

Examen 1º Parcial

① Explica claramente los siguientes conceptos y la diferencia entre ellos:

a) Error de truncamiento:

Es el resultado de aproximar un procedimiento matemático exacto al omitir algunos términos de una serie infinita o al utilizar un número finito de términos en un cálculo. Este tipo de error es común en métodos numéricos donde se utilizan aproximaciones para resolver ecuaciones o calcular funciones.

b) Exactitud y precisión:

La exactitud se refiere a que tan cercano está un resultado medido al valor verdadero real, es la proximidad al valor correcto.

Por otra parte, la precisión es que tan consistentes son los resultados cuando se repite una medición, aunque no necesariamente cercanos al valor verdadero.

c) Error de modelado y error de medición

El error de modelado se refiere al que aparece cuando usamos un modelo matemático físico que simplifica la realidad y por ello los resultados que predice no coinciden exactamente.

El error de medición se introduce al medir cantidades físicas debido a limitaciones instrumentales, condiciones ambientales, etc.

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 $x_0 = 0.5$:

- Explica en qué consiste el método.
- Hacia dos iteraciones. Reporta el error relativo.
- Compara la aproximación después de dos iteraciones con la raíz verdadera (≈ 0.7391). Reporta el error absoluto.

a) El método es iterativo para encontrar raíces, se basa en la linealización de

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Converge rápidamente si $f'(x) \neq 0$ y la estimación inicial es cercana a la raíz.

b) Hacia dos iteraciones

$$x_0 = 0.5$$

$$f(x) = \cos(x) - x, f'(x) = -\sin(x) - 1$$

Iteración 1

$$f(0.5) \approx 0.3775, f'(0.5) \approx -1.4794$$

$$x_1 = 0.5 - \frac{0.3775}{-1.4794} \approx 0.75525$$

Error relativo:

$$E_a = \left| \frac{0.755251 - 0.5}{0.755251} \right| \approx 0.3379$$

Iteración 2

$$f(0.75525) = -0.0272, f'(0.75525) = -1.6845$$

$$X_0 = 0.7552 - \frac{-0.0272}{-1.6845} = 0.7390$$

$$E_d = \frac{0.73907 - 0.75522}{0.73907} =$$

\Rightarrow hipérbola

\therefore

$$E_0 = |0.7390 - 0.7391| = \underline{0.000025\%}$$

④ Para el ejercicio anterior realiza 2 iteraciones para el método de bisección y 2 para el método de la falsa posición. ¿Cuál de los métodos converge más rápido? planteando el intervalo inicial de $[0, 2]$

Iteración 1:

$$f(c) = f(0.5) > 0 \rightarrow \text{nuevo intervalo}$$

Iteración 2: $c = 0.75$ $f(0.75) < 0$, con intervalo nuevo de $[0.5, 0.75]$

$$\text{Aproximación} = 0.75$$

→ Con el método de la falsa posición

Iteración 1

$$c = \frac{1 \cdot f(1) - 1 \cdot f(0)}{f(1) - f(0)} = \frac{-1}{-1.4597} = 0.6848$$

$$f(0.6848) > 0$$

Iteración 2:

$$c = \frac{0.6848 \cdot f(1) - 1 \cdot f(0.6848)}{f(1) - f(0.6848)} \approx 0.7361$$

$$f(0.7361) > 0$$

→ En la bisección el error es de 0.01 y en FP = 0.0030,

5) Considera la función

$$f(x) = e^x \cos(x).$$

- a) Encuentra el polinomio de Taylor de orden 3 de $f(x)$ alrededor de $x=0$.
- b) Usa este polinomio para aproximar $f(0.5)$
- c) Calcula el error verdadero comparando con el valor exacto de $f(0.5)$
- d) ¿Cuál es el error aproximado de truncamiento? Tip: Usa el término de residuo.

a)

$$f(0) = 1$$

$$f'(x) = e^x (\cos(x) - \sin(x)), f'(0) = 1$$

$$f''(x) = -2e^x (\sin(x)), f''(0) = 0$$

$$f'''(x) = -2e^x (\sin(x) + \cos(x)), f'''(0) = -2$$

$$P_3(x) = 1 + x + 0 \cdot x^2 + \frac{-2}{6} x^3 = 1 + x - \frac{1}{3} x^3$$

b) Aproximación de $f(0.5)$

$$P_3(0.5) = 1 + 0.5 - \frac{1}{3}(0.125) = 1.5 - 0.04166 = 1.4583$$

c) Error verdadero

$$\text{Val exacto: } f(0.5) = e^{0.5} \cos(0.5) = 1.6487 \cdot 0.8775 \approx 1.4464$$

$$E_v = |1.4464 - 1.4583| = 0.0118$$

d) El término residual es

$$\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} x^4$$

$$f^{(4)}(x) = -4e^x \cos(x)$$

$$R_3(0.5) = \frac{-4e^{\xi} \cos(\xi)}{24} \approx 0.0625 = 0.0104167 \cdot e^{\xi} \cos(\xi)$$

Para $\xi \in [0, 0.5]$, $e^{\xi} \cos(\xi) \in [1, 1.446]$, logo

$$|R_3(0.5)| \leq 0.0104167 \cdot 1.446 \approx 0.01506$$

→ Ela é aproximada 0.0104

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 métodos numéricos sirven para resolver problemas que no tienen solución analítica exacta o que son difíciles, y se resuelven analíticamente.

Por ejemplo, en la simulación de reactores químicos donde se emplean^{se} métodos como el método de elementos finitos o la resolución iterativa de sist. de ecuaciones para decidir el comportamiento del proceso y así poder ajustar condiciones!!

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

a) Realiza tres iteraciones del método de punto fijo, usando $g(x) = \sqrt{-\ln(x)}$ para $q=1$ con valor inicial $x_0 = 0.5$. Determina si la raíz está convergiendo o no.

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?

a) Iteración de $g(x) = \sqrt{-\ln(x)}$ y $x_0 = 0.5$

Iteración 1

$$x_1 = g(0.5) = \sqrt{-\ln(0.5)} = 0.8325$$

Iteración 2

$$x_2 = g(0.8325) = \sqrt{-\ln(0.8325)} = 0.4279$$

Iteración 3

$$x_3 = g(0.4279) = \sqrt{-\ln(0.4279)} = 0.9214$$

→ Los valores oscilan sin una convergencia clara

$$g'(x) = \frac{-1}{2 \times \sqrt{-\ln(x)}}$$

$$\text{En } x = 0.5, |g'(0.5)| = 1.201 > 1 \text{ no cumple la condición } |g'(x)| < 1$$

∴ no converge

b) Otra función

Iteración 1

$$x_1 = g(0.5) = e^{-0.25} = 0.7788$$

Iteración 2

$$x_2 = g(0.7777) = e^{-0.6065} = 0.545239$$

Iteración 3

$$x_3 = g(0.5452) = e^{-2.973} = 0.7432$$

Como las raíces se van acercando gradualmente a la raíz, converge lentamente

Sin iteraciones

$$g'(x) = -2xe^{-x^2}, \text{ el intervalo } [0.5, 0.7], |g'(x)| \leq 0.37$$

< 1 , \therefore converge.