

MATEMÁTICA SUPERIOR APLICADA

Solución Numérica de Sistemas de Ecuaciones No Lineales en Ingeniería Química

Universidad Tecnológica Nacional – Facultad Regional Rosario

Dr. Alejandro S. M. Santa Cruz



Sistemas de Ecuaciones No Lineales

- Como se mencionara, la solución de diversos problemas de modelado y simulación de procesos implica en algún momento resolver un sistema de ecuaciones, por lo general no lineal.
- A continuación se presentan algunos ejemplos, aunque obviamente no cubren todos los campos que pueden analizarse en un curso de este tipo.



Sistemas de Ecuaciones No Lineales

- Son los sistemas que comúnmente se presentan en la modelización matemática de procesos fisicoquímicos o equipos de procesos a parámetros concentrados.
- Estudiaremos problemas del tipo: $\underline{f}(\underline{x}) = \underline{0}$
o en forma equivalente:

$$f_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

$$\vdots$$

$$f_m(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$$

- Sin pérdida de generalidad, en lo que sigue supondremos que el sistema presenta igual número de ecuaciones que de incógnitas, esto es, $m=n$.



Discusión de la Convergencia

- Se busca generar una secuencia infinita de vectores (sucesión),

$$\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{x}_3, \dots, \underline{x}_n$$

tal que si existe $\lim_{n \rightarrow \infty} \{\underline{x}_n\} = \underline{x}^*$ y se cumple que $\underline{f}(\underline{x}^*) = \underline{0}$ entonces $\underline{x}^*$ es la raíz de la ecuación buscada del SENL.

- Al igual que en el caso de la resolución de una ecuación no lineal en una variable, se deben seguir los siguientes pasos:
- 1) Generar una aproximación inicial a la raíz.
 - 2) Hallar una ley de recurrencia que nos provea la secuencia buscada.
 - 3) Fijar un criterio que nos indique cuando hemos logrado una aproximación aceptable de la raíz.



Método de Aproximaciones Sucesivas

- Básicamente consiste en explicitar el sistema de ecuaciones (lineales o no lineales):

$$\underline{f}(\underline{x}) = \underline{0}$$

transformándolo en el sistema equivalente:

$$\underline{x} = \underline{x} + \underline{f}(\underline{x}) = \underline{F}(\underline{x})$$

Una vez explicitada la función, se propone una aproximación inicial $\underline{x}_0$ de la solución buscada que se mejora en sucesivas iteraciones conforme a la siguiente ley de recurrencia:

$$\underline{x}_{n+1} = \underline{F}(\underline{x}_n)$$

- Se itera hasta que se verifique que:

$$\|\underline{x}_{n+1} - \underline{x}_n\| < \varepsilon \quad y \quad \|\underline{f}(\underline{x}_n)\| < \varepsilon$$



Normas Usualmente Empleadas

➤ Norma Euclideana

$$\|\bullet\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^m (x_{n+1,i} - x_{n,i})^2}$$

➤ Norma de Máximo

$$\|\bullet\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} |x_{n+1,i} - x_{n,i}|$$



Convergencia del Método

➤ Función continua de Lipschitz en R :

$$\|\underline{F}(\underline{a}) - \underline{F}(\underline{b})\| \leq K \|\underline{a} - \underline{b}\| ; K \in (0,1) \quad \forall \underline{a}, \underline{b} \in R$$

Propiedades

- Si $\underline{F}(\underline{x})$ es continua en R , entonces si $\underline{x}^*$ es la raíz buscada ($\underline{x}^* = \underline{F}(\underline{x}^*)$) se cumple que:

$$\|\underline{x}_{n+1} - \underline{x}^*\| \leq K \|\underline{x}_n - \underline{x}^*\|$$

- Además,

$$\|\underline{x}_{n+1} - \underline{x}^*\| \leq K^{n+1} \|\underline{x}_0 - \underline{x}^*\|$$

Esto es, si $0 < K < 1$ el error de crecerá en las sucesivas iteraciones y el decrecimiento será mayor cuanto menor sea K .



Condición Suficiente para la Convergencia del Método

- Matriz Jacobiana: $J_{i,j} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j}$
- Condición suficiente de convergencia: $\|J(\underline{x})\| \leq M < 1 \quad \forall \quad \underline{x} \in R$
- Para el caso unidimensional esta condición se reduce a: $|F'(x)| < 1$
- Condición necesaria de convergencia: Para que el método de Aproximaciones Sucesivas converja para todo $\underline{x} \in R$ el radio espectral r del Jacobiano debe ser menor o igual a 1:

$$r(J) = \max_k |\lambda_k(J)| \leq 1$$

donde los λ_k representan a los autovalores del Jacobiano.



Método de Wegstein Aplicado a la Resolución de Sistemas de Ecuaciones No Lineales

- Sea el problema $\underline{f}(\underline{x}) = \underline{0}$
- Se lo transforma al esquema de Aproximaciones Sucesivas
- Entonces la ley de recurrencia se expresa como:

Valor estimado: $\underline{x}_{n+1} = \underline{F}(\underline{\tilde{x}}_n)$

Valor mejorado: $\underline{\tilde{x}}_{n+1} = \underline{\underline{Q}} \cdot \underline{x}_{n+1} + (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{Q}}) \cdot \underline{\tilde{x}}_n$

donde: $\underline{\underline{Q}} = \begin{pmatrix} q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & q_n \end{pmatrix}$ con $q_i = \frac{w_i}{w_i - 1}$ y $w_i = \frac{\underline{x}_{n+1,i} - \underline{x}_{n,i}}{\underline{\tilde{x}}_{n+1,i} - \underline{\tilde{x}}_{n,i}}$



Método de Wegstein

Etapas el Método

Identificamos las siguientes etapas:

- Etapa de preparación del método
- Etapa de iniciación
- Etapa general



Método de Wegstein

Ejemplo

- Sea el siguiente sistema de ecuaciones:

$$f_1(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \operatorname{sen}(x_1 \cdot x_2) - \frac{x_2}{4\pi} - \frac{x_1}{2}$$

$$f_2(x_1, x_2) = e \cdot \left(1 - \frac{1}{4\pi}\right) \cdot (e^{2x_1-1} - 1) + e \cdot \left(\frac{x_2}{\pi} - 2x_1\right)$$

- Elegimos como valores de arranque del método:

$$x_1^{(0)} = 0.4$$

$$x_2^{(0)} = 3$$



Método de Wegstein

Etapa de Preparación

- Se generan tres valores de $\underline{x}$ mediante aproximaciones sucesivas a partir de una estimación inicial de la solución.

Valores Estimados en la Primer Iteración

$$x_1^{(1)} = F_1(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$$

$$x_2^{(1)} = F_2(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$$

Valores Mejorados en la Primer Iteración

$$\tilde{x}_1^{(1)} = x_1^{(1)}$$

$$\tilde{x}_2^{(1)} = x_2^{(1)}$$

Valores Estimados en la Segunda Iteración

$$x_1^{(2)} = F_1\left(\tilde{x}_1^{(1)}, \tilde{x}_2^{(1)}\right) = F_1\left(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}\right)$$

$$x_2^{(2)} = F_2\left(\tilde{x}_1^{(1)}, \tilde{x}_2^{(1)}\right) = F_2\left(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}\right)$$

Valores Mejorados en la Segunda Iteración

$$\tilde{x}_1^{(2)} = x_1^{(2)}$$

$$\tilde{x}_2^{(2)} = x_2^{(2)}$$

Valores Estimados en la Tercera Iteración

$$x_1^{(3)} = F_1\left(\tilde{x}_1^{(2)}, \tilde{x}_2^{(2)}\right) = F_1\left(x_1^{(2)}, x_2^{(2)}\right)$$

$$x_2^{(3)} = F_2\left(\tilde{x}_1^{(2)}, \tilde{x}_2^{(2)}\right) = F_2\left(x_1^{(2)}, x_2^{(2)}\right)$$



Método de Wegstein

Etapa de Iniciación

$$w_i = \frac{x_i^{(3)} - x_i^{(2)}}{\tilde{x}_i^{(2)} - \tilde{x}_i^{(1)}} = \frac{F_i\left(\underline{x}^{(2)}\right) - F_i\left(\underline{x}^{(1)}\right)}{x_i - x_i}$$

$$q_i = \frac{w_i}{w_i - 1}$$

$$\tilde{x}_i^{(3)} = q_i \tilde{x}_i^{(2)} + (1 - q_i) x_i^{(3)}$$

$$x_i^{(4)} = F_i\left(\underline{x}^{(3)}\right) ; i=1,2$$



Método de Wegstein

Etapa de General del Método

$$x_i^{(n+1)} = F_i \left(\underline{x}^{(n)} \right)$$

$$w_i = \frac{x_i^{(n+1)} - x_i^{(n)}}{\tilde{x}^{(n)} - \tilde{x}^{(n-1)}} = \frac{F_i \left(\underline{\tilde{x}}^{(n)} \right) - F_i \left(\underline{\tilde{x}}^{(n-1)} \right)}{\tilde{x}_i^{(n)} - \tilde{x}_i^{(n-1)}}$$

$$q_i = \frac{w_i}{w_i - 1}$$

$$\tilde{x}_i^{(n+1)} = q_i \tilde{x}_i^{(n)} + (1 - q_i) x_i^{(n+1)} ; i=1,2$$



n	x1 (n)	x1* (n)	x2 (n)	x2* (n)	x1 (n+1)	w1	q1 = w1 / (w1 -1)	x1* (n+1)	x2 (n+1)	w2	q2 = w2 / (w2 -1)	x2* (n+1)	f1	f2	Error Relativo (%)
0	4.000000E-01		3.000000E+00												
1	4.272871E-01	4.272871E-01	3.017363E+00	3.017363E+00	4.538471E-01				3.044605E+00						
2	4.538471E-01	4.538471E-01	3.044605E+00	3.044605E+00	4.757368E-01	8.241609E-01	-4.687016E+00	5.783343E-01	3.073349E+00	1.055116E+00	1.914370E+01	2.523096E+00	6.940656E-03	-5.366738E-01	1.741776E+01
3	4.757368E-01	5.783343E-01	3.073349E+00	2.523096E+00	5.852750E-01	8.799149E-01	-7.327425E+00	6.361321E-01	2.810817E+00	5.034069E-01	-1.013721E+00	3.102486E+00	-1.049695E-01	9.022494E-03	2.249409E+01
4	5.852750E-01	6.361321E-01	2.810817E+00	3.102486E+00	5.311626E-01	-9.362361E-01	4.835341E-01	5.819189E-01	3.097649E+00	4.950582E-01	-9.804263E-01	3.092907E+00	-5.014099E-02	-4.207478E-02	1.738317E+00
5	5.311626E-01	5.819189E-01	3.097649E+00	3.092907E+00	5.317779E-01	-1.135052E-02	1.122313E-02	5.323407E-01	3.115464E+00	-1.859647E+00	6.503065E-01	3.100795E+00	-1.451820E-02	-4.394373E-02	1.595141E+00
6	5.317779E-01	5.323407E-01	3.115464E+00	3.100795E+00	5.178225E-01	2.814835E-01	-3.917566E-01	5.121349E-01	3.124354E+00	1.127024E+00	8.872501E+00	2.915326E+00	1.042756E-02	-2.002858E-01	5.929972E+00
7	5.178225E-01	5.121349E-01	3.124354E+00	2.915326E+00	5.225624E-01	-2.345842E-01	1.900107E-01	5.205811E-01	3.022703E+00	5.480752E-01	-1.212757E+00	3.152925E+00	-1.243641E-02	3.050620E-03	8.032168E+00
8	5.225624E-01	5.205811E-01	3.022703E+00	3.152925E+00	5.081447E-01	-1.707008E+00	6.305885E-01	5.159869E-01	3.151290E+00	5.411918E-01	-1.179560E+00	3.149361E+00	-9.346726E-03	1.097534E-03	1.819651E-01
9	5.081447E-01	5.159869E-01	3.151290E+00	3.149361E+00	5.066402E-01	3.274748E-01	-4.869331E-01	5.020890E-01	3.148772E+00	7.062591E-01	-2.404360E+00	3.147357E+00	-1.525588E-03	4.106148E-03	4.399886E-01
10	5.066402E-01	5.020890E-01	3.148772E+00	3.147357E+00	5.005634E-01	4.372455E-01	-7.769738E-01	4.993780E-01	3.145156E+00	1.805217E+00	2.241901E+00	3.150091E+00	-3.666322E-04	7.624567E-03	1.208010E-01
11	5.005634E-01	4.993780E-01	3.145156E+00	3.150091E+00	4.990114E-01	5.724877E-01	-1.339114E+00	4.985204E-01	3.146004E+00	3.100367E-01	-4.493524E-01	3.144167E+00	5.321012E-04	2.878397E-03	1.876899E-01
12	4.990114E-01	4.985204E-01	3.146004E+00	3.144167E+00	4.990525E-01	-4.797006E-02	4.577427E-02	4.990282E-01	3.142624E+00	5.705090E-01	-1.328337E+00	3.140574E+00	5.638110E-04	-4.563596E-04	1.139869E-01
13	4.990525E-01	4.990282E-01	3.142624E+00	3.140574E+00	4.995920E-01	1.062452E+00	1.701226E+01	4.900003E-01	3.140819E+00	5.024147E-01	-1.009706E+00	3.141066E+00	4.791019E-03	4.367126E-03	2.843189E-01
14	4.995920E-01	4.900003E-01	3.140819E+00	3.141066E+00	4.947913E-01	5.317611E-01	-1.135662E+00	5.002323E-01	3.138724E+00	-4.259220E+00	8.098577E-01	3.140620E+00	-3.878964E-05	-9.414915E-04	3.221610E-01
15	4.947913E-01	5.002323E-01	3.138724E+00	3.140620E+00	5.001935E-01	5.279701E-01	-1.118510E+00	5.001501E-01	3.141125E+00	-5.393035E+00	8.435798E-01	3.140699E+00	-3.969780E-06	-8.377821E-04	3.583370E-03
16	5.001935E-01	5.001501E-01	3.141125E+00	3.140699E+00	5.001461E-01	5.762782E-01	-1.360039E+00	5.001407E-01	3.141148E+00	2.957795E-01	-4.200097E-01	3.141337E+00	-5.006436E-05	-2.818830E-04	2.005701E-02
17	5.001461E-01	5.001407E-01	3.141148E+00	3.141337E+00	5.000907E-01	5.919990E+00	1.203252E+00	5.001509E-01	3.141488E+00	5.327239E-01	-1.140062E+00	3.141661E+00	-8.092839E-05	-6.435815E-06	1.017235E-02
18	5.000907E-01	5.001509E-01	3.141488E+00	3.141661E+00	5.000700E-01	-2.033110E+00	6.703054E-01	5.001242E-01	3.141664E+00	5.433925E-01	-1.190085E+00	3.141668E+00	-6.817016E-05	1.160900E-05	8.717106E-04
19	5.000700E-01	5.001242E-01	3.141664E+00	3.141668E+00	5.000561E-01	5.218351E-01	-1.091329E+00	4.999817E-01	3.141662E+00	-2.802415E-01	2.188974E-01	3.141663E+00	3.545485E-06	6.900518E-05	4.484090E-03
20	5.000561E-01	4.999817E-01	3.141662E+00	3.141663E+00	4.999852E-01	4.969660E-01	-9.879373E-01	4.999887E-01	3.141626E+00	7.329656E+00	1.157986E+00	3.141669E+00	-4.436012E-07	7.101206E-05	2.878254E-04
21	4.999852E-01	4.999887E-01	3.141626E+00	3.141669E+00	4.999883E-01	4.340278E-01	-7.668713E-01	4.999879E-01	3.141631E+00	8.159145E-01	-4.432259E+00	3.141462E+00	1.640315E-05	-1.075934E-04	6.501079E-03
22	4.999883E-01	4.999879E-01	3.141631E+00	3.141462E+00	5.000043E-01	-2.049407E+01	9.534755E-01	4.999887E-01	3.141520E+00	5.369987E-01	-1.159821E+00	3.141587E+00	6.109723E-06	-1.259239E-07	3.916601E-03
23	5.000043E-01	4.999887E-01	3.141520E+00	3.141587E+00	4.999948E-01	-1.248812E+01	9.258607E-01	4.999892E-01	3.141587E+00	5.375406E-01	-1.162352E+00	3.141587E+00	5.871649E-06	-1.956310E-07	1.496051E-05
24	4.999948E-01	4.999892E-01	3.141587E+00	3.141587E+00	4.999950E-01	4.744164E-01	-9.026468E-01	5.000003E-01	3.141587E+00	1.256002E+00	4.906223E+00	3.141587E+00	3.187534E-07	-5.383886E-06	3.514223E-04
25	4.999950E-01	5.000003E-01	3.141587E+00	3.141587E+00	5.000006E-01	5.029487E-01	-1.011865E+00	5.000010E-01	3.141589E+00	-5.789324E+00	8.527099E-01	3.141587E+00	-3.572143E-08	-5.293467E-06	2.418677E-05
26	5.000006E-01	5.000010E-01	3.141589E+00	3.141587E+00	5.000009E-01	4.472461E-01	-8.091233E-01	5.000009E-01	3.141590E+00	8.859779E-01	-7.770230E+00	3.141612E+00	-1.984076E-06	1.627011E-05	7.824079E-04
27	5.000009E-01	5.000009E-01	3.141590E+00	3.141612E+00	4.999989E-01	3.114887E+01	1.033169E+00	5.000010E-01	3.141603E+00	5.355172E-01	-1.152932E+00	3.141593E+00	-5.225248E-07	-7.375703E-09	5.903380E-04
28	4.999989E-01	5.000010E-01	3.141603E+00	3.141593E+00	5.000004E-01	2.320888E+01	1.045027E+00	5.000010E-01	3.141593E+00	5.353067E-01	-1.151957E+00	3.141593E+00	-5.349659E-07	-1.019143E-08	7.864894E-07
29	5.000004E-01	5.000010E-01	3.141593E+00	3.141593E+00	5.000005E-01	4.712133E-01	-8.911217E-01	5.000000E-01	3.141593E+00	1.177400E+00	6.636985E+00	3.141593E+00	-2.666932E-08	4.008377E-07	3.181742E-05
30	5.000005E-01	5.000000E-01	3.141593E+00	3.141593E+00	5.000000E-01	4.975746E-01	-9.903452E-01	4.999999E-01	3.141593E+00	8.154689E+00	1.139768E+00	3.141593E+00	-2.518911E-09	4.497908E-07	1.917236E-06



Métodos de Linealización

- En forma análoga al caso unidimensional, dada una aproximación inicial $\underline{x}_a$ de la raíz $\underline{x}^*$ se aproxima la Ecuación: $\underline{f}(\underline{x}) = \underline{0}$ por la expresión linealizada:

$$\underline{f}(\underline{x}) \cong \underline{l}(\underline{x}) = \underline{f}(\underline{x}_a) + \underline{A} \cdot (\underline{x} - \underline{x}_a) = \underline{0}$$

- Se determina la raíz de $\underline{l}(\underline{x}) = \underline{0}$ como una aproximación de $\underline{f}(\underline{x}) = \underline{0}$.
- Ley de Recurrencia:

$$\underline{x}_{n+1} = \underline{x}_n - \underline{A}^{-1} \cdot \underline{f}(\underline{x}_n)$$

- Según como se genere $\underline{A}$, se definen los diferentes algoritmos numéricos de linealización.



Método de Newton

- Consiste en adoptar **A** como la matriz Jacobiana de **f(x)**:

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{J}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_{n-1}} & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_{n-1}} & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$



Aplicación del Método de Newton para Resolver un Sistema de Dos Ecuaciones No Lineales

$$f_1 = f_1(x_1, x_2) = 0$$

$$f_2 = f_2(x_1, x_2) = 0$$

$$f_1 \approx f_1(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) + \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{\underline{x}^{(1)}} (x_1 - x_1^{(1)}) + \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right|_{\underline{x}^{(1)}} (x_2 - x_2^{(1)}) = 0$$

$$f_2 \approx f_2(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) + \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right|_{\underline{x}^{(1)}} (x_1 - x_1^{(1)}) + \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right|_{\underline{x}^{(1)}} (x_2 - x_2^{(1)}) = 0$$

$$\left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{\underline{x}^{(1)}} \underbrace{(x_1 - x_1^{(1)})}_{\Delta x_1^{(1)}} + \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right|_{\underline{x}^{(1)}} \underbrace{(x_2 - x_2^{(1)})}_{\Delta x_2^{(1)}} = -f_1(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$$

$$\left. \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right|_{\underline{x}^{(1)}} \underbrace{(x_1 - x_1^{(1)})}_{\Delta x_1^{(1)}} + \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right|_{\underline{x}^{(1)}} \underbrace{(x_2 - x_2^{(1)})}_{\Delta x_2^{(1)}} = -f_2(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$$



Método de Newton

$$\begin{pmatrix} \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{\underline{x}^{(1)}} & \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right|_{\underline{x}^{(1)}} \\ \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right|_{\underline{x}^{(1)}} & \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right|_{\underline{x}^{(1)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1^{(1)} \\ \Delta x_2^{(1)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1^{(1)} \\ f_2^{(1)} \end{pmatrix}$$

$$\Delta x_1^{(1)} = - \frac{f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x_2} - f_2 \frac{\partial f_1}{\partial x_2}}{\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \frac{\partial f_2}{\partial x_2} - \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_1}}$$

$$\Delta x_2^{(1)} = - \frac{f_2 \frac{\partial f_1}{\partial x_1} - f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x_1}}{\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \frac{\partial f_2}{\partial x_2} - \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \frac{\partial f_2}{\partial x_1}}$$

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} + \Delta x_i^{(n)}$$



Método de Newton con Factor de Relajación

$$f_1 = f_1(x_1, \dots, x_k) = 0$$

$$\vdots$$

$$f_k = f_2(x_1, \dots, x_k) = 0$$

$$\begin{pmatrix} \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{\underline{x}^{(1)}} & \dots & \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_k} \right|_{\underline{x}^{(1)}} \\ \vdots & & \vdots \\ \left. \frac{\partial f_k}{\partial x_1} \right|_{\underline{x}^{(1)}} & \dots & \left. \frac{\partial f_k}{\partial x_k} \right|_{\underline{x}^{(1)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1^{(1)} \\ \vdots \\ \Delta x_k^{(1)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1^{(1)} \\ \vdots \\ f_k^{(1)} \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{J}} \cdot \underline{\underline{\Delta x}} = -\underline{\underline{f}}$$

$$\underline{\underline{x}}^{(n+1)} = \underline{\underline{x}}^{(n)} + \rho \underline{\underline{\Delta x}}^{(n)} \quad (\rho = 0.5)$$



Dificultades del Método de Newton (I)

➤ Si bien este método converge cuadráticamente presenta varias dificultades:

- 1) Requiere evaluar n^2 elementos de la matriz Jacobiana J , ya sea en forma analítica si se dispone de las expresiones analíticas de $\partial f_i / \partial x_j$ o numéricamente de acuerdo a:

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \frac{f_i(\underline{x} + \underline{e}_j \Delta x_j) - f_i(\underline{x})}{\Delta x_j}$$

donde $\underline{e}_j$ es el vector cuyas componentes valen todas cero, excepto la j -ésima que vale 1 .

- 2) Se requiere invertir la matriz Jacobiana en cada iteración. La inversión se realiza resolviendo para $\underline{x}_{n+1}$ por algunos de los métodos de resolución de SEAL el siguiente problema:

$$\begin{aligned} \underline{J} \cdot \underline{y} &= \underline{f}(\underline{x}_n) \\ \underline{x}_{n+1} &= \underline{x}_n - \underline{y} \end{aligned}$$



Dificultades del Método de Newton (II)

- 3) Si J es singular o casi singular cerca de la solución, la inversión del Jacobiano no es posible.
- 4) Se requiere una buena aproximación inicial de la raíz para que el método converja. Esta aproximación inicial no siempre puede ser obtenida, sobre todo en problemas de elevada dimensionalidad.



Método de Newton Modificado (I)

➤ Requerimos que:

- 1) El algoritmo progrese hacia la solución en cada paso:

$$\left\| \underline{f} \left(\underline{x}^{(k+1)} \right) \right\|_2 < \left\| \underline{f} \left(\underline{x}^{(k)} \right) \right\|_2$$

- 2) Los pasos no sean demasiado grandes:

$$\left\| \underline{x}^{(k+1)} - \underline{x}^{(k)} \right\|_2 < \delta$$

donde δ es elegido por el algoritmo.



Método de Newton Modificado (II)

- Supongamos que tenemos:

$$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} + \underline{p}$$

Corrección

- A partir del Método de Newton esperamos que:

$$\underline{p} = -\underline{J}^{-1} \left(\underline{x}^{(k)} \right) \cdot \underline{f} \left(\underline{x}^{(k)} \right)$$

pero puede que no satisfaga:

$$\|\underline{p}\|_2 < \delta$$

Además, si **J** es singular, **p** no existe.



Método de Newton Modificado (III)

- En lugar de evaluar la corrección por el Método de Newton, resolvemos un problema de optimización restringida:

$$\min_{\underline{p}} \left\| \underline{J}(\underline{x}^{(k)}) \cdot \underline{p} + \underline{f}(\underline{x}^{(k)}) \right\|_2$$

sujeto a la restricción:

$$\|\underline{p}\|_2 < \delta$$

Esto funciona aún para **J** singular!!!!



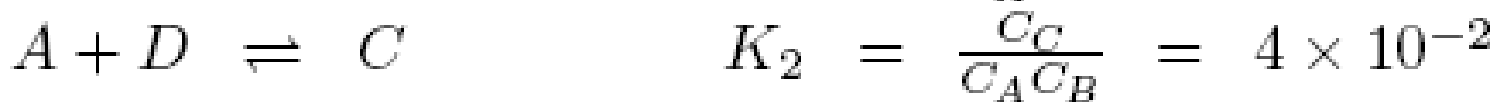
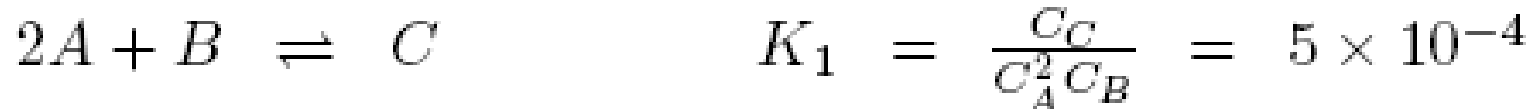
Método de Newton Modificado (IV)

- Si dispusiésemos de un **solver** que nos permita resolver el problema de optimización, entonces procederíamos de la siguiente manera:
 - 1) Si, $\left\| \underline{f}(\underline{x}^{(k)}) \right\|_2 < \varepsilon$ entonces parar.
 - 2) Calcular **p** vía optimización restringida.
 - 3) Si:
$$\left\| \underline{f}(\underline{x}^{(k)} + \underline{p}) \right\|_2 < \left\| \underline{f}(\underline{x}^{(k)}) \right\|_2$$
aceptar **p** e ir a la Etapa (1). Aquí podríamos pensar en aumentar **δ**.
 - 4) Si no, reducir **δ** y volver a la Etapa (2)
- Este algoritmo permite determinar la solución de manera confiable. El problema es que pueda quedar atrapado en un mínimo local de la función.
- La clave: **Arrancar cerca de la solución!!!**



Ejemplo 4: Solución de Ecuaciones No Lineales en Equilibrio Químico mediante el método de Newton.

- 1) Desarrollar una función de MATLAB para resolver n ecuaciones no lineales simultáneas con n incógnitas.
- 2) Aplicar esta función para hallar la conversión de equilibrio de las siguientes reacciones químicas [kmol/m³]:



$$C_{A,0} = 40 \quad C_{B,0} = 15 \quad C_{C,0} = 0 \quad C_{D,0} = 10$$



Sean x_1 y x_2 las conversiones de las reacciones anteriores, entonces:

$$C_A = C_{A,0} - 2x_1C_{B,0} - x_2C_{D,0} = 40 - 30x_1 - 10x_2$$

$$C_B = (1 - x_1)C_{B,0} = 15 - 15x_1$$

$$C_C = C_{C,0} + x_1C_{B,0} + x_2C_{D,0} = 15x_1 + 10x_2$$

$$C_D = (1 - x_2)C_{D,0} = 10 - 10x_2$$

$$\Rightarrow f_1(x_1, x_2) = \frac{C_C}{C_A^2 C_B} - 5 \times 10^{-4} = 0$$

$$f_2(x_1, x_2) = \frac{C_C}{C_A C_B} - 4 \times 10^{-2} = 0$$



Sistemas de Ecuaciones No Lineales

Ejemplos y Archivos .m

- **Ejemplo_04:** Resuelve reacciones simultáneas en equilibrio químico mediante el método de Newton con parámetro de relajación para sistemas de ecuaciones no lineales (Newton.m).



Sistemas de Ecuaciones No Lineales

Ejemplos y Archivos .m

Métodos

- **Newton.m**: Método de Newton con parámetro de relajación para resolver ecuaciones no lineales simultáneas.

Funciones

- **Ex_04_func.m**: Funciones del sistema de ecuaciones no lineales simultáneas.
- **Jacobian.m**: Jacobiano de la función del **Ejemplo_04** (argumento de **Newton.m**).



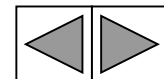
```

% Programa Ejemplo_04
% Solution to the problem posed in Example_04. It calculates the
% equilibrium concentration of the components of a system of two
% reversible chemical reactions using the Newton's method.
% Input data
% c0          = Initial concentration
% K1          = Equilibrium constant of the first Equation
% K2          = Equilibrium constant of the second Equation
% rho         = Relaxation factor
% x0          = Vector of initial guesses
% tol         = Tolerance

echo off
clear
clc

c0 = input(' Vector of initial concentration of A, B, C, and D = ');
K1 = input(' 2A + B = C K1 = ');
K2 = input(' A + D = C K2 = ');

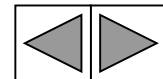
```



```

disp('Graph of the function')
x1=(0.1:0.01:0.5);
x2=(0.1:0.01:0.5);
[X1,X2]=meshgrid(x1,x2);
ca = c0(1) - 2*X1*c0(2) - X2*c0(4);
cb = (1 - X1)*c0(2);
cc = c0(3) + X1*c0(2) + X2*c0(4);
cd = (1 - X2)*c0(4);
Z1 = cc./(ca.^2)./cb - K1;
Z2 = cc./ca./cd - K2;
mesh(X1,X2,Z1);
hold on
mesh(X1,X2,Z2);
pause
disp('Zero Level Curves')
figure(2)
contour(X1,X2,Z1,[0 0]);
hold on
contour(X1,X2,Z2,[0 0]);
grid on
hold off
pause

```

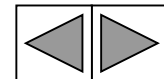


```

disp('Root estimation')
disp('Click on the intersection of the curves')
[x1e,x2e] = ginput(1)
repeat = 1;
while repeat
    rho = input(' Relaxation factor = ');
    x0 = input('\n\n Vector column of initial guesses = ');
    tol = input (' Tolerance = ');
    % Solution of the set of equations
    [solution,iter] = Newton(rho,x0,tol,c0,K1,K2)
    % Display the results
    fprintf('\n Results :\n x1 = %6.4f , x2 = 6.4f\n',solution);
    fprintf('\n Solution reached after %3d iterations.\n\n',iter);
    repeat = input(' Repeat the calculations (0 / 1) ? ');
end

```

```
function f = Ex_04_func(x,c0,K1,K2)
% Evaluation of set of equations for Example_04
% c0(1) = ca0 / c0(2) = cb0 / c0(3) = cc0 / c0(4) = cd0
ca = c0(1) - 2*x(1)*c0(2) - x(2)*c0(4);
cb = (1 - x(1))*c0(2);
cc = c0(3) + x(1)*c0(2) + x(2)*c0(4);
cd = (1 - x(2))*c0(4);
f(1) = cc / ca^2 / cb - K1;
f(2) = cc / ca / cd - K2;
f = f'; % Make it a column vector.
```



Sistemas de Ecuaciones No Lineales

Ejecución del Programa

% Solution to the problem posed in Example_04. It calculates the
% equilibrium concentration of the components of a system of two
% reversible chemical reactions using the Newton's method.

% Input data

% c0 = Initial concentration

% K1 = Equilibrium constant of the first Equation

% K2 = Equilibrium constant of the second Equation

% rho = Relaxation factor

% x0 = Vector of initial guesses

% tol = Tolerance

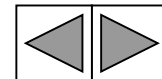
echo off

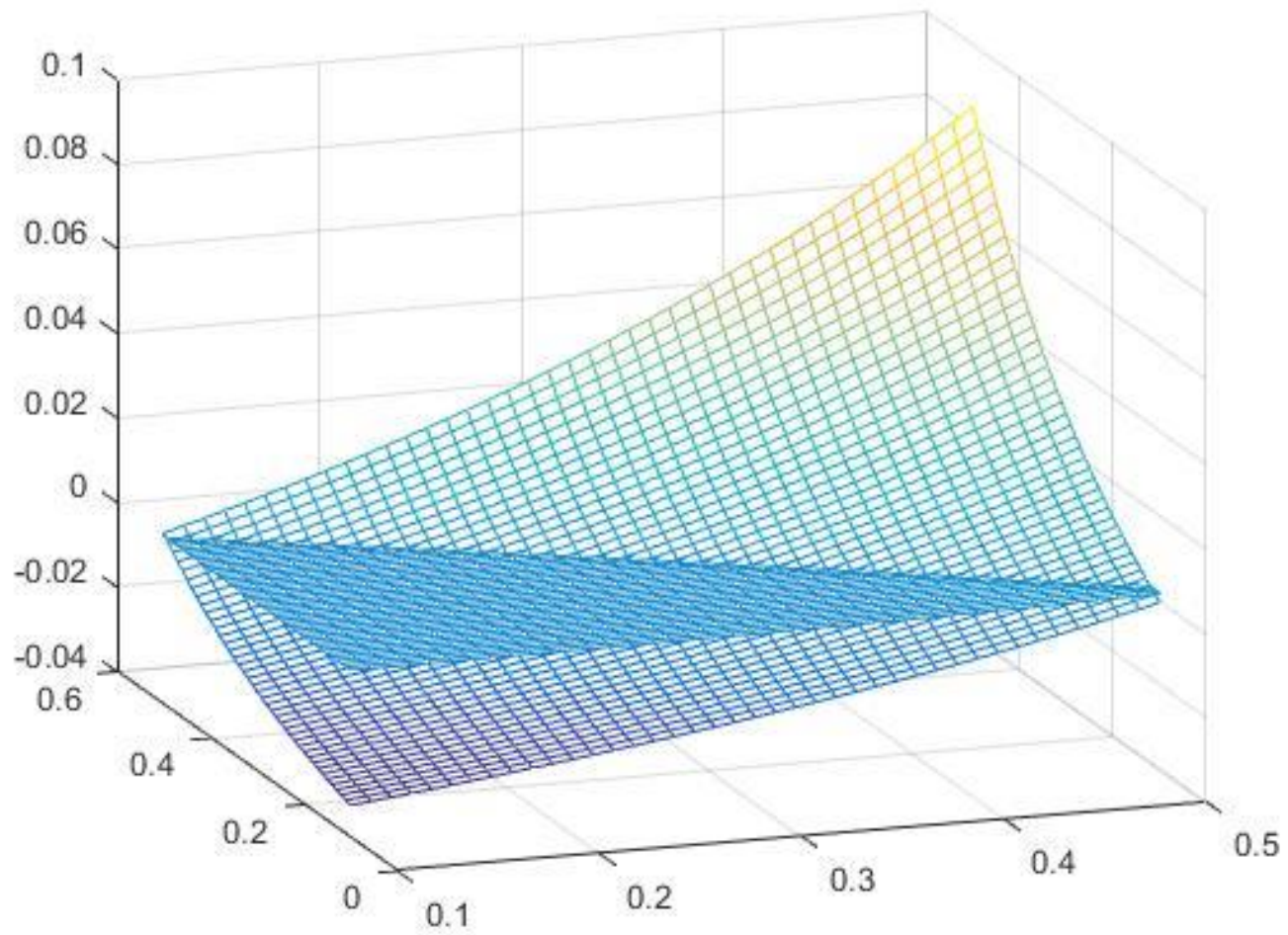
Vector of initial concentration of A, B, C, and D = [40, 15, 0, 10]

$2A + B = C$ $K1 = 5e-04$

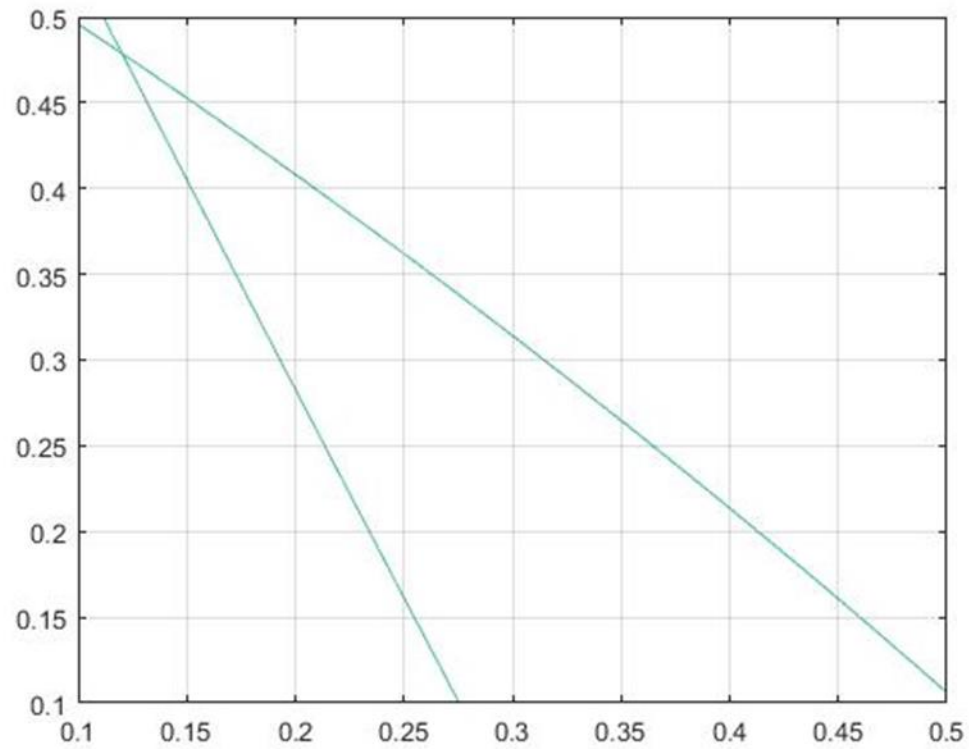
$A + D = C$ $K2 = 4e-02$

Graph of the function



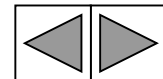


Click on the intersection of the curves



$$x1e = 0.1207$$

$$x2e = 0.4784$$



```
Relaxation factor = 1  
Vector column of initial guesses = [0.1 0.4] '  
Tolerance = 1e-06
```

```
solution =  
          0.1203  
          0.4787
```

```
iter = 4
```

```
Results :  
x1 = 0.1203 , x2 = 0.4787
```

Solution reached after 4 iterations.

Repeat the calculations (0 / 1) ?

Resumiendo:

- Se presentaron un conjunto de técnicas numéricas usuales en ingeniería química para resolver ecuaciones y sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales.
- Se introdujo un conjunto reducido de problemas típicos en los cuales resulta imperioso resolver computacionalmente sistemas de este tipo.
- Se verá mas adelante que cualquier intento de construir programas de simulación de procesos o equipos (aún sencillos) requiere inevitablemente del uso de estas técnicas, más otras que permitan el particionado, rasgado y ordenamiento de grandes sistemas de ecuaciones (por ejemplo, del orden de 1000×1000).

