# MATEMÁTICA SUPERIOR APLICADA

## Ejemplos de Ecuaciones No Lineales en Ingeniería Química

Universidad Tecnológica Nacional – Facultad Regional Rosario

Dr. Alejandro S. M. Santa Cruz

# Ejemplos de Aplicación

- A continuación se presentan algunos ejemplos de aplicación de métodos numéricos en la resolución de problemas típicos de Ingeniería Química.
- Obviamente, estos ejemplos no cubren todos los campos que pueden analizarse en un curso de este tipo.

# Ecuación de Estado Soave-Redlich-Kwong:

**Determinar el volumen específico V de un gas a T y P dadas:**

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha}{V(V+b)}$$

$$\Downarrow$$

$$Z = \frac{PV}{RT} \quad \text{Factor de compresibilidad}$$

$$A = \frac{\alpha a P}{(RT)^2}, \; B = \frac{bP}{RT}$$

$$0 = \underbrace{Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB}_{\text{Polinomio de 3er. orden}}$$

**Underwood:** Relación de mínimo reflujo de una columna de destilación múltiple etapa:

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\alpha_j z_{jF} F}{\alpha_j - \phi} - F(1-q) = 0$$

**Colebrook:** Factor de fricción para el flujo turbulento a través de una tubería de un fluido incompresible :

$$\sqrt{\frac{1}{f}} + 0.86 ln \left( \frac{\epsilon / D}{3.7} + \frac{2.51}{N_{Re}\sqrt{f}} \right) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\sqrt{\frac{1}{f}} = -0.86 ln \left( \frac{\epsilon / D}{3.7} + \frac{2.51}{N_{Re}\sqrt{f}} \right)$$

# Método de los Operadores Diferenciales para la Determinación de Soluciones Analíticas de Ecuaciones Diferenciales Homogéneas Lineales de Orden n:

$$a_n\frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}\frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}} + \ldots + a_1\frac{dy}{dx} + a_0 y = 0$$

$$\Big\Downarrow \; D = \frac{d}{dx}$$

$$\left[a_n D^n + a_{n-1}D^{n-1} + \ldots + a_1 D + a_0\right] y = 0$$

$$\Downarrow$$

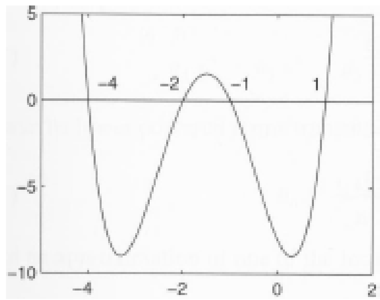
$$a_n D^n + a_{n-1}D^{n-1} + \ldots + a_1 D + a_0 = 0$$

# Tipos de Raíces y su Aproximación

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 = 0$$

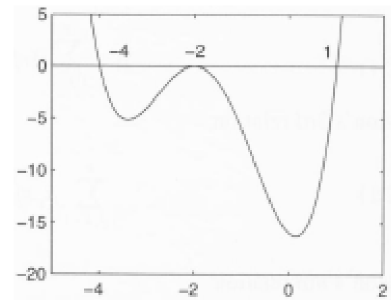
$$x^4 + 6x^3 + 7x^2 - 6x - 8 = 0$$

$$\Rightarrow x_i = -4, -2, -1, 1$$



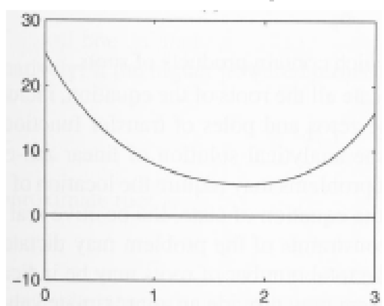

$$x^4 + 7x^3 + 12x^2 - 4x - 16 = 0$$

$$\Rightarrow x_i = -4, 1, -2, -2$$



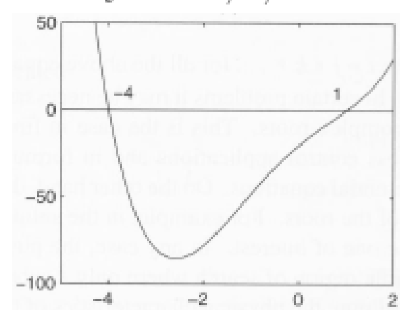

$$x^4 - 6x^3 + 18x^2 - 30x + 25 = 0$$

$$\Rightarrow x_i = 1 \pm 2i, 2 \pm i$$




$$x^4 + x^3 - 5x^2 + 23x - 20 = 0$$

$$\Rightarrow x_i = -4, 1, 1 \pm 2i$$



# Tipos de Raíces y su Aproximación

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0 = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = -\frac{a_{n-1}}{a_n}$$

$$\sum_{i,j=1}^{n} x_i x_j = \frac{a_{n-2}}{a_n}$$

$$\sum_{i,j,k=1}^{n} x_i x_j x_k = -\frac{a_{n-3}}{a_n}$$

$$x_1 x_2 x_3 \ldots x_n = (-1)^n \frac{a_0}{a_n}$$

# Tipos de Raíces y su Aproximación

$$a_4x^4 + a_3x^3 \underbrace{+a_2x^2 + a_1x + a_0}_{\text{Se desprecia}} = 0$$

$$\Downarrow \quad a_4x^4 + a_3x^3 \simeq 0 \quad \Downarrow$$

$$x \simeq -\frac{a_3}{a_4}$$

$$\underbrace{a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2}_{\text{Se desprecia}} + a_1x + a_0 = 0$$

$$\Downarrow \quad a_1x + a_0 \simeq 0 \quad \Downarrow$$

$$x \simeq -\frac{a_0}{a_1}$$

# Tipos de Raíces y su Aproximación

$$Z^3 - Z^2 + \underbrace{(A - B - B^2)Z - AB}_{\text{Se desprecia}} = 0$$

$$\Downarrow \quad Z^3 - Z^2 \simeq 0 \quad \Downarrow$$

$$Z = \frac{PV}{RT} \simeq 1$$

$$\underbrace{Z^3 - Z^2}_{\text{Se desprecia}} + (A - B - B^2)Z - AB = 0$$

$$\Downarrow \quad (A - B - B^2)Z - AB \simeq 0 \quad \Downarrow$$

$$Z = \frac{PV}{RT} \simeq \frac{AB}{A - B - B^2} \simeq 0$$

# Solución Numérica de Ecuaciones No Lineales Ejemplos y Archivos .m

- **Ejemplo_01.m:** Calcula el factor de fricción a partir de la Ecuación de Colebrook mediante
  - Aproximaciones Sucesivas (XGX.m).
  - Interpolación Lineal (LI.m).
  - Newton-Raphson (NR.m).
- **Ejemplo_02.m:** Resuelve la ecuación de estado Soave-Redlich-Kwong mediante el método de Newton-Raphson para polinomios (NRpoly.m).
- **Ejemplo_03.m:** Resuelve polinomios de grado n y funciones de transferencia utilizando el método de Newton-Raphson con división sintética (NRsdivision.m).

# Solución Numérica de Ecuaciones No Lineales Ejemplos y Archivos .m

## Métodos

- **XGX.m:** Método de Aproximaciones Sucesivas para determinar una raíz de una ecuación no lineal.
- **LI.m:** Método de Interpolación Lineal para determinar una raóz de una ecuación no lineal.
- **NR.m:** Método Newton-Raphson para determinar una raíz de una ecuación no lineal.
- **NRpoly.m:** Método Newton-Raphson para determinar una raíz de una ecuación polinomial.
- **NRsdivision.m:** Método Newton-Raphson con división sintética para determinar todas las raíces de una ecuación polinomial.

# Solución Numérica de Ecuaciones No Lineales
# Ejemplos y Archivos .m

## Funciones

- **Colebrookg.m:** Contiene la Ecuación de Colebrook expresada en forma que pueda resolverse mediante Aproximaciones Sucesivas (utilizada en el Ejemplo_01.m).
- **Colebrook.m:** Contiene la Ecuación de Colebrook expresada en forma que pueda resolverse mediante Interpolación Lineal o Newton-Raphson (utilizada en el Ejemplo_01.m).

# Ejemplo 1: Solución de la Ecuación de Colebrooke

- **Determinar la Solución de la Ecuación de Colebrook Mediante los métodos de:**
  - **Sustitución Directa o Aproximaciones Sucesivas**
  - **Interpolación Lineal**
  - **Newton-Raphson**
- **Desarrollar una función de MATLAB para resolver ecuaciones no lineales mediante los métodos de sustitución directa, interpolación lineal y Newton-Raphson.**
- **Utilice estas funciones para calcular el factor de fricción de la Ecuación de Colebrook para el flujo a través de una tubería con $\varepsilon/D = 10^{-4}$ y $Re = 10^5$. Compare estos métodos.**

# Ejemplo 1

Calculating the friction factor from the Colebrook equation

Reynolds No. = 1e5

Relative roughness = 1e-4

1 ) Successive substitution

2 ) Linear Interpolation

3 ) Newton Raphson

0 ) Exit

Choose the method of solution : 1

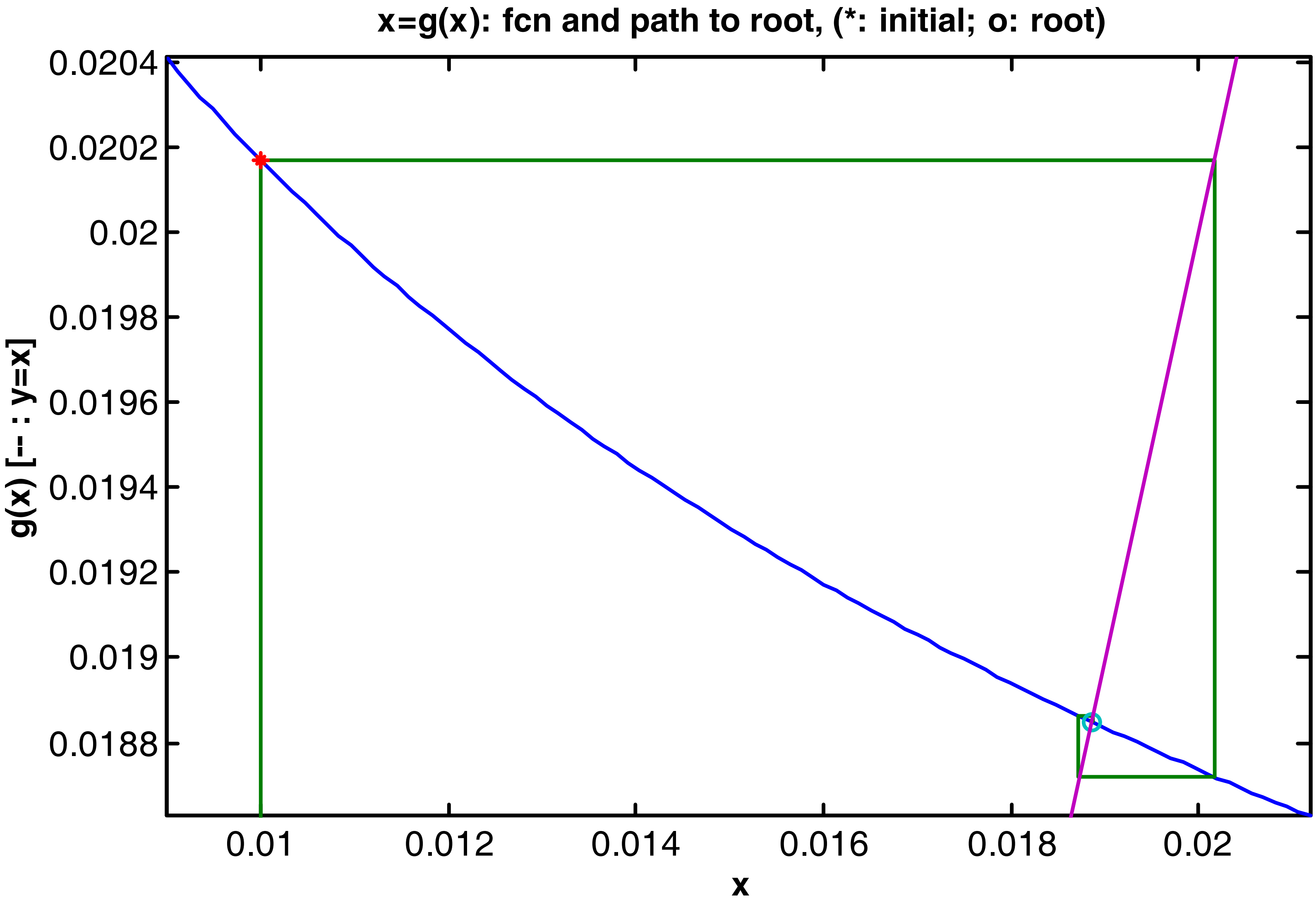
Function containing the Colebrook equation : 'Colebrookg'

Starting value = 0.01

# Ejemplo 1

| Iteration | x | g(x) |
|---|---|---|
| 1 | 0.01 | 0.0201683 |
| 2 | 0.0201683 | 0.0187204 |
| 3 | 0.0187204 | 0.0188639 |
| 4 | 0.0188639 | 0.0188491 |
| 5 | 0.0188491 | 0.0188506 |
| 6 | 0.0188506 | 0.0188505 |

f = 0.0189



x=g(x): fcn and path to root, (*: initial; o: root)
0.0204
0.0202
0.02
0.0198
0.0196
0.0194
0.0192
0.019
0.0188
g(x) [-- : y=x]
0.01
0.012
0.014
0.016
0.018
0.02
x

# Ejemplo 1

1 ) Successive substitution

2 ) Linear Interpolation

3 ) Newton Raphson

0 ) Exit

Choose the method of solution : 2

Function containing the Colebrook equation : 'Colebrook'

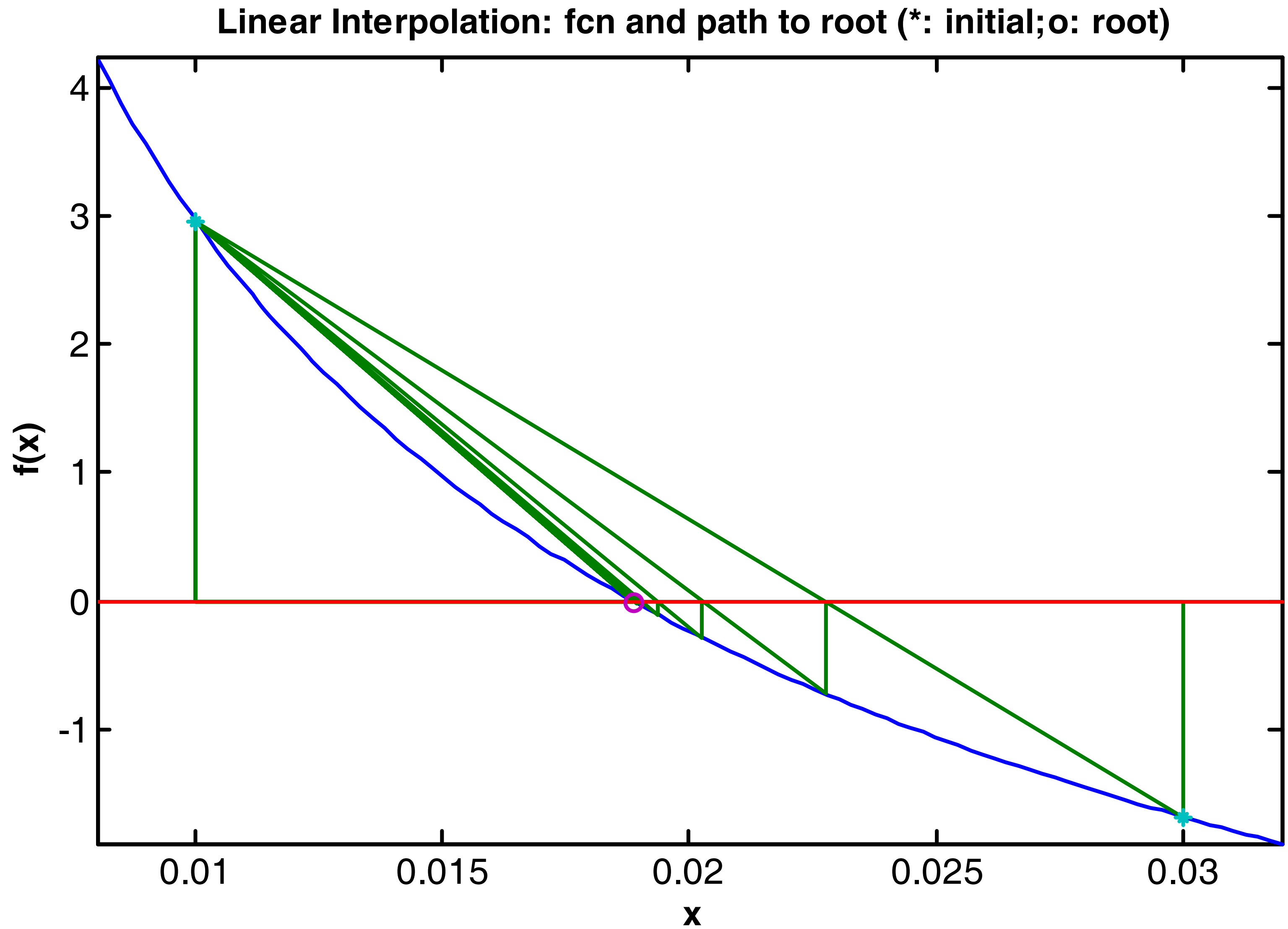
First starting value = 0.01

Second starting value = 0.03

# Ejemplo 1

| Iteration | x | f(x) |
|---|---|---|
| 0 | 0.01 | 2.9585 |
| 0 | 0.03 | -1.68128 |
| 1 | 0.0227528 | -0.723985 |
| 2 | 0.0202455 | 0.282098 |
| 3 | 0.0193536 | -0.105158 |
| 4 | 0.0190326 | -0.0385242 |
| 5 | 0.0189165 | -0.0140217 |
| 6 | 0.0188744 | -0.00509133 |
| 7 | 0.0188592 | -0.00184708 |
| 8 | 0.0188536 | -0.000669888 |
| 9 | 0.0188516 | -0.000242924 |
| 10 | 0.0188509 | -8.80885e-005 |

f = 0.0189


Linear Interpolation: fcn and path to root (*: initial;o: root)
4
3
2
1
0
-1
f(x)
0.01
0.015
0.02
0.025
0.03
x

# Ejemplo 1

1 ) Successive substitution

2 ) Linear Interpolation

3 ) Newton Raphson

0 ) Exit

Choose the method of solution : 3

Function containing the Colebrook equation : 'Colebrook'

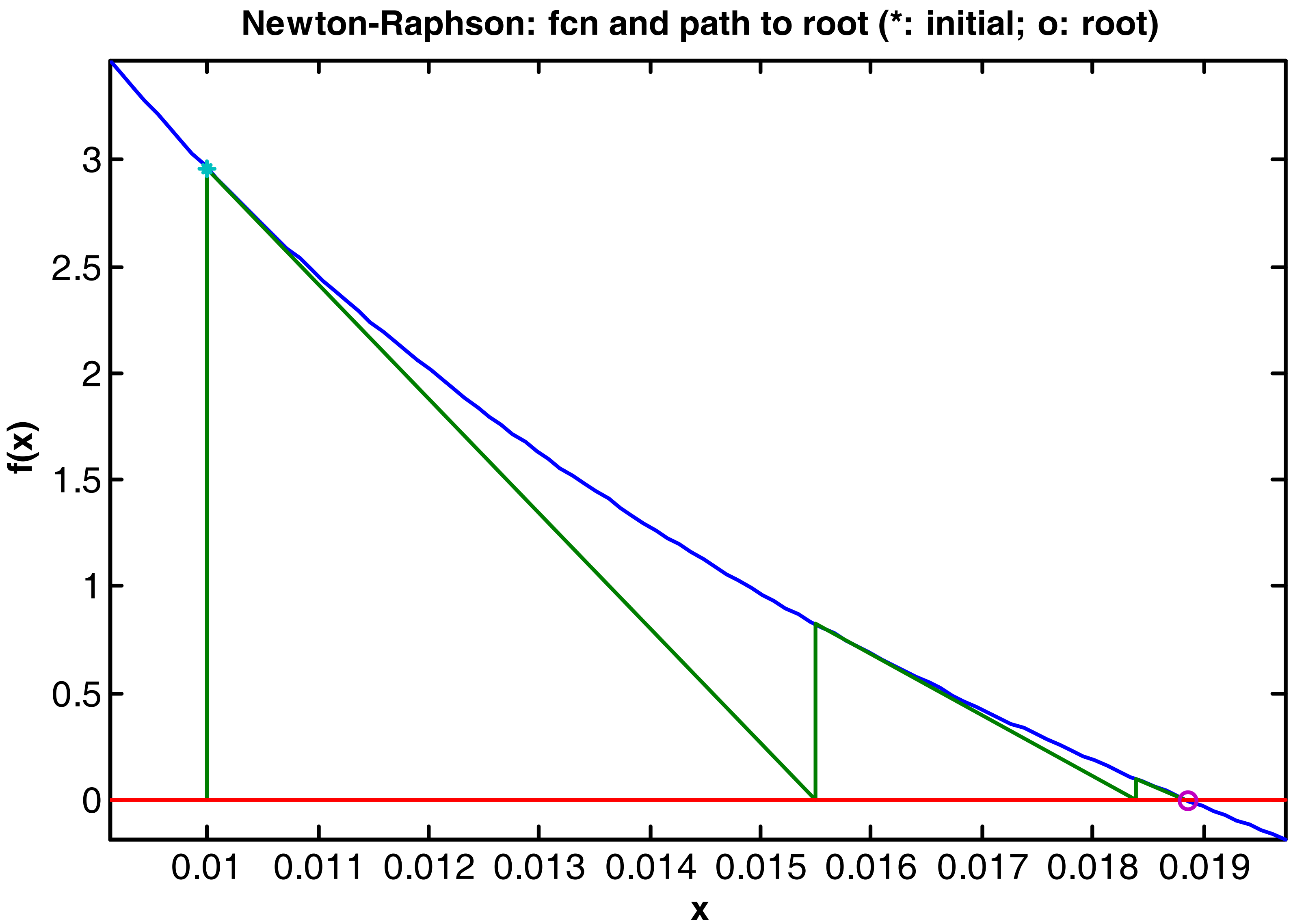
Starting value = 0.01

# Ejemplo 1

**Starting value = 0.01**

| Iteration | x | f(x) |
|---|---|---|
| | 0.01 | 2.9585 |
| 1 | 0.0154904 | 0.825216 |
| 2 | 0.0183977 | 0.0982029 |
| 3 | 0.0188425 | 0.00170492 |
| 4 | 0.0188505 | 6.30113e-007 |
| 5 | 0.0188505 | 3.79039e-011 |

**f = 0.0189**


Newton-Raphson: fcn and path to root (*: initial; o: root)
f(x)
x
3
2.5
2
1.5
1
0.5
0
0.01
0.011
0.012
0.013
0.014
0.015
0.016
0.017
0.018
0.019

# Ejemplo 2: Determinación de una raíz de un polinomio de grado n mediante el método de Newton Raphson aplicado a la Ecuación de Estado Soave-Redlich-Kwong.

- Desarrollar una función de MATLAB para calcular una raíz de una ecuación polinomial mediante el método de Newton-Raphson.
- Calcular el volumen específico de un gas puro a una dada presión y temperatura utilizando la Ecuación de Estado Soave-Redlich-Kwong:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha}{V(V+b)}$$

**Las constantes a y b de la Ecuación se obtienen de la siguiente manera**

$$a = \frac{0.4278 R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$b = \frac{0.4278 R T_c}{P_c}$$

**donde Tc y Pc representan la temperatura crítica y la presión crítica respectivamente. La variable α es una función empírica de la temperatura:**

$$\alpha = \left[1 + s\left(1 - \sqrt{\frac{t}{T_c}}\right)\right]^2$$

**El valor de S es función del factor acéntrico, ω, del gas:**

$$S = 0.48508 + 1.55171\omega - 0.15613\omega^2$$

# Las propiedades físicas del n-butano son:

$$T_c = 425.2K\,, P_c = 3797kPa, \omega = 0.1931$$

# La constante general de los gases es:

$$R = 8314J/kool.K.$$

- Calcular el volumen específico del vapor de n-butane a 500K y a presiones de 1 a 40 atm.
- Comparar los resultados gráficamente con aquellos obtenidos utilizando la Ley de los Gases Ideales.
- ¿Qué conclusión saca de esta comparación?

# Ejemplo 2

Input the vector of pressure range (Pa) = [1:40]*101325

Input temperature (K) = 500

Critical temperature (K) = 425.2

Critical pressure (Pa) = 3797e3

Acentric factor = 0.1931

RESULTS:

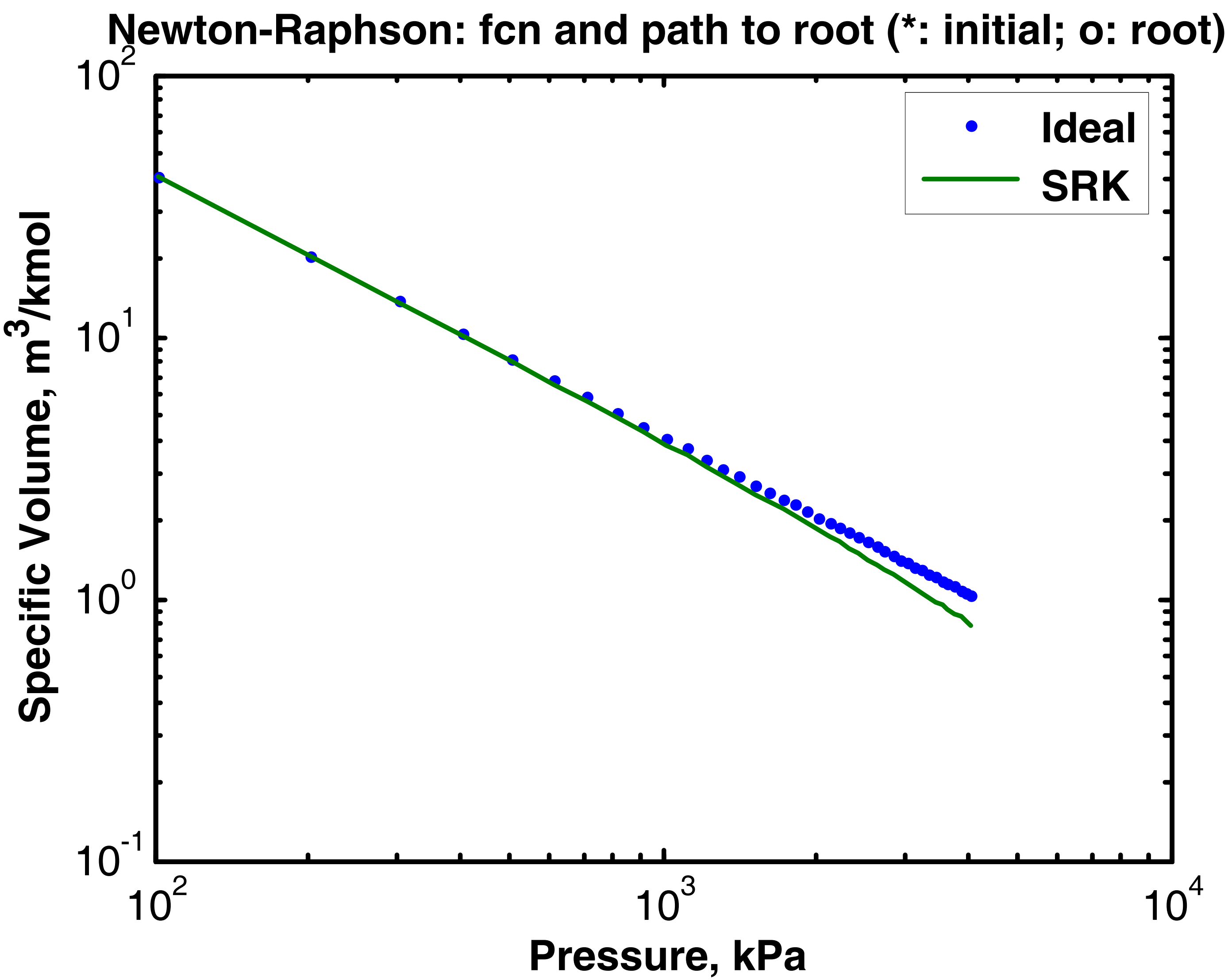
Pres. = 101325.00 Ideal gas vol. =41.0264 Real gas vol. =40.8111

Pres. = 1013250.00 Ideal gas vol. = 4.1026 Real gas vol. = 3.8838

Pres. = 2026500.00 Ideal gas vol. = 2.0513 Real gas vol. = 1.8284

Pres. = 3039750.00 Ideal gas vol. = 1.3675 Real gas vol. = 1.1407

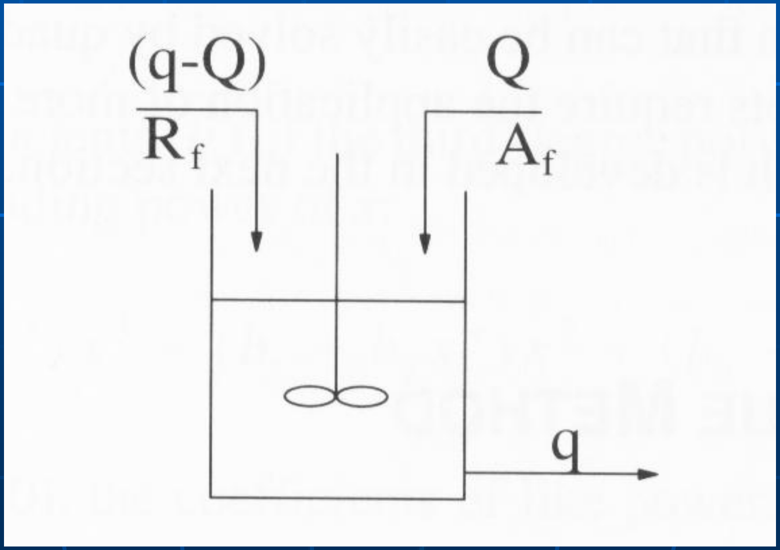
Pres. = 4053000.00 Ideal gas vol. = 1.0257 Real gas vol. = 0.7954



Newton-Raphson: fcn and path to root (*: initial; o: root)
Specific Volume, m^3/kmol
Pressure, kPa
Ideal
SRK
10^2
10^1
10^0
10^-1
10^2
10^3
10^4

# Ejemplo 3: Solución de un Polinomio de Grado n y Función de Transferencia Utilizando el Método Newton-Raphson con División Sintética y Método de Autovalores.

Consideremos el reactor isotérmico continuo tanque agitado (CSTR) como el que se muestra en la siguiente Figura:



Las componentes A y R alimentan al reactor a tasas Q y (q − Q), respectivamente. En el reactor se desarrolla el siguiente esquema de reacción:

$$
\begin{aligned}
A + R &\longrightarrow B \\
B + R &\longrightarrow C \\
C + R &\longrightarrow D \\
D + R &\longrightarrow E
\end{aligned}
$$

**Este problema fue analizado por Douglas para ilustrar las diversas técnicas de diseño de sistemas de control simple con retroalimentación En su análisis Douglas hizo las siguientes hipótesis:**

1) La componente R está presente en el reactor en exceso de manera que las velocidades de reacción puedan aproximarse por expresiones de primer orden.
2) Las componentes B, C, D y E de la alimentación son cero.
3) Se elige un conjunto particular de valores de velocidades y de concentraciones de la alimentación, constantes cinéticas y volumen del reactor.
4) Las perturbaciones se deben a cambios en la composición de la componente R en el recipiente.

- El objetivo del control es mantener la composición de la componente C tan próxima como sea posible al valor de diseño en estado estacionario, a pesar del hecho que ingresen perturbaciones al sistema.
- Este objetivo se alcanza mediante la medición de la composición real de C utilizando la diferencia entre el valor deseado y el valor medido para manipular el caudal de entrada Q de la componente A.
- Douglas desarrolló la siguiente función de transferencia para el reactor con un sistema de control proporcional:

$$K_c \frac{2.98(s+2.25)}{(s+1.45)(s+2.85)^2(s+4.35)} = -1$$

- **Kc es la ganancia del controlador proporcional.**
- **Este sistema de control es estable para valores de Kc que suministran raíces de la función de transferencia con parte real negativa.**
- **Utilizando el método de Newton-Raphson con división sintética o el método de los autovalores, determine las raíces de la función de transferencia para un rango de valores de Kc y calcule el valor crítico de Kc por encima del cual el sistema se vuelve inestable.**
- **Escribir el programa de manera que pueda utilizarse para resolver polinomios de grado n o funciones de transferencia del tipo mostrado en la Ecuación anterior.**

# Obsérvese lo siguiente:

$$K_c \frac{2.98(s+2.25)}{(s+1.45)(s+2.85)^2(s+4.35)} = -1$$

$$\frac{(2.98s+6.705)K_c}{s^4+11.50s^3+47.49s^2+83.0632s+51.2327} = -1$$

$$\left[s^4+11.50s^3+47.49s^2+83.0632s+51.2327\right]+\left[2.98s+6.705\right]K_c = 0$$

$$K_c = 0 \;\Rightarrow\; s = -1.45, -2.85, -2.85, -4.35 \quad \text{(open-loop stable)}$$

# Algoritmo de la División Sintética

$$
\begin{aligned}
f(x) &= a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0 = 0 \\
&= (x - x^*)(b_3x^3 + b_2x^2 + b_1x + b_0) \\
&= b_3x^4 + (b_2 - b_3x^*)x^3 + (b_1 - b_2x^*)x^2 + (b_0 - b_1x^*)x - b_0x^*
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow a_3 &= b_2 - b_3x^* & \text{or} \qquad & b_3 = a_4 \\
a_2 &= b_1 - b_2x^* & & b_2 = a_3 + b_3x^* \\
a_1 &= b_0 - b_1x^* & & b_1 = a_2 + b_2x^* \\
& & & b_0 = a_1 + b_1x^*
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow b_{n-1} = a_n \qquad\qquad b_{n-1-r} = a_{n-r} + b_{n-r}x^*
$$

# Método de los Autovalores

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0 = 0$$

$$root.m \Updownarrow eig.m$$

$$\mathbf{A} \begin{bmatrix} -\frac{a_{n-1}}{a_n} & -\frac{a_{n-2}}{a_n} & \cdots & -\frac{a_{n-1}}{a_n} & -\frac{a_0}{a_n} \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ . & & & & . \\ . & & & & . \\ . & & & & . \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Vector of coefficients of the numerator polynomial = [2.98, 6.705]

Vector of coefficients of the denominator polynomial =

[1, 11.5, 47.49, 83.0632, 51.2327]

Lower limit of the range of search = 0

Upper limit of the range of search = 100

1 ) Newton-Raphson with synthetic division

2 ) Eigenvalue method

Method of root finding = 1

Kc = 0.0000

Roots = -4.35 -2.8591 -2.8409 -1.45

Kc = 100.0000

Roots = -9.851 -2.248 0.2995+5.701i 0.2995-5.701i

Kc = 50.0000

Roots = -8.4949 -2.2459 -0.3796+4.485i -0.3796-4.485i

Kc = 75.0000

Roots = -9.2487 -2.2473 -0.001993+5.163i -0.001993-5.163i

Kc = 87.5000

Roots = -9.5641 -2.2477 0.1559+5.445i 0.1559-5.445i

**Kc = 81.2500**

**Roots = -9.4104 -2.2475 0.07893+5.308i 0.07893-5.308i**

**Kc = 78.1250**

**Roots = -9.3306 -2.2474 0.039+5.237i 0.039-5.237i**

**Kc = 76.5625**

**Roots = -9.29 -2.2473 0.01864+ 5.2i 0.01864- 5.2i**

**Kc = 75.7813**

**Roots = -9.2694 -2.2473 0.00836+5.182i 0.00836-5.182i**

**Kc = 75.3906**

**Roots = -9.2591 -2.2473 0.003192+5.173i 0.003192-5.173i**

**Kc = 75.1953**

**Roots = -9.2539 -2.2473 0.0006016+5.168i 0.0006016-5.168i**

**Kc = 75.0977**

**Roots = -9.2513 -2.2473 -0.0006953+5.166i -0.0006953-5.166i**

**Kc = 75.1465**

**Roots = -9.2526 -2.2473 -4.667e-005+5.167i -4.667e-005-5.167i**

**Kc = 75.1709**

**Roots = -9.2533 -2.2473 0.0002775+5.167i 0.0002775-5.167i**

**Kc = 75.1587**

**Roots = -9.2529 -2.2473 0.0001154+5.167i 0.0001154-5.167i**

Kc = 75.1526

Roots = -9.2528 -2.2473 3.438e-005+5.167i 3.438e-005-5.167i

Kc = 75.1495

Roots = -9.2527 -2.2473 -6.147e-006+5.167i -6.147e-006-5.167i

Kc = 75.1511

Roots = -9.2527 -2.2473 1.412e-005+5.167i 1.412e-005-5.167i

Kc = 75.1503

Roots = -9.2527 -2.2473 3.985e-006+5.167i 3.985e-006-5.167i