UNIVERSIDAD NACIONAL "PEDRO RUIZ GALLO"
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
ESCUELA PROFESIONAL DE MATEMÁTICA

"Métodos Iterativos Asistidos con Matlab para Resolver Ecuaciones no Lineales en Ingeniería Química"

TESIS

Para optar el título profesional de Licenciado en Matemáticas

Presentado por:

Bach. Mat. **Acosta Santisteban Iván**

Bach. Mat. **Estalla Pérez Carlos Vidal**

Asesor:

Mg. Cuti Gutierrez Alcides Raúl

LAMBAYEQUE – PERÚ

2016

UNIVERSIDAD NACIONAL" PEDRO RUIZ GALLO"
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
ESCUELA PROFESIONAL DE MATEMÁTICA

Los firmantes, por la presente certifican que han leído y recomiendan a la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas la aceptación de la tesis titulada **"Métodos Iterativos Asistidos con Matlab para Resolver Ecuaciones no Lineales en Ingeniería Química"**, presentada por los bachilleres en matemáticas, Acosta Santisteban Iván, Estalla Pérez Carlos Vidal, en el cumplimiento parcial de los requisitos necesarios para la obtención del título profesional de licenciado en matemáticas .

Dr. Cárpena Velásquez Enrique Wilfredo
Presidente Jurado de Tesis

Lic. Mat. Castro Cárdenas Diana Mercedes
Secretario Jurado de Tesis

M.Sc. Gonzáles Herrera Mardo
Vocal Jurado de Tesis

Fecha de Defensa: Septiembre - 2016

UNIVERSIDAD NACIONAL“ PEDRO RUIZ GALLO”

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS

ESCUELA PROFESIONAL DE MATEMÁTICA

“Métodos Iterativos Asistidos con Matlab para Resolver Ecuaciones no Lineales en Ingeniería ” Química ”

Bach. Mat. Acosta Santisteban Iván

Autor

Bach. Mat. Estalla Pérez Carlos Vidal

Autor

Mg. Cuti Gutierrez Alcides Raúl

Asesor

Lambayeque – Perú

Septiembre - 2016

Agradecimiento

A Dios, a mi compañero de tesis y a mi asesor Mg. Cuti Gutierrez Alcides Raúl.

A mis profesores a quienes les debo gran parte de mis conocimientos, gracias a su paciencia y enseñanza y finalmente un eterno agradecimiento a esta prestigiosa universidad la cual abrió sus puertas a jóvenes como nosotros ,preparándonos para un futuro competitivo y formándonos como personas de bien.

IVAN

"La dicha de la vida consiste en tener siempre algo que hacer, alguien a quien amar y alguna cosa que esperar".

Thomas Chalmers

Han sido cinco años lleno de esfuerzos y sacrificios, cerrada esta etapa, me queda agradecer principalmente a Dios por permitirme llegar a esta instancia del camino, en donde me vuelvo todo un profesional.

Agradezco todo su amor y su fidelidad y espero nunca soltarme de su mano.

Manifiesto mi reconocimiento y afecto infinito a mi asesor Mg. Cuti Gutierrez Alcides Raúl por su esmerado apoyo en la elaboración del presente informe de tesis.

Y a todas aquellas personas que de una u otra forma, colaboraron o participaron en la realización de esta investigación, hago extensivo mi más sincero agradecimiento.

CARLOS

Encomienda a Jehová tu camino,
y confía en él; y él hará.
Salmos 37: 5

Dedicatoria

Esta tesis se la dedico a Dios por darme la vida, quién supo guiarme por el buen camino, darme fuerzas para seguir adelante y no desmayar en las dificultades que se me presentaron.

A mi familia, quienes con amor se dedicaron día a día para formarme y ser lo que soy.

Para mis padres Manuel y Rosa por su apoyo, consejos, comprensión, amor, ayuda en los momentos difíciles, y por ayudarme con los recursos necesarios para estudiar. Pues me han dado todo lo que soy como persona, mis valores, mis principios, mi carácter, mi empeño, mi perseverancia, mi coraje para conseguir mis objetivos y triunfar.

A mis queridos hermanos Lizet, Rosa y Eric por estar siempre presentes, acompañándome para poderme realizar. A mi señorita enamorada quien me cambio la vida.

IVAN

Esta tesis se la dedico a mi Dios quién supo guiarme por el buen camino, darme fuerzas para seguir adelante y no desmayar en los problemas que se presentaban, enseñándome a encarar las adversidades sin perder nunca la dignidad ni desfallecer en el intento.

A mi familia quienes por ellos soy lo que soy.

Para mi madre: Lucila Pérez Huamán por su apoyo, consejos, comprensión, amor, ayuda en los momentos difíciles, y por ayudarme con los recursos necesarios para estudiar. Me han dado todo lo que soy como persona, mis valores, mis principios, mi carácter, mi empeño, mi perseverancia, mi coraje para conseguir mis objetivos.

CARLOS

Resumen

En la Ingeniería Química se presentan muchos problemas donde para su solución es necesario utilizar ecuaciones no lineales. Este tipo de problemas representa en la actualidad uno de los temas básicos y necesarios dentro del Análisis Numérico.

El presente trabajo de investigación, está referido a la aplicación de ecuaciones no lineales en problemas aplicados en Ingeniería Química haciendo uso de una técnica numérica, al mismo tiempo se han resuelto problemas con el software matemático MATLAB R2010a.

Se introducen conceptos de química relacionados a los problemas a tratar, de igual manera se estudian los diferentes métodos iterativos en la solución de ecuaciones no lineales, justificando su eficiencia mediante su orden de convergencia o, en algunos casos, sobre la base de resultados numéricos de tal manera que se define con precisión los resultados obtenidos.

Se presenta también algunos problemas de Ingeniería Química donde intervienen directamente ecuaciones no lineales y que para hallar su solución es necesario recurrir a los métodos numéricos que se detallan en forma simple y precisa en el presente trabajo de investigación.

Estos resultados son asistidos y comprobados mediante el software matemático MATLAB R2010a.

Abstract

In Chemical Engineering many problems where it is necessary for solving nonlinear equations used are presented. Such problems now represents one of the basic and necessary issues within the Numerical Analysis.

This research work is based on the application of nonlinear equations applied in chemical engineering problems using a numerical technique, while problems have been solved with mathematical software MATLAB R2010a.

chemistry concepts related to the problems to be treated equally different iterative methods are studied in solving nonlinear equations, justifying its efficiency by its order of convergence or, in some cases, on the basis of numerical results are introduced so that the results obtained accurately defined.

some problems of Chemical Engineering where nonlinear equations directly involved and to find its solution is necessary to use numerical methods detailed in simply and precisely in this research work is also presented.

These results are assisted and tested by mathematical software MATLAB R2010a.

Introducción

En muchas áreas de las Matemáticas y la Ingeniería existen problemas de modelado y simulación de procesos que implican en algún momento resolver una ecuación no lineal. El problema de la resolución de ecuaciones no lineales figura entre los más importantes en la teoría y la práctica, no sólo de las matemáticas aplicadas, sino también de muchas ramas de las ciencias, la ingeniería, la física, la informática, la astronomía, las finanzas, etc.

En una situación práctica, un problema matemático no es más que la modelización de un fenómeno, en nuestro caso químico. Este modelo matemático es la imagen matemática del fenómeno de estudio y se representa mediante una gran variedad de ecuaciones: transcendentes, en derivadas ordinarias o en derivadas parciales, sujetos a condiciones iniciales o de frontera (o combinación de ambas), ecuaciones integrales o integro-diferenciales, todos ellos en dimensión finita o infinita, en su mayoría no lineales.

En los casos en los que no somos capaces de encontrar la solución analítica o ésta es muy costosa, optamos por obtener una aproximación de dicha solución mediante procesos numéricos que aproximan de manera eficiente y con suficiente precisión, las soluciones de problemas expresados matemáticamente. El modelo matemático implementado en algoritmos lógico-numéricos en un ordenador, permite estudiar las cualidades del proceso original uniendo las ventajas de la teoría y del experimento.

Al trabajar con un modelo matemático y no con el fenómeno de estudio, se pueden estudiar y pronosticar sus propiedades de estado (ventaja teórica) en forma relativamente rápida y a bajo costo. Al mismo tiempo los algoritmos numéricos permiten, apoyándose en la potencia de cálculo de los ordenadores, verificar las cualidades del fenómeno de estudio en una forma no accesible para los enfoques teóricos (ventaja del experimento). En el campo de ecuaciones lineales se ha llevado a cabo una intensa labor investigadora, siendo considerable el volumen de publicaciones sobre este tema que se han generado en los últimos años. Sin embargo el número de publicaciones para la solución de ecuaciones no lineales es menor y más aún si está relacionado a su aplicación en la Ingeniería Química.

La metodología empleada en el presente trabajo consiste básicamente en detallar la teoría referente a la parte matemática y química, para después hacer la resolución práctica en algunos ejemplos y problemas planteados para facilitar la comprensión de lo estudiado anteriormente, de tal forma que se desarrolle en forma clara y precisa la aplicación de ecuaciones no lineales en Ingeniería Química. Además se utiliza el software matemático MATLAB R2010a para hallar sus resultados en forma rápida y precisa.

La tesis se divide en tres capítulos:

En el primer capítulo se presenta las definiciones básicas relacionadas a la química y en especial a las ecuaciones de Van Der Waals, Colbrook-White, Destilación Simple, Redlich-Kwong y se hace referencia también al Equilibrio Químico. También se da a conocer una introducción al software matemático MATLAB R2010a. En el segundo capítulo se estudia las ecuaciones no lineales y sus diferentes métodos de desarrollo: Bisección, Punto fijo, Newton-Raphson y el de Falsa Posición o Regula Falsa. Se presenta el desarrollo de algunos ejercicios donde se aplican estos métodos y además se comprueban con el software MATLAB R2010a.

En el tercer capítulo se detallan algunas aplicaciones químicas utilizando ecuaciones no lineales y su desarrollo utilizando los métodos numéricos analizados en el capítulo anterior, asistidos y comprobados con el software matemático MATLAB R2010a.

Se incluyen en la tesis las principales conclusiones y recomendaciones que se derivan de la investigación, también se presentan los programas en MATLAB R2010a utilizados, así como la bibliografía consultada en el ámbito nacional e internacional.

Índice general

Capítulo 1:

Preliminares

1.1 Ecuación de Van der Waals

En un gas ideal las moléculas no interaccionan entre sí excepto por colisiones elásticas, y se puede tratar como masas puntuales. La ecuación de estado de un gas ideal es:

$$PV = nRT \tag{1.1}$$

Donde:

P: Es la presión del gas.

V: Es el volumen.

T: Es la temperatura.

n: Es el número de moles.

R: $0.08205746 \, \dfrac{\mathrm{L.atm}}{K.mol}$ La constante de los gases.

La ecuación de van der Waals es una modificación de la ecuación de estado de un gas ideal en la que se tiene en cuenta tanto el volumen de las moléculas como las interacciones entre ellas.

1. Ecuación para un mol tiene la forma:

$$\left(P + \frac{A}{V^2}\right)(V - B) = RT \tag{1.2}$$

Donde:

P: Presión (atm)

V: Volumen específico (l)

T: Temperatura (K)

A: Modifica la interacción de **"fuerza de atracción"** entre moléculas $\left(\frac{l^2 atm}{mol^2}\right)$

B: Ajuste al **"efecto repulsivo"** entre moléculas $\left(\frac{l}{mol}\right)$

R: Constante de los gases $\left(\frac{l\ atm}{mol\ K}\right)$

Despejes de la ecuación de Van Der Waals con respecto al volumen utilizando los diferentes métodos iterativos de aproimación:

a) **Método de bisección:**

$$(PV^2 + A)(V - B) - RTV^2 = 0 \tag{1.3}$$

b) **Método de punto fijo:**

$$V = \frac{RT}{\left(P + \frac{A}{V^2}\right)} + B \tag{1.4}$$

Se debe tener en cuenta que no siempre convergerá, depende de como se despeje el volumen

c) **Método de Newton Raphson:**

$$\left(P + \frac{A}{V^2}\right)(V - B) - RT = 0 \tag{1.5}$$

d) **Método de falsa posición:**

$$(PV^2 + A)(V - B) - RTV^2 = 0 \tag{1.6}$$

2. Ecuación Para n moles tomará la forma

$$\left(P + \frac{An^2}{V^2}\right)(V - nB) = nRT \tag{1.7}$$

Donde n : Número de moles

1.2 Ecuación de Colebrook-White

Esta ecuación es una de las más precisas para el cálculo del factor de fricción y en un rango más amplio, pero tiene la desventaja de su complejidad al ser una función implícita. Debe resolverse de forma iterativa hasta alcanzar una cota de error aceptable, con el coste computacional y tiempo que ello conlleva. Fue propuesta por Colebrook y White en 1939 y es la más utilizada por ser la más precisa y universal.

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2ln\Big[\frac{\varepsilon/D}{3.7} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}}\Big] \tag{1.8}$$

Donde:

f: Factor de fricción.

Re: Es el número de Reynols (adimensional).

ε: Es la aspereza o rugosidad de la tubería (unidad de longitud).

D: Es el diámetro de la tubería (unidad de longitud).

Desarrollo algebraico de la ecuación (1.8)

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{f}} &= -2ln\Big[\frac{\varepsilon/D}{3.7} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}}\Big] \\
-\frac{1}{2\sqrt{f}} &= ln\Big[\frac{\varepsilon/D}{3.7} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}}\Big] \\
e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} &= e^{ln\left[\frac{\varepsilon/D}{3.7} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}}\right]} \\
e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} &= \frac{\varepsilon/D}{3.7} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}} \qquad (\div 2.51) \\
\frac{e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{2.51} &= \frac{\varepsilon}{(3.7)(2.51)\mathrm{D}} + \frac{1}{Re\sqrt{f}} \quad (\times Re\sqrt{f})
\end{aligned}$$

$$\frac{Re\,\sqrt{f}\;e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{2.51} = \frac{Re\,\varepsilon\,\sqrt{f}}{(3.7)(2.51)\mathrm{D}} + 1$$

$$\Longrightarrow R(f) = \frac{Re\,\sqrt{f}\;e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{2.51} - \frac{Re\,\varepsilon\,\sqrt{f}}{(3.7)(2.51)\mathrm{D}} - 1 = 0 \qquad (1.9)$$

Número de Reynolds

El régimen de flujo depende de tres parámetros físicos que describen las condiciones del flujo. El primer parámetro es una escala de longitud del campo de flujo, como el espesor de una capa límite o el diámetro de una tubería. Si dicha escala de longitud es lo bastantemente grande, una perturbación del flujo podría aumentar y el flujo podría volverse turbulento. El segundo parámetro es una escala de velocidad tal como un promedio espacial de la velocidad; si la velocidad es lo bastante grande el flujo podría ser turbulento. El tercer parámetro es la viscosidad cinemática; si la viscosidad es lo bastante pequeña, el flujo puede ser turbulento.

Estos tres parámetros se combinan en un solo parámetro conocido como el número de Reynolds (Re), con el cual se puede predecir el régimen de flujo, si Re $>$ 4000 el flujo será turbulento.

1.3 Ecuación de Destilación Simple

Destilación Simple:

Se usa para la separación de líquidos con punto de ebullición inferiores a 150^o a presión atmosférica de impurezas no volátiles o de otros líquidos miscibles que presenten un punto de ebullición al menos 25^o superior al primero de ellos. Esta es la primera en desarrollarse y como se puede observar es bastante sencilla de realizar, ver Figura (1.1)

La ecuación matemática está dada por:

$$\frac{Fx_F}{Wx_W} = \left[\frac{F(1-x_F)}{W(1-x_W)}\right]^{\alpha} \qquad (1.10)$$

Donde:

F	: Moles de la carga inicial.
W	: Moles de la carga final o residuo.
D	: Moles de destilado.
α	: Volatilidad relativa.
x_F	: Fracción molar del componente más volátil en la carga.
x_W	: Fracción molar del componente más volátil en el residuo.
$\overline{y}_D$	: Fracción molar promedio del componente más volátil en el destilado.

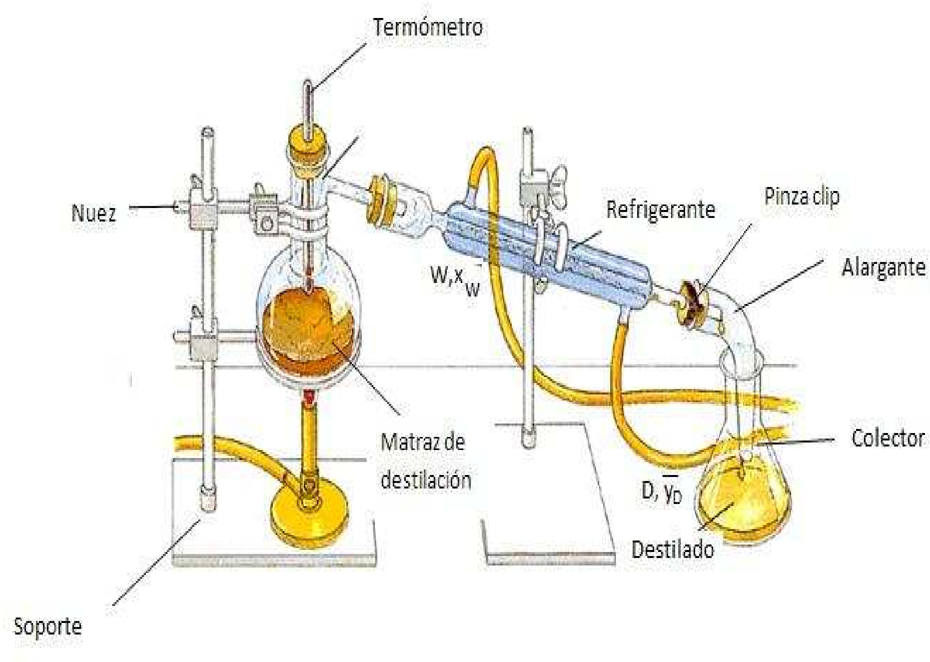


Figura 1.1: Esquema de una destilación simple

1.4 Ecuación de Redlich-Kwong

Introducida en 1949, la ecuación de Redlich-Kwong fue una mejora considerable sobre las otras ecuaciones de la época.

- Redlich-Kwong modificaron el término de atracción $\frac{a}{V^2}$, en la ecuación de Van der Waals.

- Aunque es mejor que la ecuación de Van der Waals, no da buenos resultados sobre la fase líquida y por ello no puede usarse para calcular precisamente los equilibrios líquido-vapor. Sin embargo, puede usarse conjuntamente con expresiones concretas para la fase líquida en tal caso.

- Es adecuada para calcular las propiedades de la fase gaseosa cuando el cociente entre la presión y la presión crítica es menor que la mitad del cociente entre la temperatura y la temperatura crítica osea.

$$\frac{P}{P_c} < \frac{T}{2T_c}$$

La ecuación del modelo es:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{\sqrt{T}V(V+b)} \tag{1.11}$$

Donde:

P: Es la presión del gas.

R: 0.08205746 $\frac{\text{L.atm}}{K.mol}$ Es la constante de los gases.

T: Es Temperatura.

V: Es el Volumen Molar.

a: Es la constante que corrige la atracción potencial de las moléculas.

b: Es la constante que corrige para el volumen.

Las constantes son diferentes dependiendo del gas que se esté analizando. Las constantes pueden obtener calculándose a partir de los datos del punto crítico del gas.

Las constantes están dadas por:

$$a = 0.42748 \frac{R^2 T_c^{\frac{5}{2}}}{P_c} \tag{1.12}$$

$$b = 0.08664 \frac{R T_c}{P_c} \tag{1.13}$$

Donde:

T_c: Es la temperatura en el punto crítico.

P_c: Es la presión en el punto crítico.

Realizando operaciones algebraicas de la ecuación (1.11) se obtiene:

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

$$P(V-b)\sqrt{T}V(V+b) = RT\sqrt{T}V(V+b) - a(V-b)$$

$$P\sqrt{T}V^3 + \cancel{P\sqrt{T}bV^2} - \cancel{P\sqrt{T}V^2} - P\sqrt{T}b^2V = RT\sqrt{T}V^2 + RT\sqrt{T}bV - aV + ab$$

$$P\sqrt{T}V^3 - P\sqrt{T}b^2V - RT\sqrt{T}V^2 - RT\sqrt{T}bV + aV - ab = 0 \qquad \div P\sqrt{T}$$

$$V^3 - b^2V - \frac{RT}{P}V^2 - \frac{RTb}{P}V + \frac{aV}{P\sqrt{T}} - \frac{ab}{P\sqrt{T}} = 0$$

$$V^3 - \frac{RT}{P}V^2 + \left(\frac{a}{P\sqrt{T}} - \frac{RTb}{P} - b^2\right)V - \frac{ab}{P\sqrt{T}} = 0$$

Haciendo

$$A = \frac{RT}{P}, \qquad B = \frac{a}{P\sqrt{T}} - \frac{RTb}{P} - b^2, \qquad C = \frac{ab}{P\sqrt{T}} \tag{1.14}$$

Luego la ecuación queda reducida a:

$$\Longrightarrow V^3 - AV^2 + BV - C = 0 \tag{1.15}$$

1.5 Equilibrio Químico

1. **Concepto de equilibrio químico:**

Las reacciones químicas no tienen lugar siempre a la misma velocidad, ni se alcanza siempre una transformación completa de los reactivos en productos.
Si por ejemplo analizamos como tiene lugar una reacción entre gases:

$$aA + bB \longrightarrow cC + dD$$

en la que inicialmente sólo tenemos reactivos **A** y **B**, veremos que inicialmente las moléculas de **A** y de **B** son muy numerosas y chocan entre sí rompiéndose los enlaces que la forman, liberando sus átomos y formando nuevos enlaces entre ellos, dando lugar a las sustancias producto **C** y **D**, produciéndose la reacción directa, tal como está escrita. A medida que la reacción va progresando, puede suceder también, que las especies **C** y **D** reaccionen entre sí para dar lugar a las especies iniciales **A** y **B**, es decir, que se produce la reacción inversa.
Esta reacción inversa es muy lenta al principio, pero a medida que transcurre el proceso y va aumentando el número de moléculas de **C** y **D**, la probabilidad de colisión entre estas es mayor y por tanto aumentará la velocidad de la reacción inversa.

Por lo tanto llega un momento en que las velocidades de reacción en ambos sentidos se igualan y a partir de este momento la reacción aparentemente "se para". El número de moléculas de cualquier especie permanece constante (ya que se crean las mismas moléculas que las que se destruyen) y por lo tanto también permanece constante la concentración de las mismas. Se dice entonces que la reacción ha alcanzado un estado de **equilibrio químico.**

Es importante resaltar que el equilibrio químico no es algo estático, sino que es esencialmente dinámico, puesto que las reacciones directa y opuesta siguen produciéndose indefinidamente y simultáneamente con igual velocidad neta mientras no se altere el estado de equilibrio.

El estado de equilibrio se simboliza mediante una doble flecha colocada entre los reactivos y productos en la ecuación estequiométrica:

$$aA + bB \Leftrightarrow cC + dD \tag{1.16}$$

2. **Ley de Acción de Masas (L.A.M):**

   Uno de los factores que influyen en la velocidad de una reacción química es la concentración de las especies reaccionantes.

   Consideremos la reacción: $aA + bB \Leftrightarrow cC + dD$, en fase gaseosa y en equilibrio. Sean **A, B, C,** y **D**, las concentraciones molares de las especies en el equilibrio. La velocidad de la reacción directa (hacia la derecha), vendrá dada por:

$$v_1 = k_1(A)^a(B)^b \tag{1.17}$$

   mientras que la velocidad de la reacción inversa será:

$$v_2 = k_2(C)^c(D)^d \tag{1.18}$$

   donde k_1 y k_2 son las constantes cinéticas de velocidad, que dependen de la temperatura, y el tipo de catalizador empleado.

   Si la reacción se encuentra en equilibrio químico, $v_1 = v_2$, de las ecuaciones (1.17) y (1.18), debe cumplirse que:

$$k_1(A)^a(B)^b = k_2(C)^c(D)^d$$

   Agrupando en un lado del igual las constantes de velocidad de los procesos directo e inverso, y en el otro lado los productos de las concentraciones en el equilibrio, nos queda que:

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{(C)^c(D)^d}{(A)^a(B)^b}$$

Para cada temperatura el cociente $\frac{k_1}{k_2}$ es constante, y define una nueva magnitud llamada **constante de equilibrio K_p de la reacción**, de modo que de la ecuación anterior se define como:

$$K_p = \frac{(C)^c(D)^d}{(A)^a(B)^b} \tag{1.19}$$

Esta expresión matemática se conoce como la ley de acción de masas.

El valor de K_p es independiente de las concentraciones iniciales de reactivos y productos y **sólo depende de la temperatura**. Si la temperatura cambia, también lo hará el valor de la constante de equilibro.

La ley de acción de masas (o también llamada ley del equilibrio químico) sólo se cumple exactamente para disoluciones diluidas o para gases a bajas presiones.

- Si $K_p > 1$, el equilibrio está desplazado hacia la formación de los productos (hacia la derecha), y la transformación de reactivos en productos será tanto más grande cuanto mayor sea el valor de K_p. Si K_p es muy grande, del orden de 10^5 o mayor, cuando se alcance el equilibrio, a partir de los reactivos iniciales, se habrá producido una conversión casi completa de los reactivos en los productos de la reacción.
- Si $K_p < 1$, el equilibrio está desplazado hacia los reactivos (hacia la izquierda), y la transformación de reactivos en productos será tanto más pequeña cuanto menor sea el valor de K_p. Si K_p es muy pequeña, del orden de 10^{-5} o menor, cuando se alcance el equilibrio, únicamente se habrán transformado en productos una fracción muy pequeña de los reactivos presentes inicialmente.
- Si K_p**=1**, el equilibrio no está desplazado en ningún sentido. Para valores de la constante de equilibrio K_p comprendidos entre estos extremos, especialmente si $0.01 < K_p < 100$, los reactivos y los productos se encontrarán en el equilibrio en proporciones comparables, aunque esto depende en gran medida de la estequiometría de la reacción.

3. **Otra forma de expresar la constante de equilibrio:**

   También es frecuente expresar la constante de equilibrio en términos de **fracciones molares**, cuando se conoce la **presión total del sistema.**

$$K_p = \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} = K_x P^{\Delta n} \tag{1.20}$$

   Siendo $\Delta n = c + d - a - b$ es el **incremento en el número de moles gaseosos** de la reacción, $\mathbf{K}_x$ la **constante de equilibrio en términos de fracciones molares**, y **P la presión total** de la mezcla gaseosa en el equilibrio.

   Si alguna de las sustancias que intervienen en el equilibrio es un sólido o un líquido, sus presiones de vapor son prácticamente despreciables frente a la presión de vapor de las sustancias gaseosas, y además su valor prácticamente permanece constante, por lo que el término de presión parcial correspondiente a las mismas se incluye en el valor de la constante de equilibrio y es por eso que no figura en el cociente de la L.A.M.

1.6 Software Matemático MATLAB R2010a

MATLAB R2010a (MATrix LABoratory) es un entorno integrado de computación orientado hacia la resolución de problemas científicos y de ingeniería. MATLAB R2010a integra en un solo paquete cálculo (numérico y simbólico), visualización gráfica y programación.

Algunas características notables de MATLAB R2010a son:

- La programación es más sencilla.
- No hay distinción entre números enteros, reales y complejos.
- La amplitud de intervalo y la exactitud de los números son mayores.

- Cuenta con una biblioteca matemática amplia.
- Abundantes herramientas gráficas.
- Capacidad de vincularse con los lenguajes de programación tradicionales, tales como FORTRAN, C/ C++, Visual Basic, etc.
- Transportabilidad de los programas MATLAB R2010a.

Además, el entorno básico de MATLAB R2010a se complementa con una amplia colección de cajas de herramientas (toolboxes) que contienen funciones específicas para determinadas aplicaciones en diferentes ramas de las ciencias y la ingeniería (por ejemplo: modelado, simulación y optimización de sistemas, control de procesos, adquisición de datos, estadística y control de calidad, etc.)
Estas características han hecho de MATLAB R2010a una herramienta muy efectiva para la educación y la investigación.

1.6.1 Ejecutando MATLAB R2010a

Si ya tiene instalado MATLAB R2010a, para ejecutarlo proceda igual que con cualquier otra aplicación WINDOWS, hacer doble clic sobre el icono correspondiente. En seguida se presentará la ventana de comandos, similar a la figura (1.2):

El símbolo » nos indica que MATLAB R2010a está esperando que introduzcamos datos o alguna instrucción (comando). Una vez que se escribe la orden deseada, hay que pulsar la tecla de retorno, entonces el programa realiza la operación indicada y muestra la respuesta (ans=). En las guías de uso y de referencia (PDF) que acompañan al programa, así como en la ayuda (HELP) del programa pueden consultarse información adicional sobre las instrucciones y el uso de MATLAB R2010a.

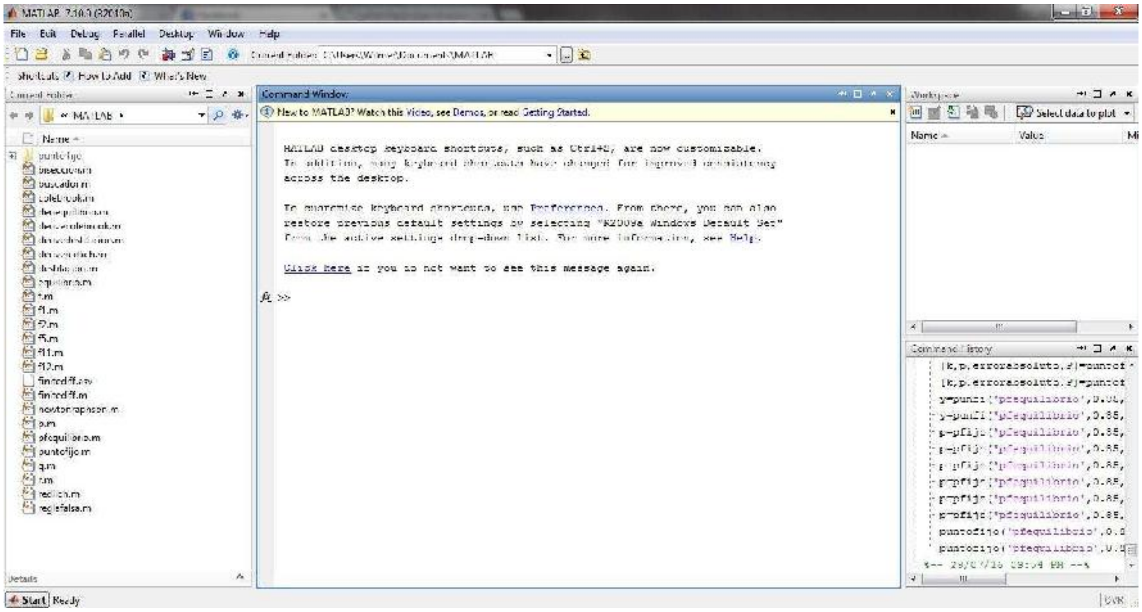


Figura 1.2: Ventana de comandos de MATLAB

1.6.2 Operadores en MATLAB R2010a

Operadores aritméticos

A + B	Adición
A - B	Sustracción
A * B	Multiplicación
A’	Transpuesta
A^B	Potenciación
A / B	División-derecha
A \B	División-izquierda
A.*B	Producto elemento a elemento
A./B y A.\ B	División elemento a elemento
A.^{B}	Elevar a una potencia elemento a elemento

Funciones Trigonométricas

Función	Inversa
sin(x)	asin(x)
cos(x)	acos(x)
tan(x)	atan(x), atan2(x)
cot(x)	acot(x)
sec(x)	asec(x)
csc(x)	acsc(x)

Funciones Hiperbólicas

Función	Inversa
sinh(x)	asinh(x)
cosh(x)	acosh(x)
tanh(x)	atanh(x)
coth(x)	acoth(x)
sech(x)	asech(x)
csch(x)	acsch(x)

Funciones exponenciales y logarítmicas

exp(x)	Función exponencial en base e
log(x)	Función logarítmica en base e de x
log10(x)	Función logarítmica en base 10 de x
log2(x)	Función logarítmica en base 2 de x
pow2(x)	Función potencial en base 2 de x
sqrt(x)	Función raíz cuadrada de x

1.7 Graficación

El comando plot gráfica el conjunto de puntos (x,y) sobre el plano euclidiano (2D). Su sintaxis es:

≫ plot(X, Y, S)

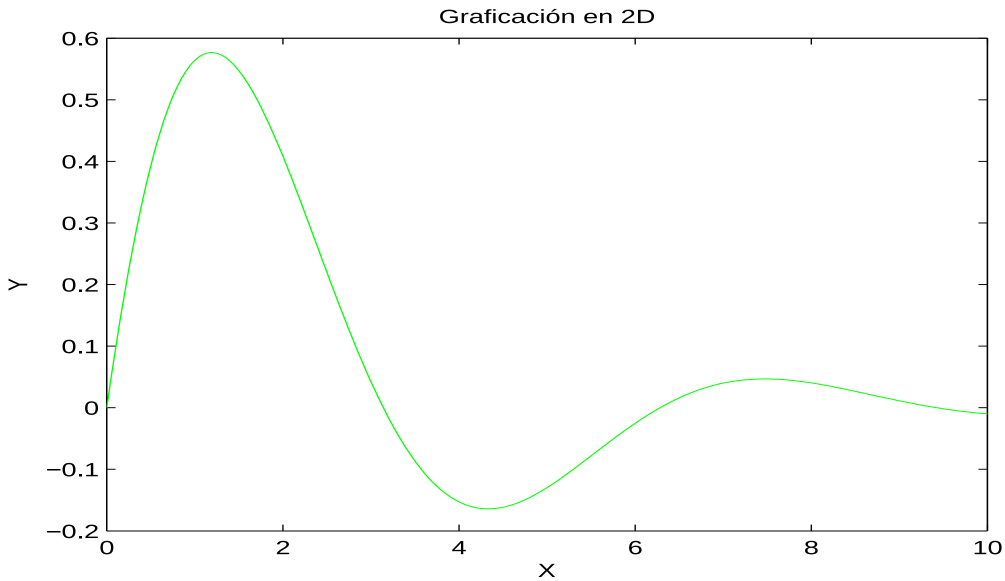
Donde X e Y son vectores fila que representan a las abscisas y las ordenadas, respectivamente. S es una cadena que indica el tipo de línea y/o carácter a usar en el ploteo y el color de la curva. Su formato es:

S = [TIPO DE LÍNEA][MARCA][COLOR]

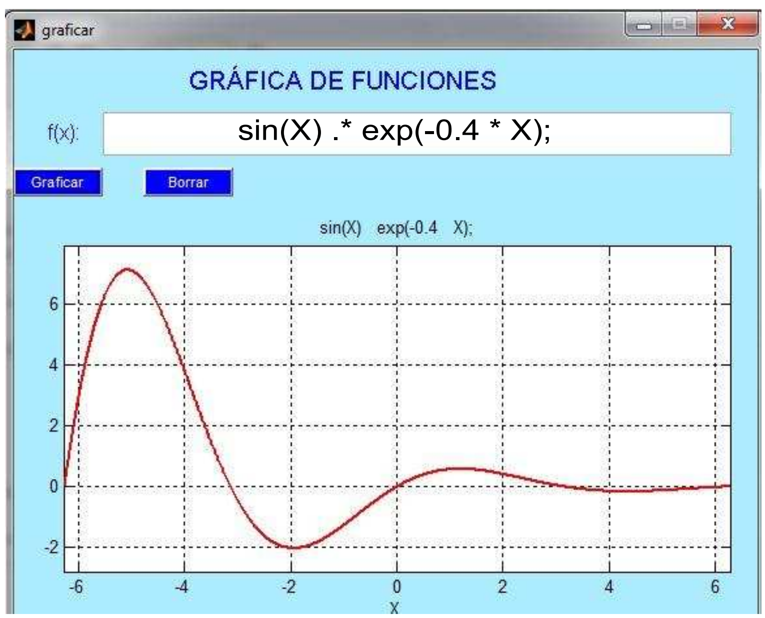
Tipos de línea		**Tipo de marca**		**Color de línea**	
Continua	-	Punto	.	Rojo	r
Guiones	—	Cruz	+	Amarillo	y
Punteada	:	Asterísco	*	Verde	g
Guiones y puntos	-.	Circulo	°	Azul	b
		Aspa	x	Magenta	m
				Cian	c
				Negro	k
				Blanco	w

Ejemplo

```
>>X = [0: 0.05: 10];
>>Y = sin(X) .* exp(-0.4 * X);
>>plot(X, Y, 'g');
>>xlabel('X');
>>ylabel('Y');
>>title('Graficación en 2D');
```



Graficando mediante una interfaz gráfica



Capítulo 2:

Métodos iterativos de aproximación para ecuaciones no lineales

Los métodos numéricos de resolución de ecuaciones no lineales suelen ser métodos iterativos que producen una sucesión de valores aproximados de la solución, que se espera, que converja a la raíz de la ecuación. Estos métodos van calculando las sucesivas aproximaciones en base a los anteriores, a partir de una o varias aproximaciones iniciales. Para saber que método debemos aplicar, hay que tener en cuenta la capacidad de separar raíces cercanas, confiabilidad en el alcance de soluciones evitando errores numéricos graves y orden de convergencia.

Uno de los problemas que con mayor frecuencia aparece en la ciencia y en la ingeniería química es hallar las raíces de una ecuación no lineal de la forma $f(x) = 0$. Estudiaremos Métodos Iterativos para determinar aproximaciones a raíces reales simples de la ecuación no lineal $f(x) = 0$.

2.1 Método de Bisección

Teorema 2.1. ***(Teorema de Bolzano)***

Sea $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *una función continua en* $[a, b]$ *tal que* $f(a).f(b) < 0$*, es decir,* *que tiene distinto signo en a y en b. Entonces, existe $c \in (a,b)$ tal que $f(c) = 0$*

Demostración.

Dividimos $[a,b]$ por la mitad. Si en el punto medio f vale 0, hemos concluido.

Si no, elegimos el semiintervalo $[a_1, b_1]$ en cuyos extremos f tiene distinto signo.

Lo dividimos de nuevo ... Repitiendo la operación, obtenemos una sucesión de intervalos encajados $[a_n, b_n]$, de longitud $\dfrac{(b-a)}{2^n}$, que define un punto c en el que la función es nula. De lo contrario, al ser f continua, $\lim_{x \longrightarrow c} f(x) = f(c) \neq 0$ y existirá un entorno de c en el que f toma el signo del límite.

Pero en todo entorno de c existen puntos en que f es mayor que 0 y puntos en los que es menor. Entonces, por reducción al absurdo, $f(c) = 0$. $\square$

Teorema 2.2. ***(Teorema de Valor Intermedio)***

Sea $f : [a,b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ continua en $[a,b]$, y tal que $f(a) < f(b)$ entonces, para cualquier k tal que $f(a) < k < f(b)$ existe $x_0 \in (a,b)$ tal que $f(x_0) = k$

Demostración.

Definimos $g(x) = f(x) - k$, que cumple $g(a) < 0$ y $g(b) > 0$. Entonces, por el teorema de Bolzano, $\exists x_0 \in (a,b)/g(x_0) = f(x_0) - k = 0 \Longrightarrow f(x_0) = k$ $\square$

Pasos para hallar el método de bisección

Se pretende resolver la ecuación $f(x) = 0$, en un intervalo $[a,b]$ del que se sabe que $f(a).f(b) < 0$

1. Hacer $f(x) = 0$.

2. Determinar el intervalo de confianza, que se encuentra ubicado en los $f(x)$, donde hay cambio de positivo a negativo o viceversa.

3. Elegir los valores iniciales a, b tales que $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos, es decir,

$$f(a).f(b) < 0$$

4. La primera aproximación a la raíz se toma igual al punto medio entre a y b

$$c = \frac{a+b}{2}$$

5. Evaluar $f(c)$, para determinar en qué subintervalo está la raíz:

   a) Si $f(a).f(c) < 0$, entonces la raíz se encuentra dentro del subintervalo inferior o izquierdo. Por lo tanto, haga $b = c$ y vuelva al paso 3.

   b) Si $f(a).f(c) > 0$, entonces la raíz se encuentra dentro del subintervalo superior o derecho. Por lo tanto, haga $a = c$ y vuelva al paso 3.

   c) Si $f(a).f(c) = 0$, la raíz es igual a c, termina el cálculo.

Criterios de paro y estimaciones de errores.

El proceso se vuelve a repetir con el nuevo intervalo, hasta que

$$|\varepsilon_n| < \varepsilon$$

es decir,

$$|\frac{c_{actual} - c_{previa}}{c_{actual}} \times 100\,\%| < \varepsilon$$

Si la tolerancia de error está dada por ε, el número de pasos de iteración necesarios es el mínimo entero que satisface

$$\frac{b-a}{2^n} < \varepsilon$$

Teorema 2.3. *Supongamos que $f \in C[a,b]$ y $f(a).f(b) < 0$. El método de bisección generan una sucesión $\{c_n\}$ que se aproxima a un cero de c de f, tal que*

$$|c_n - c| < \frac{b-a}{2^n}, \qquad n \geq 1$$

Demostración.

Para $n \geq 1$, tenemos

$$b_n - a_n = \frac{1}{2^{n-1}}(b-a) \qquad y \qquad c \in (a_n, b_n)$$

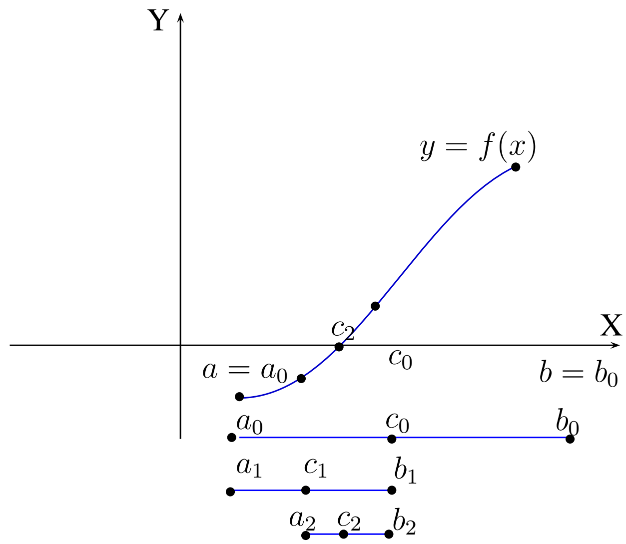


Figura 2.1: Interpretación geométrica del método de bisección

Y como $c_n = \dfrac{1}{2}(a_n + b_n)$ para toda $n \geq 1$, se deduce que

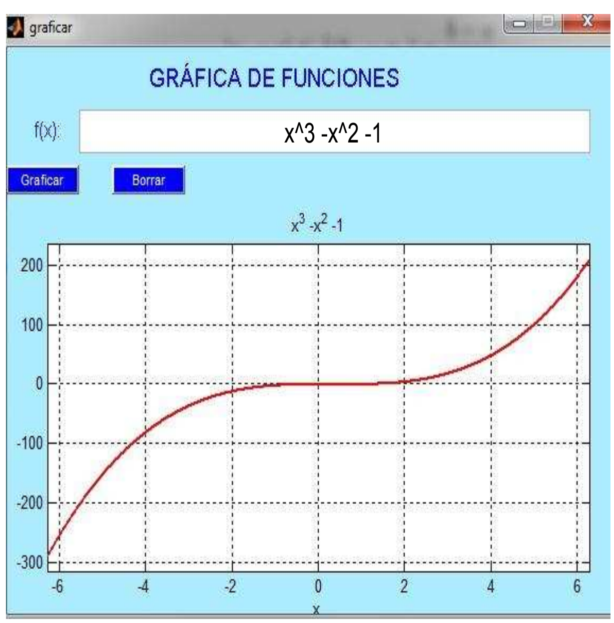
$$|c_n - c| \leq \tfrac{1}{2}(b_n - a_n) = \frac{b-a}{2^n}$$

■

Ejemplo 2.1. Determinar la raíz de la ecuación $x^3 - x^2 = 1$

Solución.

1. $x^3 - x^2 - 1 = 0$



2. Determinar el intervalo de confianza:

x	$\cdots$	-3	-2	-1	0	1	2	3	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	-37	-13	-3	-1	-1	3	17	$\cdots$

3. Los valores iniciales son $a = 1$, $b = 2$ tales que $f(1) = -1 < 0$ y $f(2) = 3 > 0$ tienen signos opuestos, es decir:

$$f(1).f(2) = (-1)(3) = -3 < 0$$

4. La primera aproximación es:

$$c_0 = \frac{1+2}{2} = 1.5 \quad \text{y} \quad f(1.5) = 0.125$$

$$c_1 = \frac{1+1.5}{2} = 1.25 \quad \text{y} \quad f(1.25) = \text{-}0.609375$$

Hallando el **criterio de parada** o el primer valor del error en %:

$$\left|\frac{1.25\text{-}1.5}{1.25} \times 100\,\%\right| = 20\,\%$$

iter	a	b	c	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	1	2	1.5	(-)	(+)	(-)	—
1	1	1.5	1.25	(-)	(-)	(+)	20 %
2	1.25	1.5	1.375	(-)	(-)	(+)	9.09 %
3	1.375	1.5	1.4375	(-)	(-)	(+)	4.35 %
4	1.4375	1.5	1.46875	(-)	(+)	(-)	2.13 %
5	1.4375	1.46875	1.453125	(-)	(-)	(+)	1.08 %
6	1.453125	1.46875	1.4609375	(-)	(-)	(+)	0.53 %
7	1.4609375	1.46875	1.46484375	(-)	(-)	(+)	0.27 %
8	1.46484375	1.46875	1.466796875	(-)	(+)	(-)	0.13 %
9	1.46484375	1.466796875	1.4658203125	(-)	(+)	(-)	0.07 %
10	1.46484375	1.4658203125	1.46533203125	(-)	(+)	(-)	0.03 %

5. La raíz obtenida es: 1.46533203125.

Utilizando el Software MATLAB R2010a

1. >> format long

2. >> v=biseccion('$x.\hat{}3 - x.\hat{}2 - 1$',1,2,0.001,11)

   El método tuvo éxito después de 10 iteraciones

   Resultados obtenidos:

   v=

i	a_i	b_i	c_i	$f(c_i)/n$
0	1	2	1.50000000000000	0.125000000000000
1	1	1.50000000000000	1.25000000000000	-0.609375000000000
2	1.25000000000000	1.50000000000000	1.37500000000000	-0.291015625000000
3	1.37500000000000	1.50000000000000	1.43750000000000	-0.959472656250000
4	1.43750000000000	1.50000000000000	1.46875000000000	0.0111999511718750
5	1.43750000000000	1.46875000000000	1.45312500000000	-0.0431938171386719
6	1.45312500000000	1.46875000000000	1.46093750000000	-0.0162034034729004
7	1.46093750000000	1.46875000000000	1.46484375000000	-0.00255352258682251
8	1.46484375000000	1.46875000000000	1.46679687500000	0.00431024283170700
9	1.46484375000000	1.46679687500000	1.46582031250000	0.000875120051205158
10	1.46484375000000	1.46582031250000	1.46533203125000	-0.000840010936371982

3. La raíz obtenida es: 1.46533203125000

2.2 Método del Punto Fijo

Definición 2.1. Sea $x \in [a, b]$ y una función $g(x) : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$, x es un punto fijo de $g(x)$, si

$$g(x) = x$$

Teorema 2.4.

1. *Si $f(x)$ es una función continua sobre $[a, b]$ y $f(x) \in [a, b]$, $\forall x \in [a, b]$, entonces f tiene un punto fijo en $[a, b]$.*

2. *Y si además $f'(x)$ existe en $\langle a,b\rangle$ y existe una constante positiva $k<1$ con*

$$|f'(x)| \leq k, \ \forall x \in \langle a,b\rangle,$$

entonces el punto fijo en $[a,b]$ es único.

Demostración.

1. Si $f(a)=a$ o si $f(b)=b$, entonces f tendrá un punto fijo en un extremo. Supongamos que no es así; entonces deberá ser cierto que $f(a)>a$ y que $f(b)<b$. La función $h(x)=f(x)-x$ es continua en $[a,b]$ y tenemos

$$h(a)=f(a)-a>0 \qquad y \qquad h(b)=f(b)-b<0.$$

El teorema del valor intermedio establece que existe un $c \in \langle a,b\rangle$ para la cual $h(c)=0$.

Ese número c es un punto fijo de g.

$$0=h(c)=f(c)-c \Rightarrow \quad f(c)=c.$$

2. Suponga además que $|f'(x)| \leq k < 1$ y que c y d son puntos fijos en $[a,b]$ tal que $c \neq d$. Según el teorema del valor medio, existe un número ξ entre c y d, por tanto, en $[a,b]$ tal que

$$\frac{f(c)-f(d)}{c-d}=f'(\xi).$$

Por tanto,

$$|c-d|=|f(c)-f(d)|=|f'(\xi)||c-d| \leq k|c-d|<|c-d|,$$

lo cual es una contradicción. Esta contradicción se debe solamente a la suposición, $c \neq d$. Por tanto, $c=d$ y el punto fijo en $[a,b]$ es único. ■

Definición 2.2. La iteración $g(x_k)=x_{k+1}$, $k \geq 0$, se define como la iteración de punto fijo.

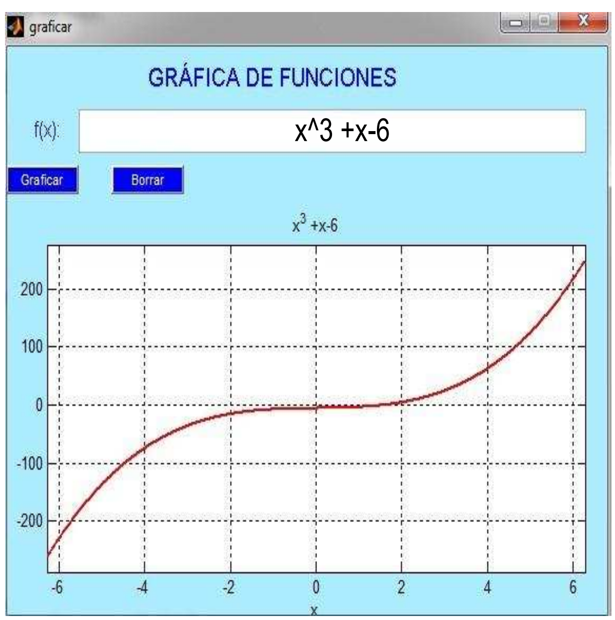
Pasos para hallar el método del punto fijo

1. Hacer $f(x) = 0$.
2. Determinar el intervalo de confianza, que se encuentra ubicado en los $f(x)$, donde hay cambio de positivo a negativo o viceversa.
3. Hallar el punto medio, sumar el intervalo de confianza y dividirlo entre dos.
4. Hallar los posibles despejes de x y derivarlos.
5. Reemplazamos el punto medio del intervalo de confianza aquel que cumpla con el **criterio de convergencia** osea $|g'(x_0)| \leq 1$, será apto para iterar.
6. Iterar con el despeje apto.
7. Obtener la raíz.

Ejemplo 2.2. Determine la raíz de la ecuación $x^3 + x = 6$

Solución.

1. $f(x) = x^3 + x - 6 = 0$



2. Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	-3	-2	-1	0	1	2	3	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	-36	-16	-8	-6	-4	4	24	$\cdots$

3. $x_0 = \frac{1+2}{2}$ =1.5

4. Hallar los posibles despejes:

$$\begin{aligned} \text{a) } x^3 + x - 6 &= 0 \\ x^3 &= 6 - x \\ x &= \sqrt[3]{6-x} \\ \Rightarrow g_1(x) &= \sqrt[3]{6-x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{b) } x^3 + x - 6 &= 0 \\ x &= 6 - x^3 \\ \Rightarrow g_2(x) &= 6 - x^3 \end{aligned}$$

Derivando ambas funciones se obtiene:

$$g_1'(x) = -\frac{1}{3\sqrt[3]{(6-x)^2}} \qquad \text{y} \qquad g_2'(x) = -3x^2$$

5. Reemplazamos el punto medio del intervalo de confianza aquel que cumpla con el **criterio de convergencia** osea $|g'(x_0)| \leq 1$, será apto para iterar.

$$|g_1'(x)| = \left|-\frac{1}{3\sqrt[3]{(6-1.5)^2}}\right| = |-0{,}122293601| = 0{,}122293601 < 1, \quad \text{apto para iterar}$$

$$|g_2'(x)| = |-3(1.5)^2| = |-6.75| = 6.75 > 1, \quad \text{no apto para iterar}$$

6. Iterar el despeje apto:

$g_1(x_i) = \sqrt[3]{6 - x_i}$

i	x_i	$g_1(x_i) = x_{i+1}$	$\lvert g_1(x_i) - g_1(x_{i-1})\rvert$
0	x_0 =1.5	$g_1(x_0)$ =1.650963624	0
1	x_1 =1.650963624	$g_1(x_1)$ =1.632291353	0.18672271
2	x_2 =1.632291353	$g_1(x_2)$ =1.634624059	0.002332706

3	x_3 =1.634624059	$g_1(x_3)$ =1.634333001	0.000291058
4	x_4 =1.634333001	$g_1(x_4)$ =1.634369323	0.000036322
5	x_5 =1.634369323	$g_1(x_5)$ =1.634364790	0.000004533
6	x_6 =1.634364790	$g_1(x_6)$ =1.634365356	0.000000566
7	x_7 =1.634365356	$g_1(x_7)$ =1.634365285	0.000000071
8	x_8 =1.634365285	$g_1(x_8)$ =1.634365294	0.000000009
9	x_9 =1.634365294	$g_1(x_9)$ =1.634365293	0.000000001
10	x_{10} =1.634365293	$g_1(x_{10})$ = 1.634365293	0

7. La raíz obtenida es 1.634365293

Utilizando MATLAB R2010a

1. >> format long

2. >> v=puntofijo('$(6-x)$^(1/3)',1.5,20,0.00000001)

   El método tuvo éxito después de 9 iteraciones

   Resultados obtenidos:

   v=

i	x_i	$g(_i)$
0	1.500000000000000	1.650963624447313
1.000000000000000	1.650963624447313	1.632291353275898
2.000000000000000	1.632291353275898	1.634624059397298
3.000000000000000	1.634624059397298	1.634333000866565
4.000000000000000	1.634333000866565	1.634369322747108
5.000000000000000	1.634369322747108	1.634364790142128
6.000000000000000	1.634364790142128	1.634365355766966
7.000000000000000	1.634365355766966	1.634365285182531
8.000000000000000	1.634365285182531	1.634365293990777
9.000000000000000	1.634365293990777	1.634365292891594

La raíz obtenida es: 1.634365292891594

2.3 Método de Newton Raphson

El método de Newton Raphson nos permite calcular de forma aproximada las raíces de la ecuación $f(x) = 0$, donde suponemos que en el intervalo considerado $[a, b]$ la ecuación $f(x) = 0$ tiene una única raíz.

Cálculo aproximado de la raíz

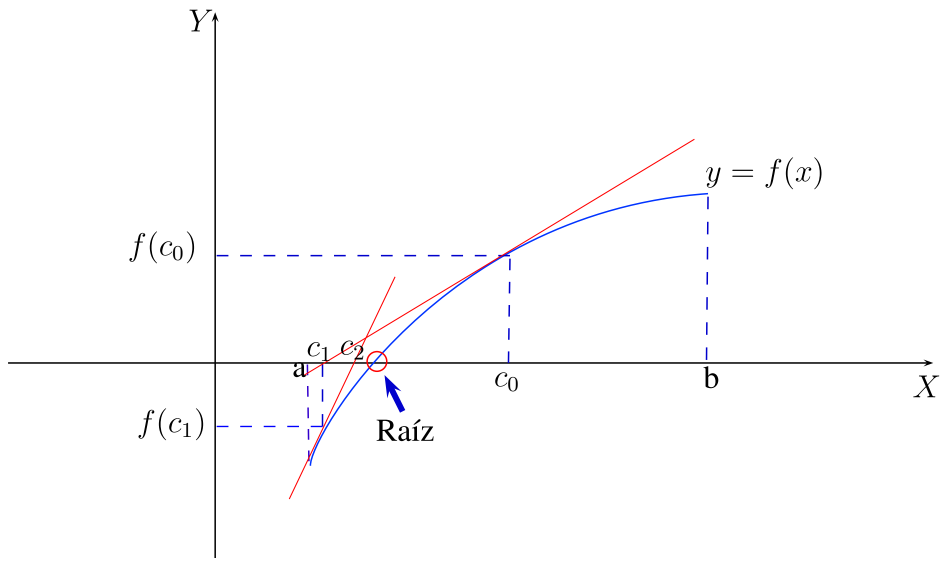


Figura 2.2: Iteraciones por método de Newton Raphson

- Elegimos $c_0 \in [a, b] / f'(c_0) \neq 0$.
- Desde $(c_0, f(c_0))$ trazamos la recta tangente a f

$$\Rightarrow y - f(c_0) = f'(c_0)(x - x_0) \tag{2.1}$$

- La siguiente aproximación c_1 es el punto de corte de la recta tangente y el eje OX, osea

$$\begin{aligned} y - f(c_0) &= f'(c_0)(x - x_0) \quad ... (*) \\ y &= 0 \qquad\qquad\qquad\quad ... (**) \end{aligned}$$

Reemplazar (**) en (*) se obtiene:

$$\begin{aligned} -f(c_0) &= f'(c_0)(x - x_0) \\ x = c_1 &= c_0 - \frac{f(c_0)}{f'(c_0)} \end{aligned}$$

$$c_1 = c_0 - \frac{f(c_0)}{f'(c_0)} \tag{2.2}$$

- Repitiendo el mismo proceso obtendríamos las sucesivas aproximaciones a la raíz $c_2, c_3, ...c_n$.

$$c_{n+1} = c_n - \frac{f(c_n)}{f'(c_n)} \qquad \forall\ n \in \mathbb{N} \tag{2.3}$$

Con respecto al criterio de parada, igualmente se selecciona un nivel de tolerancia del error ($\varepsilon > 0$) y luego construir los $c_1, ..., c_n$ hasta que

$$|c_{n+1} - c_n| < \varepsilon \ \text{ ó } \quad \left|\frac{c_{n+1} - c_n}{c_{n+1}} 100\,\%\right| < \varepsilon$$

Observación 2.1. Inconvenientes con la derivada

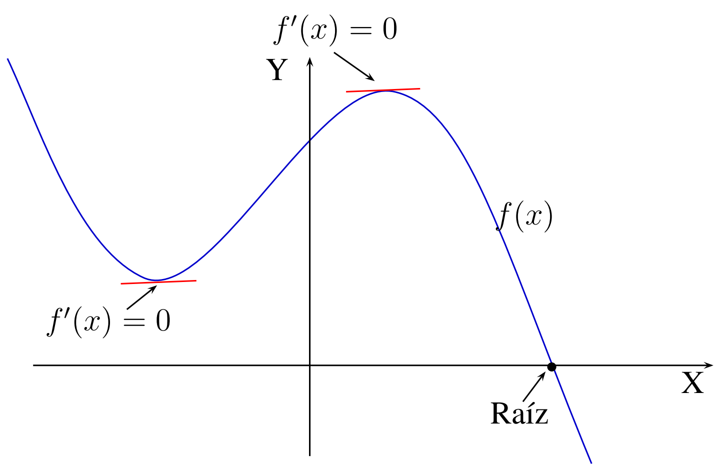


Figura 2.3: La derivada de la función $f'(x) = 0$

1. El método de Newton Raphson se indetermina en los puntos críticos por haber una división por cero, osea:

$$c_2 = c_1 - \frac{f(c_1)}{f'(c_1)} \Longrightarrow \quad c_2 = c_1 - \frac{f(c_1)}{0}$$

2. En un punto crítico, este método es ineficaz porque la recta tangente nunca cruza el eje de las abscisas y no se tiene un valor de x.

3. El método de Newton-Raphson además, resulta poco conveniente cuando se tenga una función $f(x)$ cuya primera derivada sea muy complicada obtener.

4. Otro inconveniente, es cuando se resuelva una función con raíces reales repetidas, como $f(x) = x^5$.

5. En las raíces que son repetidas, dicha raíz puede ser también un punto crítico o un punto de inflexión, donde el método de Newton-Raphson es ineficaz. Como se puede notar en la figura (2.4), la raíz también es un punto de inflexión.

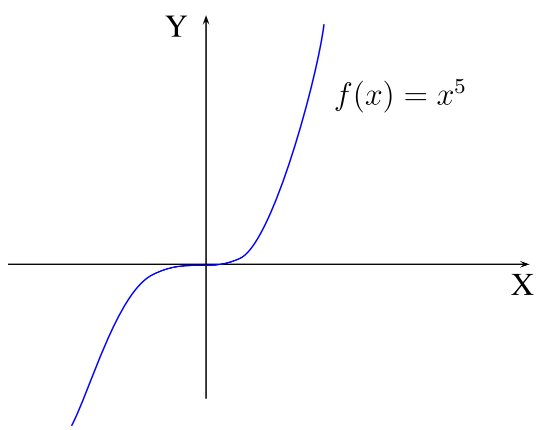


Figura 2.4: Función con raices repetidas

Teorema 2.5. ***(Criterio de Convergencia)***
Supongamos que el intervalo $[a, b]$ es lo suficientemente pequeño de tal manera que se cumplan las siguientes tres condiciones

a) f *tiene un único cero* c^* *en* $[a, b]$

b) $f(a)f(b) < 0$

c) f' *y* f'' *son no nulas y conservan el signo en* $[a, b]$.
Luego, si $c_0 \in [a, b]$, $f(c_0)f''(c_0) > 0$ *y* $c_{n+1} = c_n - \dfrac{f(c_n)}{f'(c_n)}$ *entonces* c_n *converge a* c^*

Demostración.

Como $f(a)$ y $f(b)$ deben tener signos contrarios, supongamos (sin pérdida de generalidad) que $f(a) < 0$ y $f(b) > 0$ y que $f'(c) > 0$ y $f''(c) > 0$ en $[a, b]$. Entonces $f(c_0) > 0$ y $c_0 > c^*$.

Vamos a mostrar que $c_n > c^*$ y que $f(c_n) > 0$. En efecto, por teorema de Taylor tendremos

$$0 = f(c_n) + f'(c_n)(c^* - c_n) + \frac{1}{2}(c^* - c_n)^2 f''(\xi_n), \quad \textit{con } \xi_n \textit{ entre } c_n \textit{ y } c^*$$

y como $f''(x) > 0$ entonces

$$f(c_n) + f'(c_n)(c^* - c_n) < 0 \Longrightarrow c_{n+1} = c_n - \frac{f(c_n)}{f'(c_n)} > c^*$$

Luego $c_n > c^*$, $n = 0, 1, 2, \ldots,$

Además, por los signos de f y f', se deduce que $c_n > c_{n+1}$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ por lo que, la sucesión $c_0, c_1, c_2, \ldots$ es acotada y decreciente, por lo tanto converge. El límite debe ser c^* pues si fuera $\overline{c}$ entonces,

$$c_{n+1} = c_n - \frac{f(c_n)}{f'(c_n)} \Rightarrow \overline{c} = \overline{c} - \frac{f(\overline{c})}{f'(\overline{c})}$$

tomando límites a ambos lados en la igualdad izquierda. Es decir, $f(\overline{c}) = c^*$ por la condición de a).

■

Pasos para hallar el método de Newton-Raphson

1. Hacer $f(x) = 0$.

2. Determinar el intervalo de confianza, que se encuentra ubicado en los $f(x)$, donde hay cambio de positivo a negativo o viceversa.

3. Elegir un $c_0 \in [a, b]$

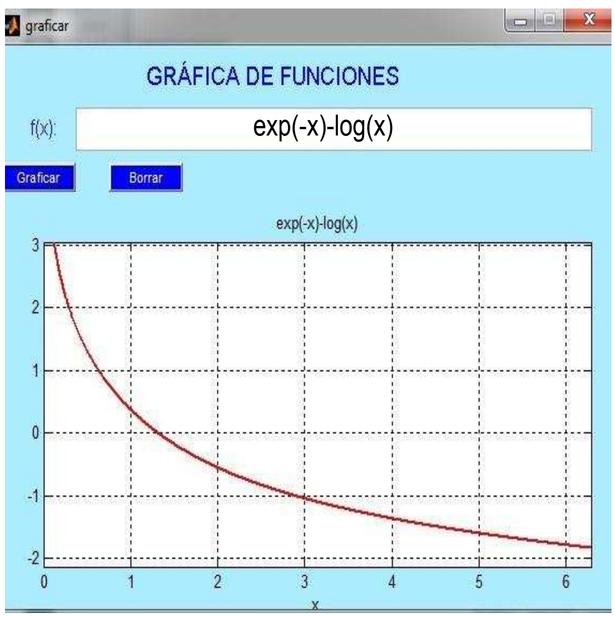
4. Hallar el **criterio de convergencia**

5. Aplicar el algoritmo hasta que $|c_{n+1} - c_n| < \varepsilon$

Ejemplo 2.3. Determinar la raíz de la ecuación $e^{-x} - ln(x) = 0$

Solución.

1. $f(x) = e^{-x} - ln(x) = 0$



2. Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	1	2	3	4	5	6	7	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	0.3679	-0.5578	-1.0488	-1.3680	-1.6027	-1.7893	-1.9450	$\cdots$

3. Donde $c_0 = 1.2 \in [1, 2]$

4. Hallar el **criterio de convergencia** donde $a = 1$ y $b = 2$

- $f(a)f(b)$ =(0.3679)(-0.5578)=-0.20521462< 0
- $f'(x) = -e^{-x} - \frac{1}{x}$ y $f''(x) = e^{-x} + \frac{1}{x^2}$ son continuas y no se anulan en $[1, 2]$
- Sea $c_0 = 1.2 \in [1, 2]$. $f(1.2)f''(1.2) = 0.1189 > 0$.

Cumple con el criterio de convergencia.

5. Aplicar el algoritmo $c_{n+1} = c_n - \dfrac{f(c_n)}{f'(c_n)}$

Sea $c_0 = 1.2 \Longrightarrow c_1 = c_0 - \dfrac{f(c_0)}{f'(c_0)} = 1.2 - \dfrac{f(1.2)}{f'(1.2)} = 1.304777231$

n	c_n	$\lvert c_{n+1} - c_n \rvert$
0	1.2	
1	1.304777231	0.104777231
2	1.309789173	0.005011942
3	1.309799586	0.000010413
4	1.309799586	0

6. La raíz obtenida es: 1.309799586

Utilizando MATLAB R2010a

1. >> NRM('exp(-x)-log(x)',1.2,0.001)

	n	c_n	$\lvert c_{n+1} - c_n \rvert$
1.0e+002*			
	0.010000000000000	0.012000000000000	1.000000000000000
	0.020000000000000	0.013153871235785	0.087721037791969
	0.030000000000000	0.013098123974366	0.004256125650348
	0.040000000000000	0.013097995858719	0.000009781316842

2. La raíz obtenida es: 0.013097995858719

2.4 Método de la Falsa Posición

El método de falsa posición es una mejora del método de Bisección, basado en el teorema (2.1)

Cálculo aproximado de la raíz

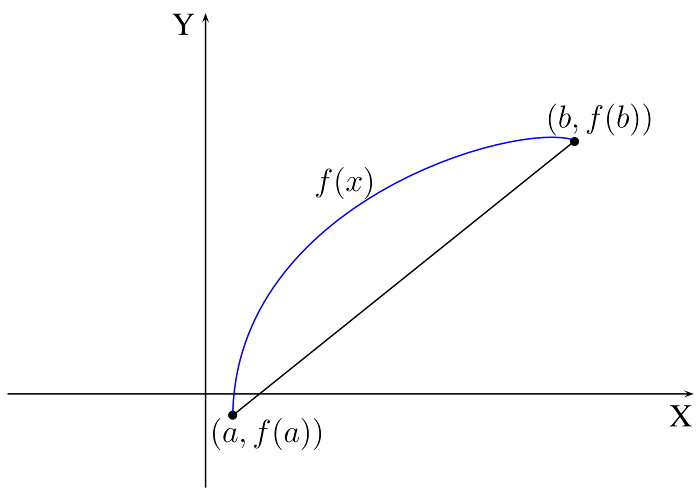


Figura 2.5: Iteraciones por método de la falsa posición

- Calculemos la ecuación de la línea recta que une los puntos $(a, f(a))$, $(b, f(b))$. Donde la ecuación de la recta esta dada por:

$$m = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \tag{2.4}$$

Por lo tanto reemplazando la ecuación (2.4) en la ecuación de la recta se obtiene:

$$y - f(a) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \tag{2.5}$$

- Haciendo $y = 0$, para obtener el cruce con el eje x:

$$-f(a) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \tag{2.6}$$

- Despejando x se tiene:

$$\begin{aligned} -f(a) &= \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a) \\ -f(a)(b-a) &= (f(b)-f(a))(x-a) \\ -\frac{f(a)(b-a)}{f(b)-f(a)} &= x-a \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \qquad x = c = a - \frac{f(a)(b-a)}{f(b)-f(a)} \tag{2.7}$$

Pasos para hallar el método de la falsa posición

Se pretende resolver la ecuación $f(x) = 0$, en un intervalo $[a, b]$ del que se sabe que $f(a).f(b) < 0$

1. Hacer $f(x) = 0$.

2. Determinar el intervalo de confianza, que se encuentra ubicado en los $f(x)$, donde hay cambio de positivo a negativo o viceversa.

3. Elegir los valores iniciales a, b tales que $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos, es decir,

$$f(a).f(b) < 0$$

4. La primera aproximación a la raíz se toma igual a

$$c = b - \frac{f(b)(b-a)}{f(b)-f(a)}$$

5. Evaluar $f(c)$, para determinar en qué subintervalo está la raíz:

   a) Si $f(a).f(c) < 0$, $\Rightarrow$ la raíz está en el primer subintervalo $\Rightarrow b = c$

   b) Si $f(a).f(c) > 0$, $\Rightarrow$ la raíz está en el segundo subintervalo $\Rightarrow a = c$

   c) Si $f(a).f(c) = 0$, $\Rightarrow$ la raíz es igual a c, termina el cálculo.

   Criterios de paro y estimaciones de errores.

   El proceso se vuelve a repetir con el nuevo intervalo, hasta que

$$|\varepsilon_n| < \varepsilon$$

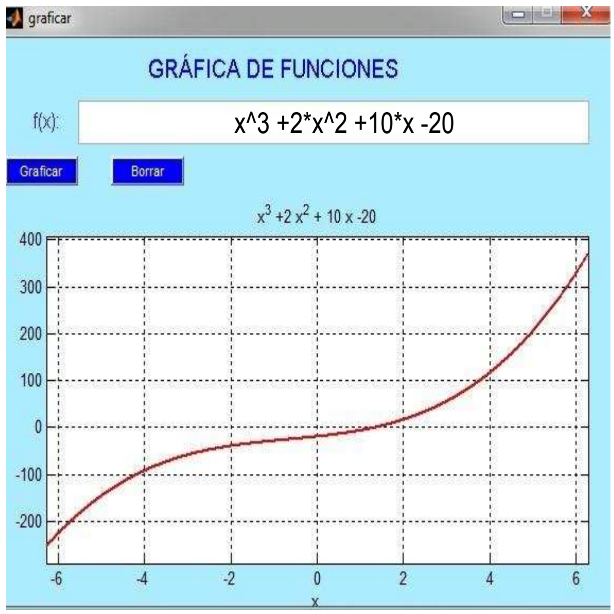
es decir:

$$\left|\frac{c_{actual} - c_{previa}}{c_{actual}} \times 100\,\%\right| < \varepsilon$$

Ejemplo 2.4. Determine la raíz de la ecuación $x^3 + 2x^2 + 10x = 20$

Solución.

1. $f(x) = x^3 + 2x^2 + 10x - 20 = 0$



2. Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	-3	-2	-1	0	1	2	3	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	-59	-40	-29	-20	-7	16	55	$\cdots$

3. Los valores iniciales son $a = 1$ y $b = 2$, donde se tienes:

$$f(1)f(2) = (-7)(16) = -112 < 0$$

4. La primera aproximación a la raíz se toma igual a

$$c = 2 - \frac{16(2-1)}{16-(-7)} = 2 - \frac{16}{23} = 1.304347826$$

5. Evaluar $f(c)$, para determinar en qué subintervalo está la raíz:

$$f(1.304347826) = (1.304347826)^3 + 2(1.304347826)^2 + 10(1.304347826) - 20 = \text{-}1.33475795$$

$$\Longrightarrow f(1)f(1.304347826) = (\text{-}7)(\text{-}1.33475795) > 9.34330565$$

Por ser positivo entonces $a = 1.304347826$ y $b = 2$

Hallando el segundo subintervalo $f(c)$

$$c = 2 - \frac{16(2 - 1.304347826)}{16 - (-1.33475795)} = 2 - \frac{16(0.695652174)}{17.33475795} = 1.357912305$$

$$f(1.357912305) = (1.357912305)^3 + 2(1.357912305)^2 + 10(1.357912305) - 20 = \text{-}0.22913572$$

$$\Longrightarrow f(1.304347826)f(1.357912305) = (\text{-}1.33475795)(\text{-}0.22913572) > 0.3058407239$$

Por ser positivo entonces $a = 1.357912305$ y $b = 2$

Hallando el **criterio de parada** o el el primer error en %:

$$\left|\frac{1.357912305 - 1.304347826}{1.357912305} \times 100\,\%\right| = 3.9\,\%$$

iter	a	b	c	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	1	2	1.304347826	(-)	(-)	(+)	—
1	1.304347826	2	1.357912305	(-)	(-)	(+)	3.9 %
2	1.357912305	2	1.366977805	(-)	(-)	(+)	0.6 %
3	1.366977805	2	1.365447269	(-)	(-)	(+)	0.11 %
4	1.365447269	2	1.368244044	(-)	(-)	(+)	0.2 %
5	1.368244044	2	1.368713470	(-)	(-)	(+)	0.03 %
6	1.368713470	2	1.368792230	(-)	(-)	(+)	0.006 %
7	1.368792230	2	1.368805444	(-)	(-)	(+)	0.0001 %

6. La raíz obtenida es 1.368805444

<u>**Utilizando MATLAB R2010a**</u>

$>> v = falapos(`x\hat{}3 + 2 * x\hat{}2 + 10 * x - 20', 1, 2, 0.01, 10)$

i	a_i	b_i	c_i	$\|error\|$
0	1.000000000000000	2.000000000000000	1.304347826086957	-1.334757951836934
1.	1.304347826086957	2.000000000000000	1.357912304657867	0.229135729587330
2.	1.357912304657867	2.000000000000000	1.366977804816513	0.038591876778376

3.	1.366977804816513	2.000000000000000	1.368500975599970	0.006478728147059
4.	1.368500975599970	2.000000000000000	1.368756579007422	0.001087042825340
5.	1.368756579007422	2.000000000000000	1.368799462883374	0.000182374360246
6.	1.368799462883374	2.000000000000000	1.368806657476001	0.000030596675209
7.	1.368806657476001	2.000000000000000	1.368807864499799	0.000005133145471
8.	1.368807864499799	2.000000000000000	1.368808066999799	0.000000861177590
9.	1.368808066999799	2.000000000000000	1.368808100972819	0.000000144478040

7. La raíz obtenida es 1.368808100972819

Capítulo 3:

Aplicaciones

3.1 Aplicación de la ecuación de Van Der Waals

Ejemplo 3.1. La ecuación de Van Der Waals para un gas es:
$\left(P+\dfrac{A}{V^2}\right)(V-B)=RT$ donde la P es la presión (atm). V es el volumen molar (l/mol). T e la Temperatura absoluta (K) y R=0.082054 atm l/mol K.

Hallar el volumen molar del CO_2 a 500K y 10 atm, utilizando todos los métodos estudiados.

Nota: A=$3.592 l^2 atm/mol^2$ y B=0.04267 l/mol.

Solución.

Datos:

P=	10 atm
T=	500K
R=	0.082054 atm l/mol K.
A=	3.592 $l^2 atm/mol^2$
B=	0.04267 l/mol

Reemplazar los datos en la ecuación general de Van Der Waals (1.2) Resulta:

$$10V^3-41.4537V^2+3V-0.1281=0$$

1. **Método de Bisección**

a) $f(V) = 10V^3 - 41.4537V^2 + 3V - 0.1281 = 0$

b) Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	0	1	2	3	4	5	6	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	-0.1281	-28.5818	-79.9429	-94.2114	-11.3873	228.5294	685.5387	$\cdots$

c) Los valores iniciales son $a = 4$ y $b = 5$, tales que $f(4)$ =-11.3873<0 y $f(2)$ =228.5294>0 tienen signos opuestos, es decir:

$$f(4).f(5) = (-11.3873)(228.5294) = -2602.332837 < 0$$

d) La primera aproximación es:

$$\begin{array}{lll} c_0 & = \frac{4+5}{2}=4.5 & \text{y} \quad f(4.5)=85.1845 \\ c_1 & = \frac{4+4.5}{2}=4.25 & \text{y} \quad f(4.25)=31.5207 \\ c_2 & = \frac{4+4.25}{2}=4.125 & \text{y} \quad f(4.125)=8.7808 \\ \vdots & = \quad \vdots & \qquad \vdots \\ c_7 & = \frac{4.0703+4.0781}{2}=4.0742 & \text{y} \quad f(4.0742)=0.2809 \end{array}$$

Hallando el **criterio de parada** o el primer valor del error en %:

$$\left|\frac{4.25 - 4.5}{4.25} \times 100\,\%\right| = 5.88\,\%$$

iter	a	b	c	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	4	5	4.5	(-)	(+)	(-)	—
1	4	4.5	4.25	(-)	(+)	(-)	5.88 %
2	4	4.25	4.125	(-)	(+)	(-)	3.03 %
3	4	4.125	4.0625	(-)	(-)	(+)	1.54 %
4	4.0625	4.125	4.09375	(-)	(+)	(-)	0.76 %
5	4.0625	4.09375	4.0781	(-)	(+)	(-)	0.38 %
6	4.0625	4.0781	4.0703	(-)	(-)	(+)	0.19 %
7	4.0703	4.0781	4.0742	(-)	(+)	(-)	0.01 %

e) La raíz obtenida es: 4.0742

f) Utilizando el Software MATLAB R2010a

$>> v = biseccion(`10 * V.\hat{}3 - (41.4537) * V.\hat{}2 + 3 * V - 0.1281', 4, 5, 0.01, 11)$

i	a_i	b_i	c_i	$f(c_i)/n$
0	4.0000	5.0000	4.5000	85.1845
1.0000	4.0000	4.5000	4.2500	31.5207
2.0000	4.0000	4.2500	4.1250	8.7808
3.0000	4.0000	4.1250	4.0625	-1.6174
4.0000	4.0625	4.1250	4.0938	3.5023
5.0000	4.0625	4.0938	4.0781	0.9227
6.0000	4.0625	4.0781	4.0703	-0.3523
7.0000	4.0703	4.0781	4.0742	0.2840

g) La raíz obtenida es 4.0742

2. **Método del Punto Fijo**

   a) $f(V) = 10V^3 - 41.4537V^2 + 3V - 0.1281 = 0$

   b) Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	0	1	2	3	4	5	6	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	-0.1281	-28.5818	-79.9429	-94.2114	-11.3873	228.5294	685.5387	$\cdots$

   c) Los valores iniciales son $a = 4$ y $b = 5$,

$$x_0 = \frac{4+5}{2} = 4.5$$

   d) Hallar los posibles despejes:

$$\begin{aligned}
1)\ f(V) &= 10V^3 - 41.4537V^2 + 3V - 0.1281 = 0 \\
10V^3 &= 41.4537V^2 - 3V + 0.1281 \\
V^3 &= 4.14537V^2 - 0.3V + 0.1281 \\
V &= \sqrt[3]{4.14537V^2 - 0.3V + 0.1281} \\
\Rightarrow g_1(V) &= \sqrt[3]{4.14537V^2 - 0.3V + 0.1281}
\end{aligned}$$

Derivando la función se obtiene:

$$g_1'(V) = \frac{1}{3}\frac{8.29074V - 0.3}{\sqrt[3]{(4.14537V^2 - 0.3V + 0.1281)^2}}$$

$$\begin{aligned}
2)\ f(V) &= 10V^3 - 41.4537V^2 + 3V - 0.1281 = 0\\
3V &= -10V^3 + 41.4537V^2 + 0.1281\\
V &= -\tfrac{10}{3}V^3 + \tfrac{41.4537}{3}V^2 + \tfrac{0.1281}{3}\\
\Rightarrow g_2(V) &= -\tfrac{10}{3}V^3 + \tfrac{41.4537}{3}V^2 + \tfrac{0.1281}{3}
\end{aligned}$$

Derivando la función se obtiene:

$$g_2'(V) = -10V^2 + \tfrac{2(41.4537)}{3}V$$

$e)$ Reemplazamos el punto medio del intervalo de confianza aquel que cumpla con el **criterio de convergencia** osea $|g'(x_0)| \leq 1$, será apto para iterar.

$$|g_1'(V)| = \left|\frac{1}{3}\frac{8.29074(4.5) - 0.3}{\sqrt[3]{(4.14537(4.5)^2 - 0.3(4.5) + 0.1281)^2}}\right| = |0.65038| = 0.65038 < 1.$$

Apto para iterar.

$$|g_2'(V)| = \left| -10(4.5)^2 + \tfrac{2(41.4537)}{3}(4.5)\right| = |-78.1389| = 78.1389 > 1.$$

No apto para iterar.

$f)$ Iterar el despeje apto:

$$g_1(V) = \sqrt[3]{4.14537V^2 - 0.3V + 0.1281}$$

$$\begin{aligned}
g_1(4.5) &= \sqrt[3]{4.14537(4.5)^2 - 0.3(4.5) + 0.1281} && = 4.357192\\
g_2(4.357192) &= \sqrt[3]{4.14537(4.357192)^2 - 0.3(4.357192) + 0.1281} && = 4.263900\\
g_2(4.263900) &= \sqrt[3]{4.14537(4.263900)^2 - 0.3(4.263900) + 0.1281} && = 4.202403\\
\vdots & \quad \vdots && \quad \vdots\\
g_{10}(4.086981) &= \sqrt[3]{4.14537(4.086981)^2 - 0.3(4.086981) + 0.1281} && = 4.084531
\end{aligned}$$

i	V_i	$g_1(V_i) = V_{i+1}$	$\|g_1(V_i) - g_1(V_{i-1})\|$
0	V_0 =4.5	$g_1(V_0)$ =4.357192	0
1	V_1 =4.357192	$g_1(V_1)$ =4.263900	0.093292
2	V_2 =4.263900	$g_1(V_2)$ =4.202403	0.061497
3	V_3 =4.202403	$g_1(V_3)$ =4.161619	0.040784

4	V_4 =4.161619	$g_1(V_4)$ =4.134462	0.027157
5	V_5 =4.134462	$g_1(V_5)$ =4.116330	0.018132
6	V_6 =4.116330	$g_1(V_6)$ =4.104201	0.012129
7	V_7 =4.104201	$g_1(V_7)$ =4.096078	0.008123
8	V_8 =4.096078	$g_1(V_8)$ =4.090633	0.005445
9	V_9 =4.090633	$g_1(V_9)$ =4.086981	0.003652
10	V_{10} =4.086981	$g_1(V_{10})$ =4.084531	0.002450

g) La raíz obtenida es: 4.084531

h) Utilizando el Software MATLAB 2010a

$>> v = puntofijo(``'((4.14537)*x.\hat{}2-(0.3)*x+0.01281)\hat{}(1/3)', 4.5, 20, 0.0000001)$

El método tuvo éxito después de 8 iteraciones

Resultados obtenidos:

i	V_i	$g(V_i)$
0	4.5000	4.3552
1.0000	4.3552	4.2605
2.0000	4.2605	4.1979
3.0000	4.1979	4.1564
4.0000	4.1564	4.1287
5.0000	4.1287	4.1102
6.0000	4.1102	4.0978
7.0000	4.0978	4.0895
8.0000	4.0895	4.0839

i) La raíz obtenida es 4.0839

3. **Método de Newton Raphson**

a) $f(V) = 10V^3 - 41.4537V^2 + 3V - 0.1281 = 0$

b) Determinar el intervalo de confianza

V	$\cdots$	0	1	2	3	4	5	6	$\cdots$
$f(V)$	$\cdots$	-0.1281	-28.5818	-79.9429	-94.2114	-11.3873	228.5294	685.5387	$\cdots$

c) Donde $c_0 = 4.3 \in [4, 5]$

d) Hallar el **criterio de convergencia** donde $a = 4$ y $b = 5$

- $f(a)f(b)$ =(-11.3873)(228.5294)=-2602.332837< 0
- $f'(V) = 30V^2 - 82.9074V + 3$ y $f''(V) = 60V - 82.9074$, son continuas y no se anulan en $[4, 5]$
- Sea $c_0 = 4.3 \in [4, 5]$. $f(4.3)f''(4.3) = \ 12578.17826 > 0$.

Cumple con el criterio de convergencia.

e) Aplicar el algoritmo $c_{n+1} = c_n - \dfrac{f(c_n)}{f'(c_n)}$

Sea $c_0 = 4.3 \Longrightarrow c_1 = c_0 - \dfrac{f(c_0)}{f'(c_0)} = 4.3 - \dfrac{f(4.3)}{f'(4.3)} = 4.3 - \dfrac{41.3630}{201.19904}$

$$c_1 = 4.0703$$

n	c_n	$\lvert c_{n+1} - c_n \rvert$
0	4.3	
1	4.094418	0.205582
2	4.072712	0.021706
3	4.072477	0.000235
3	4.072477	0.000000

f) La raíz obtenida es: 4.072477

g) Utilizando el Software MATLAB R2010a

$$>> v = NRM(`10 * x.^3 - (41.4537) * x.^2 + 3 * x - 0.1281', 4.3, 0.01)$$

n	c_n	$\lvert c_{n+1} - c_n \rvert$
1.0000	4.3000	100.0000
2.0000	4.0496	6.1828
3.0000	4.0722	0.5548
4.0000	4.0725	0.0064

h) La raíz obtenida es 4.0725

4. **Método de Falsa Posición**

a) $f(V) = 10V^3 - 41.4537V^2 + 3V - 0.1281 = 0$

b) Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	0	1	2	3	4	5	6	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	-0.1281	-28.5818	-79.9429	-94.2114	-11.3873	228.5294	685.5387	$\cdots$

c) Los valores iniciales son $a = 4$ y $b = 5$,

$$\Longrightarrow f(4)f(5) = (\text{-}11.3873)(228.5294) = \text{-}2602.332837 < 0$$

d) La primera aproximación a la raíz se toma igual a:

$$c = b - \frac{f(b)(b-a)}{f(b) - f(a)}$$

$$\begin{aligned} c_0 &= 5 - \frac{228.5294(5 - 4)}{228.5294+11.3873} &&= 4.04746356 \\ c_1 &= 5 - \frac{228.5294(5 - 4.04746356)}{228.5294+4.0247044} &&= 4.06394866 \\ \vdots & \qquad \vdots && \quad \vdots \\ c_6 &= 5 - \frac{228.5294(5 - 4.07236442)}{228.5294+0.01836307} &&= 4.07243895 \end{aligned}$$

Hallando el **criterio de parada** o el primer valor del error en %:

$$\left| \frac{4.06394866 - 4.04746356}{4{,}06394866} * 100\,\% \right| = 0.41\,\%$$

iter	a	b	c	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	4	5	4.04746356	(-)	(-)	(+)	—
1	4.04746356	5	4.06394866	(-)	(-)	(+)	0.41 %
2	4.06394866	5	4.06958151	(-)	(-)	(+)	0.14 %
3	4.06958151	5	4.07149541	(-)	(-)	(+)	0.05 %
4	4.07149541	5	4.07214446	(-)	(-)	(+)	0.02 %
5	4.07214446	5	4.07236442	(-)	(-)	(+)	0.01 %
6	4.07236442	5	4.07243895	(-)	(-)	(+)	0.01 %

e) La raíz obtenida es: 4.07243895

f) Utilizando el Software MATLAB R2010a.

$>> v = falapos(`10*V.^3-(41.4537)*V.^2+3*V-0.1281', 4, 5, 0.01, 10)$

i	a_i	b_i	c_i	$\|error\|$
0	4.000000000000000	5.000000000000000	4.047463557142958	4.024704855140818
1.	4.047463557142958	5.000000000000000	4.063948658743953	1.383541139585887
2.	4.063948658743953	5.000000000000000	4.069581510609416	0.471061342314137
3.	4.069581510609416	5.000000000000000	4.071495411480870	0.159859625883604
4.	4.071495411480870	5.000000000000000	4.072144459872537	0.054189663906581
5.	4.072144459872537	5.000000000000000	4.072364423956342	0.018362428785780
6.	4.072364423956342	5.000000000000000	4.072438953857765	0.006221401288013
7.	4.072438953857765	5.000000000000000	4.072464204754986	0.002107790653703
8.	4.072464204754986	5.000000000000000	4.072472759598469	0.000714102172435
9.	4.072472759598469	5.000000000000000	4.072475657900165	0.000241930750361

g) La raíz obtenida es 4.072475657900165

Cuadro comparativo de los 4 métodos iterativos

Método iterativos	**Iteraciones**	**Raíz**
Método de Bisección	7	4.0742
Método de Punto fijo	10	4.084531
Método de Newton Raphson	3	4.072477
Método de Regula Falsa	6	4.07243895

3.2 Aplicación de la ecuación de Colebrook-White

Ejemplo 3.2. El factor de fricción (f) para el flujo turbulento en una tubería está dado por la ecuación de Colebrook-White (1.8) :

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2ln\Big[\frac{\varepsilon/D}{3.7} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}}\Big]$$

Obtener el factor de fricción para un fluido con un Reynolds de 3×10^4 que fluye en una tubería con un diámetro de $0.1m$ y una rugosidad de $0.0025m$.

Solución.

Datos:

$\varepsilon = 0.0025m$

$D = 0.1m$

$Re = 3 \times 10^4$

Reemplazar los valores en la ecuación (1.9)

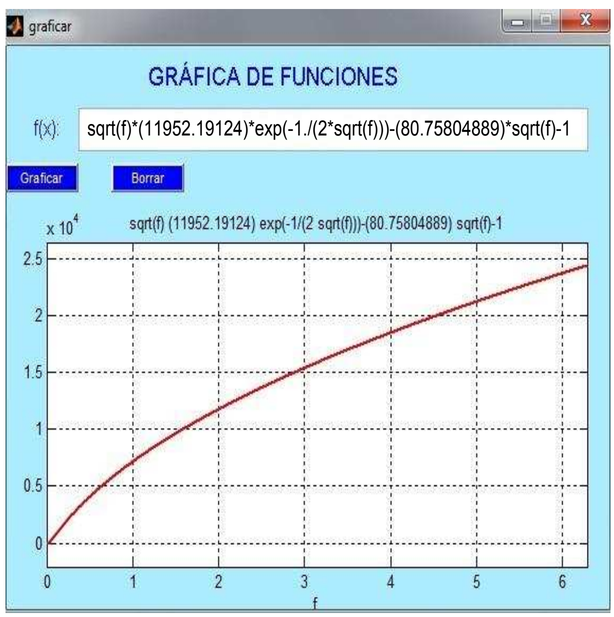
$$R(f) = \frac{(3 \times 10^4)\ \sqrt{f}\ e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{2.51} - \frac{(3 \times 10^4)(0.0025)\sqrt{f}}{(3.7)(2.51)(0.1)} - 1 = 0$$

$$R(f) = \sqrt{f}(11952.19124)\ e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - (80.75804889)\sqrt{f} - 1 = 0 \tag{3.1}$$

Resolver la ecuación (3.1) por los siguientes métodos:

1. **Método de Bisección**

   a) $R(f) = \sqrt{f}(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889\sqrt{f} - 1 = 0$



   b) Determinar el intervalo de confianza:

f	$\cdots$	0.01	0.05	$\cdots$
$R(f)$	$\cdots$	-1.02248178	266.582956	$\cdots$

c) Los valores iniciales son a =0.01, b =0.05 tales que $R(0.01) = -1.02248178 < 0$ y $R(0.05) = 266.582956 > 0$ tienen signos opuestos, es decir:

$$R(0.01).R(0.05) = (-1.02248178)(266.582956) = -272.57621503 < 0$$

d) Hallando las iteraciones:

$c_0 = \frac{0.01\,+\,0.05}{2} = 0.03$ y $f(0.03) = 100.439448$

$c_1 = \frac{0.01\,+\,0.03}{2} = 0.02$ y $f(0.02) = 36.839683$

$\vdots$ $\vdots$

$c_8 = \frac{0.01046875\,+\,0.010625}{2} = 0.01054688$ y $f(0.01054688) = 0.1378884$

Hallando el **criterio de parada** o el el primer error en %:

$$\left|\frac{0.02 \text{ - } 0.03}{0.02} \times 100\,\%\right| = 50\,\%$$

iter	a	b	c	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	0.01	0.05	0.03	(-)	(+)	(-)	—
1	0.01	0.03	0.02	(-)	(+)	(-)	50 %
2	0.01	0.02	0.015	(-)	(+)	(-)	33.33 %
3	0.01	0.0.015	0.0125	(-)	(+)	(-)	20 %
4	0.01	0.0125	0.01125	(-)	(+)	(-)	11.11 %
5	0.01	0.01125	0.010625	(-)	(+)	(-)	5.88 %
6	0.01	0.010625	0.0103125	(-)	(-)	(+)	3.03 %
7	0.0103125	0.010625	0.01046875	(-)	(-)	(+)	1.49 %
8	0.01046875	0.010625	0.01054688	(-)	(+)	(-)	0.74 %

e) El factor de fricción es: 0.01054688.

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   colebrook.m

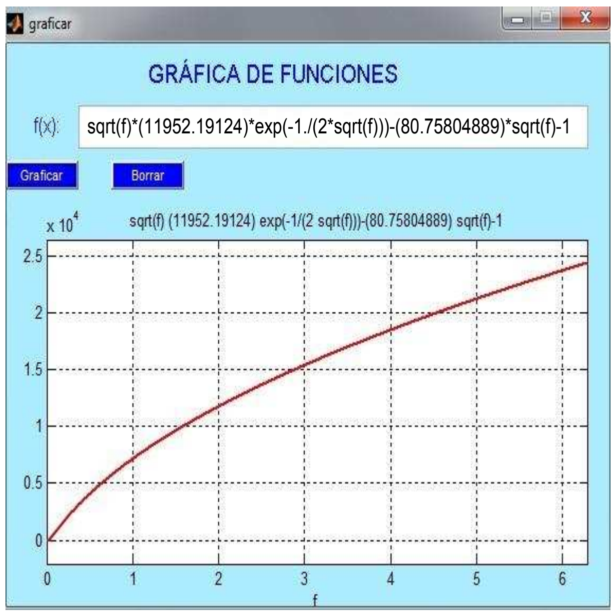
```
function y=colebrook(x)
 y=sqrt(x)*(11952.19124)*exp(-1./(2*sqrt(x)))-
                       (80.75804889)*sqrt(x)-1
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> c=biseccion('colebrook',0.01,0.05,0.00001)
c =
      0.0105
```

2. **Método del Punto fijo**

a) $R(f) = \sqrt{f}(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889\sqrt{f} - 1 = 0$



b) Determinar el intervalo de confianza:

f	$\cdots$	0.01	0.05	$\cdots$
$R(f)$	$\cdots$	-1.02248178	266.582956	$\cdots$

c) $x_{W_0} = \frac{0.2+0.3}{2} = 0.25$

d) Hallar los posibles despejes:

$$\sqrt{f}(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889\sqrt{f} - 1 = 0$$

$$\sqrt{f}[(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889] - 1 = 0$$

$$\sqrt{f}[(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889] = 1$$

$$\sqrt{f} = \frac{1}{(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889}$$

$$f = \left(\frac{1}{(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889}\right)^2$$

$$\Longrightarrow g_1(f) = \left(\frac{1}{(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889}\right)^2$$

Derivando se obtiene:

$$\Longrightarrow g_1'(f) = -\frac{1}{2}\sqrt{f}\Big((11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889\Big)^{-2}$$

e) Reemplazamos el punto medio del intervalo de confianza aquel que cumpla con el **criterio de convergencia** osea $|g'(x_0)| \leq 1$, será apto para iterar.

$|g_1'(f_0)| = \left|-\frac{1}{2}\sqrt{0.03}\Big((11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{0.03}}} - 80.75804889\Big)^{-2}\right| = 0.04311137 < 1,$

apto para iterar

f) Iterar el despeje apto:

$$g_1(f) = \left(\frac{1}{(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889}\right)^2$$

$$g_1(0.03) = \left(\frac{1}{(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{0.03}}} - 80.75804889}\right)^2 = 0.010625$$

$$g_1(0.010625) = \left(\frac{1}{(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{0.010625}}} - 80.75804889}\right)^2 = 0.0103125$$

$$g_1(0.010625) = \left(\frac{1}{(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{0.010625}}} - 80.75804889}\right)^2 = 0.01046875$$

$$g_1(0.01046875) = \left(\frac{1}{(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{0.01046875}}} - 80.75804889}\right)^2 = 0.01054688$$

i	f_i	$g_1(f_i) = f_{i+1}$	$\lvert g_1(f_i) - g_1(f_{i-1}) \rvert$
0	f_0 =0.03	$g_1(f_0)$ =0.010625	—
1	f_1 =0.010625	$g_1(f_1)$ =0.0103125	
2	f_2 =0.0103125	$g_1(f_2)$ =0.01046875	
3	f_3 =0.01046875	$g_1(f_3)$ =0.01054688	0.00836144

g) La raíz obtenida es 0.01054688

Aplicando el Software MATLAB R2010a.

1. Crear un archivo m

   pfcolebrook.m

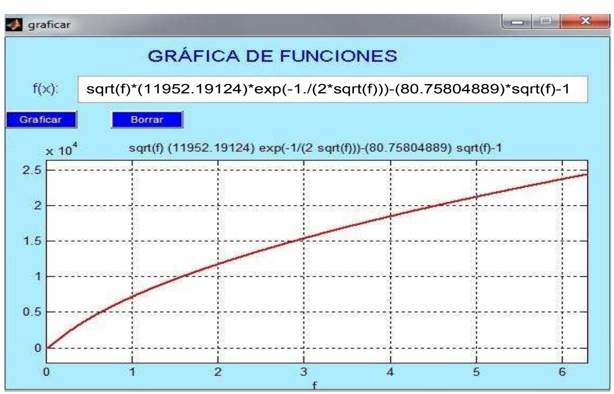
```
function g1= pfcolebrook(x)
g1=(1/((11952.19124)*exp(-1./(2*sqrt(x)))-
                                (80.75804889)))^2;
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> puntofijo('pfcolebrook',0.02,0.00001,10)
>>
     0.01054688
```

3. **Método de Newton Raphson**

   a) $R(f) = \sqrt{f}(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889\sqrt{f} - 1 = 0$



b) Determinar el intervalo de confianza:

f	$\cdots$	0.01	0.05	$\cdots$
$R(f)$	$\cdots$	-1.02248178	266.582956	$\cdots$

c) Donde $c_0 = 0.03 \in [0.01\ ,\ 0.05]$

d) Hallar el criterio de convergencia donde a =0.01 y b =0.05

- R(0.2)R(0.3)=(-1.02248178)(266.582956)=-272.576215< 0
- $R'(f) = \left(\dfrac{11952.19124}{2}\right)\dfrac{e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{\sqrt{f}} + \left(\dfrac{11952.19124}{4}\right)\dfrac{e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{f} - \left(\dfrac{80.75804889}{2}\right)\dfrac{1}{\sqrt{f}}$

  y

  $$R''(f) = -\left(\frac{11952.19124}{4}\right)\frac{e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{\sqrt{f^3}} - \left(\frac{11952.19124}{8}\right)\frac{e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{f^2} + \left(\frac{11952.19124}{16}\right)\frac{e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}}}{\sqrt{f^5}} + \left(\frac{80.75804889}{4}\right)\frac{1}{\sqrt{f^3}}$$

  son continuas y no se anulan en $[0.01\ ,\ 0.05]$

- Sea $c_0 = 0.03 \in [0.01\ ,\ 0.05]$

  $$R(0.03)R''(0.03) = (100.4394477)(146456.666612) = 14710026.710796 > 0$$

Cumple con el criterio de convergencia.

e) Aplicar el algoritmo $c_{n+1} = c_n - \dfrac{R(c_n)}{R'(c_n)}$

Sea $c_0 = 0.03 \Longrightarrow c_1 = c_0 - \dfrac{R(c_0)}{R'(c_0)} = 0.03 - \dfrac{R(0.03)}{R'(0.03)} = 0.016135$

$$c_2 = c_1 - \frac{R(c_1)}{R'(c_1)} = 0.016135 - \frac{R(0.016135)}{R'(0.016135)} = 0.011775$$

$$c_3 = c_2 - \frac{R(c_2)}{R'(c_2)} = 0.011775 - \frac{R(0.011775)}{R'(0.011775)} = 0.010603$$

$$c_4 = c_3 - \frac{R(c_3)}{R'(c_3)} = 0.010603 - \frac{R(0.010603)}{R'(0.010603)} = 0.010486$$

$$c_5 = c_4 - \frac{R(c_4)}{R'(c_4)} = 0.010486 - \frac{R(0.010486)}{R'(0.010486)} = 0.010485$$

n	c_n	$\|c_{n+1} - c_n\|$
0	0.03	———
1	0.016135	0.013865
2	0.011775	0.00436
3	0.010603	0.001172
4	0.010486	0.000117
5	0.010485	0.000001

f) La raíz obtenida es: 0.010485

Aplicando el Software MATLAB R2010a.

1. Crear dos archivos m

   colebrook.m

```
function R=colebrook(x)
 R=sqrt(x)*(11952.19124)*exp(-1./(2*sqrt(x)))-
                      (80.75804889)*sqrt(x)-1
```

   derivecolebrook.m

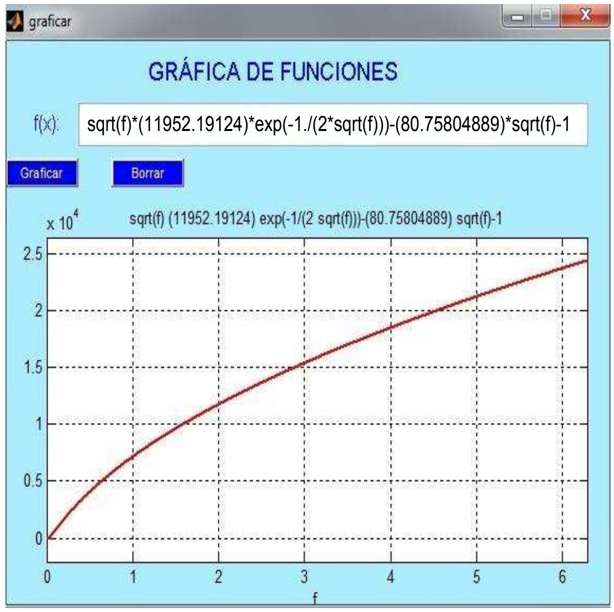
```
function dR= derivecolebrook(x)
dR=((11952.19124)/2)*(exp(-1./(2*sqrt(x)))/sqrt(x))+
         ((11952.19124)/4)*(exp(-1./(2*sqrt(x)))/x)-
         ((80.75804889)/2)*(1/sqrt(x));
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> p0=newtonraphson('colebrook','derivecolebrook',
                                         0.03,0.0001,10)
p0 =
    0.0105
```

4. **Método de la falsa posición**

a) $R(f) = \sqrt{f}(11952.19124)e^{-\frac{1}{2\sqrt{f}}} - 80.75804889\sqrt{f} - 1 = 0$



b) Determinar el intervalo de confianza:

f	$\cdots$	0.01	0.05	$\cdots$
$R(f)$	$\cdots$	-1.02248178	266.582956	$\cdots$

c) Los valores iniciales son a =0.01, b =0.05 tales que $R(0.01) = -1.0224817 < 0$ y $R(0.05) = 266.582956 > 0$ tienen signos opuestos, es decir:

$$R(0.01).R(0.05) = (-1.0224817)(266.582956) = -272.5762 < 0$$

d) La primera aproximación a la raíz se toma igual a

$$c = b - \frac{R(b)(b-a)}{R(b) - R(a)}$$

$$\begin{array}{llll}
c_0 & = 0.05 - \frac{(266.582956)(0.05 - 0.01)}{266.582956 + 1.0224817} & = 0.01015283 & \Longrightarrow \quad R(c_0) = \text{-}0.71025911 \\
c_1 & = 0.05 - \frac{(266.582956)(0.05 - 0.1015283)}{266.582956 + 0.71025911} & = 0.01025871 & \Longrightarrow \quad R(c_0) = \text{-}0.48845627 \\
\vdots & & \vdots & \qquad\quad \vdots \\
c_{10} & = 0.05 - \frac{(266.582956)(0.05 - 0.01047499)}{266.582956 + 0.02146115} & = 0.01047817 & \Longrightarrow \quad R(c_{10}) = \text{-}0.01445584
\end{array}$$

Hallando el **criterio de parada** o el el primer error en %:

$$\left|\frac{0.01025871 - 0.01015283}{0.01025871} \times 100\,\%\right| = 1.03\,\%$$

iter	a	b	c	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	0.01	0.05	0.01015283	(-)	(-)	(+)	—
1	0.01015283	0.05	0.01025871	(-)	(-)	(+)	1.03 %
2	0.01025871	0.05	0.01033139	(-)	(-)	(+)	0.7 %
3	0.01033139	0.05	0.01038097	(-)	(-)	(+)	0.48 %
4	0.01038097	0.05	0.01041464	(-)	(-)	(+)	0.32 %
5	0.01041464	0.05	0.01043744	(-)	(-)	(+)	0.22 %
6	0.01043744	0.05	0.01045285	(-)	(-)	(+)	0.15 %
7	0.01045285	0.05	0.01046325	(-)	(-)	(+)	0.10 %
8	0.01046325	0.05	0.01047026	(-)	(-)	(+)	0.07 %
9	0.01047026	0.05	0.01047499	(-)	(-)	(+)	0.05 %
10	0.01047499	0.05	0.01047817	(-)	(-)	(+)	0.01 %

e) La raíz obtenida es 0.01047817

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   colebrook.m

```
function y=colebrook(x)
 y=sqrt(x)*(11952.19124)*exp(-1./(2*sqrt(x)))-
                      (80.75804889)*sqrt(x)-1
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> c=reglafalsa('colebrook',0.01,0.05,0.0001)
c =
    0.0105
```

Cuadro comparativo de los 4 métodos iterativos

Método iterativos	**Iteraciones**	**Raíz**
Método de Bisección	8	0.01054688
Método de Punto fijo	3	0.01054688
Método de Newton Raphson	5	0.010485
Método de Regula Falsa	10	0.01047817

3.3 Aplicación de la ecuación de destilación simple

Ejemplo 3.3. La relación entre la alimentación, residuo y destilado y sus respectivas fracciones molares en una destilación diferencial está dada por la ecuación (1.10):

$$\frac{Fx_F}{Wx_W} = \left[\frac{F(1-x_F)}{W(1-x_W)}\right]^{\alpha}$$

Suponiendo:

F=100 moles, W= 35 moles, x_f=0.40 y α=2.05, encuentre el valor de fracción molar del componente más volátil en el residuo x_W usando los 4 métodos mencionados para comparar resultados.

Solución.

Primeramente reemplazaremos los valores determinados en la ecuación (1.10)

$$\frac{100(0.40)}{35x_W} = \left[\frac{100(1-0.40)}{35(1-x_W)}\right]^{2.05}$$

$$\frac{40}{35x_W} = \left[\frac{60}{35(1-x_W)}\right]^{2.05}$$

$$\frac{40}{35x_W} = \frac{(60)^{2.05}}{(35)^{2.05}(1-x_W)^{2.05}}$$

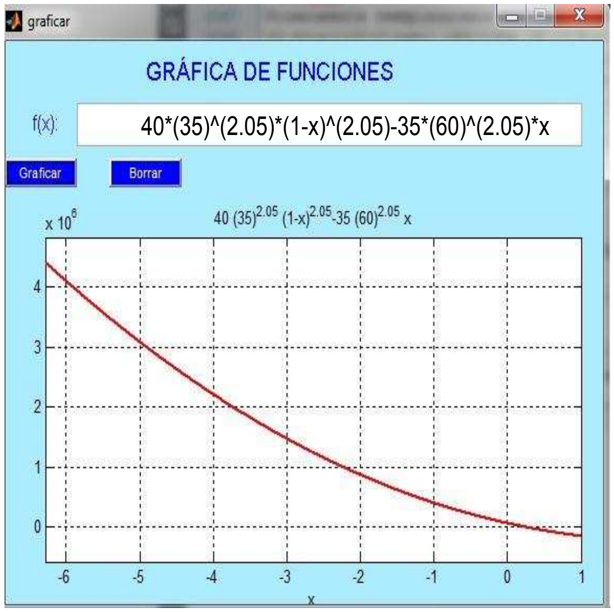
$$40(35)^{2.05}(1-x_W)^{2.05} = 35(60)^{2.05}x_W$$

$$g(x_W) = 40(35)^{2.05}(1-x_W)^{2.05} - 35(60)^{2.05}x_W = 0 \tag{3.2}$$

Luego a partir de la ecuación (3.2) se debe hallar x_W

1. <u>**Método de Bisección**</u>

   a) $g(x_W) = 40(35)^{2.05}(1 - x_W)^{2.05} - 35(60)^{2.05}x_W = 0$



   b) Determinar el intervalo de confianza:

x_W	$\cdots$	0	0.1	0.2	0.3	$\cdots$
$g(x_W)$	$\cdots$	58532.8246	31700.0363	6120.48589	-18213.2018	$\cdots$

   c) Los valores iniciales son a =0.2, b =0.3 tales que $g(0.2) = 6120.48589 > 0$ y $g(0.3) = -18213.2018 < 0$ tienen signos opuestos, es decir:

$$g(0.2).g(0.3) = (6120.48589)(-18213.2018) = -111473644.628623 < 0$$

   d) Hallando las iteraciones:

$c_0 = \frac{1+2}{2} = 1.5$ y $f(1.5) = 0.125$

$c_1 = \frac{1+1.5}{2} = 1.25$ y $f(1.25) =$ -0.609375

$\vdots$ $\vdots$

$c_6 = \frac{0.2234375\,+\,0.225}{2} = 0.22421875$ y $f(0.22421875) = 113.141094$

Hallando el **criterio de parada** o el primer valor del error en %:

$$\left|\frac{\text{1.225-0.25}}{0.225} \times 100\,\%\right| = 1.3\,\%$$

iter	*a*	*b*	*c*	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	0.2	0.3	0.25	(+)	(-)	(-)	—
1	0.2	0.25	0.225	(+)	(-)	(-)	1.3 %
2	0.2	0.225	0.2125	(+)	(+)	(+)	0.6 %
3	0.2125	0.225	0.21875	(+)	(+)	(+)	0.3 %
4	0.21875	0.225	0.221875	(+)	(+)	(+)	0.2 %
5	0.221875	0.225	0.2234375	(+)	(+)	(+)	0.1 %
6	0.2234375	0.225	0.22421875	(+)	(+)	(+)	0.09 %

e) La raíz obtenida es: 0.22421875.

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   destilacion.m

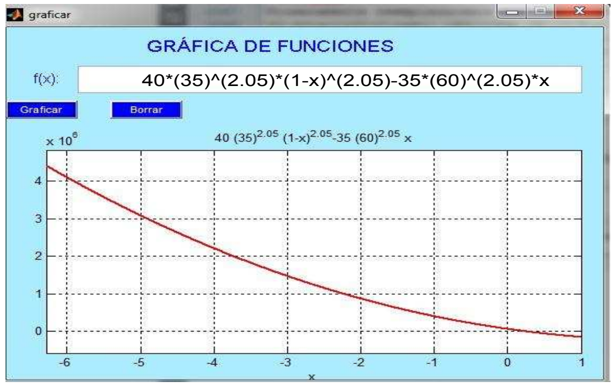
```
function g=destilacion(x)
g=40*(35)^(2.05)*(1-x)^(2.05)-35*(60)^(2.05)*x;
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> c=biseccion('destilacion',0.2,0.3,0.00001)
c =
    0.2247
```

2. **Método del Punto fijo**

   a) $g(x_W) = 40(35)^{2.05}(1 - x_W)^{2.05} - 35(60)^{2.05}x_W = 0$



b) Determinar el intervalo de confianza:

x_W	$\cdots$	0	0.1	0.2	0.3	$\cdots$
$g(x_W)$	$\cdots$	58532.8246	31700.0363	6120.48589	-18213.2018	$\cdots$

c) $x_{W_0} = \frac{0.2+0.3}{2} = 0.25$

d) Hallar los posibles despejes:

$$40(35)^{2.05}(1-x_W)^{2.05} - 35(60)^{2.05}x_W = 0$$

$$35(60)^{2.05}x_W = 40(35)^{2.05}(1-x_W)^{2.05}$$

$$x_W = \frac{40(35)^{2.05}(1-x_W)^{2.05}}{35(60)^{2.05}}$$

$$\Longrightarrow g_1(x_W) = \frac{40(35)^{2.05}(1-x_W)^{2.05}}{35(60)^{2.05}}$$

Derivando se obtiene:

$$\Longrightarrow g_1'(x_W) = -\frac{40(35)^{2.05}(2.05)(1-x_W)^{1.05}}{35(60)^{2.05}}$$

e) Reemplazamos el punto medio del intervalo de confianza aquel que cumpla con el **criterio de convergencia** osea $|g'(x_0)| \leq 1$, será apto para iterar.

$$|g_1'(x_{W_0})| = \left| -\frac{40(35)^{2.05}(2.05)(1-0.25)^{1.05}}{35(60)^{2.05}} \right| = 0.5737 < 1, \quad \text{apto para iterar}$$

f) Iterar el despeje apto:

$$\Longrightarrow g_1(x_W) = \frac{40(35)^{2.05}(1-x_W)^{2.05}}{35(60)^{2.05}}$$

$$\begin{aligned}
g_1(0.25) &= \tfrac{40(35)^{2.05}(1-0.25)^{2.05}}{35(60)^{2.05}} &&= 0.20989252\\
g_1(0.20989252) &= \tfrac{40(35)^{2.05}(1-0.20989252)^{2.05}}{35(60)^{2.05}} &&= 0.23354901\\
\vdots \quad & \quad \vdots && \quad \vdots\\
g_1(0.2247261) &= \tfrac{40(35)^{2.05}(1-0.2247261)^{2.05}}{35(60)^{2.05}} &&= 0.22464898
\end{aligned}$$

i	x_{W_i}	$g_1(x_{W_i}) = x_{W_{i+1}}$	$\lvert g_1(x_{W_i}) - g_1(x_{W_{i-1}})\rvert$
0	x_{W_0} =0.25	$g_1(x_{W_0})$ =0.20989252	—
1	x_{W_1} =0.20989252	$g_1(x_{W_1})$ =0.23354901	0.02365649
2	x_{W_2} =0.23354901	$g_1(x_{W_2})$ =0.21943928	0.01410973
3	x_{W_3} =0.21943928	$g_1(x_{W_3})$ =0.22780072	0.00836144
4	x_{W_4} =0.22780072	$g_1(x_{W_4})$ =0.22282639	0.00497433
5	x_{W_5} =0.22282639	$g_1(x_{W_5})$ =0.22577891	0.00295252
6	x_{W_6} =0.22577891	$g_1(x_{W_6})$ =0.22402404	0.00175487
7	x_{W_7} =0.22402404	$g_1(x_{W_7})$ =0.22506622	0.00104218
8	x_{W_8} =0.22506622	$g_1(x_{W_8})$ =0.22444699	0.00061923
9	x_{W_9} =0.22444699	$g_1(x_{W_9})$ =0.22481481	0.00036782
10	$x_{W_{10}}$ =0.22481481	$g_1(x_{W_{10}})$ =0.22459629	0.00021852
11	$x_{W_{11}}$ =0.22459629	$g_1(x_{W_{11}})$ =0.2247261	0.00012981
12	$x_{W_{12}}$ =0.2247261	$g_1(x_{W_{12}})$ =0.22464898	0.00007712

g) La raíz obtenida es 0.22464898

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   pfdestilacion.m

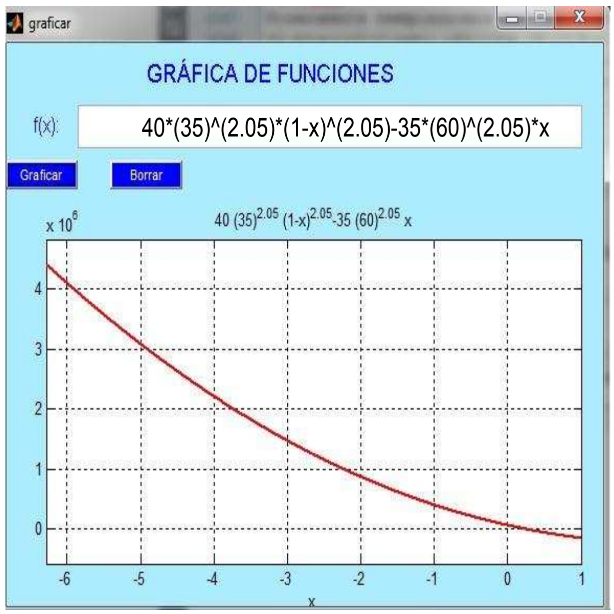
```
function g1=pfdestilacion(x)
g1= (40*(35)^(2.05)*(1-x)^(2.05))/(35*(60)^(2.05));
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> puntofijo('pfdestilacion',0.25,0.00001,20)
>>c
     0.224680
```

3. **Método de Newton Raphson**

   a) $g(x_W) = 40(35)^{2.05}(1 - x_W)^{2.05} - 35(60)^{2.05}x_W = 0$



   b) Determinar el intervalo de confianza:

x_W	$\cdots$	0	0.1	0.2	0.3	$\cdots$
$g(x_W)$	$\cdots$	58532.8246	31700.0363	6120.48589	-18213.2018	$\cdots$

   c) Donde $c_0 = 0.21 \in [0.2\ ,\ 0.3]$

   d) Hallar el **criterio de convergencia** donde a =0.2 y b =0.3

   - g(0.2)g(0.3)=(6120.48589)(-18213.2018)=-111473644.628623< 0
   - $g'(x_W) = -40(35)^{2.05}(2.05)(1 - x_W)^{1.05} - 35(60)^{2.05}$ y $g''(x_W) = 40(35)^{2.05}(2.05)(1.05)(1 - x_W)^{0.05}$ son continuas y no se anulan en $[0.2\ ,\ 0.3]$

- Sea $c_0 = 0.21 \in [0.2\ ,\ 0.3]$

$$g(0.21)g''(0.21) = (3631.18236)(124515.666) = 45214269.9 > 0$$

Cumple con el criterio de convergencia.

e) Aplicar el algoritmo $c_{n+1} = c_n - \dfrac{g(c_n)}{g'(c_n)}$

Sea $c_0 = 0.21 \Longrightarrow c_1 = c_0 - \dfrac{g(c_0)}{g'(c_0)} = 0.21 - \dfrac{g(0.21)}{g'(0.21)} = 0.224624$

$c_2 = c_1 - \dfrac{g(c_1)}{g'(c_1)} = 0.224624 - \dfrac{g(0.224624)}{g'(0.224624)} = 0.224678$

$c_3 = c_2 - \dfrac{g(c_2)}{g'(c_2)} = 0.224678 - \dfrac{g(0.224678)}{g'(0.224678)} = 0.224677$

n	c_n	$\|c_{n+1} - c_n\|$
0	0.21	———
1	0.224624	0.0146237
2	0.224678	0.0000542
3	0.224677	0.0000001

f) La raíz obtenida es: 0.224677

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear dos archivo m

   destilacion.m

```
function g=destilacion(x)
g=40*(35)^(2.05)*(1-x)^(2.05)-35*(60)^(2.05)*x;
```

   derivedestilacion.m

```
function dg=derivedestilacion(x)
dg=-40*(35)^(2.05)*(2.05)*(1-x)^(1.05)-35*(60)^(2.05);
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

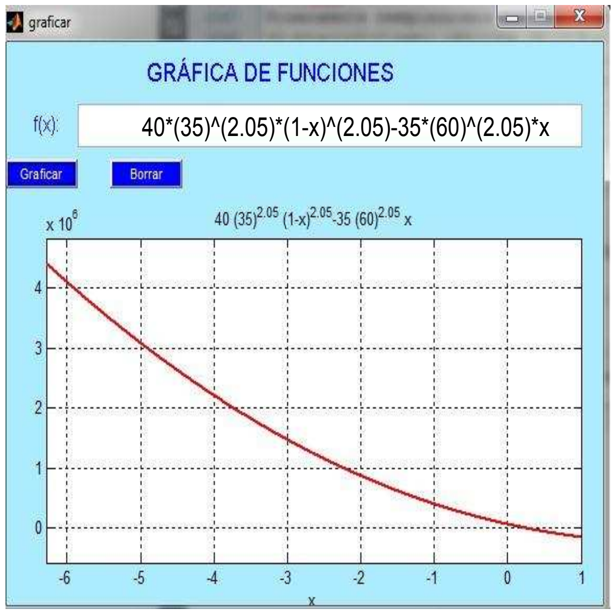
```
>>p0=newtonraphson('destilacion','derivedestilacion',
                                       0.21,0.00001,10)
```

```
p0 =

    0.2247
```

4. **Método de la falsa posición**

   a) $g(x_W) = 40(35)^{2.05}(1 - x_W)^{2.05} - 35(60)^{2.05}x_W = 0$



   b) Determinar el intervalo de confianza:

x_W	$\cdots$	0	0.1	0.2	0.3	$\cdots$
$g(x_W)$	$\cdots$	58532.8246	31700.0363	6120.48589	-18213.2018	$\cdots$

   c) Los valores iniciales son a =0.2, b =0.3 tales que $g(0.2) = 6120.48589 > 0$ y $g(0.3) = -18213.2018 < 0$ tienen signos opuestos, es decir:

$$g(0.2).g(0.3) = (6120.48589)(-18213.2018) = -111473644.628623 < 0$$

   d) La primera aproximación a la raíz se toma igual a

$$c = b - \frac{g(b)(b-a)}{g(b) - g(a)}$$

$$\begin{aligned}
c_0 &= 0.3 - \frac{\text{(-18213.2018)(0.3 - 0.2)}}{\text{-18213.2018 - 6120.48589}} &&= 0.225152 &&\Longrightarrow && g(c_0) = \text{-116.88631} \\
c_1 &= 0.225152 - \frac{\text{(-116.88631)(0.225152 - 0.2)}}{\text{-116.88631 - 6120.48589}} &&= 0.224681 &&\Longrightarrow && g(c_1) = \text{-0.80780013} \\
c_2 &= 0.224681 - \frac{\text{(-0.80780013)(0.224681 - 0.2)}}{\text{-0.80780013 - 6120.48589}} &&= 0.224681 &&\Longrightarrow && g(c_2) = \text{-0.06835812}
\end{aligned}$$

Hallando el **criterio de parada** o el primer valor del error en %:

$$\left|\frac{0.224681 - 0.225152}{0.224681} \times 100\,\%\right| = 0.21\,\%$$

iter	a	b	c	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	0.2	0.3	0.225152	(+)	(-)	(-)	—
1	0.2	0.225152	0.224681	(+)	(-)	(-)	0.21 %
2	0.2	0.224681	0.224678	(+)	(-)	(-)	0.0012 %
3	0.2	0.224678	0.224677	(+)	(-)	()	0.0001 %

e) La raíz obtenida es 0.224677

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   destilacion.m

```
function g=destilacion(x)
g=40*(35)^(2.05)*(1-x)^(2.05)-35*(60)^(2.05)*x;
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> c=reglafalsa('destilacion',0.2,0.3,0.00001)
c =
    0.2247
```

Cuadro comparativo de los 4 métodos iterativos

Método iterativos	**Iteraciones**	**Raíz**
Método de Bisección	6	0.22421875
Método de Punto fijo	12	0.22464898
Método de Newton Raphson	3	0.224677
Método de Regula Falsa	3	0.224677

3.4 Aplicación de la Ecuación de Redlich-Kwong

Ejemplo 3.4. Calcule el volumen molar de oxígeno a 50 atm y a 100°C, utilizando la ecuación de Redlich-Kwong. Datos: P_C=49.70 atm, T_C=154.40

Solución.

T=100 +273=373°K

La ecuación de Redlich-Kwong, (1.11) está dada por:

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

Reemplazando los datos en las ecuaciones (1.12), (1.13) y (1.14).

$$a = \frac{(0.42748)(0.082)^2(154.40)^{2.5}}{49.7} = 17.131893$$

$$b = \frac{(0.08664)(0.082)(154.40)}{49.7} = 0.022071$$

$$A = \frac{(0.082)(373)}{50} = 0.61172$$

$$B = \frac{17.131893}{50\sqrt{373}} - \frac{(0.082)(373)(0.022071)}{50} - (0.022071) = 0.003753$$

$$C = \frac{(17.131893)(0.022071)}{50\sqrt{373}} = 0.0003916$$

Luego, reemplazar los valores hallados en la ecuación (1.15) se transforma en:

$$V^3\text{- } 0.61172V^2\text{- } 0.003753V \text{ - } 0.0003916$$

1. **<u>Método de Bisección</u>**

   a) $f(V) = V^3$- 0.61172V^2- 0.003753V - 0.0003916=0

b) Determinar el intervalo de confianza

V	$\cdots$	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	$\cdots$
$f(V)$	$\cdots$	-0.035768	-0.030198	-0.006863	0.040238	0.117105	$\cdots$

c) Los valores iniciales son a =0.6 y b =0.7, tales que $f(0.6)$=-0.006863< 0 y $f(0.7)$=0.040238 > 0 tienen signos opuestos, es decir:

$$f(0.6)*f(0.7) = (-0.006863)(0.040238) = -0.000276141 < 0$$

d) Las aproximaciones son:

$$\begin{array}{lll}
c_0 = \frac{0.6\,+\,0.7}{2}=0.65 & \text{y} & f(0.65)=0.013342 \\
c_1 = \frac{0.6\,+\,0.65}{2}=0.625 & \text{y} & f(0.625)=0.002450 \\
c_2 = \frac{0.6\,+\,0.625}{2}=0.6125 & \text{y} & f(0.6125)=\text{-}0.002398 \\
\vdots = \quad \vdots & & \quad \vdots \\
c_9 = \frac{0.61875\,+\,0.61894532}{2}=0.61884766 & \text{y} & f(0.61884766)=0.000016
\end{array}$$

Hallando el **criterio de parada** o el primer valor del error en %:

$$\left|\frac{0.625-0.65}{0.625}\times 100\,\%\right| = 4\,\%$$

$$\left|\frac{0.6125-0.625}{0.6125}\times 100\,\%\right| = 2.04\,\%$$

$$\left|\frac{0.61875-0.6125}{0.61875}\times 100\,\%\right| = 1.01\,\%$$

iter	*a*	*b*	*c*	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	0.6	0.7	0.65	(-)	(+)	(-)	——
1	0.6	0.65	0.625	(-)	(+)	(-)	4 %
2	0.6	0.625	0.6125	(-)	(-)	(+)	2.04 %
3	0.6125	0.625	0.61875	(-)	(-)	(+)	1.01 %
4	0.61875	0.625	0.621875	(-)	(+)	(-)	0.50 %
5	0.61875	0.621875	0.6203125	(-)	(+)	(-)	0.25 %
6	0.61875	0.6203125	0.61953125	(-)	(+)	(-)	0.13 %
7	0.61875	0.61953125	0.619140625	(-)	(+)	(-)	0.06 %
8	0.61875	0.61914063	0.618945315	(-)	(+)	(-)	0.03 %
9	0.61875	0.61894532	0.61884766	(-)	(+)	(-)	0.02 %
10	0.61875	0.61894532	0.61884766	(-)	(+)	(-)	0.0000 %

e) La raíz obtenida es: 0.61884766

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   redlich.m

```
function f=redlich(x)
f=x^3 - (0.61172)*x^2 - (0.003753)*x -0.0003916;
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> c=biseccion('redlich',0.6,0.7,0.00001)
c =   0.6188
```

2. **Método del Punto Fijo**

   a) $f(V) = V^3$- 0.61172V^2- 0.003753V - 0.0003916=0

b) Determinar el intervalo de confianza

V	$\cdots$	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	$\cdots$
$f(V)$	$\cdots$	-0.035768	-0.030198	-0.006863	0.040238	0.117105	$\cdots$

c) Los valores iniciales son a =0.6 y b =0.7,

$$V_0 = \frac{0.6 + 0.7}{2} = 0.65$$

d) Hallar los posibles despejes:

$$\begin{aligned} 1)\ f(V) &= V^3\text{- } 0.61172V^2\text{- } 0.003753V \text{ - } 0.0003916\text{=}0 \\ V^3 &= 0.61172V^2\text{+ } 0.003753V \text{ + } 0.0003916 \\ V &= \sqrt[3]{0.61172V^2 + 0.003753V + 0.0003916} \\ \Rightarrow g_1(V) &= \sqrt[3]{0.61172V^2 + 0.003753V + 0.0003916} \end{aligned}$$

Derivando la función se obtiene:

$$g_1'(V) = \frac{1}{3}\frac{2(0.61172)V + 0.003753}{\sqrt[3]{(0.61172V^2 + 0.003753V + 0.0003916)^2}}$$

e) Reemplazamos el punto medio del intervalo de confianza aquel que cumpla con el **criterio de convergencia** osea $|g'(x_0)| \leq 1$, será apto para iterar.

$$|g_1'(V)| = \left|\frac{1}{3}\frac{2(0.61172)(0.65) + 0.003753}{\sqrt[3]{(0.61172(0.65)^2 + 0.003753(0.65) + 0.0003916)^2}}\right| = 0.651647 < 1.$$

Apto para iterar.

f) Iterar el despeje apto:

$$g_1(V) = \sqrt[3]{0.61172V^2 + 0.003753V + 0.0003916}$$

$$\begin{aligned}
g_1(0.65) &= \sqrt[3]{0.61172(0.65)^2 + 0.003753(0.65) + 0.0003916} && = 0.639298 \\
g_1(0.639298) &= \sqrt[3]{0.61172(0.639298)^2 + 0.003753(0.639298) + 0.0003894} && = 0.632305 \\
g_1(0.632305) &= \sqrt[3]{0.61172(0.632305)^2 + 0.003753(0.632305) + 0.0003916} && = 0.627715 \\
\vdots \quad & \quad \vdots && \quad \vdots \\
g_1(0.618809) &= \sqrt[3]{0.61172(0.618809)^2 + 0.003753(0.618809) + 0.0003916} && = 0.618809
\end{aligned}$$

i	V_i	$g_1(V_i) = V_{i+1}$	$\lvert g_1(V_i) - g_1(V_{i-1}) \rvert$
0	0.65	0.639298	——
1	0.639298	0.632305	0.006993
2	0.632305	0.627715	0.004590
3	0.627715	0.624693	0.003022
4	0.624693	0.622699	0.001994
5	0.622699	0.621382	0.001317
6	0.621382	0.620511	0.000871
7	0.620511	0.619935	0.000576
8	0.619935	0.619554	0.000381
9	0.619554	0.619302	0.000252
10	0.619302	0.619135	0.000167
11	0.619135	0.619024	0.000111
12	0.619024	0.618951	0.000074
13	0.618951	0.618903	0.000048
14	0.618903	0.618871	0.000032
15	0.618871	0.618850	0.000021
16	0.61885	0.618836	0.000014
17	0.618836	0.618826	0.000009
18	0.618826	0.618820	0.000007
19	0.61882	0.618816	0.000004
20	0.618816	0.618813	0.000003
21	0.618813	0.618811	0.000002
22	0.618811	0.618810	0.000001
23	0.61881	0.618809	0.000001
24	0.618809	0.618809	0.000000

g) La raíz obtenida es: 0.618809

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   pfredlich.m

```
function g1=pfredlich(x)
g1=((0.61172)*x^2 +(0.003753)*x+0.0003916)^(1/3);
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> puntofijo('pfredlich',0.65,0.00001,20)
>>
    0.618820
```

3. **Método de Newton Raphson**

   a) $f(V) = V^3$- 0.61172V^2- 0.003753V - 0.0003916=0

b) Determinar el intervalo de confianza

V	$\cdots$	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	$\cdots$
$f(V)$	$\cdots$	-0.035768	-0.030198	-0.006863	0.040238	0.117105	$\cdots$

c) Donde $c_0 = 0.62 \in [0.6\ ,\ 0.7]$

d) Hallar el **criterio de convergencia** donde a =0.6 y b =0.7

- $f(a)f(b)$ =(-0.006863)(0.040238)=-0.000276141< 0
- $f'(V) = 3V^2 - 2(0.61172)V - 0.003753$ y $f''(V) = 6V - 2(0.61172)$, son continuas y no se anulan en $[0.6\ ,\ 0.7]$.
- Sea $c_0 = 0.62 \in [0.6\ ,\ 0.7]$. $f(0.62)f''(0.62) = (0.000464)(2.49656) = 0.001159333 > 0$.

Cumple con el criterio de convergencia.

e) Aplicar el algoritmo $c_{n+1} = c_n - \dfrac{f(c_n)}{f'(c_n)}$

Sea $c_0 = 0.62 \Longrightarrow c_1 = c_0 - \dfrac{f(c_0)}{f'(c_0)} = 0.62 - \dfrac{f(0.62)}{f'(0.62)} = 0{,}618812$

$$c_1 = 0.618812$$

n	c_n	$\lvert c_{n+1} - c_n \rvert$
0	0.62	
1	0.618812	0.001188
2	0.618808	0.000004
3	0.618808	0.000000

f) La raíz obtenida es: 0.618808

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear dos archivos m

   redlich.m

```
function f=redlich(x)
f=x^3 - (0.61172)*x^2 - (0.003753)*x -0.0003916;
```

deriveredlich.m

```
function df=deriveredlich(x)
df=3*x^2 -2*(0.61172)*x - 0.003753;
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> p0=newtonraphson('redlich','deriveredlich',0.62,
                                        0.00001,10)
p0 =
    0.6188
```

4. <u>**Método de falsa posición**</u>

a) $f(V) = V^3$- 0.61172V^2- 0.003753V - 0.0003916=0

b) Determinar el intervalo de confianza

V	$\cdots$	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	$\cdots$
$f(V)$	$\cdots$	-0.035768	-0.030198	-0.006863	0.040238	0.117105	$\cdots$

c) Los valores iniciales son a =0.6 y b =0.7,

$$\Longrightarrow f(0.6)f(0.7) = (\text{-}0.006863)(0.040238) = \text{-}0.000276141 < 0$$

d) La primera aproximación a la raíz se toma igual a:

$$c = b - \frac{f(b)(b-a)}{f(b)-f(a)}$$

$$\begin{array}{llll}
c_0 & = 0.7 - \frac{0.040238(0.7 - 0.6)}{0.040238 + 0.006863} = 0.61457 & \Longrightarrow f(c_0) & = \text{-}0.001622 \\
c_1 & = 0.7 - \frac{0.040238(0.7 - 0.61457)}{0.040238 + 0.001622} = 0.617886 & \Longrightarrow f(c_1) & = \text{-}0.000359 \\
\vdots & \quad\vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots & & \\
c_5 & = 0.7 - \frac{0.040238(0.7 - 0.618798)}{0.040238 + 0.000004} = 0.618805 & \Longrightarrow f(c_5) & = \text{-}0.000001
\end{array}$$

Hallando el **criterio de parada** o el el primer error en %:

$$\left| \frac{0.61788 - 0.61457}{0{,}61788} * 100\,\% \right| = 0.54\,\%$$

iter	*a*	*b*	*c*	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	0.6	0.7	0.61457	(-)	(-)	(+)	—
1	0.61457	0.7	0.61788	(-)	(-)	(+)	0.54 %
2	0.61788	0.7	0.618606	(-)	(-)	(+)	0.12 %
3	0.618606	0.7	0.618764	(-)	(-)	(+)	0.03 %
4	0.618764	0.7	0.618798	(-)	(-)	(+)	0.01 %
5	0.618798	0.7	0.618805	(-)	(-)	(+)	0.00 %

e) La raíz obtenida es: 0.618805

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   redlich.m

```
function f=redlich(x)
f=x^3 - (0.61172)*x^2 - (0.003753)*x -0.0003916;
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> c=reglafalsa('redlich',0.6,0.7,0.00001)
c =
    0.6188
```

Cuadro comparativo de los 4 métodos iterativos

Método iterativos	**Iteraciones**	**Raíz**
Método de Bisección	10	0.61884766
Método de Punto fijo	24	0.618809
Método de Newton Raphson	3	0.618808
Método de Regula Falsa	5	0.618805

3.5 Aplicación de equilibrio químico

Ejemplo 3.5. Calcule la composición de la mezcla en porcentaje molar de los productos de reacción en equilibrio, que ocurre a 900°C y a 1 atm de presión entre el monóxido de carbono y dióxido de azufre para obtener azufre elemental y dióxido de carbono cuyo K_p es 81.6.

Solución.

La reacción está dada por:

$$2CO_{(g)} + SO_{2(g)} \Leftrightarrow \frac{1}{2}S_{2(g)} + 2CO_{2(g)}$$

Moles iniciales	2	1	0	0
Moles formados	0	0	$\frac{x}{2}$	$2x$
Moles consumidas	$2x$	x	0	0
Moles en equilibrio	$2-2x$	$1-x$	$\frac{x}{2}$	$2x$
Moles totales	$2-2x$	$+1-x$	$+\ \frac{x}{2}$	$+2x=\frac{6-x}{2}$

De la ecuación (1.20) se tiene:

$$K_p = \frac{p_{S_2}^{1/2}\ p_{CO_2}^2}{p_{CO}^2\ p_{SO_2}} = 81.6$$

$$K_p = K_x\ P^{\Delta n}, \quad \Delta n = \left(\frac{1}{2} + \right) - (2+1) = -\frac{1}{2}$$

P= 1atm

$$K_p = \frac{\left(\frac{x/2}{(6-x)/2}\right)^{1/2}\left(\frac{2x}{(6-x)/2}\right)^2}{\left(\frac{2-2x}{(6-x)/2}\right)^2\left(\frac{1-x}{(6-x)/2}\right)} = \frac{(6-x)^{\frac{1}{2}}x^{\frac{5}{2}}}{2(1-x)^3}$$

$$81.6 = \frac{(6-x)^{\frac{1}{2}}\ x^{\frac{5}{2}}}{2(1-x)^3}$$

$$163.2(1-x)^3 = (6-x)^{\frac{1}{2}}x^{\frac{5}{2}}$$

$$163.2(1-x)^3 = \sqrt{(6-x)x^5}$$

$$163.2(1-x)^3 = \sqrt{6x^5-x^6}$$

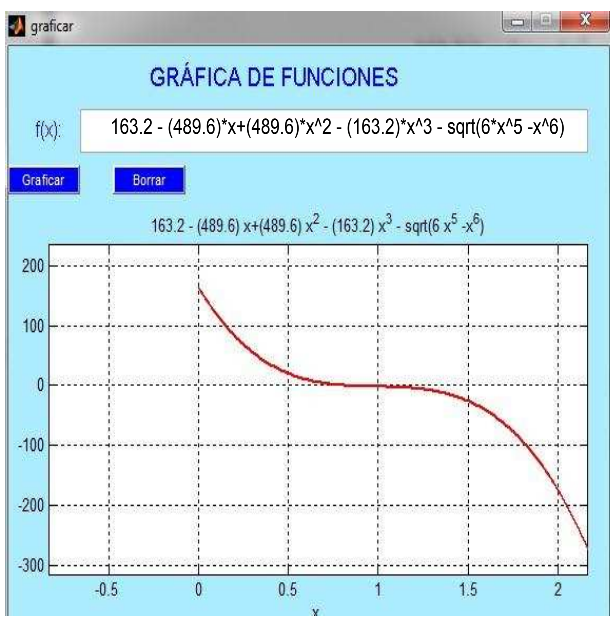
$$163.2(1-3x+3x^2-x^3) = \sqrt{6x^5-x^6}$$

$$163.2-489.6x+489.6x^2-163.2x^3 = \sqrt{6x^5-x^6}$$

$$\Longrightarrow f(x) = 163.2-489.6x+489.6x^2-163.2x^3-\sqrt{6x^5-x^6}$$

1. **Método de Bisección**

   a) $f(x)$ = 163.2 -489.6x + 489.6x^2 - 163.2x^3 - $\sqrt{6x^5-x^6} = 0$



b) Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	19.985422	9.796800	3.462593	0.000251	-1.572167	$\cdots$

c) Los valores iniciales son a =0.8 y b =0.9, tales que $f(0.8)$=0.00025$>$ 0 y $f(0.9)$=-1.572167$<$ 0 tienen signos opuestos, es decir:

$$f(0.8)*f(0.9) = (0.00025)(1.572167) = -0.00039462 < 0$$

d) Las aproximaciones son:

$$\begin{aligned}
c_0 &= \tfrac{0.8\,+\,0.9}{2}{=}0.85 && \text{y} \quad f(0.85){=}{-0.960849}\\
c_1 &= \tfrac{0.8\,+\,0.85}{2}{=}0.825 && \text{y} \quad f(0.825){=}{-0.531689}\\
c_2 &= \tfrac{0.8\,+\,0.825}{2}{=}0.8125 && \text{y} \quad f(0.8125){=}{-0.279525}\\
\vdots &= \quad \vdots && \qquad \vdots\\
c_{12} &= \tfrac{0.8\,+\,0.80002442}{2}{=}0.8000122 && \text{y} \quad f(0.8000122){=}{-0.000036}
\end{aligned}$$

Hallando el **criterio de parada** o el el primer error en %:

$$\left|\frac{0.825-0.85}{0.825}\times 100\,\%\right| = 3.03\,\%$$

iter	a	b	c	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	0.8	0.9	0.85	(+)	(-)	(-)	—
1	0.8	0.85	0.825	(+)	(-)	(-)	3.03 %
2	0.8	0.825	0.8125	(+)	(-)	(-)	1.54 %
3	0.8	0.8125	0.80625	(+)	(-)	(-)	0.78 %
4	0.8	0.80625	0.803125	(+)	(-)	(-)	0.39 %
5	0.8	0.803125	0.8015625	(+)	(-)	(-)	0.19 %
6	0.8	0.8015625	0.80078125	(+)	(-)	(-)	0.10 %
7	0.8	0.80078125	0.80039063	(+)	(-)	(-)	0.05 %
8	0.8	0.80039063	0.80019532	(+)	(-)	(-)	0.02 %
9	0.8	0.80019532	0.80009766	(+)	(-)	(-)	0.01 %
10	0.8	0.80009766	0.80004883	(+)	(-)	(-)	0.006 %
11	0.8	0.80004883	0.80002442	(+)	(-)	(-)	0.003 %
112	0.8	0.80002442	0.80001221	(+)	(-)	(+)	0.002 %

e) La raíz obtenida es: 0.80001221

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   equilibrio.m

```
function f=equilibrio(x)
f=163.2 - (489.6)*x+(489.6)*x^2 - (163.2)*x^3 -
                                  sqrt(6*x^5 -x^6);
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> c=biseccion('equilibrio',0.8,0.9,0.00001)
c =
    0.80001
```

2. **Método del Punto Fijo**

a) $f(x) = 163.2 - 489.6x + 489.6x^2 - 163.2x^3 - \sqrt{6x^5 - x^6} = 0$

b) Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	19.985422	9.796800	3.462593	0.000251	-1.572167	$\cdots$

c) Los valores iniciales son a =0.8 y b =0.9,

$$x_0 = \frac{0.8 + 0.9}{2} = 0.85$$

d) Hallar los posibles despejes:

$$\begin{aligned}
1)\ f(x) &= 163.2 - 489.6x + 489.6x^2 - 163.2x^3 - \sqrt{6x^5 - x^6} = 0 \\
489.6x &= 163.2 + 489.6x^2 - 163.2x^3 - \sqrt{6x^5 - x^6} \\
x &= \frac{163.2 + 489.6x^2 - 163.2x^3 - \sqrt{6x^5 - x^6}}{489.6} \\
\Rightarrow g(x) &= \frac{163.2 + 489.6x^2 - 163.2x^3 - \sqrt{6x^5 - x^6}}{489.6}
\end{aligned}$$

Derivando la función se obtiene:

$$g'(x) = \frac{2(489.6)x \text{ -}3(163.2)x^2 - \frac{1}{2}(30x^4 - 6x^5)(6x^5 - x^6)^{-\frac{1}{2}}}{489.6}$$

e) Reemplazamos el punto medio del intervalo de confianza aquel que cumpla con el **criterio de convergencia** osea $|g'(x_0)| \leq 1$, será apto para iterar.

$$|g'(0.85)| = \left| \frac{2(489.6)(0.85) \text{ -}3(163.2)(0.85)^2 - \frac{1}{2}(30(0.85)^4 - 6(0.85)^5)(6(0.85)^5 - (0.85)^6)^{-\frac{1}{2}}}{489.6} \right| = 0.968449 < 1.$$

Apto para iterar.

f) Iterar el despeje apto:

$$g(x) = \frac{163.2 + 489.6x^2 - 163.2x^3 - \sqrt{6x^5 - x^6}}{489.6}$$

$$\begin{aligned}
g(0.85) &= \frac{163.2 + 489.6(0.85)^2 - 163.2(0.85)^3 - \sqrt{6(0.85)^5 - (0.85)^6}}{489.6} && = 0.848037 \\
g(0.848037) &= \frac{163.2 + 489.6(0.848037)^2 - 163.2(0.848037)^3 - \sqrt{6(0.848037)^5 - (0.848037)^6}}{489.6} && = 0.846136 \\
\vdots \quad & \quad \vdots && \vdots \\
g(0.800103) &= \frac{163.2 + 489.6(0.800103)^2 - 163.2(0.800103)^3 - \sqrt{6(0.800103)^5 - (0.800103)^6}}{489.6} && = 0.800099
\end{aligned}$$

i	V_i	$g_1(V_i) = V_{i+1}$	$\lvert g_1(V_i) - g_1(V_{i-1})\rvert$
0	V_0 =0.85	$g_1(V_0)$ =0.848037	—-
1	V_1 =0.848037	$g_1(V_1)$ =0.846136	0.001901
2	V_2 =0.846136	$g_1(V_2)$ =0.844297	0.001839
3	V_3 =0.844297	$g_1(V_3)$ =0.842518	0.001779
4	V_4 =0.842518	$g_1(V_4)$ =0.840798	0.001720
5	V_5 =0.840798	$g_1(V_5)$ =0.839136	0.001662
6	V_6 =0.839136	$g_1(V_6)$ =0.837531	0.001605
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
124	V_{124} =0.800129	$g_1(V_{124})$ =0.800123	0.000006
125	V_{125} =0.800123	$g_1(V_{125})$ =0.800118	0.000005
126	V_{126} =0.800118	$g_1(V_{126})$ =0.800113	0.000005
127	V_{127} =0.800113	$g_1(V_{127})$ =0.800108	0.000005
128	V_{128} =0.800108	$g_1(V_{128})$ =0.800103	0.000005
129	V_{129} =0.800103	$g_1(V_{129})$ =0.800099	0.000004

g) La raíz obtenida es: 0.800099

Aplicando el Software MATLA R2010a

1. Crear un archivo m

   pfequilibrio.m

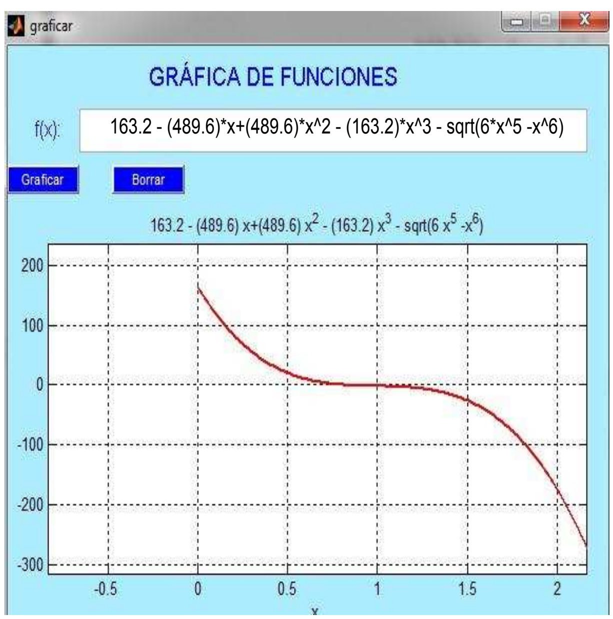
```
function g= pfequilibrio(x)
g=(163.2+(489.6)*x^2 -(163.2)*x^3 -
       (6*x^5 -x^6)^(1/2))/(489.6);
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> puntofijo('pfequilibrio',0.85,0.0000001,200)
>>
    0.800014
```

3. **Método de Newton Raphson**

a) $f(x)$ = 163.2 -489.6x + 489.6x^2 - 163.2x^3 - $\sqrt{6x^5 - x^6} = 0$



b) Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	19.985422	9.796800	3.462593	0.000251	-1.572167	$\cdots$

c) Donde $c_0 = 0.80001 \in [0.8\ ,\ 0.9]$

d) Hallar el **criterio de convergencia** donde a =0.8 y b =0.9

- $f(0.8)f(0.9)$ =(0.00025)(-1.572167)=-0.00039462< 0
- $g'(x) = -489.6 + 2(489.6)x$ -3(163.2)$x^2 - \frac{1}{2}(30x^4 - 6x^5)(6x^5 - x^6)^{-\frac{1}{2}}$

  y

  $$g''(x) = 2(489.6) \text{ -6(163.2)}x - \tfrac{1}{2}(120x^3 - 30x^4)(6x^5 - x^6)^{-\frac{1}{2}} +$$

  $$\tfrac{1}{4}(30x^4 - 6x^5)(30x^4 - 6x^5)(6x^5 - x^6)^{-\frac{3}{2}}$$

  son continuas y no se anulan en $[0.8\ ,\ 0.9]$.

- Sea $c_0 = 0.80001 \in [0.8\ , 0.9]$. $f(0.80001)f''(0.80001) = (0.000016)(188.978187) = 0.00295504 > 0$.

Cumple con el criterio de convergencia.

e) Aplicar el algoritmo $c_{n+1} = c_n - \dfrac{f(c_n)}{f'(c_n)}$

Sea $c_0 = 0.80001 \Longrightarrow c_1 = c_0 - \dfrac{f(c_0)}{f'(c_0)} = 0.80001 - \dfrac{f(0.80001)}{f'(0.80001)} = 0.80001066$

$$c_1 = 0.80001066$$

n	c_n	$\lvert c_{n+1} - c_n \rvert$
0	0.80001	
1	0.800011	0.000001
2	0.800011	0.000000

f) La raíz obtenida es: 0.800011

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear dos archivos m

   equilibrio.m

```
function f=equilibrio(x)
f=163.2 - (489.6)*x+(489.6)*x^2 - (163.2)*x^3 -
                                    sqrt(6*x^5 -x^6);
```

deriequilibrio.m

```
function f=deriequilibrio(x)
f=-489.6 -2*(489.6)*x - 3*(163.2)*x^2 -
    (1/2)*(30*x^4 -6*x^5)*(6*x^5 - x^6)^(-1/2);
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> p0=newtonraphson('equilibrio','deriequilibrio',
                                    0.80001,0.00001,10)
p0 =
    0.800012
```

4. <u>**Método de falsa posición**</u>

   a) $f(x) = 163.2$ -489.6x + 489.6x^2 - 163.2x^3 - $\sqrt{6x^5 - x^6} = 0$

   b) Determinar el intervalo de confianza

x	$\cdots$	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	$\cdots$
$f(x)$	$\cdots$	19.985422	9.796800	3.462593	0.000251	-1.572167	$\cdots$

   c) Los valores iniciales son a =0.8 y b =0.9,

$$\Longrightarrow f(0.8)f(0.9) = (\ 0.00025\ )(-1.572167) = -0.00039462 < 0$$

   d) La primera aproximación a la raíz se toma igual a:

$$c = b - \frac{f(b)(b-a)}{f(b)-f(a)}$$

$$\begin{array}{llll} c_0 & = 0.9 - \frac{(-1.572167)(0.9 - 0.8)}{-1.572167 - 0.000251} & = 0.800016 \Longrightarrow f(c_0) & = -0.000125 \\ c_1 & = 0.800016 - \frac{(-0.000125)(0.800016 - 0.8)}{-0.000125 - 0.000251} & = 0.800011 \Longrightarrow f(c_1) & = -0.000008 \\ c_2 & = 0.800016 - \frac{(-0.000125)(0.800016 - 0.800011)}{-0.000125 - 0.000008} & = 0.800011 \Longrightarrow f(c_1) & = 0.000000 \end{array}$$

Hallando el **criterio de parada** o el el primer error en %:

$$\left|\frac{0.617686 - 0.614407}{0{,}617686} * 100\,\%\right| = 0.53\,\%$$

iter	*a*	*b*	*c*	$f(a)$	$f(c)$	Producto	error
0	0.8	0.9	0.800016	(+)	(-)	(-)	—
1	0.8	0.800016	0.800011	(-)	(-)	(+)	0.000625 %
2	0.800011	0.800016	0.800011	(-)	(-)	(+)	0.12 %

e) La raíz obtenida es: 0.800011

Aplicando el Software MATLAB R2010a

1. Crear un archivo m

   equilibrio.m

```
function f=equilibrio(x)
f=163.2 - (489.6)*x+(489.6)*x^2 - (163.2)*x^3 -
                                sqrt(6*x^5 -x^6);
```

2. Ingresar en la ventana de MATLAB R2010a lo siguiente:

```
>> c=reglafalsa('equilibrio',0.8,0.9,0.00001)
c =
    0.80001
```

Moles en equilibrio

CO	2-2x	2-2(0.80001)	$= 0.39998$
SO_2	1-x	=1-0.80001	$= 0.19999$
S_2	$\frac{x}{2}$	$\frac{0.80001}{2}$	$= 0.400005$
CO_2	2x	= 2(0.80001)	$= 1.60002$

Moles totales en equilibrio

$$\frac{6 - 0.80001}{2} = 2.599995$$

Moles en equilibrio

$$y_{CO} = \frac{0.39998}{2.599995} \times 100 = 13.38\,\%$$

$$y_{SO_2} = \frac{0.19999}{2.599995} \times 100 = 7.69\,\%$$

$$y_{S_2} = \frac{0.400005}{2.599995} \times 100 = 15.39\,\%$$

$$y_{C0_2} = \frac{1.60002}{2.599995} \times 100 = 61.54\,\%$$

Cuadro comparativo de los 4 métodos iterativos

Método iterativos	**Iteraciones**	**Raíz**
Método de Bisección	12	0.80001221
Método de Punto fijo	129	0.800099
Método de Newton Raphson	2	0.800011
Método de Regula Falsa	2	0.800011

Conclusiones

1. Las ecuaciones de Van Der Waals, Colebrook-White, Destilación Simple, Redlich-Kwong y de Equilibrio Químico, se pueden resolver por los métodos numéricos de Bisección, Iteración de Punto fijo, Newton-Raphson Falsa Posición.

2. La aproximación a la solución exacta de las ecuaciones dadas esta determinada por los criterios de convergencia de cada uno de los métodos.

3. El Software MATLAB R2010a nos permite simplificar el proceso de solución de cada uno de las ecuaciones dadas y llegar en forma rápida a una solución más exacta.

4. En el presente trabajo se detalla en forma analítica la solución de las ecuaciones dadas y se comprueban a través del software matemático MATLAB R2010a.

Bibliografía

[1] **Abdelwahab K., Ronald B.** *An Introduction to Numerical Methods a MATLAB Approach*, Trird Edition-2012.

[2] **Alhiet O., Cristian M. y Alfonso V.** *Software para ciencia e ingeniería MATLAB* , Empresa Editora MACRO-2010.

[3] **Burden R. y Faires J.**, *" Análisis Numérico"*, 9^a ed. Cengage, 2011.

[4] **Ezquerro J.** *Inicicación a los métodos numéricos*, edición 2012.

[5] **Mathews, J.H; Fink, K.**, *" Métodos Numéricos con Matlab"*, Edición 1999.

[6] **Medina J.**, *Métodos numéricos utilizando POLYMATH, MATHCAD y MATLAB aplicados a la ingeniería química*, Febrero 2012.

[7] **Prieto J.**, *Métodos iterativos para resolver ecuaciones no lineales* , Mérida - 2008

[8] **Rodríguez L.**, *Análisis numérico báico un enfoque algorítmico con el soporte de MATLAB*, edición 2011

[9] **S. Chapra y R. Canale**, *" Numerical Methods for Engineers"*, 6 edición Mcgraw- Hill, 2010.

[10] **Thomas E. y Philip R.**, *Introducción a la Fisicoquímica: Termodinámica*, PEARSON EDUCACIÓN, México, 2007

[11] **Douglas C.**, *Física para ciencias e ingeniería con física moderna volumen 2*, PEARSON EDUCACIÓN, México, 2008

Linkografía


```
https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/16373/9/
Microsoft%20Word%20-%209.PROBLEMAS%20APLICADOS%20A%
20LA%20INGENIERIA%20QUIMICA.pdf
```

```
http://www.ieslaaldea.com/documentos/fisicayquimica/
equilibrioquimico.pdf
```

```
http://webs.ono.com/tomas_mata/cuestiones_problemas_
equilibrio.pdf
```

```
http://assets.mheducation.es/bcv/guide/capitulo/
844816962X.pdf
```

```
http://caminos.udc.es/info/asignaturas/grado_itop/
102/pdf/DocsApoyo/Tema4_FR/60TeorFuncCont-1.pdf
```

Anexo

Método de Bisección

```
function v=biseccion(f,a,b,tol,n)
f=inline(f);
v=[ ]
c=(a+b)/2;
i=0;
v=[v; i a b c f(c)];
while (i<n&abs(a-b)>tol)
if f(a)*f(c)<0
i=i+1;
b=c;
else
if f(c)*f(b)<0
i=i+1;
a=c;
else
i=n;
end
end
if i<n
c=(a+b)/2;
v=[v; i a b c f(c)];
end
end
if (i==n)
```

```
fprintf('El método fracasó desues de %3.0f iteraciones',i)
else
fprintf('El método tuvo exito desues de %3.0f iteraciones',i)
fprintf('\n')
fprintf('Resultados obtenidos')
fprintf('\n')
fprintf('i  a_i  b_i  c_i  f(c_i)/n ')
end
```

Punto fijo

```
function v=puntofijo(g,x0,maxi,tol)
g=inline(g);
v=[0 x0 g(x0)];
i=1;
x1=g(x0);
v=[v;i x1 g(x1)];
while (i<maxi&abs(x1-x0)>tol)
x0=x1;
i=i+1;
x1=g(x0);
v=[v; i x1 g(x1)];
end
if (i==maxi)
fprintf('El metodo fracaso despues de
fprintf('\n')
else
fprintf('El metodo tuvo exito despues de
fprintf('\n')
fprintf('Resultados obtenidos:')
fprintf('\n')
fprintf(' i x_i g(x_i) ')
fprintf('\n')
v;
end
```

Algoritmo del método de Newton-Raphson

```
function [ X ] = NRM( F,x0,e )
i = 1;
Ea = e;
z(1) = x0;
syms x;
df = strcat('diff(',F,')');
ddf = strcat('diff(',F,',2)');
df = eval(df);
ddf = eval(ddf);
while Ea >= e
x = z(i);
X(i,1) = i;
X(i,2) = x;
f = eval(F);
ff = eval(df);
fff = eval(ddf);
z(i + 1) = x - ((f * ff)/(ff^2 - (f * fff)));
if i > 1
Ea = abs((z(i) - z(i-1))/z(i))*100;
X(i,3) = Ea;
if Ea < e
break;
end
else
X(i,3) = 100;
end
i = i + 1;
end
end
```

Algoritmo de la falsa posición

```
function v=falapos(f,a,b,tol,n)
f=inline(f);
v=[ ];
c=b-f(b)*(b-a)/(f(b)-f(a));
i=0;
v=[v; i a b c f(c)];
while (i < n & abs(a − b) > tol)
if f(a) ∗ f(c) < 0
i=i+1;
b=c;
else
if f(c) ∗ f(b) < 0
i=i+1;
a=c;
else
i=n;
end
end
if i < n
c=b-f(b)*(b-a)/(f(b)-f(a));
v=[v; i a b c f(c)];
end
end
if (i==n)
else
fprintf('El método fracasó despues de %3.0f iteraciones',i)
else
fprintf('El método tuvo exito despues de %3.0f iteraciones',i)
fprintf('\n')
fprintf('Resultados obtenidos')
fprintf('\n')
fprintf('i  a_i  b_i  c_i  f(c_i)/n ')
end
```