CAPÍTULO IV

SISTEMAS DE ECUACIONES DE GRAN DIMENSIÓN Y POCO DENSOS

Por
Nicolás José Scenna

IV.1 INTRODUCCIÓN

En general, el modelo de una planta completa contiene miles de ecuaciones e i ncógnitas. Más aún, un problema de diseño involucra un número significativamente mayor de incógnitas que de ecuaciones, siendo su diferencia los grados de libertad que deben especificarse para definir un sistema compatible (igual número de incógnitas que de ecuaciones). Existen numerosas alternativas para realizar esta asignación. Como se verá más adelante, necesitamos algoritmos prácticos que nos permitan realizar la tarea, más aún si lo debemos hacer computacionalmente (algorítmicamente). Por otra parte, dado que deben manejarse miles de ecuaciones, es la única forma de realizarlo.

Es por ello que necesitamos herramientas numéricas para resolver sistemas de ecuaciones no lineales de gran dimensión, que sean lo suficientemente eficientes como para resolverlas rápidamente y sin problemas de almacenamiento en memoria. Este problema es típico tanto en simulación estacionaria como dinámica.

Dentro de este contexto, en las primeras secciones analizaremos métodos numéricos apropiados para sistemas de ecuaciones no lineales, que por otra parte son una continuación de los vistos en el capítulo anterior. En la segunda parte de este capítulo, se estudiarán métodos apropiados para resolver grandes sistemas de ecuaciones tomando ventaja de su estructura particular. Además, dado que un simulador se basa en programar un modelo para la planta a simular y dado que éste está co nstituido por un sistema de ecuaciones, es lógico establecer una correspondencia entre el tratamiento de un sistema de ecuaciones y su relación con los simuladores específicos. En la segunda parte de este capítulo se harán evidentes estas íntimas relaciones. En efecto, si realizamos un cambio gradual en el lenguaje, podremos abordar al sistema, no solamente como un conjunto de símbolos matemáticos, sino como la representación de la planta a simular.

IV.2 RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES

En el capítulo anterior se han visto técnicas que permiten la solución numérica de sistemas de ecuaciones lineales y además se analizaron métodos para resolver ecuaciones no lineales, que pueden generalizarse para aplicarlos a sistemas de ecuaciones no lineales. Dado que muchos de los métodos más importantes

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

(cuadráticos) recurren a la linealización (proponiendo una secuencia de problemas lineales), nos serán muy útiles las metodologías ya vistas para sistemas de ecuaciones lineales.

La gran mayoría de los modelos correspondientes a procesos químicos involucran sistemas de ecuaciones no lineales; por lo tanto resulta imprescindible desarrollar métodos eficientes, tanto desde el punto de vista de la convergencia, como del tiempo de cómputo involucrado. Existen en la bibliografía un gran número de algoritmos destinados a l a solución numérica de sistemas de ecuaciones no lineales. Aquí analizaremos unos pocos, los más utilizados en la práctica. Nuevamente, al igual que lo hicimos en el capítulo anterior, se darán las pautas mínimas para lograr comprender los basamentos conceptuales y poder aplicar los principales algoritmos para resolver problemas específicos. No se revisarán los teoremas que sustentan los principios utilizados, así como la demostración del orden de convergencia y las condiciones para las cuales éstos convergen.

El lector interesado en estos temas, al igual que en complementar los conocimientos aquí incorporados, deberá recurrir a la bibliografía recomendada al final del capítulo.

IV.2.1 Métodos de Newton-Raphson. Linealización

Sea un sistema de ecuaciones no lineales $\underline{f}\ (\underline{x}) = 0$. Si se procede a la expansión en serie de Taylor de la función $\underline{f}\ (\underline{x})$ alrededor del punto $\underline{x}^*$ / $\underline{f}(\underline{x}^*)$ =0 tenemos:

$$f_i(\underline{x}^*)+\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right)(\underline{x}-\underline{x}^*)+\left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j^2}\right)(\underline{x}-\underline{x}^*)^2+....+ \qquad (1)$$

i= 1,…., N ; j=1,…., N = dimensión del sistema

donde los términos entre paréntesis representan matrices. A la matriz que contiene a las primeras derivadas se la conoce como matriz Jacobiana,

$$\underline{\underline{J}}=\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right)\ con\ i=1,....,N\ ;\ j=1,...,N \qquad (2)$$

y es una matriz cuadrada de orden N que contiene la derivada de todas y cada una de las funciones f_i, respecto de todas y cada una de las variables x_j.

Si $\underline{x}'$ es la aproximación de la raíz $\underline{f}\ (\underline{x}^*) = 0$, una aproximación lineal de dicha función, $\underline{L}\ (\underline{x})$, puede escribirse:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\underline{L}(\underline{x}') \cong \underline{f}(\underline{x}') + \underline{\underline{J}}.(\underline{x}' - \underline{x}^*) = 0$$

O bien:

$$\underline{x}' = \underline{x}^* - \underline{\underline{J}}^{-1}.\underline{f}(\underline{x}^*) \qquad (3)$$

Luego, cualquier $\underline{x}'$ en la iteración k se obtiene aplicando la ecuación anterior; con lo cual nos queda para las sucesivas aproximaciones a la raíz $\underline{x}^*$,

$$\underline{x}' = \underline{x}^* - \underline{\underline{J}}^{-1}.\underline{f}(\underline{x}^*) \qquad (3)$$

$$\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^k - \underline{\underline{J}}^{-1} . \underline{f}(\underline{x}^k)$$

El Jacobiano debe evaluarse en $\underline{x} = \underline{x}^k$ y el exponente negativo indica inversión de la matriz.

La interpretación de esta ecuación ya la vimos en el Capítulo III, que para una variable implica la recta tangente a la función $f(x)$ *en* x^k, tomada como aproximación lineal de la verdadera función. Aquí el concepto es el mismo, pero ahora es un hiperplano el que aproxima la función en el punto $\underline{x}^k$. Este método es conocido como método de Newton-Raphson. Luego, en cada iteración, según la Ecuación (4), debe calcularse el Jacobiano $\underline{\underline{J}}$ y la matriz inversa $\underline{\underline{J}}^{-1}$, para luego proceder a la multiplicación indicada $\underline{\underline{J}}^{-1}. \underline{f}(\underline{x})$, que siendo entre una matriz de (N x N) y un vector de (N x 1) resulta un vector (N x 1) que debe sustraerse del vector $\underline{x}^k$ para darnos $\underline{x}^{k+1}$.

Otra forma de proceder es escribir el Sistema (4) de la siguiente forma:

$$\underline{\underline{J}} . \Delta\underline{x}^k = - \underline{f}(\underline{x}^k)$$

Aquí, dado que $\underline{\underline{J}}$ y $\underline{f}$ son conocidos, tenemos un sistema de ecuaciones con $\underline{\underline{J}}$ como matriz de coeficientes, $\underline{f}$ como términos independientes y $\Delta\underline{x}^k$ como vector incógnita.

Si bien desde el punto de vista analítico ambas expresiones son equivalentes, desde el punto de vista numérico o procedural no lo son. En efecto, es conveniente utilizar una u otra según sea el sistema a resolver y como veremos más adelante, uno de los factores más importantes es la estructura del sistema de ecuaciones, o lo que es lo mismo, de la matriz de coeficientes $\underline{\underline{J}}$.

El Sistema (4) impone la inversión numérica de una matriz, para lo cual existen varios algoritmos, los cuales serán más o menos convenientes según las características de $\underline{\underline{J}}$. En cambio, para resolver el Sistema (5) pueden utilizarse los procedimientos de manipulación de matrices (Gauss, etc.) vistos en el capítulo anterior. En general, en la mayoría de los problemas utilizaremos una variante del método de eliminación Gaussiana.

Debe remarcarse que este procedimiento de resolución del sistema de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ecuaciones lineales debe realizarse para cada iteración *k*, hasta lograr convergencia y en sistemas donde, por ejemplo, *N* es mayor que *1000*, exige un importante consumo de tiempo y memoria (almacenamiento). Luego, todos los aspectos discutidos en el capítulo anterior respecto de estos puntos adquieren superlativa importancia. Más adelante veremos dos ejemplos en los cuales se mostrará cómo puede facilitarse enormemente el cómputo de los vectores $\underline{\Delta x}^k$ en función de la estructura particular de $\underline{\underline{J}}$.

Una característica que debemos recordar sobre el método de Newton-Raphson (N-R) es que si no inicializamos en un punto próximo a la solución, puede no converger; además, en general, se hace más lento a medida que avanza a la solución, pese a que el esfuerzo de evaluar los Jacobianos, iteración a iteración, es el mismo.

Por último, a medida que el determinante de $\underline{\underline{J}}$ tiende a cero, los valores de los incrementos $\underline{\Delta x}^k$ pueden ser muy grandes, es decir, fuera de *escala*. Para resolver o mitigar estos problemas se han propuesto muchas variantes, algunas con sustento teórico y otras con basamento empírico, con conocimiento provisto por la experiencia. Acerca de algunos procedimientos que eviten problemas como los mencionados arriba podemos citar un adecuado escalado de todos los coeficientes de la matriz $\underline{\underline{J}}$(esto evita errores de redondeo o truncamiento), mediante la división por constantes de las filas de la matriz y el uso del Jacobiano un cierto número de veces (mantener la pendiente un cierto número de iteraciones), lo cual hace que el método ya no sea estrictamente de orden dos pero evita el tiempo de cómputo del Jacobiano. Esta estrategia da mejores resultados cuando estamos próximos a la convergencia.

Por otra parte, también resulta útil acotar por un cierto parámetro $\alpha \subset [0,1]$ los incrementos calculados $\underline{\Delta x}^k$, de tal forma de evitar el *disparo* de los incrementos en las variables independientes. Otra técnica consiste en acotar cada componente de $\underline{\Delta x}^k$ pero esto sólo es posible cuando la aplicación física permite inferir ciertas propiedades. Por ejemplo, en una columna de destilación todos los incrementos de temperaturaΔT_i pueden acotarse a 10°C en cada iteración. Además, si las correcciones hacen que el valor corregido (en grados Kelvin) sea negativo, se aplicará un factor de reducción mayor al incremento de tal forma de lograr una temperatura positiva. Un criterio más profundo, y además complementario, es plantear un problema de optimización, de tal forma de encontrar un factor de escala α, que si bien mantiene la dirección del incremento $\underline{\Delta x}^k$, modifica la norma del vector $\underline{\Delta x}^k$según el siguiente criterio.

$$\underset{\alpha}{Min} \left\| \underline{f}\left(\underline{x}^k - \alpha\, \underline{\Delta x}^k\right) \right\| \qquad (6)$$

Esto es, lograr el factor de escalado α que permita el máximo descenso posible (tiende a cero) de la función $\underline{f(\alpha)}$. Esto si bien favorece la velocidad de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

convergencia, impone resolver un problema de optimización. Aunque sea de una sola variable, α, éste debe resolverse en cada iteración. Otro método propuesto para acelerar la convergencia, modificando al de N-R, es el de Broyden, que es muy utilizado en simulación de procesos, como se verá en el Capítulo (X). El método de Broyden (1965) forma parte de una familia de métodos conocidos como cuasi-Newtonianos, en los cuales se reemplaza la matriz Jacobiana por una aproximación que es adaptada en cada iteración (de esta manera se ahorra tiempo de cómputo).

$$\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^{k} - t^{k} \left(\underline{\underline{B}}^{-1}\right).\underline{f}\left(\underline{x}^{k}\right) \tag{7}$$

donde t^k es un factor de escalado y $\underline{\underline{B}}$ es la aproximación de $\underline{\underline{J}}$. El factor t^k se calcula de tal manera que $\underline{f}\ (\underline{x}^k + t^k\ \underline{\Delta x}^k)$ resulte mínimo (similar a la variable α en la Ecuación (6)). La matriz $\underline{\underline{B}}$ se calcula en función del parámetro t^k y las correcciones $\underline{\Delta x}^k$ existiendo varias estrategias propuestas. Para un análisis más profundo se remite al lector a la bibliografía recomendada.

Ejemplo:

Sea la ecuación:

$$3\ \ln(x) - x + \frac{1}{x} = 0$$

definida para x > 0. Hallar una raíz por el método de N-R.

Proponemos x_0= 0,1 y tomamos como criterio de error o tolerancia $|f(x)| < 10^{-3}$.

Según hemos visto, proceder de acuerdo al procedimiento iterativo N-R implica suponer un valor inicial o semilla considerado como una aproximación a la solución (raíz) buscada. El criterio de error lo necesitamos ya que la serie de valores consecutivos que genera el método debe, si es convergente hacia la solución, detenerse en algún momento, esto es, numéricamente debemos decidir cuán cerca de la solución (tolerancia o error aceptable) queremos llegar.

Con el valor inicial supuesto y el criterio de error ya podemos comenzar con la generación de los sucesivos valores (aproximaciones) a la raíz buscada. Para ello es conveniente derivar la función, a los efectos de calcular fácilmente la derivada en cada iteración.

$$f(0{,}1) = 3\ln(0{,}1) - 0{,}1 + 10 = 2{,}99224$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$f(x_0) \neq 0$, luego

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

$$f'(x) = \frac{3}{x} - 1 - \frac{1}{x^2}$$

$$f'(x_0) = 30 - 1 - 100 = -71$$

$$x_1 = 0{,}1 - \frac{2{,}99224}{(-71)} = 0{,}142144$$

$f(x_1) = 1{,}04203 \neq 0$, luego

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 0{,}142144 - \frac{1{,}04023}{-29{,}3875} = 0{,}177541$$

$f(x_2) = 0{,}26930 \neq 0$, luego

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} = 0{,}177541 - \frac{0{,}26930}{-15{,}8383} = 0{,}194544$$

$f(x_3) = 0{,}03439 \neq 0$, luego

$$x_4 = x_3 - \frac{f(x_3)}{f'(x_3)} = 0{,}194544 - \frac{0{,}03439}{-12{,}0012} = 0{,}19741$$

$$f(x_4) = 7{,}720 \times 10^{-4} < 10^{-3}$$

Luego, *x = 0.19741* es una de las raíces dentro del criterio de tolerancia establecido. Puede observarse que el valor *x = 1* también es solución. El lector puede verificar intentando el proceso con una nueva inicialización.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ejemplo:

Sea el siguiente sistema:

$$x_1^2 - x_2^2 = 0$$
$$2x_1 - 2 = 0$$

Hallar una raíz aplicando el método de N-R. Para ello suponemos $\underline{x}^0 = (1,2)$,

$$J = \begin{vmatrix} f'_{11} & f'_{12} \\ f'_{21} & f'_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2x_1 & -2x_2 \\ 2 & 0 \end{vmatrix}$$

$$f_1\left(\underline{x}^0\right) = -3$$
$$f_2\left(\underline{x}^0\right) = 0$$

Luego, debemos calcular $\underline{\Delta x}^1$. Resolvemos el siguiente sistema:

$$\begin{bmatrix} 2 & -4 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1^1 \\ \Delta x_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$2\ \Delta x_1^1 - 4\ \Delta x_2^1 = 3$$

$$2\ \Delta x_1^1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta x_1^1 = 0,\ \Delta x_2^1 = -0{,}75\text{, luego}$$

$$x_1^1 = 1 + 0 = 1$$

$$x_2^1 = 2 - 0{,}75 = 1{,}25$$

$$f_l\left(\underline{x}_1^1\right) = 1 - (1{,}25)^2 = -0{,}5625$$

$$f_2\left(\underline{x}_1^1\right) = 2 - 2 = 0$$

Luego, para el cálculo de $\underline{\Delta x}^2$ resolvemos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\begin{bmatrix} 2 & -2{,}50 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1^2 \\ \Delta x_2^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}5625 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$2\ \Delta x_1^2 - 2{,}5\ \Delta x_2^2 = 0{,}5625$$

$$2\ \Delta x_1^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta x_2^2 = 0{,}5625 / (-2{,}50) = -0{,}225$$

$$x_1^2 = x_1^1 + \Delta x_1^2 = 1$$

$$x_2^2 = x_2^1 + \Delta x_2^2 = 1{,}25 - 0{,}225 = 1{,}025$$

$$f_1(\underline{x}^2) = 1 - (1{,}025)^2 = -0{,}050625$$
$$f_2(\underline{x}^2) = 2 - 2 = 0$$
$\left\| \underline{f}(\underline{x}^2) \right\| > 10^{-3}$, luego resolveremos:

$$\begin{bmatrix} 2 & -2{,}05 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1^3 \\ \Delta x_2^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}050615 \\ 0 \end{bmatrix}$$
$$2\ \Delta x_1^3 - 2{,}05\ \Delta x_2^3 = 0{,}05065$$
$2\ \Delta x_1^3 = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta x_1^3 = 0, \quad \Delta x_2^3 = -0{,}02469$, luego:
$$x_1^3 = 1$$
$$x_2^3 = 1{,}025 - 0{,}02469 = 1{,}000307$$
$$f_1(\underline{x}^3) = 1 - 1{,}00061 = -6{,}14 \times 10^{-4}$$
$$f_2(\underline{x}^3) = 0$$

luego, $\left\| \underline{f}(\underline{x}^3) \right\| < 10^{-3}$ Entonces, el vector (1, 1.000307) es solución del sistema dado. Nótese que las solución exacta es (1, 1).

IV.2.2 Matrices Tridiagonales. Método de Thomas

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Como anticipamos, existen sistemas de ecuaciones tales que por su estructura, permiten procedimientos especiales que ahorran tiempo de cómputo y permiten acotar o minimizar los errores. Sea el siguiente sistema de ecuaciones, que como se verá en el Capítulo X es muy importante en el modelado de equipos múltiple etapas en cascadas contracorriente, por ejemplo, columnas de destilación:

$$
\begin{aligned}
a_{11}\,x_1 + a_{12}\,x_2 + \;0\; + \;0\; + \;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + 0 &= d_1 \\
a_{21}\,x_1 + a_{22}\,x_2 + a_{23}\,x_3\,0 \; + \;0\; + \;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + 0 &= d_2 \\
0 + a_{32}\,x_2 + a_{33}\,x_3 + \;0\; \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + 0 &= d_3 \\
\ldots & \\
\ldots & \\
\ldots & \\
0 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots a_{n-1,n-2}\,x_{n-2} + a_{n-1,n-1}\,x_{n-1} + a_{n-1,n}\,x_n &= d_{n-1} \\
0 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a_{n,n-1}\,x_{n-1} + a_{n,n}\,x_n &= d_n
\end{aligned}
\qquad (8)
$$

o en forma matricial compacta:

$$
\begin{bmatrix}
B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\
0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & 0 \\
0 & . & . & 0 & . & . \\
0 & . & . & A_{n-1} & B_{n-1} & C_{n-1} \\
0 & 0 & 0 & 0 & A_n & B_n
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \Delta x_3 \\ . \\ \Delta x_{n-1} \\ \Delta x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ . \\ d_{n-1} \\ d_n
\end{bmatrix}
\qquad (9)
$$

que se denomina matriz tridiagonal, ocupando los coeficientes A_i, B_i y C_i los lugares antes, en la diagonal y posterior respectivamente. Es por ello que podemos obviar la notación de dos índices del Sistema (8) y escribirlo más sencillamente según el Sistema (9).

El Sistema de Ecuaciones (8) es un típico caso que involucra matrices ralas, esto es, poco densas y de muy elevada dimensión. En el Capítulo X veremos que ciertas aplicaciones normalmente involucran miles de ecuaciones. Luego, debe trabajarse eficientemente. Esto implica dos aspectos. El primero, evitar los errores de redondeo y eventualmente de truncamiento que se generan (si el procedimiento es inadecuado) y el segundo es el tiempo de cómputo.

Para ambos aspectos Thomas introduce un método eficiente, que se basa en la técnica de eliminación Gaussiana vista en el capítulo anterior, pero tomando ventaja de la estructura particular del sistema en análisis (tridiagonal). Para la primer fila (*n = 1*) tenemos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$B_1\ x_1 + C_1\ x_2\ D_1 \tag{10}$$

de donde:

$$x_1 = \frac{D_1 - C_1\ x_2}{B_1} \tag{11}$$

Si se define $p_1=C_1/B_1$ y $q_1=D_1/B_1$, entonces la Ecuación (10) se escribe:

$$x_1 = q_1 - p_1\ x_2 \tag{12}$$

Comparando la Ecuación (10) con la Ecuación (12) vemos que los coeficientes que acompañan a las incógnitas son ahora $B_1 = 1$ y $C_1 = p_1$ y el valor de D_1 es ahora q_1. Tomando en cuenta estos valores, y procediendo de igual manera para *n = 2* tenemos:

$$x_2 = \frac{D_2 - A_2\ q_1}{B_2 - A_2\ p_1} - \left(\frac{C_2}{B_2 - A_2\ p_1} \right) x_3$$

Si llamamos:

$$q_2 = \frac{D_2 - A_2\ q_1}{B_2 - A_2\ p_1}$$

$$p_2 = \frac{C_2}{B_2 - A_2\ p_1}$$

Nos queda:

$$x_2 = q_2 - p_2\ x_3 \tag{13}$$

Nuevamente los coeficientes ahora resultan $A_2=0$, $B_2= 1$, $C_2=P_2$ y $D_2=q_2$. En general los valores p_n y q_n pueden obtenerse según la siguiente ley de recurrencia:

$$p_n = \frac{C_n}{B_n - A_n\ p_{n-1}} \tag{14}$$

$$q_n = \frac{D_n - A_n\ q_{n-1}}{B_n - A_n\ p_{n-1}} \tag{15}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

que conforman los coeficientes genéricos para:

$$x_n = q_n - p_n \; x_{n+1}$$

Las anteriores fórmulas permiten calcular p_n y q_n desde *1* a (*N-1*) y también q_N. Para la última fila tenemos, despejando de la ecuación anterior ($A_N = 0$):

$$x_N = \frac{D_N}{B_N} = q_N \tag{17}$$

Por lo tanto, luego de este proceso de *operaciones elementales* aplicadas a todas las filas, obtenemos de la última (*N*) el valor de x_N. Luego, a partir de x_N, por el proceso inverso, a partir de la Ecuación (16), obtenemos todos los x_n, desde $n = N - 1$, hasta *1*.

$$x_{n-1} = q_{n-1} - p_{n-1} \; x_n = r_{n-1} \tag{18}$$

Un ejemplo numérico para la matriz tridiagonal es el siguiente. El lector puede aplicar las fórmulas recursivas anteriores para lograr la solución del mismo.

$$\begin{bmatrix} 3 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

IV.2.3 Extensión del Método de Thomas a Matrices Tridiagonales en Bloque

Sea el siguiente sistema:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{B}}_1 & \underline{\underline{C}}_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \underline{\underline{A}}_2 & \underline{\underline{B}}_2 & \underline{\underline{C}}_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \underline{\underline{A}}_3 & \underline{\underline{B}}_3 & \underline{\underline{C}}_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & \underline{\underline{A}}_{n-1} & \underline{\underline{B}}_{n-1} & \underline{\underline{C}}_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \underline{\underline{A}}_n & \underline{\underline{B}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{X}_1 \\ \underline{X}_2 \\ \underline{X}_3 \\ . \\ \underline{X}_{n-1} \\ \underline{X}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\underline{F}_1 \\ -\underline{F}_2 \\ -\underline{F}_3 \\ . \\ -\underline{F}_{n-1} \\ -\underline{F}_n \end{bmatrix} \qquad (19)$$

donde $\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}$ y $\underline{\underline{C}}$ son matrices de (*m x m*) y además $\underline{x}$ y $\underline{F}$ son vectores de dimensión *m*; se puede demostrar que puede operarse en forma similar al algoritmo de Thomas para resolver una matriz tridiagonal pero ahora con las submatrices y vectores en lugar de los escalares indicados en las Ecuaciones (14) a (18).

Genéricamente, podemos plantear que el rol de A_n, B_n, C_n, D_n y x_n ahora lo cumplen $\underline{\underline{A}}_n$, $\underline{\underline{B}}_n$, $\underline{\underline{C}}_n$, $-\underline{F}_n$ y $\underline{X}_n$, respectivamente. En efecto, aplicando el mismo razonamiento anterior, para la primer fila tenemos:

$$\underline{\underline{B}}_1 \ \underline{X}_1 + \underline{\underline{C}}_1 \ \underline{X}_2 = -\ \underline{F}_1$$
$$\underline{X}_1 = \underline{\underline{B}}_1^{-1} \left(-\underline{F}_1 - \underline{\underline{C}}_1 \ \underline{X}_2 \right)$$
$$\underline{X}_1 = -\underline{\underline{B}}_1^{-1} \ \underline{F}_1 - \left(\underline{\underline{B}}_1^{-1} \ \underline{\underline{C}}_1 \right) \underline{X}_2$$

reordenando tenemos:

$$\underline{X}_1 + \left(\underline{\underline{B}}_1^{-1} \ \underline{\underline{C}}_1 \right) \underline{X}_2 = -\underline{\underline{B}}_1^{-1} \ \underline{F}_1$$

Luego, las nuevas constantes (matriz y vectores) asumen los siguientes reemplazos:

$$\underline{\underline{B}}_1 \leftarrow \underline{\underline{I}}$$
$$\underline{\underline{C}}_1 \leftarrow \left(\underline{\underline{B}}_1^{-1} \ \underline{\underline{C}}_1 \right)$$
$$\underline{F}_1 \leftarrow \underline{\underline{B}}_1^{-1} \ \underline{F}_1$$

donde $\underline{\underline{I}}$ es la matriz identidad.

Siguiendo el mismo razonamiento anterior y operando algebraicamente, para las filas *2* a *N-1*, tenemos para la transformación de las matrices de los coeficientes el siguiente reemplazo:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\underline{\underline{C}}_n \leftarrow \left(\underline{\underline{B}}_n - \underline{\underline{A}}_n \ \underline{\underline{C}}_{n-1}\right)^{-1} \underline{\underline{C}}_n$$
$$\underline{F}_n \leftarrow \left(\underline{\underline{B}}_n - \underline{\underline{A}}_n \ \underline{\underline{C}}_{n-1}\right)^{-1} \left(\underline{F}_n - \underline{\underline{A}}_n \ \underline{F}_{n-1}\right); \ \ \underline{\underline{A}}_n \leftarrow 0, \ \underline{\underline{B}}_n \leftarrow \underline{\underline{I}}$$

Para la última fila, $\underline{\underline{B}}_N \leftarrow \underline{\underline{I}}$, $\underline{\underline{A}}_N \leftarrow \underline{\underline{0}}$, Luego:

$$\underline{X}_N = -\underline{F}_N \tag{20}$$

donde se procede al siguiente reemplazo (según las ecuaciones vistas arriba):

$$\underline{F}_N \leftarrow \left(\underline{\underline{B}}_N - \underline{\underline{A}}_N \ \underline{\underline{C}}_{N-1}\right)^{-1} \left(\underline{F}_N - \underline{\underline{A}}_N \ \underline{F}_{N-1}\right) \tag{21}$$

Obteniendo el valor del vector $\underline{X}_N$, al igual que en el caso anterior, por medio del camino inverso, calculamos los $\underline{X}_{N-1}$,..., $\underline{X}_1$ de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} &\underline{X}_n = -\left(\underline{F}_n + \underline{\underline{C}}_n \ \underline{F}_{n+1}\right) \\ &con \ n = (N-1), (N-2), ..., 1 \end{aligned} \tag{22}$$

obtenemos la solución del sistema paso a paso.

Por ejemplo, el siguiente sistema de ecuaciones representando por una matriz de coeficientes de forma tridiagonal en bloques:

$$\begin{bmatrix} -7 & 3 & 4 & 2 & 11 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 & 3 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 9 & 3 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 4 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -4 & 3 & 2 & 0 & -4 & 1 & 3 \\ 4 & 3 & 0 & 2 & 1 & 8 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 3 & 2 & 6 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & -3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{X}_1 \\ \underline{X}_2 \\ \underline{X}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \\ 3 \\ -1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

puede resolverse según el algoritmo planteado. Esto implica encontrar los valores del vector $(\underline{X}_1, \underline{X}_2, \underline{X}_3)$, con $\left(\underline{X}_1 = (x_1, x_2, x_3), \underline{X}_2 = (x_4, x_5, x_6), \underline{X}_3 = (x_7, x_8, x_9)\right)$

IV.2.4 Método de Sustitución Directa o Aproximaciones Sucesivas

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En el capítulo anterior vimos que para una ecuación no lineal de una incógnita, era posible, explicitando la variable independiente, generar una secuencia de valores tales que se llegara, si el método converge, a la solución (raíz) buscada.

También vimos que para acelerar la convergencia es posible introducir ciertas modificaciones en el procedimiento. Uno de los métodos estudiados fue el propuesto por Wegstein. Aquí veremos que estos métodos son directamente aplicables a sistemas de ecuaciones no lineales.

Sea el sistema:

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

Se explicita $\underline{X}$ tal que:

$$\underline{x} - \underline{F}(\underline{x}) = \underline{0}$$

esto es:

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

Luego, el algoritmo de sustitución directa propone la siguiente secuencia:

$$\underline{x}^{n+1} = \underline{F}\left(\underline{x}^{n}\right) \tag{23}$$

que converge si se cumple:

$$\left\| \underline{x}^{n+1} - \underline{x}^{n} \right\| < \varepsilon \tag{24}$$

donde ε es una tolerancia especificada.

Se puede probar que si el determinante del Jacobiano de la función $\underline{F}\ (\underline{x})$ es menor que la unidad en la región de trabajo en el entorno del punto solución $\underline{x}^{*} / \underline{F}\left(\underline{x}^{*}\right) = 0$, el método converge.

Aquí también se logra acelerar la velocidad de convergencia según el método de Wegstein. Para ello se procede de la misma forma indicada en la Sección (III.3). En efecto, la Ecuación (III.23) se escribe ahora:

$$\bar{\underline{x}}^{n} = \underline{\underline{Q}}\ \bar{\underline{x}}^{n-1} + \left(\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{Q}}\right)\underline{x}^{n} \tag{25a}$$

$$\underline{x}^{n+1} = \underline{F}\left(\underline{x}^{n}\right) \tag{25b}$$

donde los elementos de $\underline{\underline{Q}}$, $q_j^{\,i}$ se calculan en cada iteración *i* para cada componente *j = 1, ..., N* según:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$q_j^i = \frac{w_j^i}{w_j^i - 1} \tag{26}$$

$$w_j^i = \frac{x_j^i - x_j^{i-1}}{\bar{x}_j^{i-1} - \bar{x}_j^{i-2}} \tag{27}$$

El factor de corrección q_j^i debe calcularse para cada componente en cada iteración. Nuevamente, para el inicio el método se recurre al método convencional de sustitución directa:

Sea: $$\underline{\bar{x}}^{-1} = \underline{x}^1 \quad y \quad \underline{\bar{x}}^{-2} = \underline{x}^2$$

$$w_j^3 = \frac{x_j^3 - x_j^2}{\bar{x}_j^{-2} - \bar{x}_j^{-1}} \quad ; \quad j = 1,\ldots, N$$

$$\underline{\bar{x}}^{-3} = \underline{\underline{Q}}\ \underline{\bar{x}}^{-2} + \left(\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{Q}}\right)\underline{x}^3$$

con

$$\underline{\underline{Q}} = \begin{bmatrix} \frac{x_1^3 - x_1^2}{x_1^3 - 2x_1^2 + x_1^1} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \frac{x_2^3 - x_2^2}{x_2^3 - 2x_2^2 + x_2^1} & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & \frac{x_N^3 - x_N^2}{x_N^3 - 2x_N^2 + x_N^1} \end{bmatrix}$$

Para una iteración genérica, *k*, los nuevos valores de $\underline{\bar{x}}$ se calculan de acuerdo con las Ecuaciones (25a) y (25b), teniendo en cuenta que los valores de la matriz $\underline{\underline{Q}}$, q_j^i, deben actualizarse en cada iteración según las Ecuaciones (26) y (27).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ejemplo:

Sea el siguiente sistema:

$$x_1 \ \ln(x_2) - x_1 + x_1^{(x_2 - x_1)} = 0$$
$$x_1 \ \ln(3 \ x_2) + x_2 - 1 = 0$$

con $x_2 \geq 0$, $x_1 \geq 0$. Resolverlo mediante el procedimiento de sustitución directa.

Solución:

Se comienza explicitando el vector $\underline{x} = (x_1, \ x_2) = \underline{F}(\underline{x})$

$$x_1 = x_1 \ \ln(x_2) + x_1^{(x_2 - x_1)}$$
$$x_2 = 1 - x_1 \ \ln(3 \ x_2)$$

Sea el vector inicial $\underline{x}^0$ (inicialización) = (0, 2), entonces $\underline{x}^1 = \underline{F}(\underline{x}^0)$.

$$x_1^1 = 0 \ \ln(2) + 0^{(2-0)} = 0$$
$$x_2^1 = 1 - 0 \ \ln(3 \ * \ 2) = 1$$

Aquí vemos que $\underline{x}^1 \neq \underline{x}^0$ luego el vector (0,2) no es solución del sistema.

$$x_1^2 = 0 \ \ln(1) + 0^{(1-0)} = 0$$
$$x_2^2 = 1 - 0 \ \ln(3 \ . \ 1) = 1$$

Luego $\underline{x}^2 \neq \underline{x}^1$. Esto implica que $\underline{x} = (0, 1)$ es solución del sistema de ecuaciones analizado. Si probamos con otro punto de arranque, (por ejemplo (0.5, 0.5)), tenemos:

$$x_1^2 = 0 \ \ln(0.5) + 0.5^{(0.5-0.5)} = 0{,}653426$$
$$x_2^2 = 1 - 0.5 \ \ln(3 * 0.5) = 0{,}797267$$

$\underline{x}^1 \neq \underline{x}^0$ luego, calculamos $\underline{x}^2 = \underline{F}(\underline{x}^1)$

Siendo las soluciones más aproximadas:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$x_1^2 = 0{,}653426$$
$$x_2^2 = 0{,}797267$$

Luego calculamos:

$$x_1^3 = 0.653426\ \ln(0.797267) + 0.653426^{(0.797267-0.653426)} = 0.792584$$
$$x_2^3 = 1 - 0.653426\ \ln(3 * 0.797267) = 0.430181$$

$\underline{x}^3 \neq \underline{x}^2$ luego, calculamos $\underline{x}^4 = \underline{F}(\underline{x}^2)$

$$x_1^4 = 0.792584\ \ln(0.430181) + 0.792584^{(0.430181-0.792584)} = 0.419310$$
$$x_2^4 = 1 - 0.792584\ \ln(3 * 0.430181) = 0{,}797841$$

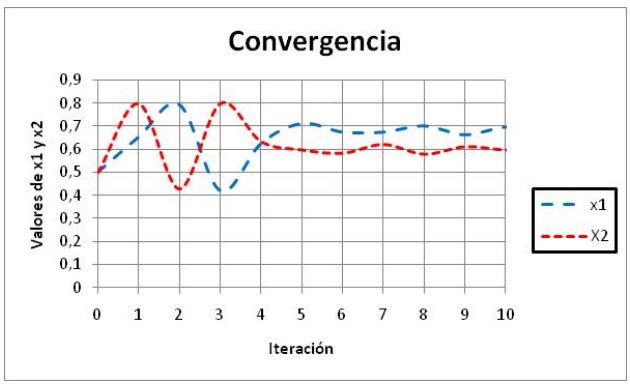
$$x_1^5 = 0.419310\ \ln(0{,}797841) + 0.419310^{(0{,}797841-0.419310)} = 0.624945$$
$$x_2^5 = 1 - 0.419310\ \ln(3 * 0{,}797841) = 0{,}634040$$

Siendo las soluciones más aproximadas:

$$x_1^* = 0.682826454$$
$$x_2^* = 0.59936582$$

Cuyas funciones resultan:

$$f_1(x_1, x_2^*) = -7.2 * 10^{-14}$$
$$f_2(x_1, x_2^*) = -7.5 * 10^{-14}$$



ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ejemplo:

Hallar una raíz de la función $f(x) = x^2 - 3\,x$, ya vista en el ejemplo de la Sección (III.3), pero ahora mediante el método de Wegstein. Según vimos, en la etapa de arranque necesitamos los valores para x^1, x^2 y x^3.

$$x^0 = 1$$

$$x^1 = F(x^0) = 1.73205$$
$$x^2 = F(x^1) = 2.27951$$
$$x^3 = F(x^2) = 2.61505$$

Luego:

$$\bar{x}^3 = q\ \bar{x}^2 + (1-q)\,x^3$$

Cálculo de q:

$$w = \frac{x^3 - x^2}{\bar{x}^2 - \bar{x}^1} = \frac{2.61505 - 2.27951}{2.27951 - 1.73205} = 0.612918$$

$$q = \frac{w}{w-1} = -1.583434$$

$$\bar{x}^3 = (-1.583434)\,2.27951 + (2.583434)(2.61505) = 3.14635$$

$$x^4 = F(\bar{x}^3) = 3.0723$$

$$\bar{x}^4 = q\,\bar{x}^3 + (1-q)x^4$$

$$w = \frac{x^4 - x^3}{\bar{x}^3 - \bar{x}^2} = \frac{3.0723 - 2.61505}{3.14635 - 2.27951} = 0.53274$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$q = \frac{w}{w-1} = 1.1401$$

$$\bar{x}^4 = (-1.1401)(3.14635) + (2.1401)\,3.0723 = 2.9878$$

$$x^5 = F\left(\bar{x}^4\right) = 2.99393$$

$$\left|x^5 - \bar{x}^4\right| = 0.0613 \neq 0, \ \textit{entoncs}:$$

$$\frac{x^5 - x^4}{\bar{x}^4 - \bar{x}^3} = \frac{2.99393 - 3.0723}{2.99393 - 3.14635} = 0.5028$$

$$q = \frac{w}{w-1} = -1.01137$$

$$\bar{x}^5 = (-1.01137)(2.9878) + (-2.01137)2.99393 = 3.00011$$

$$x^6 = F\left(\bar{x}^5\right) = 3.000056$$

$$\left|x^6 - \bar{x}^5\right| < 10^{-3}$$

Luego, 3.000056 es raíz de la *f (x)* dada. De la misma manera, puede ejercitar al lector el procedimiento de Wegstein para el sistema del ejemplo anterior, teniendo en cuenta que al existir ahora dos variables, los factores *q* y *w* deben calcularse para cada una de ellas. Nótese que aquí se ha reducido sustancialmente el número de iteraciones respecto al método de sustitución directa, esto es, se ha *acelerado* el proceso de convergencia. Sin embargo, acelerar la convergencia no implica que si el método de sustitución directa no converge, sí lo hará el procedimiento de Wegstein.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

IV.3 ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE SISTEMAS DE ELEVADA DIMENSIÓN

Resulta claro que los métodos numéricos discutidos en las secciones anteriores o en el Capítulo III son idóneos para la resolución de los sistemas que aquí discutimos. No obstante, en adelante nos centraremos en los aspectos estructurales y en el análisis de cómo tomar ventajas de la topología particular del sistema de ecuaciones, de tal manera de lograr un método de resolución eficiente.

Una estrategia adecuada para este tipo de problemas, según algunos de los ejemplos ya vistos, es particionarlo en subsistemas independientes, tales que al ser resueltos cada uno de ellos en un orden particular, permitan la solución global del sistema de ecuaciones dado. Recordemos que esta estrategia ya fue mencionada en los Capítulos I y II, para distintos tipos de problemas. Aquí veremos que nuevamente la representación matricial y por grafos resultará ventajosa para nuestros propósitos.

Una forma de modelar el sistema es plantear la representación del mismo mediante la llamada *matriz de ocurrencia o incidencia*, que por definición es un arreglo de n filas y n columnas (suponemos un sistema compatible) donde cada fila representa una ecuación y cada columna una incógnita o variable. De esta forma, cada elemento en la matriz puede tomar los valores cero o uno, si es que para el elemento a_{ij} existe una vinculación entre la función i y la variable j , caso contrario, $a_{ij} = 0$.

Sea por ejemplo el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} f_1(x_1) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2) &= 0 \\ f_3(x_1, x_2, x_3) &= 0 \\ f_4(x_1, x_2, x_3, x_4) &= 0 \\ f_5(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) &= 0 \end{aligned} \tag{28}$$

Aquí la matriz de incidencia u ocurrencia es la indicada en la Figura (IV.1), que se obtiene directamente de la definición de la misma, esto es, considerando en filas y columnas las funciones y variables respectivamente, y en cada posición se indicará si existe o no relación entre ellas.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
f_1	1				
f_2	1	1			
f_3	1	1	1		
f_4	1	1	1	1	
f_5	1	1	1	1	1

Figura IV.1: Matriz de ocurrencias del sistema de ecuaciones. (28)

Se define como variable de salida de una ecuación a una variable asignada a la misma, tal que se supone puede calcularse a partir de conocer el valor de las demás variables contenidas en dicha ecuación. Se prescinde del hecho que pueda explicitarse, o deba procederse en forma iterativa con algunos de los métodos discutidos en el capítulo anterior.

Si tomamos el listado de pares (x_i, f_i), correspondientes a cada asignación realizada, tenemos el conjunto de salida. Debe respetarse para esta definición, el siguiente principio: Cada ecuación debe tener asignada una y sólo una variable de salida, mientras que cada variable es variable de salida de una y sólo una ecuación.

Es evidente que al necesitarse para el cálculo de cada variable de salida x_i el valor de las demás variables que están contenidas en f_i, toda asignación de un conjunto de salida define un orden o secuencia en la cual el sistema de ecuaciones es resuelto.

IV.3.1 Algoritmo de Steward para la Determinación del Conjunto de Salida

En el año 1962 Steward propuso un método para determinar un posible conjunto de salida, utilizando la matriz de incidencia. Aquí sólo discutiremos algunos detalles del algoritmo, sugiriendo al lector interesado la lectura de la bibliografía citada para profundizar el tema. La incidencia se obtiene para una función (fila) como el número de variables que involucra y para una variable, por el número de funciones en la que participa (columna).

La idea básica del método es tomar la fila (columna) con menor número de incidencia, lo cual implica que de la ecuación que depende del menor número de incógnitas (o alternativamente, la incógnita afecta el menor número de ecuaciones) y de la fila en cuestión (o columna) se selecciona el elemento que pertenezca a una columna (fila) con el menor número de incidencia. De esta manera se asigna la variable representada por tal columna a la ecuación asociada a la fila correspondiente. Luego, se eliminan de la matriz ambas, fila y columna, prosiguiendo con el algoritmo hasta que se reduzca la matriz a la dimensión unitaria. El procedimiento se comprenderá mejor con un ejemplo, por caso el sistema de ecuaciones cuya matriz de ocurrencia es la indicada en la Figura (IV.1). La fila con el menor número de incidencia es la primera (uno), correspondiente a la variable x_1. Se asigna $x_1 \rightarrow f_1$, luego se elimina dicha fila y columna, obteniéndose la matriz de la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Figura. (IV.2).

	x_2	x_3	x_4	x_5
f_2	1			
f_3	1	1		
f_4	1	1	1	
f_5	1	1	1	1

Figura IV.2: Matriz de ocurrencias resultante luego de eliminar la *fila 1* y la *columna 1* de la matriz de ocurrencias de la Figura (IV.1).

Nuevamente, la fila de menor incidencia es la primera con uno, siendo $x_2 \rightarrow f_2$. Luego, al eliminar fila y columna, queda una matriz de orden 3, que por la estructura de la matriz de incidencia se comprende claramente que implicará las siguientes asignaciones:

$$f_3 \rightarrow x_3$$

$$f_4 \rightarrow x_4$$

$$f_5 \rightarrow x_5$$

Esta asignación del conjunto de salida implica un orden de resolución que puede indicarse según la Figura (IV.3).

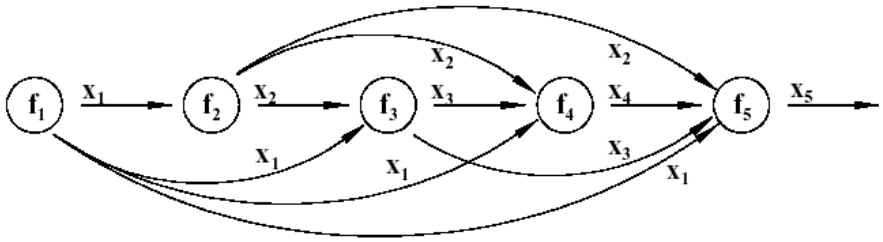


Figura IV.3: Orden de resolución del sistema de ecuaciones.

Puede notarse que en este caso se encuentra una secuencia de resolución acíclica. En general, cuando la estructura de la matriz de ocurrencia es diagonal, o triangular como en este caso, es fácil demostrar que existirá una secuencia de resolución acíclica, esto es, sin necesidad de recurrir a variables de iteración o iteradoras. Asimismo, puede demostrarse que es posible resolver el sistema ecuación a ecuación (variable a variable) sin necesidad de resolver subsistemas de ecuaciones simultáneas siguiendo un orden dado.

Ejemplo:

Sea el siguiente sistema:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$
\begin{aligned}
&f_1(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = 0 \\
&f_2(x_3, x_2, x_5) = 0 \\
&f_3(x_2, x_3, x_4) = 0 \\
&f_4(x_1, x_4, x_5) = 0 \\
&f_5(x_2, x_3, x_4, x_5) = 0
\end{aligned}
\tag{29}
$$

cuya matriz de ocurrencia se indica en la Figura (IV.4):

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
f_1	1	1	1	1	1
f_2		1	1		1
f_3		1	1	1	
f_4	1			1	1
f_5		1	1	1	1

Figura IV.4: Matriz de incidencia del Sistema de Ecuaciones (29).

La fila con el menor número de incidencia es la *3*. En cambio para las columnas es la *2*, para x_1. Luego, operando en la columna x_1, f_4 tiene menor incidencia *3* que f_1, por lo tanto se asigna a x_1, $f_4 \rightarrow x_1$. Se eliminan fila y columna, resultando la matriz de la Figura (IV.5):

	x_2	x_3	x_4	x_5
f_1	1	1	1	1
f_2	1	1		1
f_3	1	1	1	
f_5	1	1	1	1

Figura IV.5: Matriz de ocurrencia luego de eliminar x_1 y f_1 de la Figura (IV.4).

Para las filas la menor incidencia es *3* (f_2 y f_3). Lo mismo para las columnas (*3* para x_5 y x_4). Elegimos f_2, asignando x_5 (incidencia *3*), $f_2 \rightarrow x_5$; luego, eliminando fila y columna, nos queda (Figura (IV.6)):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

	x_2	x_3	x_4
f_1	1	1	1
f_3	1	1	1
f_5	1	1	1

Figura IV.6: Matriz de incidencia luego de eliminar f_2 y x_5 de la Figura (IV.5).

Las funciones f_1, f_3 y f_5 forman parte de una partición o subconjunto que debe resolverse en forma simultánea. Aquí podemos realizar una asignación arbitraria ($f_3 \rightarrow x_3$), ($f_1 \rightarrow x_2$), ($f_5 \rightarrow x_4$). Luego, el orden de resolución o secuencia resulta según se indica en la Figura (IV.7):

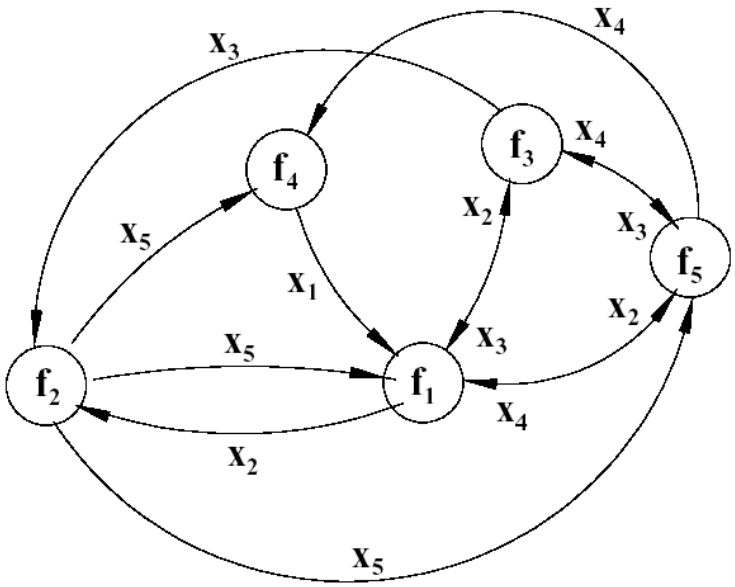


Figura IV.7: Orden de resolución del sistema de Ecuaciones (29).

Como se observa en la Figura (IV.7), el subconjunto (f_1, f_3, f_5) debe resolverse simultáneamente, habiéndose solucionado primero las restantes ecuaciones. Esto implica, según vimos en el Capítulo III un orden cuadrático de convergencia. Sin embargo, podemos linealizar el sistema, (rasgar), introduciendo variables de corte (iteradoras) que permitan resolverlo en forma acíclica.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Esta estrategia reemplaza la resolución del sistema en forma simultánea por una secuencia dada (f_1, f_3, f_5) modificando el orden cuadrático por uno menor (sustitución directa, Wegstein, etc.).

Más adelante se discutirán métodos para rasgar un sistema de ecuaciones. En lo inmediato nos centraremos en el siguiente problema: Dado un modelo para un proceso o equipo específico, notaremos que generalmente contiene más variables que ecuaciones, por lo cual algunas deben especificarse. Luego, debemos tomar un criterio para hacerlo.

IV.3.2 Especificaciones de Variables y Grados de Libertad de un Sistema de Ecuaciones

Sea el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, x_3, x_4) &= 0 \\ f_2(x_3, x_4, x_5) &= 0 \\ f_3(x_5, x_6, x_1) &= 0 \end{aligned} \tag{30}$$

que puede ser representado según el siguiente esquema (que más adelante llamaremos grafo bipartito):

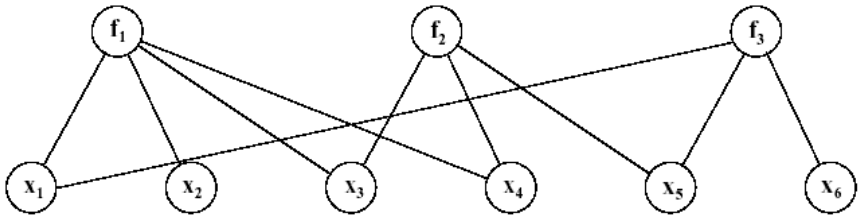


Figura IV.8

Aquí existen nodos que representan a las funciones y otros que representan a las variables. Los arcos simplemente indican que la variable x_i está vinculada a la ecuación f_j. Dado que existen 6 variables y 3 ecuaciones, tenemos 3 variables a especificar de tal manera de lograr un sistema compatible. No obstante, existen varias opciones para asignar las mencionadas variables. Por ejemplo, sea el conjunto especificado el (x_6, x_5, x_4). De acuerdo a esto, el diagrama nos queda de la siguiente forma:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

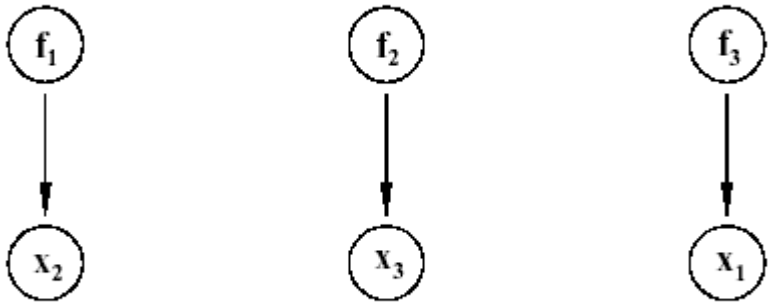


Figura IV.9: Sistema luego de la asignación de (x_6, x_5, x_4) como variables especificadas.

Luego, existe una secuencia acíclica sin necesidad de iterar ya que conocidas las variables especificadas se puede resolver en dicha forma. El esquema de orden de resolución es (ver Figura (IV.10)):

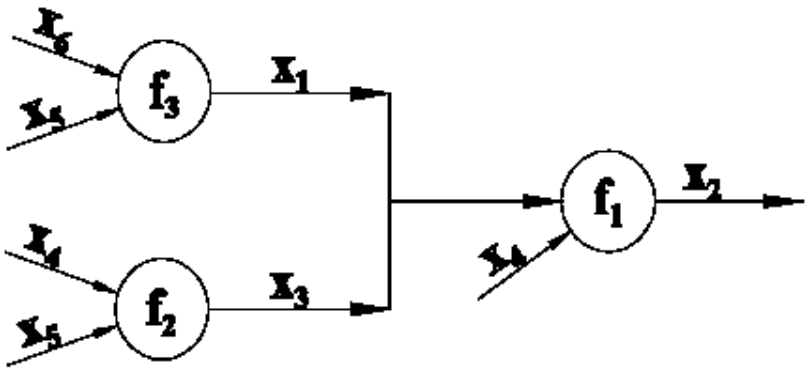


Figura IV.10: Orden de resolución del sistema de ecuaciones.

que surge simplemente por análisis de la Figura IV.8. Sin embargo, no es el mencionado el único conjunto de asignaciones que puede realizarse.

En efecto, si en cambio el conjunto especificado fuera (x_3, x_4, x_6), tenemos el siguiente esquema de resolución (ver Figura (IV.11)) y de asignaciones de variables (ver Figura (IV.12)):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

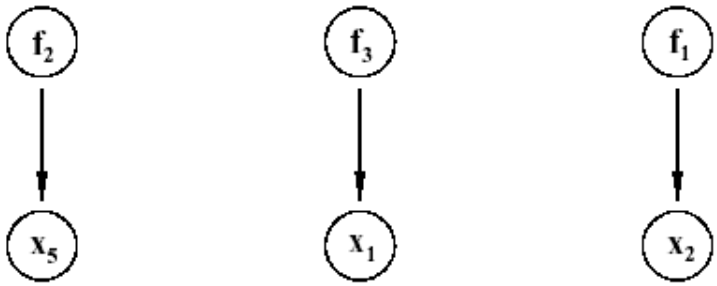


Figura IV.11: Sistema de la Figura (IV.9) luego de la asignación de (x_3, x_4, x_6)

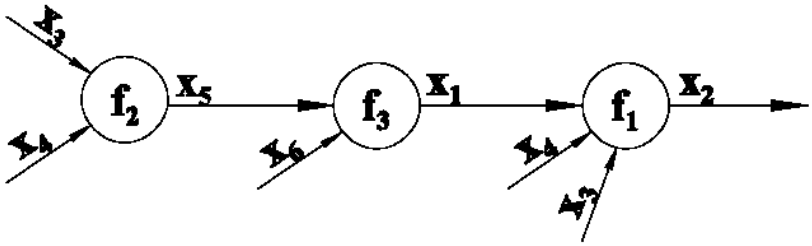


Figura IV.12: Orden de resolución para el Sistema (30) luego de la signación indicada en la Figura (IV.11).

Por último, especificando (x_1, x_2, x_6) tenemos (ver Figura (IV.13)):

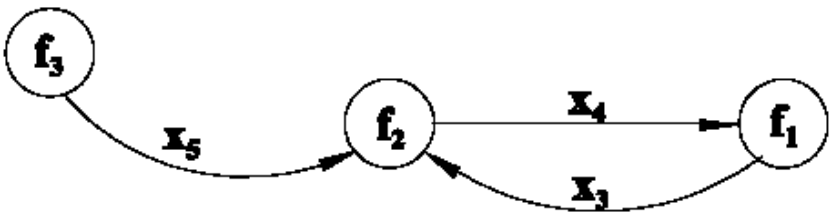


Figura IV.13: Orden de resolución del Sistema (30) luego de la asignación (x_1, x_2, x_6)

Aquí resulta en una secuencia cíclica de resolución, esto es, deberán resolverse simultáneamente f_1 y f_2, o bien suponerse un valor para x_4 o x_3 e iterarse

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

secuencialmente hasta lograr convergencia, según los métodos analizados en el capítulo anterior.

El lector puede probar, como ejercitación, que la especificación o asignación (x_1, x_4, x_6) nos lleva a una secuencia acíclica.

Como conclusión, puede apreciarse que la elección de un conjunto de variables para ser especificadas no es neutra, sino que según se la realiza, el sistema resultante podrá o no ser resuelto secuencialmente,o en otras palabras, existe un grado de dificultad inherente que depende estrictamente del modo en que se han realizado las asignaciones. Dado que en sistemas de elevada dimensión es muy difícil deducir cómo especificar dicho conjunto, de manera tal de minimizar el esfuerzo para resolver luego el sistema, se han propuesto numerosos algoritmos para realizar dicha tarea.

En la próxima sección analizaremos el algoritmo de Lee, Christensen y Rudd, para tal fin. Se planteará el problema tendiendo progresivamente a ligar el concepto de sistema de ecuaciones con simulación, ya que básicamente, según ya sabemos, la simulación de un proceso consiste en implementar el modelo del mismo (sistema de ecuaciones) en un algoritmo computacional y resolverlo, proponiendo valores a ciertas variables de entrada para obtener las correspondientes a las de salida (resultados de la simulación).

Como hemos mencionado en el Capítulo I, todo proceso, equipo y/u operación puede representase a través de un modelo que puede poseer diversas características, según sea el problema a resolver. Si enfrentamos la resolución de los balances de materia y energía de un sistema, lo más común es que el modelo estará compuesto por un sistema de ecuaciones algebraicas si representamos el comportamiento en estado estacionario y además trabajamos con parámetros concentrados; esto es, no nos interesan como el caso de un reactor tanque agitado, las variación de las propiedades ni en el espacio ni en el tiempo, ya que de lo contrario necesitamos ecuaciones diferenciales a derivadas parciales.

Dentro de este contexto, muy preliminarmente, podemos decir que simular un equipo o un proceso significa implementar el modelo que lo representa computacionalmente y a partir de dicho programa/sistema computacional, proponer los valores, variables o parámetros de entrada para obtener los resultados de interés.

Los datos de entrada pueden ser los parámetros operativos de los equipos (números de etapas, características de la torre de destilación, áreas de intercambio, etc.) y las características de las corrientes de alimentación al equipo/proceso, tales como caudales, temperaturas, presiones y composiciones de cada una. Los resultados podrían ser todas las corrientes intermedias y las salidas a la planta, los perfiles internos en las torres de destilación, los servicios de calentamiento y enfriamiento, etc.

Resulta necesario comprender cómo desarrollar modelos y además cómo enfrentar la solución de los mismos. Aquí nos ocuparemos en particular de la estructura del sistema de ecuaciones algebraicas resultante y los procedimientos apropiados para encarar la solución de los grandes sistemas, que, en general,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

involucran variables de iteración y además requieren procedimientos de particionado del sistema en subsistemas de más fácil solución.

En general, un sistema de ecuaciones tiene la forma:

$$f_i\left(\underline{x}_{1,}\ \underline{x}_{2,},....,\underline{x}_{n,}\right)=0;\quad i=1,...,M \tag{31}$$

Entonces, los grados de libertad del sistema se definen como la diferencia entre el número de variables menos el de ecuaciones:

$$G\ell = n - m \tag{32}$$

Ya mencionamos que se tiene un mayor número de variables que de ecuaciones al plantear el modelo de un equipo o proceso. Por lo tanto, para obtener un sistema compatible, deberán especificarse GR variables, de tal forma de lograr igual número de ecuaciones que de incógnitas.

El problema radica en que existen numerosas variantes para asignar estas variables, si suponemos el planteo general en el cual todas las variables son desconocidas o factibles de ser especificadas. Se puede fácilmente demostrar que el número de posibles combinaciones para asignar los GR grados de libertad responde a la siguiente expresión:

$$NA = C^{n}_{G\ell} = \begin{pmatrix} n \\ G\ell \end{pmatrix} = \frac{n!}{m!\ G\ell!} \tag{33}$$

Este número de alternativas es muy grande pero en la práctica están limitadas por criterios físicos a esquemas realistas de aplicación.

IV.3.3 Algoritmos para Selección de Variables a Especificar

Lee, Christensen y Rudd introdujeron un algoritmo para la selección de variables de tal forma de lograr una secuencia acíclica de resolución (sin iteraciones). Se introduce para el modelado el grafo bipartito. Éste se construye definiendo nodos *f* (funciones) y nodos *v* (variables). De este modo, los arcos dirigidos conectan las ecuaciones con las variables relacionadas.

En la Figura (IV.14) vemos un ejemplo de grafo bipartito correspondiente al sistema de ecuaciones (34). Como se observa, los nodos superiores representan a cada función, mientras que los nodos inferiores (v) representan a las variables. Dado que, por ejemplo, f_2 esté vinculado con las variables v_3 y v_6, en la figura IV.14 existen arcos que vinculan dichos nodos.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\begin{aligned} f_1(v_1, v_2, v_3, v_4) &= 0 \\ f_2(v_3, v_6) &= 0 \\ f_3(v_5, v_6) &= 0 \\ f_4(v_2, v_4, v_5) &= 0 \end{aligned} \tag{34}$$

Se define como grado local al número de corrientes ligadas a cada nodo (φ). Por ejemplo, en la Figura (IV.14) el grado local para v_l, $\varphi(v_l)=1$. El método se basa, según Osteward, en las siguientes consideraciones:

- Cada ecuación contiene exactamente una variable de salida.
- Cada variable aparece como elemento de salida en solamente una ecuación.

Por otra parte, las ecuaciones de grado uno $f_l(x_j)=0$ no agregan información, ya que si existe una solución real y única $x_j=c$, ésta es la variable determinada, por lo que se eliminan del tratamiento en la Figura (IV.14).

A continuación aplicaremos el algoritmo al sistema de la Figura (IV.14), esto es, el Sistema de Ecuaciones (34).

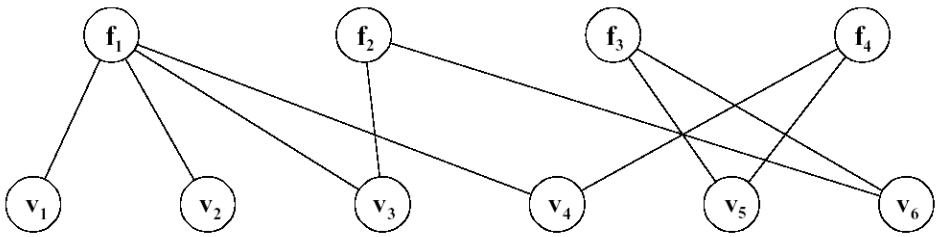


Figura IV.14: Grafo que representa al Sistema de Ecuaciones (34).

Ejemplo de aplicación del algoritmo:

Existe $\varphi(f_i) = 1$?

No, no hay funciones y variables a eliminar.

$\varphi(v_j) = 1$?

Sí, v_1, entonces $f_l \rightarrow v_1$; luego, asignando v_1 como variable de salida de f_1, el grafo de la Figura (IV.14) queda, según se observa en la Figura (IV.15):

Nótese que también podría (entre otras) realizarse la asignación f_1 6 v_2. Para una

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

adecuada decisión, debemos conocer más información acerca del sistema.

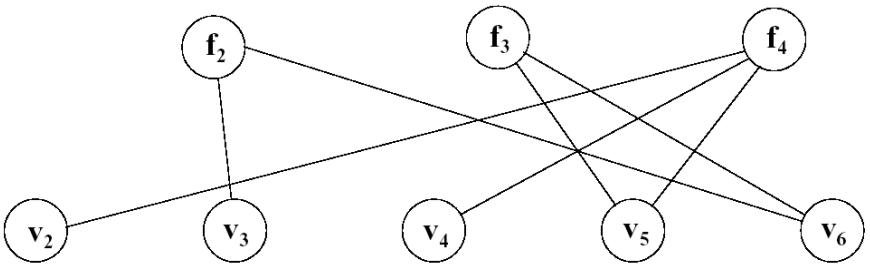


Figura IV.15: Grafo luego de eliminar v_1 y f_1

$\varphi(v_j) = 1$?

Sí, v_2, entonces $f_4 \rightarrow v_2$; luego tenemos el siguiente grafo bipartito (Figura (IV.16)):

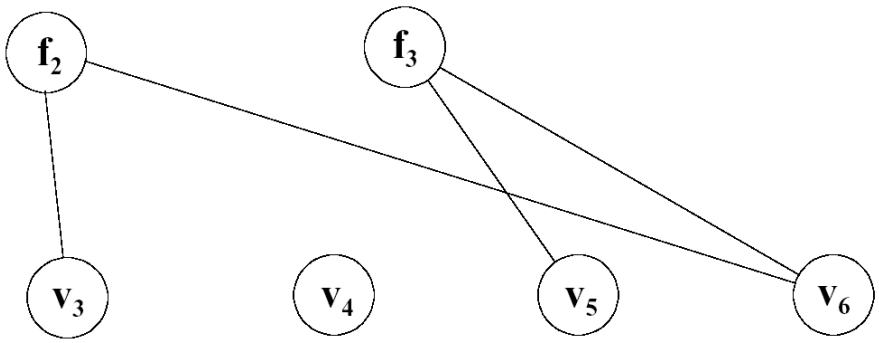


Figura IV.16: Grafo luego de eliminar f_4 y v_2

$\varphi(v_j) = 1$?Sí, v_3; luego resulta el siguiente grafo (ver Figura (IV.17)):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

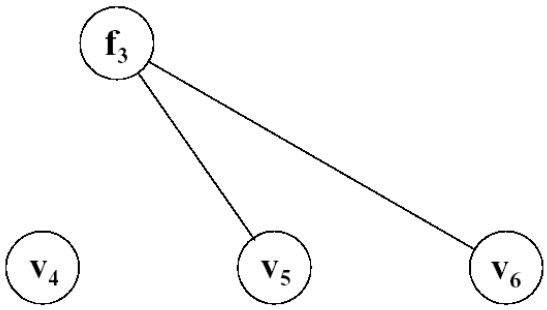


Figura IV.17: Grafo luego de eliminar f_2 y v_3

$\varphi(v_j) = 1$? Sí, v_5; luego $f_3 \rightarrow v_5$.
$\varphi(v_j) = 1$? No.
$\varphi(v_j) = 0$? Sí, (v_4, v_6).
Quedan f_i ? No, →*sistema acíclico.*

Vemos que el sistema de Ecuaciones (34) tiene 6 - 4 = 2 grados de libertad. Aquí el algoritmo nos permite la selección (entre las varias alternativas posibles), que nos brinda una secuencia de resolución de mínima dificultad, en este caso, acíclica.

Se ha supuesto que cualquier variable de salida elegida se puede explicitar de toda y cualquier ecuación. Por otra parte, no se utilizó conocimiento heurístico (información adicional) sobre la conveniencia de ligar una variable de salida con una función, sólo se utilizó el criterio de seleccionar la primer variable de izquierda a derecha, según una hipotética implementación (listado de nodos) en un algoritmo computacional. Este criterio puede mejorarse, pero se requiere algún tipo de información adicional, según mencionamos en el párrafo anterior. Este algoritmo, someramente expuesto a través del ejemplo, concluye cuando, o bien genera una secuencia acíclica, o bien se encuentran ciclos irreductibles que deben ser analizados bajo otro enfoque.

A continuación se expondrá un nuevo ejemplo, y luego se discutirán aspectos de los casos que presentan ciclos.

Ejemplo:

Sea el sistema de la Figura (IV.18). Aquí se representa un conjunto de ductos que se unen en un único conducto, contemplando las variables relacionadas con cada corriente. Se pretende generar el modelo, (sistema de ecuaciones) y encontrar un conjunto de variables a especificar de tal forma que la secuencia de resolución resulte conveniente.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

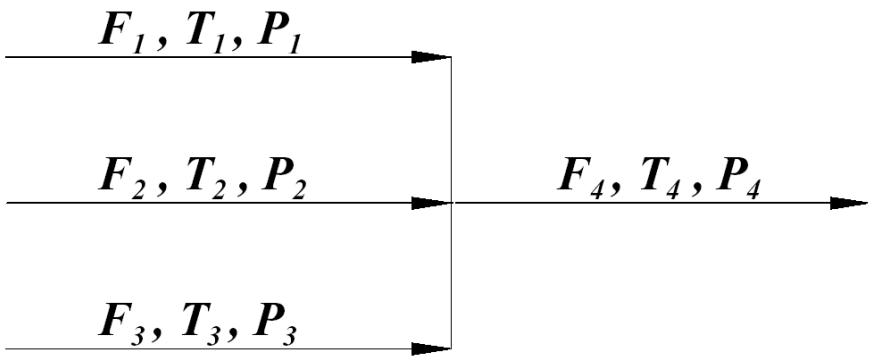


Figura IV.18: Esquema del sistema a modelar.

Hipótesis:

- Sistema adiabático y estacionario.
- Cañerías de igual sección y altura equivalente (trabajo de la fuerza de gravedad despreciable).
- Pérdidas de carga despreciables.
- Densidad de los fluidos constante. Fluido puro.
- Trabajo de las fuerzas de presión despreciable. Las presiones de las corrientes de entrada y salida son iguales.

Balance de materia:

$$f_1 = F_1 + F_2 + F_3 - F_4 = 0 \tag{35}$$

Balance de energía:

$$f_2 = F_1\ H_1 + F_2\ H_2 + F_3\ H_3 - F_4\ H_4 = 0 \tag{36}$$

Ecuaciones constitutivas:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\begin{aligned} f_3 &= H_1(T_1, P_1) = 0 \\ f_4 &= H_2(T_2, P_2) = 0 \\ f_5 &= H_3(T_3, P_3) = 0 \\ f_6 &= H_4(T_4, P_4) = 0 \end{aligned} \tag{37}$$

En función de las hipótesis asumidas, podemos suponer que la presión de descarga es igual a las de la corriente de entrada, esto es:

$$P_1 \approx P_2 \approx P_3 \approx P_4 \approx P$$

Por lo tanto, las ecuaciones anteriores pueden expresarse según el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} & f_1(F_1, F_2, F_3, F_4) = 0 \\ & f_2(F_1, H_1, F_2, H_2, F_3, H_3, F_4, H_4) = 0 \\ & f_3(H_1, T_1, P_1) = 0 \\ & f_4(H_2, T_2, P_2) = 0 \\ & f_5(H_3, T_3, P_3) = 0 \\ & f_6(H_4, T_4, P_4) = 0 \end{aligned} \tag{38}$$

Tenemos por lo tanto *6* ecuaciones y *13* incógnitas por lo que disponemos de *7* grados de libertad, variables de diseño o variables a especificar. Por otra parte, en el caso general, las variantes para especificar son:

$$\binom{13}{7} = \frac{13!}{6!\,7!} = 1716$$

Como se observa, son enormes las variantes, pese a este problema sencillo; pensemos en un planta completa, con miles de ecuaciones e incógnitas. Las variables a especificar dependerán del problema a r esolver. Por ejemplo, sea el caso que querramos calcular las variables de salida, conocidas las de entrada. De esta manera, las seis variables a especificar deberán surgir del conjunto:

(F_1, F_2, F_3, T_1, T_2, T_3, P_1, P_2, P_3). Según vimos, basta con las seis primeras y un dato de presión, , ya que asumimos todas las presiones equivalentes.

Si bien este conjunto de especificaciones surge de la conveniencia al

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

conocer ciertas variables, no significa que sea la mejor alternativa para la secuencia de resolución (cíclica o iterativa vs. secuencia acíclica, esto es sin necesidad de iteraciones). En la Figura (IV.19) se observa el grafo bipartito para este caso ($v_1=F_1$, $v_2=F_2$, $v_3=F_3$, $v_4=F_4$, $v_5=H_1$, $v_6=H_2$, $v_7=H_3$, $v_8=H_4$, $v_9=T_1$, $v_{10}=T_2$, $v_{11}=T_3$, $v_{12}=T_4$, $v_{13}=P$):

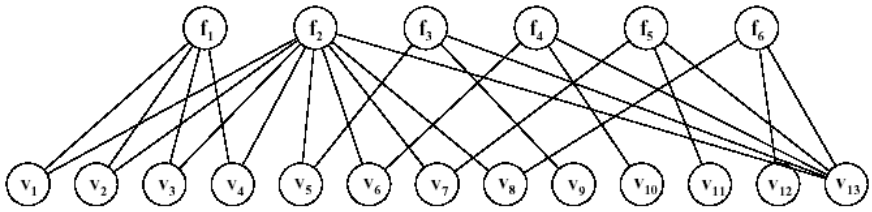


Figura IV.19: Grafo bipartito, Sistema de Ecuaciones (38).

Como hemos visto, el algoritmo de Lee, Christensen y Rudd permite determinar un conjunto de asignaciones conveniente. Por lo tanto, en lo que sigue aplicaremos el procedimiento a los efectos de juzgar la especificación arriba mencionada.

Aplicación del algoritmo de Lee, Christensen y Rudd

$\varphi(f_i) = 1$?. No.

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, $v_9 \rightarrow f_3$. Resulta por lo tanto el grafo de la Figura (IV.20).

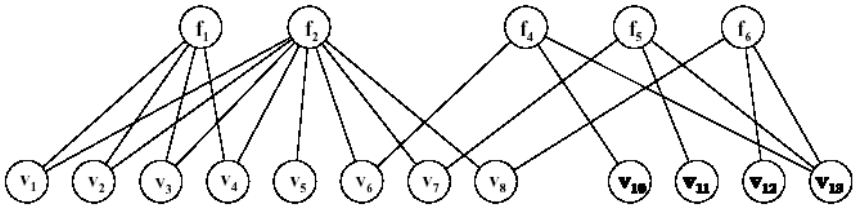


Figura IV.20

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, v_5, $f_2 \rightarrow v_5$. Luego obtenemos el grafo de la Figura (IV.21).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

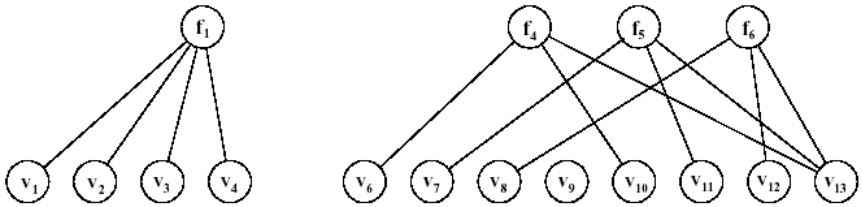


Figura IV.21: Grafo luego de la eliminación de f_2 y v_5.

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, v_1, $f_1 \rightarrow v_1$ Nos queda ahora el grafo indicado en la Figura (IV.22).

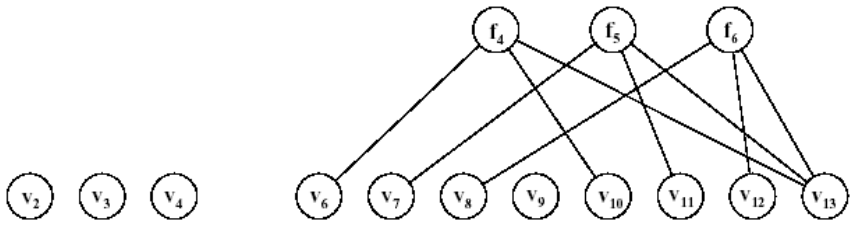


Figura IV.22: Grafo luego de la eliminación de f_1 y v_1.

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, v_6, $f_4 \rightarrow v_6$ Luego tenemos el grafo indicado en la Figura (IV.23).

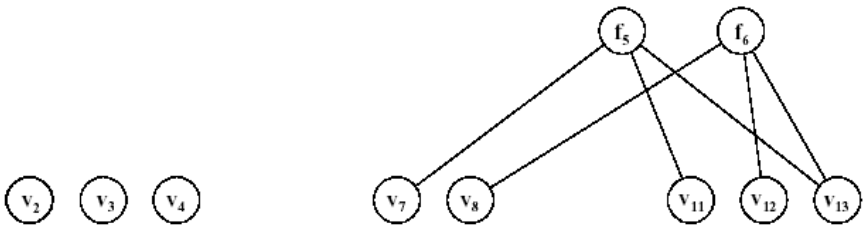


Figura IV.23: Grafo luego de la eliminación de f_4 y v_6.

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, v_7, $f_5 \rightarrow v_7$. Luego, tenemos el siguiente esquema (ver Figura (IV. 24)):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

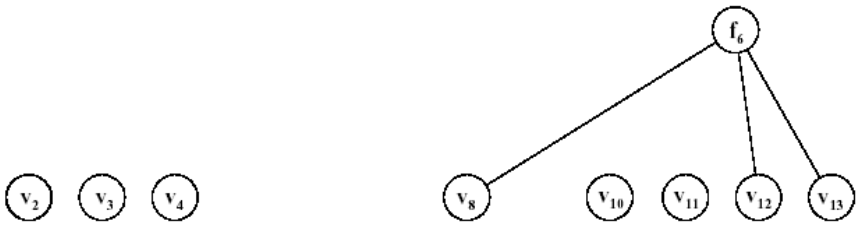


Figura IV.24: Grafo luego de la eliminación de f_5 y v_7.

$\varphi(v_i) = 1$? Sí, v_8, $f_3 \rightarrow v_8$.

$\varphi(v_i) = 1$? No.

$\varphi(v_i) = 0$? Sí, $\rightarrow (v_2, v_3, v_4, v_{10}, v_{11}, v_{12}, v_{13})$.

Queda algún f_i ? No $\rightarrow$sistema acíclico.

El conjunto de variables a especificar obtenido por el algoritmo involucra una secuencia de resolución según se indica en la Figura (IV.25).

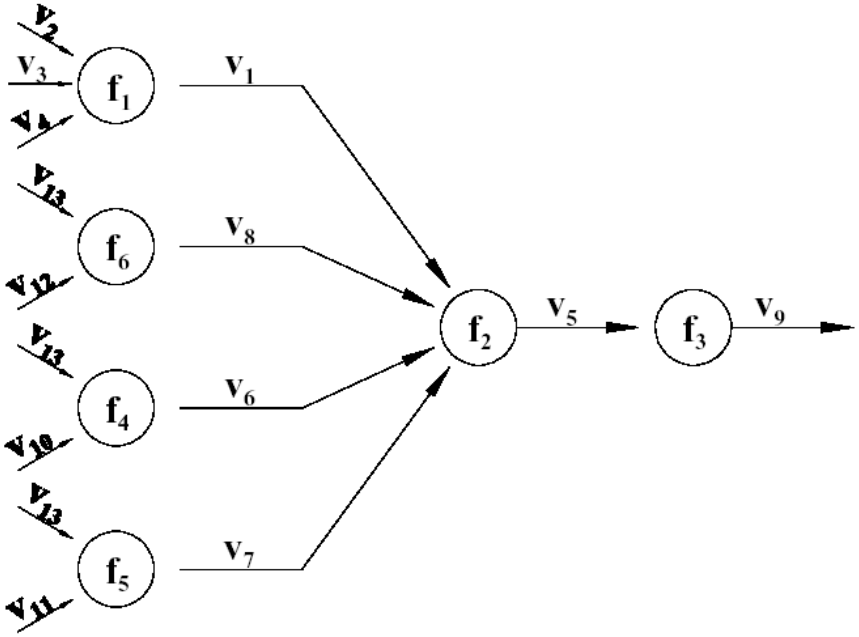


Figura IV.25: Secuencia de cálculo para el Sistema de Ecuaciones (38), una vez especificados (v_2, v_3, v_4, v_{10}, v_{11}, v_{12}, v_{13})

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Como se observa, al no incluir ninguna información adicional, respecto a la conveniencia de especificar o no determinadas variables, obtenemos un conjunto específico distinto del conjunto (F_1, F_2, F_3, T_1, T_2, T_3, P) mencionado anteriormente. Se puede demostrar fácilmente que adoptando este conjunto también obtenemos una secuencia de resolución acíclica, por lo que en este caso la elección dependerá de la conveniencia. No obstante, no siempre la secuencia impuesta por el *criterio directo* (especificamos las entradas para calcular las salidas como es clásico en simulación secuencial, según veremos en el próximo capítulo), resultará en una secuencia acíclica y por lo tanto, no siempre será la más conveniente. Sin embargo, físicamente es atractiva ya que representa naturalmente el flujo de la planta real.

Probaremos seguidamente, que en este caso, la especificación de las entradas también lleva una secuencia acíclica. En la Figura (IV.26) se indica el grafo de partida donde las variables (v_1, v_2, v_3, v_9, v_{10}, v_{11}, v_{13}) han sido especificadas, esto es son conocidas. En efecto, al especificar este último conjunto de variables nos queda (ver Figura (IV.26)):

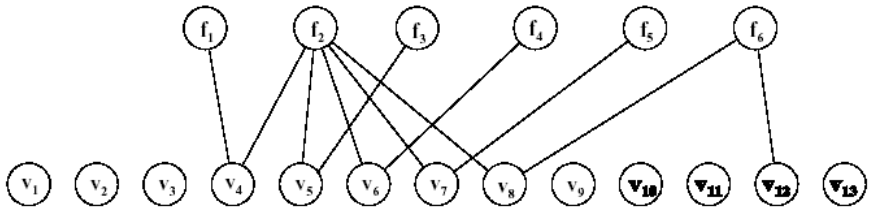


Figura IV.26

Aplicando el algoritmo:

$\varphi(f_i) = 1$? Sí, f_1; luego $f_1 \rightarrow v_4$. El nuevo grafo es (ver Figura (IV.27)):

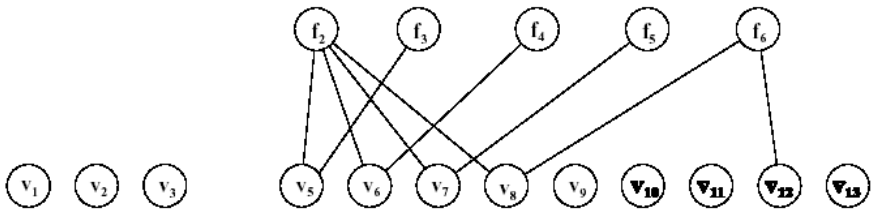


Figura IV.27

$\varphi(f_i) = 1$? Sí, f_4; luego $f_4 \rightarrow v_6$, luego resulta el grafo de la Figura (IV.28).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

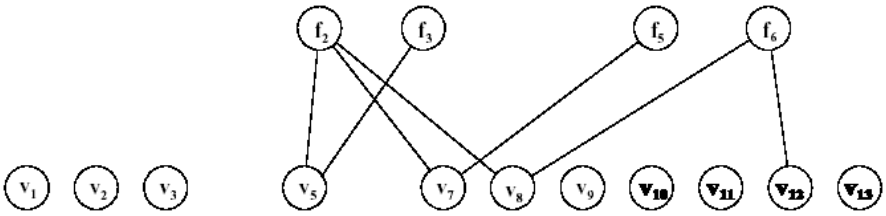


Figura IV.28

$\varphi(f_i) = 1$? Sí, f_3; luego $f_3 \rightarrow v_5$; entonces resulta el grafo de la Figura (IV.29).

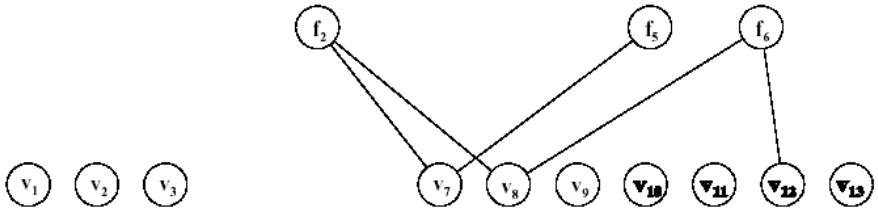


Figura IV.29

$\varphi(f_i) = 1$? Sí, f_5; luego $f_5 \rightarrow v_7$; entonces tenemos el grafo de la Figura (IV.30).

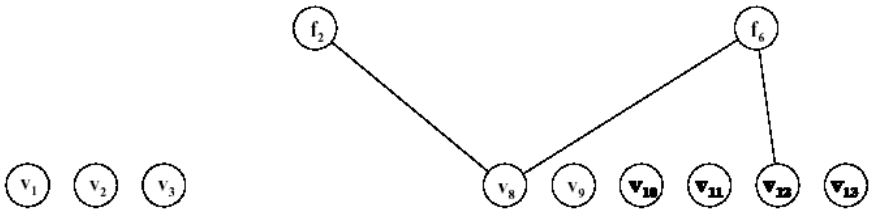


Figura IV.30

$\varphi(f_i) = 1$? Sí, f_2, $f_2 \rightarrow v_8$.

$\varphi(f_i) = 1$? Sí, f_6, $f_6 \rightarrow v_{12}$.

$\varphi(f_i) = 1$? No.

$\varphi(v_i) = 0$? Sí.

Esto implica que se encuentra una secuencia de resolución acíclica según ya anticipamos. En efecto, el lector puede, a partir de los pares (f_i, v_i) encontrados, armar

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

el orden de resolución correspondiente, el cual resulta acíclico.

IV.3.4 Sistemas Cíclicos

La variante propuesta, dentro del algoritmo que estamos analizando, para el caso en que se detecten ciclos, se basa en el hecho que el subgrafo irreducible tiene al menos un $\varphi(v_j) \geq 2$

Se propone cortar (rasgar) el grafo de tal forma que el número de variables iteradoras sea mínimo. Estas variables son aquellas que deben ser *inicializadas* para generar una secuencia iterativa a los efectos de resolver el sistema de ecuaciones correspondiente.

En general podrían necesitarse *c* cortes, donde *c* es menor que el número de ecuaciones f_i; tales que se resuelven si se asignan variables de salida a los posibles *c* f_i nodos, que surgen de los cortes, ya que de esta manera el grafo resultante puede procesarse según lo visto en los ejemplos anteriores. El número mínimo c_{min} de variables de corte se relaciona con el grado local de la siguiente forma:

$$C_{\min} = \min \varphi\left(v_j\right) - 1 \tag{39}$$

Ejemplo:

Sea el sistema:

$$\begin{aligned} &f_1\left(x_1, x_2, x_3\right) = 0 \\ &f_2\left(x_1, x_2, x_4, v_6\right) = 0 \\ &f_3\left(x_3, x_4, x_5, v_6\right) = 0 \\ &f_4\left(x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8\right) = 0 \\ &f_5\left(x_6, x_7, x_8\right) = 0 \end{aligned} \tag{40}$$

El grafo correspondiente es el indicado en la Figura (IV.31), según el procedimiento ya discutido en los ejemplos anteriores.

En este caso, como vemos, no existe $\varphi(v_j) = 1$ ni $\varphi(f_i) = 1$. El menor $\varphi(v_j)$ es 2. Luego, esta situación indica la existencia de un sistema cíclico y la necesidad de determinar corrientes de corte (rasgado).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

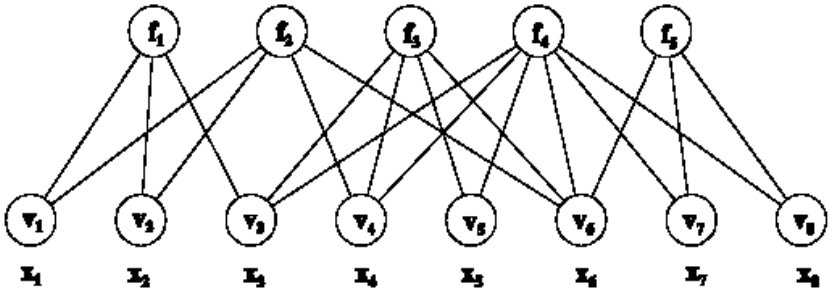


Figura IV.31: Grafo correspondiente al Sistema de Ecuaciones (40).

$$Mínimo\ \ \varphi(v_j) = 2;\ \ C_{\min} = 2 - 1 = 1$$

Comenzando con $f_1 \rightarrow v_1$ (iteradora), nos queda (ver Figura (IV.32)):

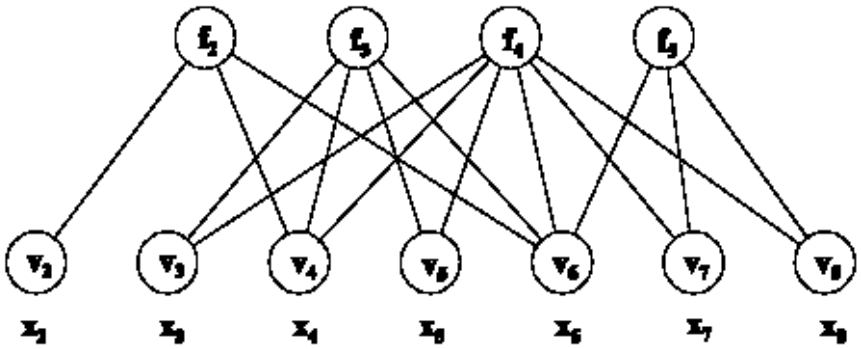


Figura IV.32: Grafo luego de eliminar f1 y v1.

Tenemos al menos un nodo de variables de grado local uno (v_2). Luego aplicamos el algoritmo ya visto para sistemas acíclicos:

$\varphi(f_i) = 1$? No.

$\varphi(v_i) = 1$? Sí, v_2, $f_2 \rightarrow v_2$; tenemos entonces el grafo de la Figura (IV.33).

Nuevamente, en este caso, no encontraremos variables con φ (v_j) = 1. Luego, comenzamos con el procedimiento para sistemas cíclicos. Nótese que siempre deberá agotarse la búsqueda del sistema acíclico utilizando las C_{min} *f* combinaciones posibles de nodos. Si no se logra, debe incrementarse *C* en uno hasta lograrlo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

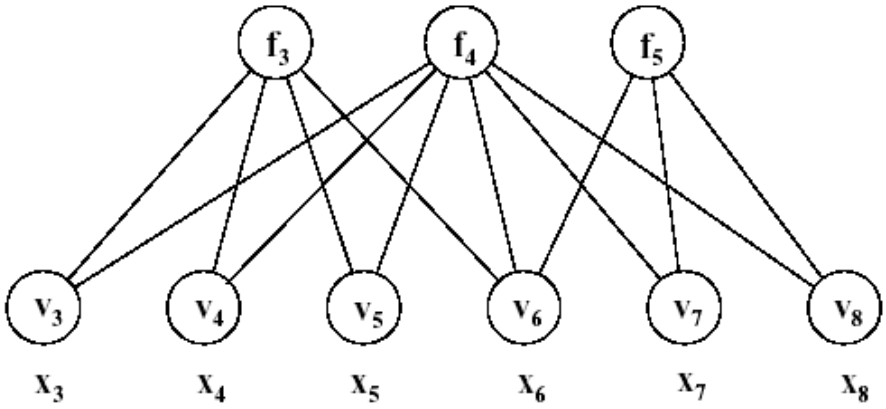


Figura IV.33: Grafo luego eliminar f_2 y v_2.

$\varphi(v_j) = 1$? No.

$Mínimo \ \ \varphi(v_j) = 2; \ C_{\min} = 2 - 1 = 1$

Asignamos $f_3 \rightarrow v_3$ (iteradora); luego nos queda el grafo de la Figura (IV.34).

Al encontrar un $\varphi(v_j) = 1$ comenzamos con el algoritmo para sistema acíclicos.

$\varphi(v_j) = 1$? Sí, v_4, luego $f_4 \rightarrow v_4$. Nos queda entonces el grafo de la Figura (IV.35).

$\varphi(v_i) = 1$? Sí, v_6, luego $f_5 \rightarrow v_6$.

$\varphi(v_j) = 1$? No.

$\varphi(v_j) = 0$? Sí, $\rightarrow (v_5, v_7, v_8)$.

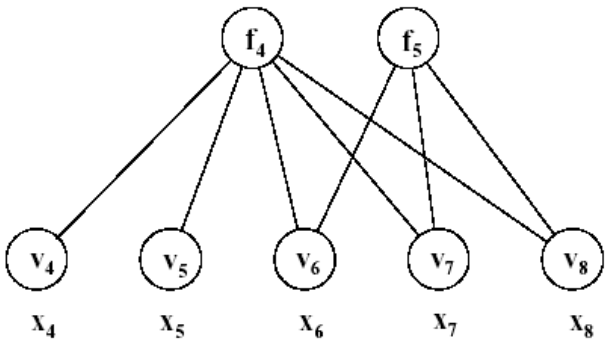


Figura IV.34: Grafo luego de eliminar f_3 y v_3.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nótese que al igual que los casos anteriores, las asignaciones realizadas (por ejemplo $v_6 \rightarrow f_5$) no son únicas.

Dado que no quedan f_i, se finaliza el algoritmo. Luego, tenemos como variables iteradoras (v_1, v_3) y las variables a ser especificadas: (v_5, v_7, v_8). Vemos que este número coincide con los grados de libertad del sistema (Gl = 8 - 5 = 3). La secuencia de resolución para este caso es la que se muestra en la Figura (IV.36).

Nuevamente, al aplicar el procedimiento, la selección de variables la hicimos tomando la primer función o variable según corresponda, de izquierda a derecha, suponiendo la implementación de un algoritmo que manipule las variables intermedias según ese orden (se supone que están archivadas en una lista).

Obviamente, si se aplican criterios heurísticos o provenientes del conocimiento intrínseco del sistema es posible mejorar mucho la perfomance del algoritmo, en particular al seleccionar variables iteradoras. No se analizarán aquí estos criterios, al igual que los casos especiales que puedan aparecer en la aplicación general del procedimiento. Se recomienda al lector profundizar el tema en la bibliografía citada o recomendada al final del capítulo.

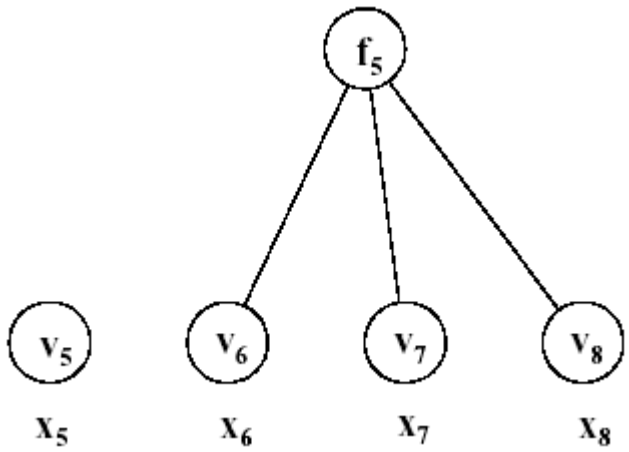


Figura IV.35: Grafo luego de eliminar f_4 y v_4.

Sólo mencionaremos a modo de ejemplo, que el uso de matrices para modelar el problema permite introducir varias mejoras en el procedimiento. Para ello se introduce el concepto de matriz de ocurrencias, la cual es manipulada hasta lograr una matriz tridiagonal (Book y Ramirez, 1976), con un esquema similar al ya discutido.

Es interesante remarcar que la forma de representar el problema no sólo facilita su resolución, sino que además, puede o no facilitar la programación computacional. Como veremos más adelante, todos los criterios de particionado, rasgado y ordenamiento de sistemas de ecuaciones son muy importantes para la implementación de un simulador.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

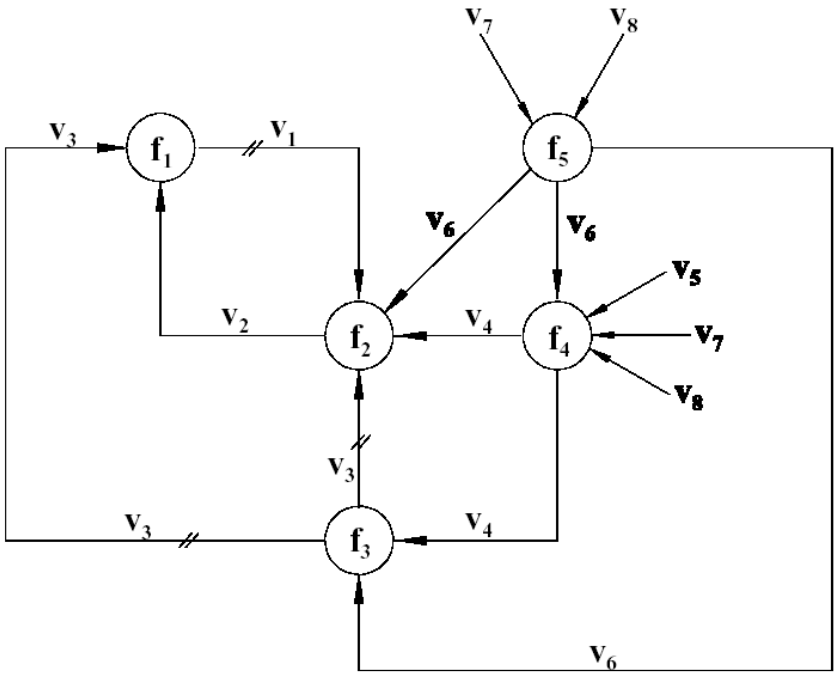


Figura IV.36: Secuencia de resolución del Sistema de Ecuaciones (40). El símbolo ≠ significa variable de corte o iteradora.

IV. 4 ALGORITMOS DE PARTICIONADO, RASGADO Y ORDENAMIENTO. ARQUITECTURA MODULAR SECUENCIAL

Llegado a este punto, nos interesa plantearnos la utilidad de los métodos discutidos y su relación con un simulador de procesos. Como fuera que éste al fin y el cabo consiste en un sistema de ecuaciones, la relación resulta obvia. En efecto, una planta completa tendrá asociada, como veremos más adelante, a miles de ecuaciones y variables. Un simulador que responde a la filosofía de representar a todo el proceso a simular por un único sistema de ecuaciones se conoce como de arquitectura global u orientado a ecuaciones. Bajo esta arquitectura, todo lo discutido hasta aquí es directamente aplicable; en particular la selección de las variables a especificar para que el sistema resulte compatible y las metodologías de particionado en subsistemas para su posterior resolución, no recurriéndose a la linealización (rasgado) de los mismos para reemplazar los procedimientos de resolución simultánea por cálculos secuenciales ecuación a ecuación en una secuencia iterativa.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Cada estrategia dependerá del caso particular, los objetivos perseguidos, la forma de plantear el modelo etc. Debe destacarse, no obstante, que los algoritmos discutidos al permitir representar el *estado* del sistema mediante matrices, permiten fácilmente su implementación computacional, de tal manera de automatizar el procedimiento de resolución.

Por otra parte, conviene remarcar que al existir un gran número de alternativas posibles, el problema tiene una gran flexibilidad y puede resultar apropiado para tomar decisiones, contar con conocimientos intrínsecos y/o específicos del sistema a resolver. Esto puede realizarse mediante sistemas inteligentes que complementan los algoritmos hasta aquí estudiados, de tal manera de mejorar su performance, tomando ventajas de características específicas del particular problema a resolver.

Expuesto el problema más general, conviene en este punto aclarar que históricamente, al implementarse los primeros simuladores, no se recurrió a la filosofía o enfoque global, sino que se utilizó una alternativa conocida como arquitectura modular secuencial. No discutiremos las ventajas o desventajas de ambas alternativas ni las particularidades específicas, ya que volveremos sobre este punto en los Capítulos V y VI. Nos basta con destacar que la estrategia modular secuencial, que básicamente interpreta al complejo a simular como una unión de subunidades o módulos específicos, llamados equipos (correspondientes con las operaciones unitarias clásicas), matemáticamente la podemos interpretar como un *particionado* del sistema de ecuaciones de la planta completa en subunidades (subsistemas), pero no guiados por un criterio de optimización (algoritmos estudiados en las secciones anteriores), sino por la *conveniencia* física de disponer datos y submódulos estructurados de una manera dada, dictados prioritariamente por la correspondencia de los subsistemas de ecuaciones con las subunidades de proceso (operaciones unitarias), por ejemplo bombas, intercambiadores, torres, etc, y por el sentido en que están conectadas en el proceso real.

Al forzar la partición del sistema global en subsistemas, se pierde gran parte de la flexibilidad original, sacrificando seguramente alternativas óptimas de particionado. Es el precio a pagar por utilizar una *guía no matemática*, pero conveniente desde el punto de vista físico o de ingeniería. Esquemáticamente, cada módulo o paquete de ecuaciones correspondientes a cada equipo puede ahora ser representado según la Figura (IV.37). En otras palabras, se supone que podemos construir el modelo de una unidad de proceso por medio de un sistema de ecuaciones, y que conocemos las variables (generalmente asociadas a las corrientes físicas) de entrada, siendo el objetivo el cálculo de las variables (corrientes) de salida.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

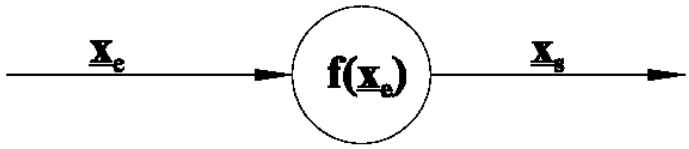


Figura IV.37

En la figura anterior se indica que, dados los valores de las variables de entrada, $\underline{X}_e$, se obtienen los valores de las variables de salida, $\underline{X}_S$ por medio de las funciones $f(\underline{X}_e)$. Nótese que nada se especifica acerca de cómo internamente se procede a la resolución, esto es, si se utiliza un método iterativo, si es una secuencia acíclica, etc. Se supone que se han aplicado a nivel local (a cada módulo; por ejemplo, el indicado en la Figura (IV.37)) todos los procedimientos vistos, de tal manera de optimizar la secuencia de resolución, fijados los $\underline{X}_e$. Obviamente, como ya se comentó, esta solución será sub- óptima, ya que si en vez de fijado $\underline{X}_e$ se hubiese adoptado algún otro conjunto entre todos los posibles, existe la posibilidad de hallar una solución más adecuada, ya que el óptimo sólo se encuentra a partir de un análisis que considere todas las posibilidades.

Dada una planta, compuesta por diversos equipos conectados entre sí, todos representados por su correspondiente sistema de ecuaciones (supuesto que conocemos las entradas y calculamos las variables de salida), podemos suponer para un caso específico, un esquema como el indicado en la Figura (IV.38):

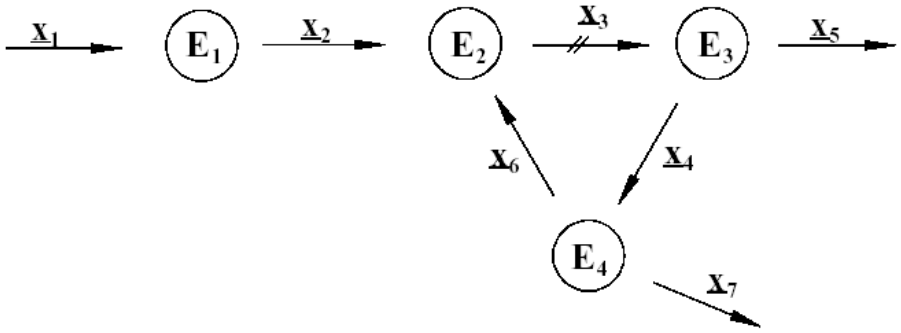


Figura IV.38: Diagrama de flujo de información (DFI) o de vinculación entre variables de entrada y salida para cada módulo (equipo) para un proceso dado.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En él se indican con valores (E_i) los nodos que representan equipos, mientras que los vectores $\underline{X}_i$ indican variables de entrada o salida de los respectivos módulos. En simulación de procesos se suele llamar al vector de variables *corriente*, ya sea de entrada o de salida, en alusión a las corrientes físicas del proceso. Se supone que para cada equipo se conocen las variables correspondientes a las corrientes de entrada (variables especificadas) y que las variables contenidas en las corrientes de salida serán calculadas. A un nodo pueden ingresar o salir más de una corriente. La cantidad de variables asociadas a cada corriente dependerá de las características de la misma.

Si analizamos la Figura (IV.38) vemos que para poder resolver el proceso completo (todas las variables de salida e intermedias), ya que las de entrada por definición se suponen especificadas ($\underline{X}_1$ en este caso), se deberá recurrir a rasgar el grafo (corrientes iteradoras) según lo indicado en la Figura (IV.38). Nótese que tanto $\underline{X}_3$ como $\underline{X}_4$ o $\underline{X}_6$ pueden ser asumidas como *corrientes o grupo de variables de iteración*. Si bien en este caso la selección ha sido sencilla (también lo es darse cuenta que en este caso el conjunto mínimo de *corrientes iteradoras* es unitario), no resulta lo mismo para un grafo de decenas de equipos y cientos de corrientes con muchos reciclos. A la relación entre nodos y corrientes esquematizada en la Figura (IV.38) se le llama, como mencionamos antes, *diagrama de flujo de información* (DFI).

Por otra parte, existen varios algoritmos propuestos que permiten encontrar el mínimo conjunto de corrientes de corte, según se analizará en detalle en las próximas secciones.

Debemos recalcar aquí que en este problema, esto es, el particionado específico del sistema global de ecuaciones (por ejemplo, el de la Figura (IV.38)) en subconjuntos de ecuaciones específicas (los representados por E_1, E_2, E_3, E_4) orientados según un sentido de cálculo tal que se suponen especificadas las variables asociadas a las corrientes de entrada, debiéndose calcular las contenidas en las corrientes de salida, no puede asegurarse una performance óptima con respecto al particionado por medio de los *algoritmos anteriormente vistos* aplicados al problema original. Esto surge como consecuencia de una asignación histórica que se orienta según los módulos de equipos o bien en las relaciones físicas en el proceso, contrariamente al *flujo de información matemático* inherente a las relaciones entre las variables y funciones, según la estructura del sistema. Es por ello comprensible que a la primer estrategia, esto es, encarar el problema global y particionar el sistema en subsistemas con un criterio que da prioridad a la estructura del sistema de ecuaciones se lo llama *orientado a ecuaciones*, mientras que al otro se lo llama *orientado a módulos* o simplemente modular. Dado que los módulos se suponen orientados y deben resolverse según una secuencia, se lo denomina *criterio modular secuencial*. En los Capítulos V y VI veremos las ventajas y desventajas asociadas a ambas alternativas para encarar la simulación de un proceso.

Volviendo al esquema de la Figura (IV.38) vemos que una posible secuencia de resolución sería la siguiente (conocemos las corrientes de entrada a la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

planta, o sea $\underline{x}_1$, y suponiendo conocido además el valor de la corriente $\underline{x}_3$- valor supuesto -):

$$E_3$$
$$\underline{x}_3 \rightarrow \underline{x}_5, \underline{x}_4$$
$$E_4$$
$$\underline{x}_4 \rightarrow \underline{x}_7, \underline{x}_6$$

$$E_1$$
$$\underline{x}_1 \rightarrow \underline{x}_2$$
$$E_2$$
$$\underline{x}_6, \underline{x}_2 \rightarrow \underline{x}_3^*$$

Luego, se comparan los valores $\underline{x}_3$ y $\underline{x}_3^*$, hasta lograr, mediante un proceso iterativo, que el error entre los mismos satisfaga un criterio especificado, por ejemplo:

$$\left\| \underline{x}_3^* - \underline{x}_3 \right\| < 10^{-8}$$

El orden de resolución de equipos (E_3, E_4, E_1, E_2) se llama *orden de procedencia o de resolución*. Las secuencias no necesariamente son únicas, como puede comprobarse rápidamente por simple inspección de la Figura (IV.38). A las corrientes iteradoras se las llama también *corrientes de corte* (en este caso $\underline{x}_3$).

Por último, al proceso de identificar los ciclos ($E_2 \rightarrow E_3 \rightarrow E_4 \rightarrow E_2$) se lo llama *particionado*. Los algoritmos que veremos a continuación permiten realizar el *particionado*, la asignación de *corrientes de corte o iteradoras* y por ende encontrar una secuencia de resolución (ordenamiento) en una forma automática y sencilla.

Antes de introducirnos en la problemática de referencia, repasaremos algunos conceptos asociados a la teoría de grafos que expresamos someramente en el Capítulo II.

Se denomina grafo a la representación formada por un conjunto de nodos unidos entre sí por arcos, par a par. Se lo llama *dirigido* o *digrafo* cuando los arcos están dirigidos. Además, se dice que entre un nodo N_i y N_j existe un camino, si siguiendo los arcos orientados desde N_i es posible llegar a N_j.

Por otra parte, si existe un camino tal que comienza en un nodo y termina en él, éste es llamado *ciclo* o *camino cíclico*. Un ciclo es máximo si y sólo sí todos los demás ciclos del grafo no están contenidos en él ni tampoco existen nodos en común.

IV.5 MÉTODO DE PARTICIONADO DE NORMAN (1965)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Norman se basó en la definición de la *matriz de adyacencia*, que a diferencia de la *matriz de ocurrencia*, dispone en filas y columnas los nodos del grafo (es decir que tiene dimensión igual a la del grafo). Luego, en la posición a_{ij} existirá un *uno (1)* si existe un arco entre *i* y *j* y *cero (0)* en caso contrario. Por ejemplo, en la Figura (IV.39) tenemos un g rafo sencillo y su correspondiente *matriz de adyacencia*.

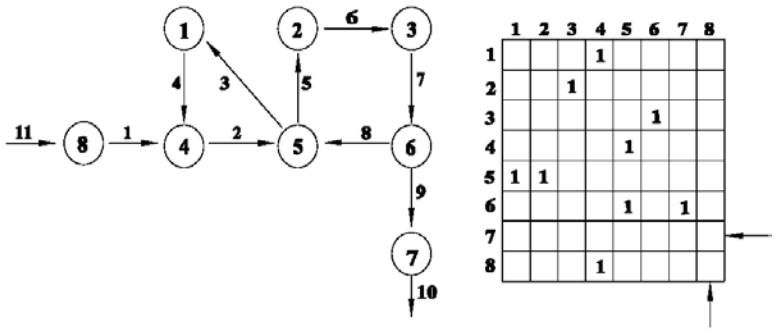


Figura IV.39: Digrafo y matriz de adyacencia correspondiente.

Se puede notar que en la matriz aparecen filas y columnas (indicadas con una flecha) que no poseen números, esto es, están vacías. Una fila vacía, según construimos la matriz, indica que el nodo correspondiente (*7* en este caso) no es antecesor inmediato de ningún nodo. Para una columna, (*8* en este caso), significa que no es sucesor inmediato de ningún nodo. El algoritmo de Norman (1965) permite identificar los ciclos máximos por medio de la potenciación sucesiva de la *matriz de adyacencia*, $\underline{\underline{A}}$. En efecto, al multiplicar la matriz $\underline{\underline{A}}$ por sí misma, todo elemento:

$$\left[a_{ij}\right] = \sum_{i=1}^{N} a_{ik}\ a_{kj}$$

según la definición de multiplicación de matrices se obtiene acumulando los productos parciales (*k* productos). Estos productos sólo serán distintos de cero si para cada *k*, tanto a_{ik}como a_{kj} son distintos de cero, esto es, existe un camino entre ellos que los vincula.

Luego, el resultado de la operación mide la longitud del camino que une los nodos *i* y *j*. Por consiguiente, si la matriz potencia $\underline{\underline{A}}^{p}$con *p = 1, 2,..., n* presenta elementos no nulos en la diagonal, nos indica que para ese elemento a_{ii}, existen caminos que nacen en a_i y finalizan en a_i(ciclo) y además el ciclo tiene longitud *p*.

Sea el ejemplo de la Figura (IV.39). Las matrices $\underline{\underline{A}}^{2}, \underline{\underline{A}}^{3}, \underline{\underline{A}}^{4}$ se indican a continuación:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\underline{\underline{A}}^2 =$

	1	2	3	4	5	6	7	8
1					1			
2						1		
3					1		1	
4	1	1						
5			1	1				
6	1	1						
7								
8					1			

$\underline{\underline{A}}^3 =$

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1	1						
2					1		1	
3	1	1						
4			1	1				
5					1	1		
6			1	1				
7								
8	1	1						

$\underline{\underline{A}}^4 =$

1			1	1				
2	1	1						
3			1	1				
4					1	1		
5	1	1			1		1	
6					1	1		
7								
8			1	1				

Aquí el problema radica en la dimensión de la matriz (que en casos reales puede ser mayor a mil) y por consiguiente el tiempo de cómputo asociado. Para solucionar este problema Keham y Shacham se basaron en las características particulares de la *matriz de adyacencia*, logrando un algoritmo eficaz y sencillo.

IV.6 ALGORITMO DE PARTICIONADO DE KEHAM Y SHACHAM

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Entre las modificaciones introducidas, la primera es eliminar las filas y columnas vacías en la matriz $\underline{\underline{A}}$ descripta anteriormente, ya que no proveen información relevante. Luego se introduce una nueva matriz, la *matriz de índices* $\underline{\underline{I}}$.

Se define así una matriz de *m* filas (siendo *m* el número de elementos no nulos en $\underline{\underline{A}}$) y dos columnas. La columna de la izquierda, para una dada fila, contiene todos los nodos que dispongan de sucesor inmediato y a la derecha se coloca dicho sucesor inmediato. Esta definición también puede aplicarse a las sucesivas potencias de $\underline{\underline{A}}$. Puede apreciarse que se produce una gran reducción del espacio utilizado (memoria de máquina necesaria) sin perder información. Lo que falta es encontrar un álgebra con la *matriz de índices* similar a las potencias de la *matriz de adyacencia*. Keham y Shacham propusieron un algoritmo basado en la *matriz de índices* que logra ubicar los ciclos de igual modo que lo realiza la *matriz de adyacencia*.

Si se comparan las *matrices de índices* correspondientes a cada matriz $\underline{\underline{A}}$ potenciada, se puede lograr fácilmente un procedimiento o algoritmo práctico que permita obtener las sucesivas potencias de la *matriz de índices*.

Para tener una somera idea del algoritmo (para mayores detalles se remite al lector a la bibliografía citada o recomendada), conviene analizar las propiedades de la *matriz de índices*, $\underline{\underline{I}}$. Por ejemplo, *la matriz de índices* correspondiente a la *matriz de adyacencias* (o al grafo) de la Figura (IV.39) es:

$$\underline{\underline{I}} = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 3 \\ 3 & 6 \\ 4 & 5 \\ 5 & 1 \\ 5 & 2 \\ 6 & 5 \\ 6 & 7 \\ 8 & 4 \end{bmatrix}$$

Una segunda reducción se logra eliminando los nodos de entrada que son aquellos que no tienen antecesores inmediatos. Ello implica que en la matriz $\underline{\underline{I}}$ los valores figuran en la columna de la izquierda y no aparecen en la columna de la derecha. En caso contrario, aquellos que figuren en la columna de la derecha pero no en la izquierda no tienen sucesores, razón por la que se los llama *nodos de salida* y pueden eliminarse. Luego de ese proceso, la *matriz de índices reducida* $\underline{\underline{I}}_r$ queda:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\underline{\underline{I}}_r =$

1	4
2	3
3	6
4	5
5	1
5	2
6	5

Luego de este paso que ha eliminado información irrelevante se computan las sucesivas potencias de $\underline{\underline{I}}_r$ (que pueden obtenerse a partir de las matrices $\underline{\underline{A}}$ potenciadas). Un algoritmo para obtenerlas directamente es el siguiente:

< En la matriz $\underline{\underline{I}}_r$ se procede de la siguiente manera: Se toma cada elemento de la columna izquierda y se lo escribe nuevamente en la columna izquierda de la *matriz potencia*, por ejemplo, $\underline{\underline{I}}_r^2$

< En la columna de la derecha se ubica el nodo procediendo de la siguiente manera: Se debe hallar en $\underline{\underline{I}}_r$ el nodo sucesor inmediato, esto es, el valor en la columna derecha.

Por ejemplo, en el caso $\underline{\underline{I}}_r^1 \rightarrow \underline{\underline{I}}_r^2$ se tiene en la primera fila el nodo 1, que tiene a la derecha (sucesor) el valor *4*. En las columnas de la izquierda, *4* aparece una sola vez y tiene como sucesor (derecha) el valor *5* en $\underline{\underline{I}}_r^1$. Luego, se ubicará este valor a la derecha, en $\underline{\underline{I}}_r^2$, en la primer fila. Para el caso de la cuarta y quinta fila en $\underline{\underline{I}}_r^2$, vemos que se repite el *nodo 4*. Esto se debe a que en la cuarta fila de $\underline{\underline{I}}_r^1$ tenemos el *nodo 4* con su sucesor inmediato (fila derecha) el *nodo 5*. Luego, al ubicar los nodos sucesores inmediatos de *5*, esto es, en la columna izquierda de $\underline{\underline{I}}_r^1$ y tomar el nodo que lo acompaña en la fila derecha, vemos que el *nodo 5* está dos veces, en la quinta y la sexta fila con nodos sucesores *1* y *2*, respectivamente. Por lo tanto, en $\underline{\underline{I}}_r^2$ se ubicarán en la cuarta y quinta fila el *nodo 4* en columna izquierda, y los *nodos 1* y *2* en la columna derecha.

Si observamos la Figura (IV.39), esto no es más que ubicar los caminos de longitud dos que nacen en el *nodo 4*, y como puede observarse son dos y llegan hasta los *nodos 2* y *1,* respectivamente.

Esta misma información puede obtenerse en $\underline{\underline{A}}^2$. Sin embargo, con este

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

procedimiento, que consiste en ubicar cada uno de los sucesores inmediatos del nodo sucesor a uno dado, se está adicionando una longitud más (potencia siguiente de $\underline{\underline{I}}_r$); pero evitando calcular las potencias de $\underline{\underline{A}}$ que requieren más memoria (más datos a almacenar) y mayor tiempo de cómputo. Completando el procedimiento, se obtiene:

$$\underline{\underline{I}}_r^{\,2} =$$

1	5
2	6
3	5
4	1
4	2
5	4
5	3
6	2
6	1

Aplicamos la misma técnica y obtenemos $\underline{\underline{I}}_r^{\,3}$. Antes conviene reiterar que las filas de $\underline{\underline{I}}_r^{\,2}$ contienen la información de todos los caminos de longitud dos que se encuentran en el grafo (por ejemplo, 1 → 4 → 5). Esta es la misma información contenida en $\underline{\underline{A}}^2$. Para obtener $\underline{\underline{I}}_r^{\,3}$ se procede según vimos tomando, por ejemplo, el primer valor en $\underline{\underline{I}}_r^{\,2}$ (primer fila = *1*) y se recorren los correspondientes sucesores del nodo colocado a la derecha, en este caso *5*. Este nodo figura en la quinta fila de $\underline{\underline{I}}_r$. Allí tenemos a la derecha *1*. También en la matriz $\underline{\underline{I}}_r$ figura en la sexta fila con *2* a la derecha. Ambos pares forman parte de $\underline{\underline{I}}_r^{\,3}$, según vimos. Cuando se obtienen en una fila valores iguales en las dos columnas, esto equivale al proceso en el cual un elemento de la *matriz de adyacencias* $\underline{\underline{A}}$ tiene un uno en la diagonal o lo que es la mismo, existe un camino que nace y termina en el nodo en cuestión. El proceso completo nos da el siguiente resultado:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\underline{\underline{I_r}}^3$ =

1	1*
1	2
2	5
3	1
3	2
4	4*
4	3
5	5*
5	6
6	3
6	4

Aquí obtenemos, además de los caminos de longitud *3*, tres nodos (*) que pertenecen a un camino cíclico de longitud *3*. El algoritmo prosigue luego asignando los nodos a un pseudonodo (llamémosle 1) que los engloba. Luego se reemplaza en $\underline{\underline{I_r}}$ por *1* para luego iniciar nuevamente el proceso. Entonces $\underline{\underline{I_{r,2}}}$ nos queda (donde el subíndice *2* indica que detectamos un ciclo y comenzamos una segunda iteración del método):

$\underline{\underline{I_{r,2}}}$ =

1	1
2	3
3	6
1	1
1	1
1	2
6	1

➜

2	3
3	6
1	2
6	1

Los valores iguales en ambas columnas se eliminan porque no aportan información adicional. Comenzamos por eliminar nodos de entrada y salida. En este caso no existen. Luego, como se ha explicado, se obtiene $\underline{\underline{I^2_{r,2}}}$ y las sucesivas potencias:

2	6
3	1
1	3
6	2

$\underline{\underline{I^2_{r,2}}}$

2	1
3	2
1	6
6	3

$\underline{\underline{I^3_{r,2}}}$

2	2*
3	3*
1	1*
6	6*

$\underline{\underline{I^4_{r,2}}}$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Luego, encontramos en $\underline{\underline{I}}_{r,2}^{4}$ un ciclo de longitud *4*. Si reemplazamos los nodos por un pseudonodo, tendremos un sólo nodo en la matriz $\underline{\underline{I}}_{r,3}$, por lo que el mismo será de entrada/salida y el proceso habrá finalizado. Gráficamente podemos ver los sucesivos pasos (detección de ciclos) según la Figura (IV.40).

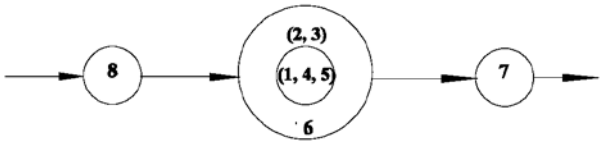


Figura IV.40: Detección de ciclos en el grafo de la Figur7a (IV.39).

Luego, en la Figura (IV.40) puede observarse que se obtienen los ciclos y un orden de resolución. No obstante, sabemos que para resolver cada ciclo hay que designar una corriente iteradora. El criterio para decidir una de ellas no se obtiene de este algoritmo. En síntesis, el algoritmo podría resumirse de la siguiente manera:

- Eliminar los nodos de entrada y salida (obtener $\underline{\underline{I}}_{r}$).
- Se calculan las sucesivas potencias de $\underline{\underline{I}}_{r}$. Para ello se recurre al expediente de reemplazar los sucesores de los nodos en la matriz a elevar por los sucesores de los mismos (en el grafo, o en $\underline{\underline{I}}_{r}$), colocándolos en la matriz resultado. Si hubiese más de un sucesor, se debe proceder para cada uno de ellos.
- Se verifican las igualdades en la matriz potencia $\underline{\underline{I}}_{r}^{p}$. Si existen *p* igualdades, se ha detectado un ciclo de longitud de camino *p*. No obstante, pueden detectarse más de un grupo de igualdades. Esto es porque puede existir más de un ciclo de longitud *p*. Las igualdades serán siempre un número múltiplo de *p*, ya que no pueden existir caminos (ciclos) detectados a esta altura de longitud distinta de *p*. Aquí cabe mencionar que pueden darse casos particulares de ciclos contenidos en otros, ciclos que compartan algunos nodos o ciclos independientes entre sí. Luego; para identificar estos ciclos especiales los autores (Norman, 1965), proponen ciertas

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

modificaciones o estrategias específicas.

- Una vez identificado el ciclo se lo reemplaza por un pseudonodo, de tal forma de eliminar en $\underline{\underline{I}}_r$ toda referencia a los nodos individuales que lo componen.
- Con esta nueva matriz de índices se comienza el algoritmo desde el principio.
- Se aplica el mismo hasta que la matriz quede vacía.

IV.7 RASGADO DEL DIAGRAMA DE FLUJOS O GRAFO

El resultado de aplicar los algoritmos de particionado es detectar los ciclos, de tal manera de transformar el grafo original en una secuencia lineal. Esta secuencia puede tener subgrafos cíclicos. Luego, se deberá resolver cada subproblema (linealizar un grafo cíclico).

La técnica de rasgado consiste en detectar las corrientes de corte que permitan que cada subgrafo cíclico pueda ser resuelto, esto es, detectar las corrientes de corte que permitan que cada subgrafo cíclico pueda ser solucionado mediante una técnica iterativa.

Asignar una corriente de corte es similar a definir una *nueva corriente* de entrada a la planta, sólo que sus valores son supuestos y sirven para generar una secuencia que permita resolver todas las ecuaciones del sistema, tantas veces como sea necesario hasta lograr convergencia. Por ejemplo, si en la Figura (IV.39) tomamos como corrientes de corte (una por cada ciclo) las indicadas como *2* y *8* nos queda el grafo de la Figura (IV.41).

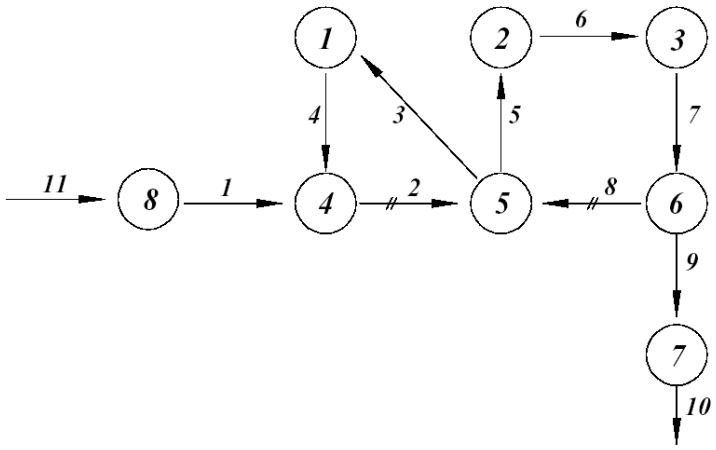


Figura IV.41: Diagrama de flujos de la Figura (IV.39) con corrientes de corte (se indican ≠) para linealizar ambos ciclos.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

A partir de dichas corrientes, seleccionados los valores iniciales para el vector de variables $\underline{x}^i_2$ y $\underline{x}^i_8$ asociadas a las respectivas corrientes, se procede a calcular secuencialmente los nodos, según:

$\underline{x}^1_5$, $\underline{x}^1_3$ del *nodo 5*, ya que disponemos del valor $\underline{x}^1_2$ y $\underline{x}^1_8$ (supuestos o iniciales).

$\underline{x}^1_4$ del *nodo 1*, ya que conocemos $\underline{x}^1_3$.

$\underline{x}^1_1$ del *nodo 8*, ya que la *corriente 11*, de entrada, se asume conocida.

$\underline{X}^1_2$ del *nodo 4*, ya que disponemos de $\underline{X}^1_1$ y $\underline{X}^1_4$

$\underline{x}^1_6$ del *nodo 2*, ya que disponemos de $\underline{x}^1_5$.

$\underline{x}^1_7$ del *nodo 3*, ya que disponemos de $\underline{x}^1_6$.

$\underline{x}^1_8$ y $\underline{x}^1_9$ del *nodo 6*, ya que conocemos $\underline{x}^1_7$.

$\underline{x}^1_{10}$ del *nodo 7*.

Si bien obtuvimos todos los valores asociados a las variables de todas las corrientes, éstos pertenecen a la primera iteración. Debe ahora verificarse si los valores calculados $\underline{x}^1_2$ y $\underline{x}^1_8$ coinciden con los supuestos $\underline{x}^i_2$ y $\underline{x}^i_8$ dentro del margen de error especificado. Si lo hacen, finaliza el cálculo. De lo contario, y aplicando algunas de las técnicas vistas anteriormente (por ejemplo sustitución directa, Wegstein, etc.) se proponen nuevos valores, generando una secuencia tal que finaliza cuando se obtiene el criterio de error deseado. Nuevamente, aquí observamos que si bien es simple identificar las corrientes de corte en un grafo sencillo como el de la Figura (IV.39), no resulta equivalente analizar uno con cientos de nodos y/o corrientes. Luego, se necesita un método sistemático, implementable en computadora, que permita tal selección.

El primer problema que se presenta es encontrar un criterio con el cual guiar la búsqueda. En efecto, dado que se trata de un particionado de ecuaciones, lo lógico resultaría pensar en un criterio que minimice el esfuerzo de cálculo. De manera similar a los problemas discutidos en los Capítulos I y II, no existen tales criterios o lineamientos sin conocer en detalle el problema a resolver; por ejemplo, el número de variables asociadas a la resolución de cada nodo y corriente, el grado de dificultad asociado a la resolución de cada nodo en particular, etc. El problema es que el algoritmo debe tratar casos generales, por lo que debiéramos obtener criterios universales. Si suponemos que todas la corrientes poseen la misma cantidad de variables, es lógico pensar que debemos buscar el mínimo número de corrientes de corte para linealizar el ciclo (debido a que ello implica el mínimo número de variables iteradoras). Sin embargo, no está demostrado que un número mayor de corrientes de corte implique mayor esfuerzo de cómputo. No obstante, podemos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

asumir que así será en la mayoría de los casos.

Otro problema radica en conocer la certeza que tenemos acerca de la solución (o el conocimiento que se dispone del proceso que se modela) para proponer un adecuado valor inicial. Esto implica que el algoritmo debería permitir que el usuario le introduzca pesos penalizando ciertas corrientes y favoreciendo otras, de tal manera de recorrer las alternativas considerando tales criterios (recordar las funciones de evaluación discutidas en el Capítulo I).

A continuación se discutirán algunos métodos clásicos, sugiriendo ampliar el tema al lector interesado mediante la bibliografía citada y recomendada al final del capítulo.

IV.8 ALGORITMO DE BARKELEY Y MOTARD (1972)

El algoritmo propuesto por Barkeley y Motard tiene como objetivo el rasgado de los subgrafos cíclicos para obtener un conjunto de corte con el menor número de corrientes iteradoras. Este algoritmo se basa en el concepto de grafo de corrientes (S) o grafo dual al ya visto. Éste se logra intercambiando los roles, esto es, los nodos ahora son las corrientes y los arcos se obtienen a través del flujo de información en el DFI. Nuevamente, se puede hablar de corriente inmediata sucesora o antecesora, razonando ahora sobre el grafo S.

Como ejemplo, obtengamos el grafo S correspondiente al diagrama de flujo de información de la Figura (IV.39). Para ello, el primer paso es incorporar tantos nodos como corrientes existan. Luego, se vinculan éstos según el sentido de la información que circula entre las corrientes en el grafo original. Por ejemplo, en la Figura (IV.42) se tienen ahora *11 nodos*, ya que en la Figura (IV.39) existen *11 corrientes*. Además, vemos que la *corriente 11* es antecesora inmediata de la *corriente 1* y la *corriente 1* lo es de *2*. De esta manera, recorriendo todas las corrientes y sus vinculaciones, se logra el grafo S representado en la Figura (IV.42).

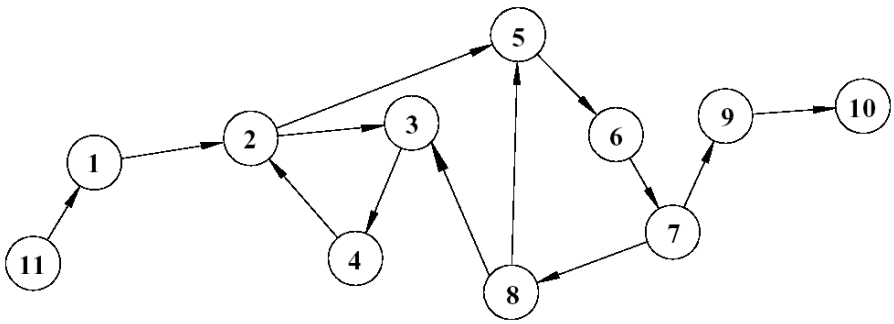


Figura IV.42: Grafo de corrientes asociado al diagrama de flujo de información de la Figura (IV.39).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Es evidente que al manipular el grafo S ahora lo hacemos sobre las corrientes (nodos), y dado que lo que buscamos son las corrientes de corte, se comprende la utilidad de la transformación del algoritmo propuesto por Barkeley y Motard.

Los autores introducen, para operar en el grafo, el concepto de *nodo dominado*. En efecto, se dice que un nodo cualquiera n_i en S es dominado por otro n_j si n_j es el único antecesor inmediato de n_i. Luego, los autores proponen un proceso de reducción de S mediante el procedimiento de englobar (engullir o fundir) los nodos dominados por sus dominantes sin perder la información en el grafo S. Por ejemplo, el *nodo 1* es dominado por el *11*, el *4* lo es por el *3* y el *7* por el *6*. Si procedemos a la reducción, nos queda el grafo indicado en la Figura (IV.43).

Como vemos, la secuencia de procedimientos es sumamente sencilla, y fácil de programar computacionalmente, dado el grafo S como dato. La forma de programación dependería de las facilidades del lenguaje a utilizar. Si asignamos pesos o preferencias a ciertos nodos, el algoritmo y su implementación computacional se complican ligeramente.

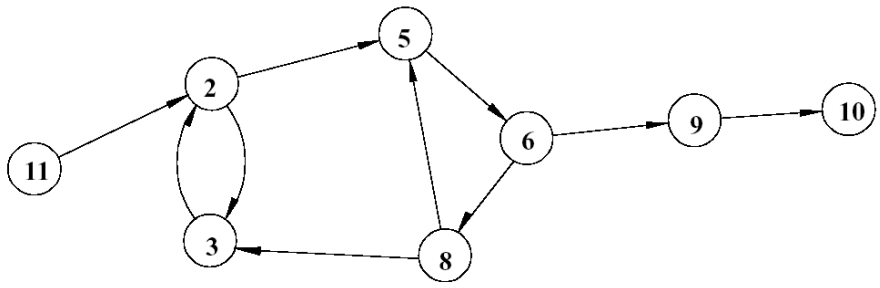
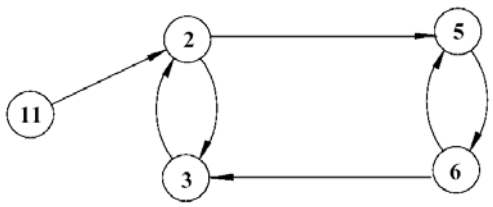


Figura IV.43: Grafo S reducido luego del proceso parcial de fusión.

Este procedimiento puede proseguirse hasta encontrar un estado en el cual un nodo se enlace a si mismo, esto es, (luego del proceso de reducción) sea dominado por si mismo. En la Figura (IV.44) se muestra el estado del grafo anterior luego de proceder a las asignaciones *10* → *9*, *9* → *6* y *8* → *6*.



ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Figura IV.44

Luego, haciendo *6* → *5* tenemos la Figura (IV.45).

Vemos que no puede reducirse más el grafo S, ya que el *nodo 2* tiene más de un antecesor, el *11* y el 3. Y lo mismo sucede con *5*. Aquí se introduce un nuevo concepto, el de *autociclo*, que es precisamente la particularidad que presenta el nodo *5* que están en ciclo con él mismo, al ser antecesor y sucesor de sí mismos simultáneamente. Este hecho está íntimamente relacionado con la definición de *rasgado* o *corriente de corte*, ya que justamente, por definición de los módulos que componen el diagrama de flujo de información, cada corriente puede ser calculada sólo si se conocen las entradas al equipo (nodo) del cual sale. Traduciendo al grafo S, por la forma en que se ha obtenido, si una corriente forma un *autociclo*, esto implica que no puede calculársela en el DFI si no se conoce su valor previamente, o lo que es lo mismo, si no se procede al rasgado del ciclo al cual pertenece.

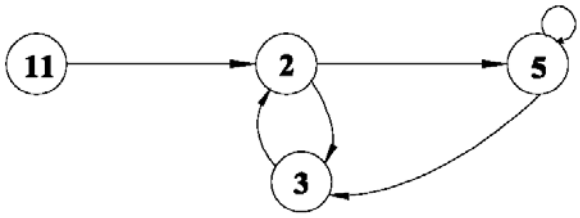


Figura IV.45

Volviendo a nuestro ejemplo, esto implica que la *corriente 2* y *5* conforman un conjunto de corrientes de corte de tamaño mínimo.

Como puede deducirse en función del proceso de reducción, no necesariamente el conjunto (*2*,*5*) es el único resultado, ya que se podrían obtener otros (se deja al lector la prueba). Previamente propusimos al conjunto (*2*,*8*) para el DFI de la Figura (IV.39), que a los efectos prácticos (asumiendo que todas las corrientes tienen la misma cantidad de variables, y no disponiendo de ninguna otra información del problema específico), resultará equivalente al conjunto (*2*,*5*). Obviamente una vez logradas las *corrientes iteradoras* puede proponerse una secuencia de resolución (ordenamiento) según discutimos anteriormente.

Al igual que los otros algoritmos, existen situaciones especiales o particulares que deben ser contempladas. Por ejemplo, sea la situación siguiente (ver Figura (IV.46)):

Figura IV.46: Ciclos de dos corrientes.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Aquí vemos que no existen nodos en los cuales se encuentre un único antecesor, por lo que no pueden ser reducidos (observar que la situación es distinta al caso de la Figura (IV.44)). A este caso se lo llama *ciclo de dos corrientes* y sólo puede ser resuelto (reducido) cortando una de las corrientes.

Si se presentan como en la figura, esto es, una sucesión de varios ciclos, es conveniente cortar corrientes intermedias que permitan rasgar más de un ciclo simultáneamente. Esto es un principio general.

Al igual que en los otros casos, no discutiremos en detalle las particulares situaciones que puedan aparecer, dejando la inquietud para quien desee profundizar este tema a través de la bibliografía recomendada. En forma resumida el algoritmo consiste en los siguientes pasos:

Reducción de los nodos del grafo hasta detectar *autociclos* o ciclos de dos corrientes.

< Elección del conjunto de corrientes de corte, según el criterio expuesto (por ejemplo, en un ciclo de dos corrientes).

Si embargo, para su implementación computacional es conveniente trabajar con una lista que contenga la información de los nodos y sus antecesores inmediatos. Por ejemplo, esta lista para el grafo S de la Figura (IV.42) es:

Nodo	Antecesores Inmediatos
1	11
2	1,4
3	2, 8
4	3
5	2,8
6	5
7	6
8	7
9	7
10	9

En la lista, los nodos con un sólo antecesor inmediato son *1*, *4*, *6*, *7*, *8*, *9*, y *10*. Por equivalencia al proceso de fusión del dominado por el dominante, se eliminan de la lista los menciondos nodos, reemplazando los mismos por sus dominantes. En este proceso conviene no considerar las corrientes de entradada.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodo	Antecesores
2	11, 3
5	2, 5
3	2, 5

Vemos que la lista o tabla anterior se corresponde con la Figura (IV.45), mostrando la utilidad del procedimiento, hasta aquí empleado. Luego, se explora si existen en la lista nodos que estén en autociclo. El nodo *5* cumple con esta condición (figurando a la izquierda y derecha en la misma fila). Se selecciona el nodo *5* como corriente de corte *ya que aparece en ambos*. Luego se lo elimina de la tabla.

Nodo	Antecesores
2	2

Al eliminar *2* (autociclo), nos queda la lista vacía y las dos corrientes de corte; coincidiendo a su vez con los resultados ya obtenidos anteriormente.

IV.9 ETAPA DE ORDENAMIENTO

Una vez obtenidos los ciclos y rasgados éstos, debe ordenarse el conjunto de nodos en la forma en que serán resueltos. En general, con la información que proveen los algoritmos ya vistos (los subgrafos cíclicos y las corrientes de corte que los linealizan), es posible por inspección en las listas disponibles (pasos intermedios en cada algoritmo) ordenar los nodos según la secuencia de resolución que imponen las corrientes iteradoras selecionadas.

No entraremos aquí en el detalle de programación de dichos algoritmos. Sólo basta mencionar que resultan de una combinación de los ya analizados , con ciertas modificaciones prácticas.

Ejemplo:

Sea el diagrama de flujos indicado en la Figura (IV.47), que corresponde al proceso de la Figura (IV.48). Se desea conocer cuántas y cuáles corrientes iteradoras deberán utilizarse, considerando que el conjunto de corrientes de corte sea mínimo.

En la Figura (IV.48) se denotan con un triángulo los nodos que provienen de sumar o dividir corrientes , sólo para remarcar que los mismos deben estar presentes cuando se representa a la planta en el DFI, ya que sus ecuaciones *no deben eliminarse* del problema. Respecto al tratamiento, estos nodos son equivalentes obviamente a los anteriormente analizados, por lo que deben procesarse de la misma manera que lo indicado en los ejemplos anteriores.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

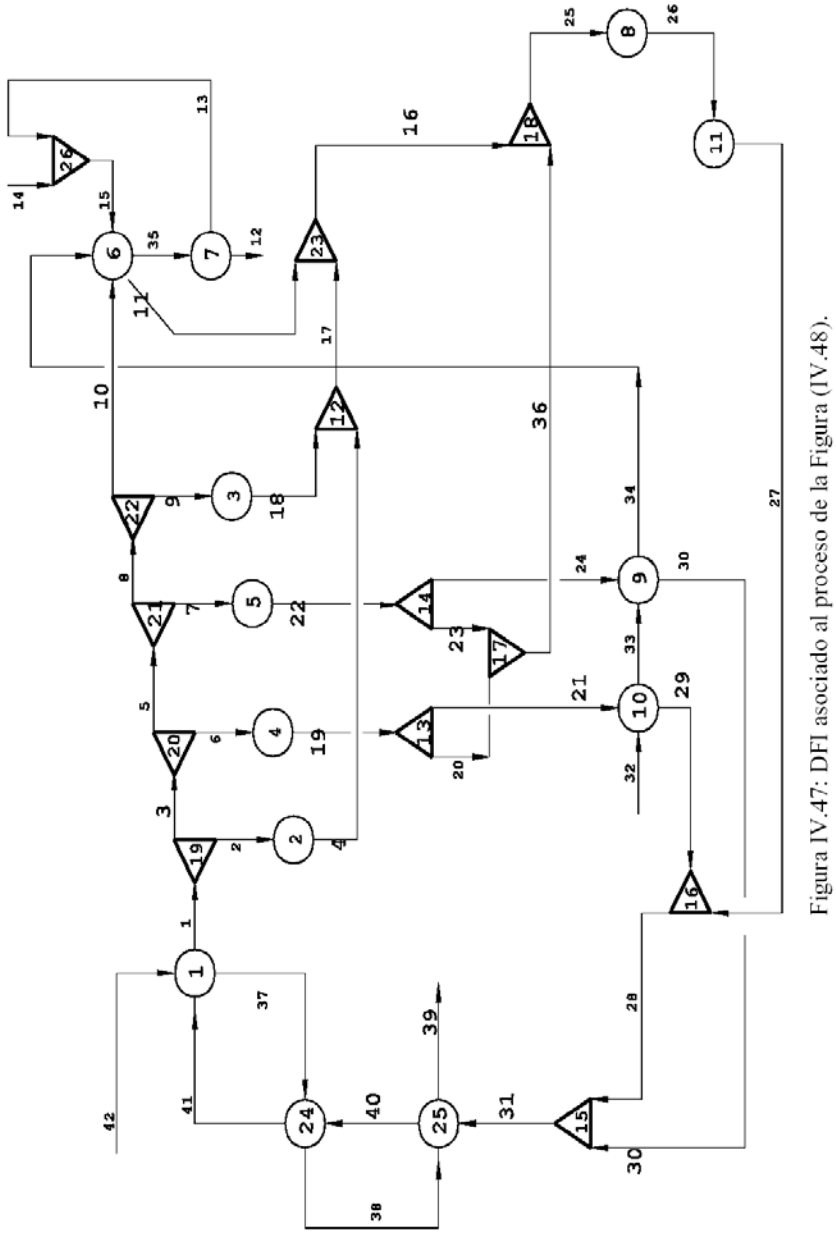


Figura IV.47: DFI asociado al proceso de la Figura (IV.48).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

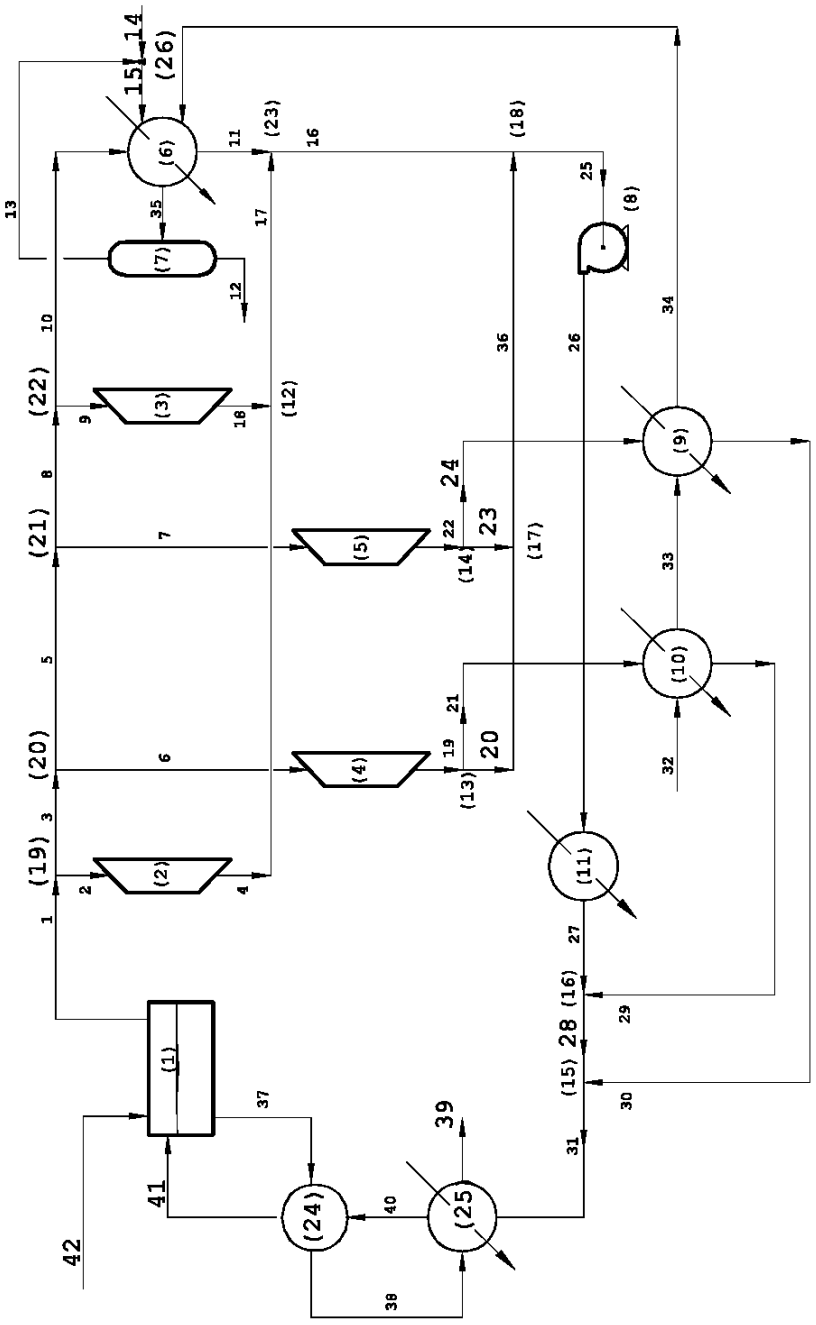


Figura IV.48: Esquema genérico de un proceso.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

A continuación, sólo se mostrarán los pasos del algoritmo más significativos:

Tabla de Nodos y Predecesores

Nodos	Predecesores		
1	41		
2	1		
3	1		
4	2		
5	3		
6	3		
7	5		
8	5		
9	8		
10	8		
11	10	15	34
13	35		
15	13		
16	11	17	
17	18	41	
18	41		
19	41		
20	19		
21	19		
22	41		
23	22		
24	22		
25	23	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	21		
30	24	33	
31	30	28	
33	21		
34	33	24	
35	41	34	15
36	20	23	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

Se comienza con el método de reducción que consiste en reemplazar

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

el nodo que solamente tenga una corriente predecesora por su predecesora. El nodo que se reemplaza por su predecesor luego se elimina de la tabla. Por ejemplo, se comienza reemplazando *1* por *41* y eliminando el nodo *1*. De esta manera los nodos *2* y *3* (los únicos nodos que contienen a *1*) pasan a ser dominados por *41*. Así, eliminando *2* por *41*, luego *3* por *41* y procediendo sucesivamente de esta forma, se llega a la siguiente tabla o matriz:

Nodos	Predecesores		
1	**41**		
2	**41**		
3	**41**		
4	**41**		
5	**41**		
6	**41**		
7	**41**		
8	**41**		
9	**41**		
10	**41**		
11	41	15	34
13	35		
15	13		
16	11	17	
17	18	41	
18	41		
19	41		
20	19		
21	19		
22	41		
23	22		
24	22		
25	23	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	21		
30	24	33	
31	30	28	
33	21		
34	33	24	
35	41	34	15
36	20	23	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

→

Nodos	Predecesores		
11	41	35	34
13	**35**		
15	**13**		
16	11	17	
17	18	41	
18	41		
19	41		
20	19		
21	19		
22	41		
23	22		
24	22		
25	23	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	21		
30	24	33	
31	30	28	
33	21		
34	33	24	
35	41	34	15
36	20	23	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

que luego de reducir *13* y *15* por *35*, resulta:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodos	Predecesores		
11	41	35	34
16	11	17	
17	18	41	
18	41		
19	41		
20	19		
21	19		
22	41		
23	22		
24	22		
25	23	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	21		
30	24	33	
31	30	28	
33	21		
34	33	24	
35	***41***	***34***	***35***
36	20	23	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

Se puede observar que se encuentra la corriente *35* que forma parte de un autociclo, entonces ésta resulta ser una corriente de corte. Se elimina de la tabla y se continúa con la reducción. A continuación pasamos a reducir el nodo *18* por *41*, luego *19*, *20*, *21*, *22*, *23* y *24* por *41*; luego de lo cual resulta:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodos	Predecesores		
11	41	34	
16	11	41	
17	**41**	**41**	
18	**41**		
19	**41**		
20	**41**		
21	**41**		
22	**41**		
23	**41**		
24	**41**		
25	41	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	41		
30	41	33	
31	30	28	
33	41		
34	33	41	
36	41	41	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

Eliminando los nodos antes reducidos y reduciendo los nodos *26* y *25* se obtiene:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodos	Predecesores	
11	41	34
16	11	41
25	41	16
26	**25**	
27	**25**	
28	25	29
29	41	
30	41	33
31	30	28
33	41	
34	33	41
36	41	41
37	41	
38	37	40
40	38	31
41	40	37

Siguiendo con el proceso de reducción:

nodos	predecesores	
11	41	34
16	11	41
25	41	16
28	25	41
29	**41**	
30	41	41
31	30	28
33	**41**	
34	41	41
36	41	41
37	41	
38	37	40
40	38	31
41	40	37

Resultando:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodos	Predecesores	
11	41	41
16	11	41
25	41	16
28	25	41
30	**41**	
31	41	28
34	**41**	
36	41	
37	41	
38	37	40
40	38	31
41	40	37

Luego, se obtiene:

Nodos	Predecesores	
11	**41**	
16	**41**	**41**
25	**41**	**41**
28	**41**	**41**
31	**41**	**41**
36	**41**	
37	**41**	
38	41	40
40	38	41
41	***40***	***41***

Aquí aparece la corriente *41* como corriente de corte. Finalmente:

Nodos	Predecesores
38	**40**
40	38

→

Nodos	Predecesores
40	***40***

Luego, un conjunto de corrientes de corte para el ejemplo analizado resulta: (*35*, *41*, *40*).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Obtenga la solución del siguiente sistema de ecuaciones:

$$2x_1^2 + 3x_2^2 + 5x_3^2 + \ln\left(x_1^2 + x_2^2\right) = 0$$
$$x_1^2 + 5x_2 + 3x_3 - e^{x_1} = 0$$
$$4x_1^2 + 3x_2 + 5x_3^2 - e^{\left(x_1^2 + x_3^2\right)} = 0$$

Por los métodos de Newton-Raphon y Wegstein.

P2) Obtenga la solución del siguiente sistema (previamente represéntelo matricialmente):

$$x_1 + 2x_2 = -1$$
$$3x_1 + 4x_2 + 3x_3 = -5$$
$$5x_2 + 3x_3 - x_4 = 0$$
$$6x_3 + 3x_4 + x_5 = -1$$
$$4x_5 + 3x_6 = 2$$

P3) Obtenga la solución del siguiente sistema:

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 9 & 3 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 4 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 & 3 & 1 & 0 & 4 & 1 & 3 \\ 4 & 3 & 0 & 2 & 1 & 8 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 3 & 2 & 6 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & -3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \\ x_8 \\ x_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \\ 3 \\ -1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

P4) Mediante la matriz de adyacencia analice la causa por la cual una matriz de coeficientes de forma triangular implica una secuencia de solución acíclica.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

P5) Determine el mínimo conjunto de corte para el proceso indicado en la Figura. Suponer que cada equipo indicado debe implementarse como un módulo independiente (no tener en cuenta los controladores).

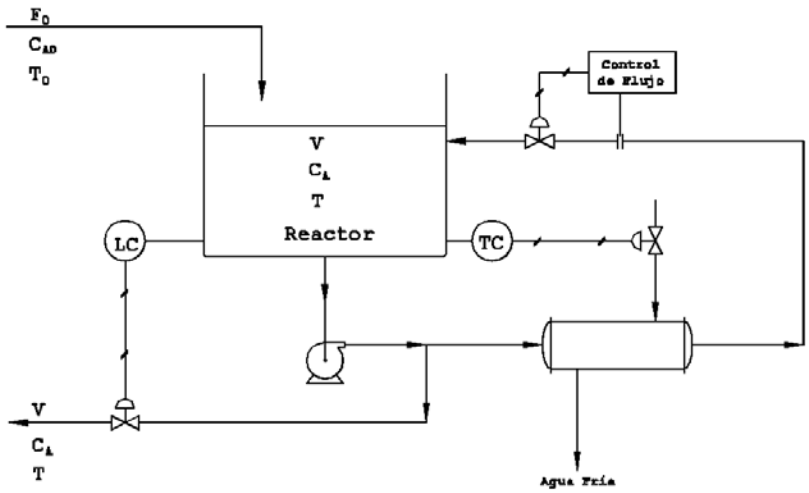


Figura correspondiente al proceso del Problema (P5).

P6) Sea el siguiente sistema de ecuaciones implícitas:

$$f_1(x_1, x_2, x_3, x_4, x_9, x_{12}) = 0$$
$$f_2(x_2, x_3, x_8, x_9, , x_{13}) = 0$$
$$f_3(x_1, x_3, x_5, x_7, x_{13}) = 0$$
$$f_4(x_5, x_6, x_8, x_9) = 0$$
$$f_5(x_{10}, x_{11,13}, x_{14}) = 0$$
$$f_6(x_1, x_2, x_5, x_8, x_{10}, x_{11}) = 0$$
$$f_7(x_1, x_4\, x_7, x_8, x_9) = 0$$
$$f_8(x_6, x_8, x_{10}, x_{12}, x_{14}) = 0$$
$$f_9(x_{10}, x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{14}) = 0$$
$$f_{10}(x_1, , x_5, x_7, x_9, x_{11}, x_{14}) = 0$$

¿Cuántas variables deben especificarse (grado de libertad del sistema)? ¿Qué asignación resulta más conveniente? ¿Es ésta única?

P7) Sea la siguiente matriz de adyacencias:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

¿Cuál es el grafo que representa? ¿Tiene algún ciclo? Detéctelo mediante un algoritmo adecuado. Detecte si fuera necesario las corrientes de corte adecuadas.

P8) Mediante los métodos de Newton-Raphson y Wegstein resolver el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} & 2\ x_1^2 - 3\ x_1\ x_2 + 4\ x_2\ x_3 - 5\ \ln\left(x_1^2\right) = 0 \\ & 3\ x_4\ x_1 + 2\ x_3\ x_2 + 4\ x_1\ e^{x_4} - 5\ \ln\left(x_3\right) e^{x_4} = 0 \\ & 3\ x_1^4 + 4\ x_2\ x_3 - 5\ x_4 + 3\ \ln\left(x_4^2 + x_1^2\right) = 0 \\ & 4\ x_1^3 - 8\ x_3^2 + 5\ x_3\ x_4 - 4\ x_4\ e^{x_4} = 0 \end{aligned}$$

P9) Confeccionar el diagrama de flujos de un programa que obtenga la raíz de una *f(x)* dada para los métodos de Wegstein y de Newton-Raphson. Implementarlo en computadora. Utilizar el concepto de función o subrutina, de tal forma de lograr un programa general con mínimo esfuerzo.

P10) Confeccionar el diagrama de flujos para un programa que, dados los datos del DFI, entregue las corrientes de corte y la secuencia de resolución.

BLIOGRAFÍA CITADA

- Broyden, C. G., Math. Computation, 19, 577 (1965).
- Kehat, E. y M. Sacham, Process Techn., 18, 181 (1973).
- Lee, W., J. H. Christensen y D. F. Rudd, AICHE J., 12, 6, 1104 (1966).
- Norman, R. L, *A Matrix Method for Location of Cycles of a Directed Graph*, AICHE J., 11, 450 (1965).
- Rudd, D. F. y C.Watson, Strategy of Process Engineering, John Wiley &

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Sons (1968).

- Steward, D.V., Soc. Ind. Appl. Math. Rev., 4, 321 (1962).
- Steward D. V., SIAM Review, 4, 321.
- Tiernan, J. C., *An Efficient Search Algorithm for Optimun Decomposition of Recycle Systems*, AICHE J., 18, 465 (1972).
- Updahye, R. S., *Selection of Decompositions for Chemical Process Simulation*, AICHE J., 21, 136 (1975).

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- Amundson, N. R., Mathematial Methods in Chemical Engineering. Matrices and Their Applications, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- Cerro, R. L., L. E. Arri, M. G. Chiovetta y G. Perez, Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora, Parte I (TomoI): Simulación de Procesos por Computadora; Agosto de 1978, INTEC, Santa. Fe, Argentina.
- Cerro, R. L., L. E. Arri, M. G. Chiovetta y G. Perez, Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora, Parte I (Tomo II): Simulación de Procesos por Computadora, Agosto de 1978, INTEC, Santa. Fe, Argentina.
- Westerberg, A.W., H. P. Hutchison, R. L. Motard y P. Winter, Process Flowsheeting, Cambridge University Press (1979).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999