Reynaldo Hassan Juarez Aranda NUA: 427554 28 09 2025

Primer exámen parcial Métodos Numéricos

1.- Explica claramente los siguientes conceptos, y la diferencia entre ellos.

a) Error de truncamiento y error de redondeo

Los errores de truncamiento son aquellos que resultan de reemplazar una formulación o procedimiento matematicamente exacto por una aproximación obtenida mediante el método numérico.

Dentro del análisis numérico el error de redondeo se refiere a la discrepancia entre el valor real de una variable y su representación en una computadora debido a la precisión limitada de la máquina. Ocurre cuando los cálculos se realizan utilizando un número finito de cifras significativas, lo que lleva a errores aleatorios e impredecibles que pueden acumularse y causar imprecisiones significativas en los cálculos.

El primero depende del método numérico y puede reducirse, y el segundo proviene de la precisión finita y puede acumularse

b) Exactitud y Precisión

La exactitud se refiere a qué tan cerca un valor calculado o medido concuerda con el valor verdadero. (cercania al valor verdadero)

Precisión: se refiere a qué tan cerca coinciden los valores individuales medidos o calculados. (consistencia entre mediciones).

c) Error de modelado y error de medición

El error de modelado es la diferencia entre la realidad y lo que predice un modelo matematico, debido a las simplificaciones o suposiciones hechas al construir ese modelo

El error de medición es la diferencia entre el valor medio y el valor real o verdadero de una cantidad. Puede deberse a imperfecciones en los instrumentos, el metodo de medición o factores externos.

2.- Considera la función $f(x) = x - e^{-x^2}$

a) Realiza tres iteraciones del método del punto fijo, usando $g(x) = \sqrt{-\ln(x)}$ para el valor inicial $x_0 = 0.5$. Determina si la raíz está convergiendo o no.

Iteración 1 $i=0$ $x_{i+1} = g(x)$

$x_1 = \sqrt{-\ln(0.5)} = 0.832$ $e = \left|\frac{x_{i+1} - x_0}{x_{i+1}}\right| = \left|\frac{0.832 - 0.5}{0.832}\right| = 39.9\%$

Iteración 2 $i=1$

$x_2 = \sqrt{-\ln(0.832)} = 0.428$ $e = \left|\frac{0.428 - 0.832}{0.428}\right| = 94.39\%$

Iteración 3 $i=2$

$x_3 = \sqrt{-\ln(0.428)} = 0.921$ $e = \left|\frac{0.921 - 0.428}{0.921}\right| = 53.52\%$

Para que converja debe cumplir la condición $|g'(x)| < 1$

$g'(x) = -\frac{1}{2x\sqrt{-\ln(x)}}$ $g'(0.5) = |-1.20|$ no cumple la condición ∴ no está convergiendo

b) Define otra función $g(x)$ y nuevamente realiza 3 iteraciones. En este caso ¿la solución converge o no? ¿Cómo se determina si el método converge o no, sin necesidad de realizar las iteraciones explícitamente?

Otra opción es despejar x de $f(x) = x - e^{-x^2}$ $x = e^{-x^2} = g(x)$

Para comprobar que sí converge sacamos la derivada $g'(x) = -2x/e^{x^2}$

$\left|g(0.5) = \frac{-2(0.5)}{e^{0.5^2}}\right| < 1 \Rightarrow 0.778 < 1$ sí cumple

Iteración 1 $i=0$

$x_1 = e^{-0.5^2} = 0.778$ $e = \left|\frac{0.778 - 0.5}{0.778}\right| \cdot 100 = 35.73\%$

Iteración 2 $i=1$

$x_2 = e^{-0.778^2} = 0.545$ $e = \left|\frac{0.545 - 0.778}{0.545}\right| \cdot 100 = 42.75\%$

Iteración 3 $i=2$

$x_3 = e^{-0.545^2} = 0.743$ $e = \left|\frac{0.743 - 0.545}{0.743}\right| \cdot 100 = 26.64\%$

Raíz encontrada con código 0.652 con $E_{max} = 0.001$

Escaneado con CamScanner

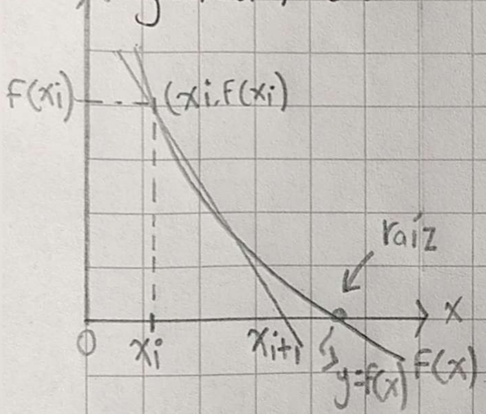
3.- La ecuación para la constante de equilibrio de una reacción química implica resolver:

$$F(x) = \cos(x) - x = 0$$

Usa el método de Newton - Raphson con valor inicial $x_0 = 0.5$

(a) Explica en qué consiste el método

Este metodo nos sirve para encontrar aproximaciones de las raíces de Funciones no lineales, valores de x que hacen que una función $f(x) = 0$. A su vez $y = F(x) = 0$.



Como es un metodo abierto no requerimos un intervalo solo un valor inicial x_i. $(x_i, F(x_i))$ al trazar una recta tangente a este punto encontramos el primer aprox. de la raíz x_{i+1}, aquí comienza el proceso iterativo para aproximarse a la raíz verdadera.

b) Realiza dos iteraciones. Reporta el error relativo

$$E_a = \frac{\text{aproximación actual} - \text{aproximación anterior}}{\text{aproximación actual}} \cdot 100$$

Calcular $F'(x) = -\operatorname{sen}(x) - 1$

Iteración 1 $i=0$

$F(x_i) = F(x_0) = \cos(0.5) - 0.5 = 0.377$

$F'(x_i) = F'(x_0) = -\operatorname{sen}(0.5) - 1 = -1.47$

$$x_1 = x_0 - \frac{F(x_0)}{F'(x_0)} = 0.5 - \frac{0.377}{-1.47} = 0.756 \quad E_{relativo} = \left|\frac{x_1 - x_0}{x_1}\right| = \left|\frac{0.756 - 0.5}{0.756}\right| \cdot 100 = 33.8\%$$

Iteración 2 $i=1$

$F(x_1) = \cos(0.756) - 0.756 = -0.028$

$F'(x_1) = -\operatorname{sen}(0.756) - 1 = -1.68$

$$x_2 = x_1 - \frac{F(x_1)}{F'(x_1)} = 0.756 - \frac{-0.028}{-1.68} = 0.739 \quad E_{rel} = \left|\frac{0.739 - 0.756}{0.739}\right| \cdot 100 = 2.3\%$$

c) Compara la aproximación después de dos iteraciones con la raíz verdadera (≈ 0.7391). Reporta el error absoluto

Iteración 1 $= |0.756 - 0.5| = 0.256$ $\quad |0.756 - 0.7391| = 0.0169$

Iteración 2 $= |0.739 - 0.756| = 0.017$ $\quad |0.739 - 0.7391| = 1 \times 10^{-4}$

Escaneado con CamScanner

4.- Para el ejercicio anterior realiza 2 iteraciones para el metodo de bisección y dos para el metodo de falsa posición. ¿Cuál de los dos converge más rápido?

• Bisección $(0,1)$

1.- Iteración 1

$m = \frac{a+b}{2} = \frac{0+1}{2} = 0.5$

$f^a(0) = \cos(0) - 0 = 1$

$f^b(1) = \cos(1) - 1 = -0.459$

$f^m(0.5) = \cos(0.5) - 0.5 = 0.377$

+ + −

a m b

0 0.5 1

F(a) f(m) F(b)

new $(0.5, 1)$

2.- Iteración 2

$m = \frac{0.5+1}{2} = 0.75$

$f^a(0.5) = \cos(0.5) - 0.5 = 0.377$

$f^b(1) = \cos(1) - 1 = -0.459$

$f^m(0.75) = \cos(0.75) - 0.75 = -0.018$

+ − −

a m b

F(0.5) F(0.75) F(1)

new $(0.5, 0.75)$

2. Falsa posición

Iteración 1

$F(a) = F(0) = \cos(0) - 0 = 1$

$F(b) = F(1) = \cos(1) - 1 = -0.459$

$x_1 = \frac{0 \cdot -0.459 - 1 \cdot 1}{-0.459 - 1} = 0.685$

$F(x_1) = \cos(0.685) - 0.685 = 0.089$

+ + −

a x_1 b

0 0.685 1

new $(0.685, 1)$

Iteración 2

$F(a) = F(0.685) = 0.089$

$F(b) = F(1) = -0.459$

$x_2 = \frac{0.685(-0.459) - (1)(0.089)}{-0.459 - 0.089} = 0.7361$

$F(x_2) = 4.99 \times 10^{-3}$

Es más rápido el metodo de falsa posición

5.- Considera la Función $F(x)=e^{x}\cos(x)$

a) Encuentra el polinomio de Taylor de orden 3 de $F(x)$ alrededor de $x=0$

$$F(x_{i+1}) = f(0) + F'(0)x + \frac{F''(0)^2}{2!}x^2 + \frac{F'''(0)}{3!}x^3$$

$F'(x) = e^{x}\cos(x) - e^{x}\operatorname{sen}(x) = 1$

$F''(x) = -2e^{x}\operatorname{sen}(x) = 0$

$F'''(x) = -2e^{x}\operatorname{sen}(x) - 2e^{x}\cos(x) = -2$

$F(x) = e^{x}\cos(x) = 1$

$f(x_{i+1}) = 1 + x + 0x^2 - \frac{1}{3}x^3 = P_3(x) = 1 + x - \frac{1}{3}x^3$

b) Usa este polinomio para aproximar $f(0.5)$

$$P_3(0.5) = 1 + 0.5 - \frac{1}{3}(0.5)^3 = 1.4583$$

c) Calcula el error verdadero comparando con el valor exacto de $f(0.5)$

Valor exacto $F(0.5) = e^{0.5}\cos(0.5) = 1.446$

Error verdadero = Valor exacto - Valor aproximado

$= 1.446 - 1.458 = -0.012$

La aproximación de Taylor fue un poco mayor que el valor exacto de la función

d) ¿Cuál es el error aproximado de truncamiento? Tip: Usa el termino de residuo

$$R_n = \frac{F^{(n+1)}(x_i)}{(n+1)!}x^{n+1}$$ dado que $n=3$ R_n

$$R_n = \frac{F^{4}(0)}{4!}x^4$$

$F^{4}(x_i)^{=0} = -4e^{x}\cos(x) = -4$

$$R_n = \frac{-4}{4!}(0.5)^4 = -0.010$$

6.- En tus propias palabras, ¿Por qué son importantes los métodos numéricos en química y en otras ciencias? Da un ejemplo donde una solución analítica sea difícil o imposible, y los métodos numéricos resulten útiles.

Los metodos númericos son muy importantes en la ciencia ya que muchos proble-mas son demasiado complejas para resolverlos con formulas sencillas o de manera manual. Estos metodos nos permiten resolver ecuaciones o sistemas que no tienen una solución analítica y con ellos podemos encontrar una solución aproximada que es lo suficientemente precisa para usar el resultado.
Dentro del diseño de un reactor químico donde se estudian las velocidades de reacción en flujo continuo las propiedades físicas varían mucho como la concentración con respecto al tiempo y la posición, estos cambios se describen con ecuaciones diferenciales. Dado que su complejidad y por tiempo de resolverlas se utilizan los metodos para hacer predicciones al momento.