

29
71



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

TECNICAS NUMERICAS APLICADAS A LA
INGENIERIA QUIMICA

TESIS MANCOMUNADA

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A N

JOSE ANTONIO HERNANDEZ MORALES

SERGIO ALVAREZ NAVARRO

1 9 8 6



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

C O N T E N I D O

	PAG.
OBJETIVOS	1
CAPITULO I GENERALIDADES	2
I.1 LA INGENIERIA QUIMICA Y LA FORMULACION DE MODELOS MATEMATICOS	2
I.2 TIPOS DE MODELOS APLICADOS A LA INGENIERIA QUIMI- CA	4
I.3 SIMBOLOGIA	8
CAPITULO II	10
TECNICAS APLICADAS A LA INGENIERIA QUIMICA	10
II.0 INTRODUCCION	10
II.1 TECNICAS MATEMATICAS ANALIZADAS EN LA PRESENTE TESIS	13
II.2 INTERPOLACION	13
II.2.1 INTERPOLACION EN UNA VARIABLE	14
II.2.2 ALGORITMO DE INTERPOLACION	16
II.2.3 TRAZADOR DE CURVAS	16
II.2.4 INTERPOLACION EN DOS VARIABLES	20
II.3 RESOLUCION DE UNA ECUACION ALGEBRAICA NO LINEAL	27
II.3.0 INTRODUCCION	27
II.3.1 TECNICAS BASADAS EN EL POLINOMIO DE SERIE DE TAYLOR O EN EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEW- TON	27

II.3.2	TECNICAS QUE NO DEPENDEN DE LOS POLINOMIOS DE TAYLOR O NEWTON	34
II.3.3	OTRAS TECNICAS ANALITICAS	40
II.3.3.1	ECUACION CUADRATICA	40
II.3.3.2	ECUACION CUBICA	41
II.3.3.3	DIVISION SINTETICA	48
II.4	TECNICAS DE INTEGRACION	50
II.4.0	INTRODUCCION	50
II.4.1	REGLA DEL TRAPECIO	54
II.4.2	REGLA DE SIMPSON	56
II.4.3	REGLA DE SIMPSON 3/8	58
II.4.4	OTRAS TECNICAS GENERADAS POR EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON	61
II.4.5	TECNICAS QUE NO DEPENDEN DEL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON	70
II.4.5.1	CUADRATURA GAUSSIANA	72
II.4.5.1.0	INTRODUCCION	72
II.4.5.1.1	METODOS DE GAUSS	78
II.5	RESOLUCION DE UNA ECUACION DIFERENCIAL ORDI_ NARIA	82
II.5.0	INTRODUCCION	82
II.5.1	METODO DE TAYLOR	83
II.5.2	METODO DE EULER	84
II.5.3	METODO DE EULER MODIFICADO	85
II.5.4	METODOS RUNGE - KUTTA DE ORDEN M	87
II.5.4.0	INTRODUCCION	87
II.5.4.1	RUNGE - KUTTA DE 2° ORDEN	89
II.5.4.2	RUNGE - KUTTA DE 3er. ORDEN UTILIZANDO 7 CONSTANTES	94

II.5.4.8	RUNGE - KUTTA DE 4° ORDEN UTILIZANDO 7 CONSTANTES	100
II.5.5	METODOS DE MULTIPASOS DE INTEGRACION ABIERTA	104
II.5.5.0	INTRODUCCION	104
II.5.5.1	METODO DE ADAMS - BASHFORTH DE DOS PASOS	107
II.5.5.2	METODO DE ADAMS - BASHFORTH DE TRES PASOS	108
II.5.5.3	METODO DE ADAMS - BASHFORTH DE CUATRO PASOS	109
II.5.5.4	METODO DE ADAMS - BASHFORTH DE CINCO PASOS	110
II.5.5.5	DIAGRAMA DE FLUJO GENERAL	111
II.5.6	METODOS DE MULTIPASOS DE INTEGRACION CERRADA	111
II.5.7	METODOS PREDICTORES - CORRECTORES	114
II.5.7.0	INTRODUCCION	114
II.5.7.1	METODOS MAS UTILIZADOS	115
II.5.8	METODO DE DIFERENCIAS FINITAS	117
II.5.8.0	INTRODUCCION	117
II.5.8.1	SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES LINEALES	122
II.5.8.2	METODOS DE RESOLUCION DE ECUACIONES DIFEREN CIALES DE ORDEN SUPERIOR	124
II.6	RESOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES	127
II.6.1	SOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES	127
II.6.1.1	METODOS ITERATIVOS	128
II.6.1.2	METODOS DIRECTOS	131
II.6.2	SOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES	147
II.6.3	SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS	150
II.7	AJUSTE DE DATOS	153

	PAG.
II.7.0 INTRODUCCION	153
II.7.1 POLINOMIO DE INTERPOLACION	155
II.7.2 POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON	157
II.7.3 MINIMOS CUADRADOS	161
II.7.3.1 MINIMOS CUADRADOS PARA MODELOS LINEALES	161
II.7.3.2 MINIMOS CUADRADOS NO LINEALES	168
II.7.4 MINIMOS CUADRADOS PARA MODELOS MATEMATICOS REPRESENTADOS POR POLINOMIOS ORTOGONALES	172
II.8 TECNICA DE GRAFICACION	180
CAPITULO III	
RESOLUCION DE PROBLEMAS DE INGENIERIA QUIMICA	182
III.0 GENERALIDADES	182
III.1 PROBLEMAS	185
CAPITULO IV CONCLUSIONES	
IV.1 GENERALES	229
IV.2 ANALISIS DE LAS DIVERSAS TECNICAS PRESENTADAS	230
BIBLIOGRAFIA	235

OBJETIVOS

DESDE QUE LA INGENIERIA QUIMICA SE CONSOLIDO COMO UNA PROFESION, SE HA ORIENTADO LA FORMACION DE SUS PROFESIONALES HACIA EL DESARROLLO DE LAS CAPACIDADES Y HABILIDADES PARA EL ESTUDIO DE CUALQUIER FENOMENO FISICO Y/O QUIMICO. ESTE ENFOQUE HA PERMITIDO QUE EL INGENIERO QUIMICO, AUNADO AL CONOCIMIENTO DE LAS LEYES QUE RIGEN A DICHS FENOMENOS, TENGA UNA FORMACION MATEMATICA PARA UNA AMPLIA APLICACION PRACTICA, ES DECIR, PUE DA APLICAR LAS TECNICAS EXISTENTES PARA RESOLVER CUALQUIER MO DELO MATEMATICO PRODUCTO DEL ESTUDIO DE UN FENOMENO.

LA ENORME VARIEDAD DE LOS FENOMENOS FISICOS Y/O QUIMICOS QUE EXISTEN EN LA NATURALEZA, O TODOS AQUELLOS QUE PUEDEN GENERAR SE CON LA INTERACCION DEL HOMBRE CON LA NATURALEZA, HAN CREADO A SU VEZ, UN CAMPO MUY AMPLIO DE APLICACION PARA LA CIENCIA MATEMATICA, QUE DESARROLLO ALGUNAS TECNICAS QUE ACTUALMENTE CONOCEMOS COMO METODOS NUMERICOS.

EL OBJETIVO DE ESTA TESIS ES PRESENTAR EN FORMA RESUMIDA Y ACESIBLE TODAS LAS TECNICAS MATEMATICAS QUE SE APLICAN EN EL CAMPO DE LA INGENIERIA QUIMICA, ASI COMO TAMBIEN PROVEER UN PAQUETE LO SUFICIENTEMENTE AMPLIO Y REPRESENTATIVO DE LOS METODOS NUMERICOS PARA QUE TANTO ALUMNOS COMO PROFESORES DE INGENIERIA QUIMICA PUEDAN UTILIZARLOS FACILMENTE.

CAPITULO I.- GENERALIDADES

I.1 LA INGENIERIA QUIMICA Y LA FORMULACION DE MODE- LOS MATEMATICOS.

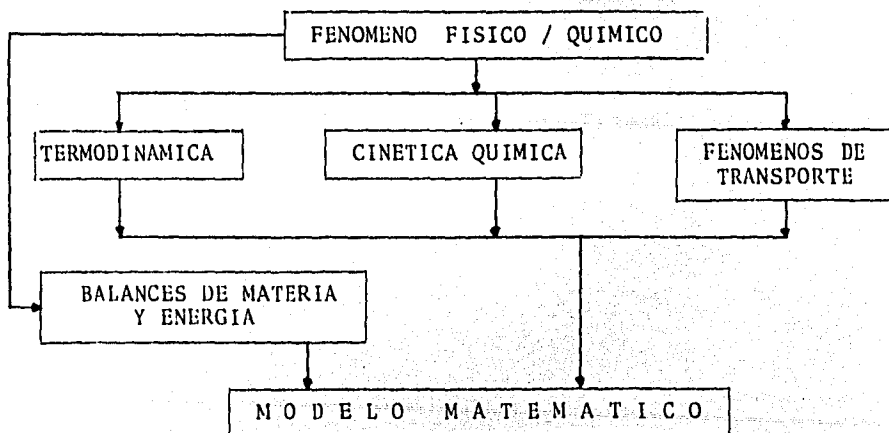
DADO QUE LA ACTIVIDAD PRINCIPAL DEL INGENIERO QUIMICO ES DESARROLLAR Y DISEÑAR PROCESOS PARA EL OPTIMO APROVECHAMIENTO DE LOS RECURSOS NATURALES, TRANSFORMANDOLOS DE UNA MANERA INDISCUTIBLEMENTE ECONOMICA EN PRODUCTOS UTILES AL HOMBRE, ES NECESARIO TENER LA INFORMACION SUFICIENTE ACERCA DE LOS FENOMENOS QUE SE MANIFIESTAN O INDUCEN SOBRE ESTOS RECURSOS NATURALES PARA LA ESPERADA TRANSFORMACION EN PRODUCTOS. EL HOMBRE, EN SU PERMANENTE AFAN POR OBTENER ESTA INFORMACION MEDIANTE LA OBSERVACION Y LA EXPERIMENTACION, HA LOGRADO DESCUBRIR Y FORMULAR UN CONJUNTO DE LEYES Y PRINCIPIOS QUE ACTUALMENTE FORMAN PARTE DE LAS CIENCIAS FISICA Y QUIMICA, DENTRO DE SUS DIFERENTES AREAS COMO LA TERMODINAMICA, FENOMENOS DE TRANSPORTE Y LA CINETICA QUIMICA. ESTAS LEYES Y ESTOS PRINCIPIOS, APLICADOS EN FORMA GENERALIZADA A CUALQUIER FENOMENO, DETERMINARAN LA POSIBILIDAD Y, EN SU CASO, LA VELOCIDAD CON LA CUAL SE REALIZARA EL FENOMENO. CABE HACER NOTAR LA IMPORTANCIA DE ESTO ULTIMO, YA QUE LA VELOCIDAD DE PRODUCCION DE CIERTO PRODUCTO ESTARA DIRECTAMENTE RELACIONADA CON SU ACCESO AL MERCADO Y CON LA UTILIDAD O RENTABILIDAD DEL PROCESO DE SU OBTENCION.

ENTRE LAS LEYES QUE SE HAN FORMULADO EXISTE UNA DE APLICACION FUNDAMENTAL PARA PODER REPRODUCIR UN FENOMENO. ESTA ES LA LEY DE CONSERVACION DE ALGUNA PROPIEDAD, YA SEA MASA, ENERGIA O

CANTIDAD DE MOVIMIENTO.

DICHA LEY HA PERMITIDO DESARROLLAR TECNICAS PARA LA FORMULACION DE MODELOS MATEMATICOS DE LOS FENOMENOS QUIMICOS Y/O FISICOS. LA UTILIDAD DE TODO LO ANTERIOR LO PODEMOS RESUMIR DE LA SIGUIENTE MANERA :

" CUALQUIER FENOMENO QUIMICO Y/O FISICO PUEDE SER REPRESENTADO MEDIANTE UNA ECUACION O CONJUNTO DE ECUACIONES FORMULADAS A PARTIR DE BALANCES DE MATERIALES Y ENERGIA, ASI COMO DE LOS PRINCIPIOS O LEYES DE LA TERMODINAMICA, CINETICA QUIMICA Y FENOMENOS DE TRANSPORTE QUE LO RIGEN " .



(Esquema 1)

INDEPENDIENTEMENTE DE QUE LA QUIMICA Y LA FISICA ESTEN PRESENTES COMO CIENCIAS BASICAS SEPARADAS, EL DIAGRAMA ANTERIOR REPRESENTA LAS AREAS DE CONOCIMIENTO FUNDAMENTALES PARA PODER FORMULAR EL MODELO MATEMATICO DEL FENOMENO.

EN EL AREA DE LA INGENIERIA QUIMICA A LOS FENOMENOS FISICOS EXCLUSIVOS SE LES DENOMINA OPERACIONES UNITARIAS Y A LOS FENOMENOS QUIMICOS SE LES LLAMA PROCESOS UNITARIOS. LA TRANSFORMACION DE MATERIA PRIMA EN PRODUCTO TERMINADO, REQUIERE DE LA REALIZACION EN SERIE O PARALELO DE VARIOS FENOMENOS INDEPENDIENTES, LO QUE IMPLICA QUE LA TRANSFORMACION QUEDARA REPRESENTADA POR UN CONJUNTO DE OPERACIONES Y PROCESOS UNITARIOS.

CADA OPERACION UNITARIA, AL SER REPRESENTATIVA DE UN FENOMENO ESPECIFICO, TIENE SUS PROPIAS LEYES FISICAS Y/O QUIMICAS, DE TAL MANERA, QUE AL HABLAR DE ALGUNA DE ELLAS, YA SE ESTAN IMPLICANDO E IDENTIFICANDO LAS LEYES QUE LA RIGEN.

LA FORMULACION DE MODELOS MATEMATICOS EN INGENIERIA QUIMICA, SE REALIZA EN CADA OPERACION Y PROCESO UNITARIOS QUE INTEGREN UN PROCESO DE TRANSFORMACION. EL RESOLVER ESTOS MODELOS SIGUIENDO LA SECUENCIA EN SERIE O PARALELO DE LAS OPERACIONES UNITARIAS NOS LLEVARA A UNA RESPUESTA DEL PROCESO GLOBAL. ESTO NOS CONDUCE A LO QUE SE CONOCE COMO SIMULACION Y DISEÑO DEL PROCESO.

1.2 TIPOS DE MODELOS APLICADOS A LA INGENIERIA QUIMICA.

EN INGENIERIA QUIMICA EXISTEN DOS TIPOS DE MODELOS ESQUEMATICOS PARA REPRESENTAR A UN FENOMENO :

- 1) MODELO DE PARAMETROS DISTRIBUIDOS, EN LOS QUE SE ACEPTA LA EXISTENCIA DE GRADIENTES DE PROPIEDADES DENTRO DEL SISTEMA.
- 2) MODELO DE PARAMETROS NO-DISTRIBUIDOS, EN LOS QUE SE ACEPTA QUE EL SISTEMA ES UNIFORME EN SUS PROPIEDADES Y SIN GRADIENTE ALGUNO.

AL APLICAR EL PROCEDIMIENTO DE FORMULACION DE MODELOS (ESQUEMA-1) A UN SISTEMA DE PARAMETROS NO DISTRIBUIDOS, NOS CONDUCE A DOS ECUACIONES ALGEBRAICAS COMO MINIMO. SI SE APLICA A n EQUIPOS QUE FUNCIONEN EN SERIE O EN PARALELO, NOS CONDUCE A UN CONJUNTO DE ECUACIONES ALGEBRAICAS. ESTO ULTIMO, ES TIPICO DE LAS OPERACIONES DE SEPARACION O REACCION POR ETAPAS.

AL APLICAR EL PROCEDIMIENTO DE FORMULACION DE MODELOS A UN SISTEMA DE PARAMETROS DISTRIBUIDOS, NOS CONDUCE A ECUACIONES DIFERENCIALES QUE SERAN ORDINARIAS O PARCIALES, DEPENDIENDO DEL NUMERO DE DIRECCIONES DONDE EXISTAN GRADIENTES Y DE CUALES FENOMENOS CONTROLAN EL PROCESO. ESTO ULTIMO ES APLICABLE A EQUIPOS DE CONTACTO CONTINUO, TALES COMO INTERCAMBIADORES DE CALOR, COLUMNAS EMPACADAS, ETC.

EN EL ANALISIS DEL PROCESO ES COMUN QUE UN INGENIERO QUIMICO RECURRA A DATOS EXPERIMENTALES REGISTRADOS EN FORMA GRAFICA, TABULAR O DE NOMOGRAMA. PARA UTILIZAR EFICIENTEMENTE LA TECNI-

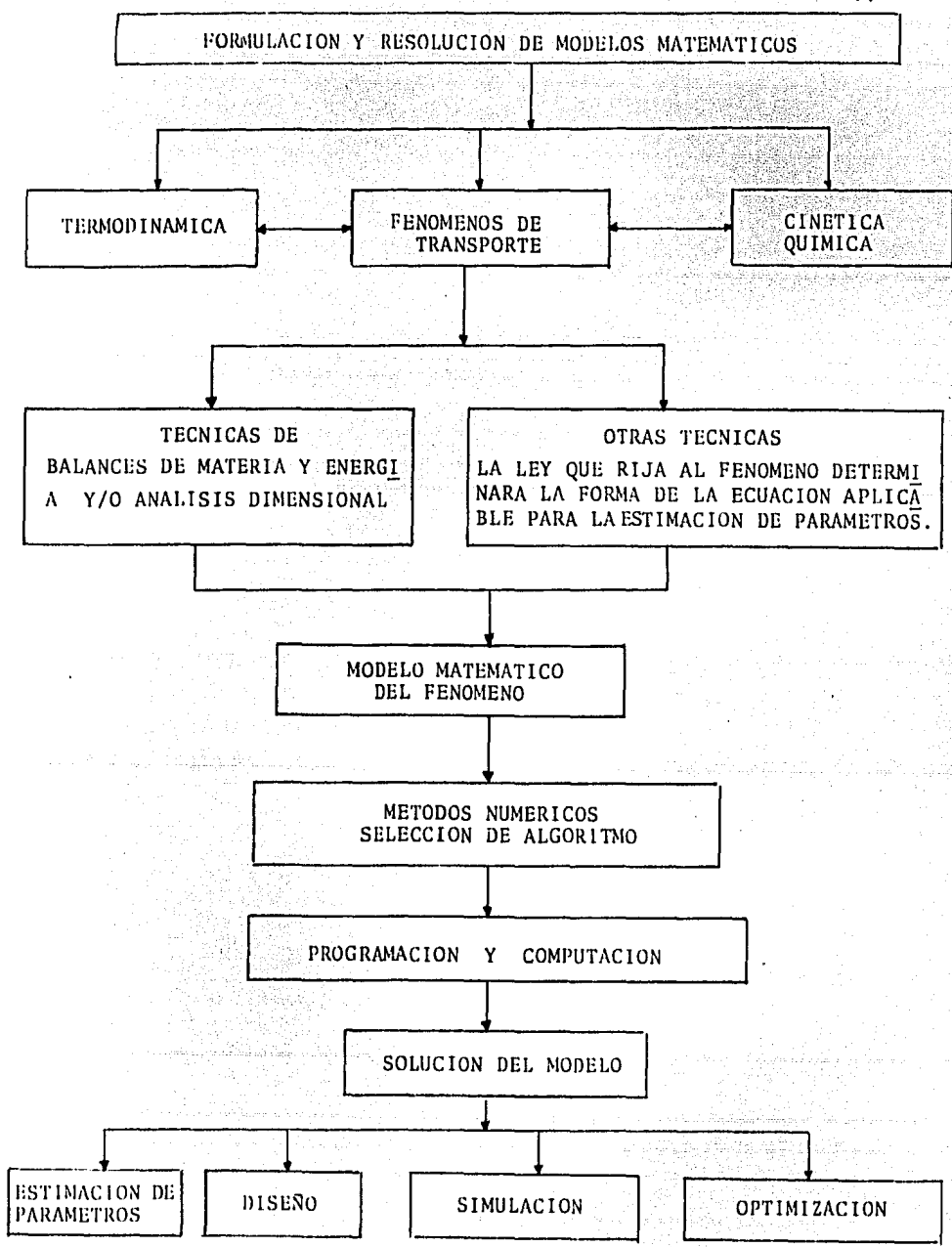
CA TABULAR, ES NECESARIO APLICAR TECNICAS DE INTERPOLACION DE DATOS, PARA CALCULAR EL VALOR DE LA PROPIEDAD REQUERIDA EN CIERTAS CONDICIONES DEL PROCESO. AHORA BIEN, SI ES MUY FRECUENTE LA LECTURA DE DATOS PARA CUALQUIERA DE LAS TRES TECNICAS MENCIONADAS, SERA MAS CONVENIENTE REPRESENTAR LA INFORMACION CON UNA ECUACION, MISMA QUE PUEDE SER DETERMINADA MEDIANTE TECNICAS DE AJUSTE DE DATOS O MEDIANTE POLINOMIOS DE INTERPOLACION.

POR LO ANTERIOR, SE IMPLICA QUE UN INGENIERO QUIMICO DEBE TENER LOS CONOCIMIENTOS NECESARIOS Y LA HABILIDAD PARA LA :

- a) INTERPOLACION DE DATOS.
- b) FORMULACION DE MODELOS MEDIANTE TECNICAS DE AJUSTE DE DATOS
- c) RESOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES Y NO LINEALES (DADA LA DIVERSIDAD DE FENOMENOS).
- d) RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS Y PARCIALES.

EL SIGUIENTE CAPITULO ESTARA ENFOCADO AL ESTUDIO DE LAS TECNICAS NUMERICAS APLICADAS A LA INGENIERIA QUIMICA.

EN EL SIGUIENTE ESQUEMA SE PRESENTA UNA SERIE DE ACTIVIDADES ASOCIADAS A LA FORMULACION Y RESOLUCION DE MODELOS MATEMATICOS MEDIANTE EL USO DE UNA COMPUTADORA, CON EL OBJETO DE UTILIZAR ESTA HERRAMIENTA EN EL ANALISIS, DESARROLLO Y DISEÑO DE PROCESOS.



(Esquema 2)

SE HA MENCIONADO LA NECESIDAD DE FORMULAR MODELOS MEDIANTE TECNICAS DE AJUSTE DE DATOS; ESTO SE DERIVA DE UN ESTUDIO DIMENSIONAL DE UN FENOMENO, O BIEN, COMO CONSECUENCIA DE TEORIAS QUE PREDICEN EL COMPORTAMIENTO DEL MISMO CON MODELOS GENERALIZADOS. PARA UN SISTEMA PARTICULAR, ES NECESARIO ESPECIFICAR EL MODELO MEDIANTE EL CALCULO DE CONSTANTES EXPLICITAS (O PARAMETROS); ESTO ES EN REALIDAD UNA ETAPA PREVIA EN LA FORMULACION DE MODELOS DE LAS OPERACIONES Y/O PROCESOS UNITARIOS, EN DONDE RIGE CIERTA LEY O TEORIA QUE ESTA REPRESENTADA POR UNA ECUACION CON PARAMETROS NO ESPECIFICADOS. EL MODELO QUE ASI SE OBTENGA, SE UTILIZARA EN FORMA CONJUNTA CON LAS ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIAL Y ENERGIA PARA REPRESENTAR EL PROCESO. POR LO ANTERIOR SE HACE NECESARIO EL CONOCIMIENTO SOBRE TECNICAS DE AJUSTE DE DATOS, CUYA FRECUENCIA DE USO EN INGENIERIA QUINICA LAS SEÑALA COMO UNA AREA IMPORTANTE DE LAS TECNICAS NUMERICAS PRESENTADAS EN ESTA TESIS.

I.3 SIMBOLOGIA

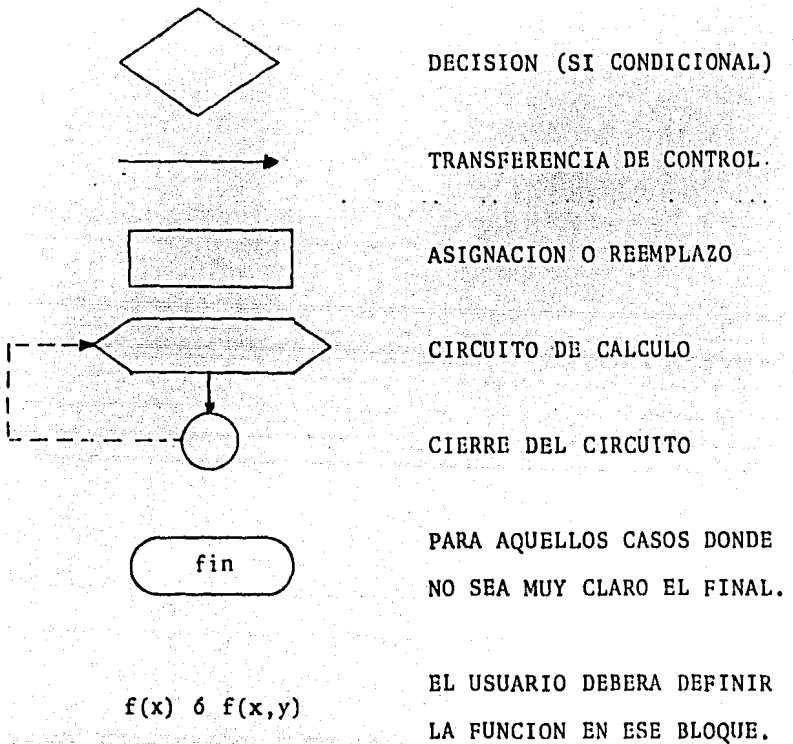
CON EL OBJETO DE PODER REPRESENTAR DE MANERA SIMPLE TODAS LAS TECNICAS NUMERICAS, EN CADA CASO SE DARA EL DIAGRAMA DE FLUJO CORRESPONDIENTE, USANDO LA SIGUIENTE SIMBOLOGIA:



LECTURA DE DATOS



IMPRESION



EN LOS PROCESOS REPETITIVOS USAREMOS UN CONTADOR PARA EL CIRCUITO:

I = CONTROL DEL CIRCUITO (CONTROL DE REPETICIONES)

I = N_1, N_2, N_3 DONDE N_1 = VALOR INICIAL DE I

N_2 = VALOR FINAL DE I

N_3 = INCREMENTO PARA I

CUANDO $N_3 = 1$, USAREMOS I = N_1, N_2 .

CAPITULO II. TECNICAS NUMERICAS APLICADAS A LA INGENIERIA QUIMICA.

II.0 INTRODUCCION.

DADA LA COMPLEJIDAD DE LOS MODELOS MATEMATICOS OBTENIDO DE LAS OPERACIONES UNITARIAS EN EL ANALISIS DE LOS PROCESOS, EL INGENIERO QUIMICO, PARA OBTENER SOLUCIONES UTILES APPLICABLES EN LA TOMA DE DECISIONES, SE HA ORIENTADO A LA SIMPLIFICACION DE MODELOS QUE NO DEBERAN AFECTAR A LA SOLUCION DEL PROBLEMA. SE HAN GENERADO METODOS GRAFICOS Y METODOS CORTOS PARA EL CALCULO EN LAS DIVERSAS OPERACIONES UNITARIAS. CON EL SOPORTE DE LAS COMPUTADORAS DIGITALES HA PROLIFERADO EL USO DE METODOS NUMERICOS QUE, COMO SU NOMBRE LO INDICA, NO PROVEEN UNA SOLUCION ANALITICA (ESTRUCTURA FUNCIONAL), SINO DIRECTAMENTE RESULTADOS NUMERICOS. ESTO ULTIMO FUNCIONA PARA LOS OBJETIVOS DE LA INGENIERIA QUIMICA, YA QUE PARA DISEÑAR PROCESOS, EQUIPOS O PLANTAS QUIMICAS, SE REQUIEREN RESULTADOS NUMERICOS EN EL DIMENSIONAMIENTO DE EQUIPO Y CONDICIONES DE OPERACION CORRESPONDIENTE.

LOS METODOS NUMERICOS, TAL COMO SE HAN DESARROLLADO, CONSISTEN EN TECNICAS DE CALCULO QUE APROXIMAN A UNA SOLUCION REAL, MEDIANTE REPETIDAS PRUEBAS Y ERRORES (TECNICAS ITERATIVAS), O BIEN, POR MEDIO DE CALCULOS RECURSIVOS QUE POR LO GENERAL, GENERAN PERFILES O GRAFICAS DE COMPORTAMIENTO A PARTIR DE UNA O VARIAS CONDICIONES CONOCIDAS (PROBLEMAS DE VALOR INICIAL Y DE

VALOR A LA FRONTERA). ESTO NOS INDICA QUE, PARA EL CASO DONDE EXISTAN GENERALIZACIONES, LOS METODOS NUMERICOS DARAN UNICAMENTE SOLUCIONES PARTICULARES.

LOS METODOS NUMERICOS FORMAN PARTE DE UNA RAMA DE LA MATEMATICA CONOCIDA COMO ANALISIS NUMERICO. EL CONTENIDO DEL PRESENTE CAPITULO SE ENFOCA HACIA ESOS TEMAS.

LA MAYORIA DE LOS METODOS NUMERICOS SE FUNDAMENTAN EN APROXIMAR UNA FUNCION MEDIANTE UNA EXPANSION DE SERIE DE TAYLOR, O BIEN UTILIZANDO EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON.

SEA $f(x)$ UNA FUNCION CONTINUA UNIVARIABLE Y $x_0, f(x_0)$ VALORES CONOCIDOS DE LA VARIABLE INDEPENDIENTE Y DE LA FUNCION A PARTIR DE LOS CUALES SE DESEA EXPANDER PARA CUALQUIER VALOR DE x . UTILIZANDO LA SERIE DE TAYLOR OBTENEMOS :

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + f''(x_0) \frac{(x-x_0)^2}{2!} + f'''(x_0) \frac{(x-x_0)^3}{3!} + \dots$$

LA REPRESENTACION DE $f(x)$ SERA EXACTA SI SE INVOLUCRAN TODOS LOS TERMINOS DE LA SERIE, PERO ESTO ES IMPOSIBLE EN LA PRACTICA POR SER INFINITOS. ANTE ESTO, SURGE LA IDEA DE TRUNCAR LA SERIE EN n TERMINOS. SE LES CONOCE COMO TERMINOS DE APROXIMACION. DEL TERMINO $n+1$ HASTA EL INFINITO SE LES CONOCE COMO ERROR DE TRUNCACION. ES OBVIO QUE A MENOR ERROR DE TRUNCACION SERA MEJOR EL POLINOMIO DE APROXIMACION.

DE UNA MANERA SIMILAR HABRA UNA APROXIMACION DE SERIE DE -

TAYLOR PARA FUNCIONES MULTIVARIABLES QUE DEPENDERA DE LAS DERIVADAS PARCIALES DE LA FUNCION RESPECTO A CADA VARIABLE INDEPENDIENTE.

EN MUCHOS PROCESOS QUIMICOS Y/O FISICOS NO SE CONOCE LA FORMA DE LA FUNCION f , Y POR LO TANTO, TAMPOCO SUS DERIVADAS; EN CAMBIO, SE CONOCEN n PARES DE PUNTOS $x_i, f(x_i)$. EN ESTE CASO SERA IMPOSIBLE APLICAR LA EXPANSION DE SERIE DE TAYLOR. UNA TECNICA DESARROLLADA EN PARALELO, CONOCIDA COMO EXPANSION MEDIANTE EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON, Y QUE SE OBTIENE DE LA SERIE DE TAYLOR, SUSTITUYE LAS DERIVADAS ANALITICAS POR DERIVADAS NUMERICAS. EL POLINOMIO SE EXPRESA DE LA SIGUIENTE MANERA:

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x-x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x-x_0)(x-x_1) + f[x_0, x_1, x_2, x_3](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) + \dots$$

EN DONDE: $f[x_0] = f(x_0)$ ES CONOCIDA COMO LA DIFERENCIA DE ORDEN CERO.

$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$ ES CONOCIDA COMO LA DIFERENCIA DE 1er. ORDEN.

$$Y f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}$$

ES CONOCIDA COMO DIFERENCIA DE 2o. ORDEN.

SI LO COMPARAMOS CON LA SERIE DE TAYLOR, NOTAMOS QUE HAY MUCHA SIMILITUD ENTRE AMBOS, DONDE LAS DERIVADAS SERAN FUNCION DE LAS DIFERENCIAS. DADA LA ESTRUCTURA DE ESTAS DIFERENCIAS SE LES DENOMINA "DIFERENCIAS FINITAS DIVIDIDAS". EXISTEN SUS HOMOLOGOS DE DIFERENCIAS FINITAS SIN DIVIDIR. EN LAS SECCIO-

NES SIGUIENTES SE DESARROLLARAN LOS DISTINTOS ALGORITMOS APOYAN DONOS, SEGUN SEA NECESARIO, EN EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON O EN LA EXPANSION DE SERIE DE TAYLOR.

II.1 TECNICAS MATEMATICAS ANALIZADAS EN LA PRESENTE TESIS.

EN BASE A LO MENCIONADO EN EL CAPITULO 1, SOBRE LOS MODELOS MATEMATICOS QUE SURGEN DEL ANALISIS DE OPERACIONES Y PROCESOS UNITARIOS, SE ANALIZARAN Y DESARROLLARAN LOS ALGORITMOS CORRESPONDIENTES A LAS SIGUIENTES TECNICAS :

- 1 - INTERPOLACION
- 2 - RESOLUCION DE UNA ECUACION ALGEBRAICA NO LINEAL
- 3 - INTEGRACION
- 4 - RESOLUCION DE UNA ECUACION DIFERENCIAL ORDINARIA
- 5 - RESOLUCION DE UN SISTEMA DE ECUACIONES
- 6 - TECNICA DE AJUSTE DE DATOS

NOTA: DADO LO EXTENSO DEL TEMA, LA RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES SE ESTAN TRATANDO EN FORMA INDEPENDIENTE EN OTRO TRABAJO DE TESIS. (VER BIBLIOGRAFIA)

II.2 INTERPOLACION

II.2.0 INTRODUCCION

EN ESTA BREVE SECCION NO SE PRESENTARA UNA TECNICA DE INTERPOLACION COMO TAL, SINO TENDRA COMO OBJETO EL DEFINIR LOS FUNDAMENTOS PARA EL DESARROLLO DE OTRAS TECNICAS. LO MAS COMUN-

MENTE UTILIZADO EN INGENIERIA QUIMICA ES LA INTERPOLACION LINEAL, PERO EN LA ACTUALIDAD SE PREFIERE TENER UN MODELO MATEMATICO QUE REPRESENTA AL CONJUNTO DE DATOS MAS QUE EL APLICAR INTERPOLACIONES.

EL OBJETIVO DE ESTA TECNICA ES ESTIMAR EL VALOR DE UNA FUNCION PARA UN VALOR DADO DE LA(S) VARIABLE(S) INDEPENDIENTE(S), QUE NO SE ENCUENTRE EXPLICITA EN LA INFORMACION DISPONIBLE, NORMALMENTE CONSTITUIDA POR DATOS $x_i, f(x_i)$.

POLINOMIO DE INTERPOLACION. SE LE LLAMARA ASI AL OBTENIDO POR LA TRUNCACION DEL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON.

II.2.1 INTERPOLACION EN UNA VARIABLE.

PARA EL CASO EN DONDE LA FUNCION DEPENDA UNICAMENTE DE x , LA EXPRESION SERA:

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1] (x-x_1) + \frac{f[x_0, x_1, x_2] (x-x_2) (x-x_1)}{2!} + \dots$$

COMO SE MENCIONO ANTERIORMENTE, EL POLINOMIO MAS USADO ES EL DE GRADO UNO, ESPECIALMENTE CUANDO LA APROXIMACION SE BUSCA EN INTERVALOS PEQUEÑOS $[x_0, x_1]$:

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1] (x-x_0) \quad (\text{POLINOMIO DE GRADO UNO})$$

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

ES OBVIO QUE ESTE POLINOMIO INTRODUCIRA MUCHO ERROR DE TRUNCACION PARA LAS FUNCIONES QUE NO SEAN LINEALES.

CUANDO SE TIENEN UN CONJUNTO DE n PARES DE DATOS DE $x, f(x)$,

EL MAXIMO GRADO DEL POLINOMIO DE INTERPOLACION QUE SE PUEDE OBTENER ES DE $n-1$, YA QUE PARA EVALUAR LA DIFERENCIA DE ORDEN n -ASOCIADO AL GRADO n , SE REQUIEREN $n+1$ PUNTOS.

EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON USADO COMO POLINOMIO DE INTERPOLACION, HA SIDO MODIFICADO, MEDIANTE TRANSFORMACIONES ALGEBRAICAS, PARA OBTENER LO QUE SE CONOCE COMO POLINOMIO DE LAGRANGE, - QUE NOS PERMITE CALCULAR EL VALOR DE LA FUNCION $f(x)$ PARA UNA x -DADA, A PARTIR DE DATOS x_i , $f(x_i)$, DESDE $i=0$ HASTA $i=n$:

$$f(x) = \sum_{i=0}^N f(x_i) * \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^N \frac{(x-x(k))}{(x(i)-x(k))} \quad (\text{Ec. 1})$$

DEBE NOTARSE QUE IMPLICA $n+1$ PUNTOS, POR LO QUE SE OBTIENE UN POLINOMIO DE INTERPOLACION DE GRADO n . COMO ESTE PRESENTADO SE CONSIDERA MAS FACIL DE PROCESAR.

SI SE DESEA INTERPOLAR CON UN POLINOMIO DE GRADO MENOR QUE n , -- BUSCANDO UN RESULTADO MUY APROXIMADO AL REAL, DEBERA SELECCIONAR SE UN PUNTO BASE PARA LA EXPANSION, NO COMO x_0 SINO COMO UN x_r - TAL QUE EL VALOR DE x QUEDE COMPRENDIDO EN EL INTERVALO :

$$x_r \leq x \leq x_{r+m}$$

EN DONDE m ES EL GRADO DEL POLINOMIO. PARTIENDO DE ESTA BASE, EL POLINOMIO SE TRANSFORMARA EN

$$f(x) = \sum_{i=r}^{r+m} f(x_i) * \prod_{\substack{k=r \\ k \neq i}}^{r+m} \frac{(x-x_k)}{(x_i-x_k)} \quad (\text{Ec. 2})$$

CON LA CONDICION DE QUE $r+m \leq N$

II.2.2 ALGORITMO DE INTERPOLACION

PASO 1 : SELECCIONAR EL PUNTO DE EXPANSION (VALOR DE τ)

PASO 2 : APLICAR LA ECUACION 2

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 17)

II.2.3 TRAZADOR DE CURVAS

EL OBJETIVO ES TRAZAR UNA CURVA CONTINUA, ADICIONANDO PUNTOS A UN CONJUNTO DE PARES DE DATOS $x_i, f(x_i)$. SE INCLUYE AQUI COMO OTRA APLICACION DE LA INTERPOLACION, AUNQUE DEBEMOS RECORDAR QUE EN INGENIERIA QUIMICA SE PREFERE EL MANEJO DE MODELOS MATEMATICOS AL USO DE TECNICAS DE INTERPOLACION DE LOS DATOS TABULADOS.

EL USO DE POLINOMIOS DE INTERPOLACION HA DEMOSTRADO QUE SI UN CONJUNTO DE DATOS ES REPRESENTADO POR UN POLINOMIO DE ALTO GRADO, EL ERROR SERA MAYOR QUE SI SE UTILIZA UN POLINOMIO DE GRADO MENOR EN UN INTERVALO PEQUEÑO DE INTERPOLACION; ES DECIR, EL ERROR ES MAS SENSIBLE AL TAMAÑO DEL INTERVALO QUE AL GRADO DEL POLINOMIO. RECORDEMOS QUE UN POLINOMIO DE ALTO GRADO IMPLICA UN INTERVALO MAYOR DE INTERPOLACION.

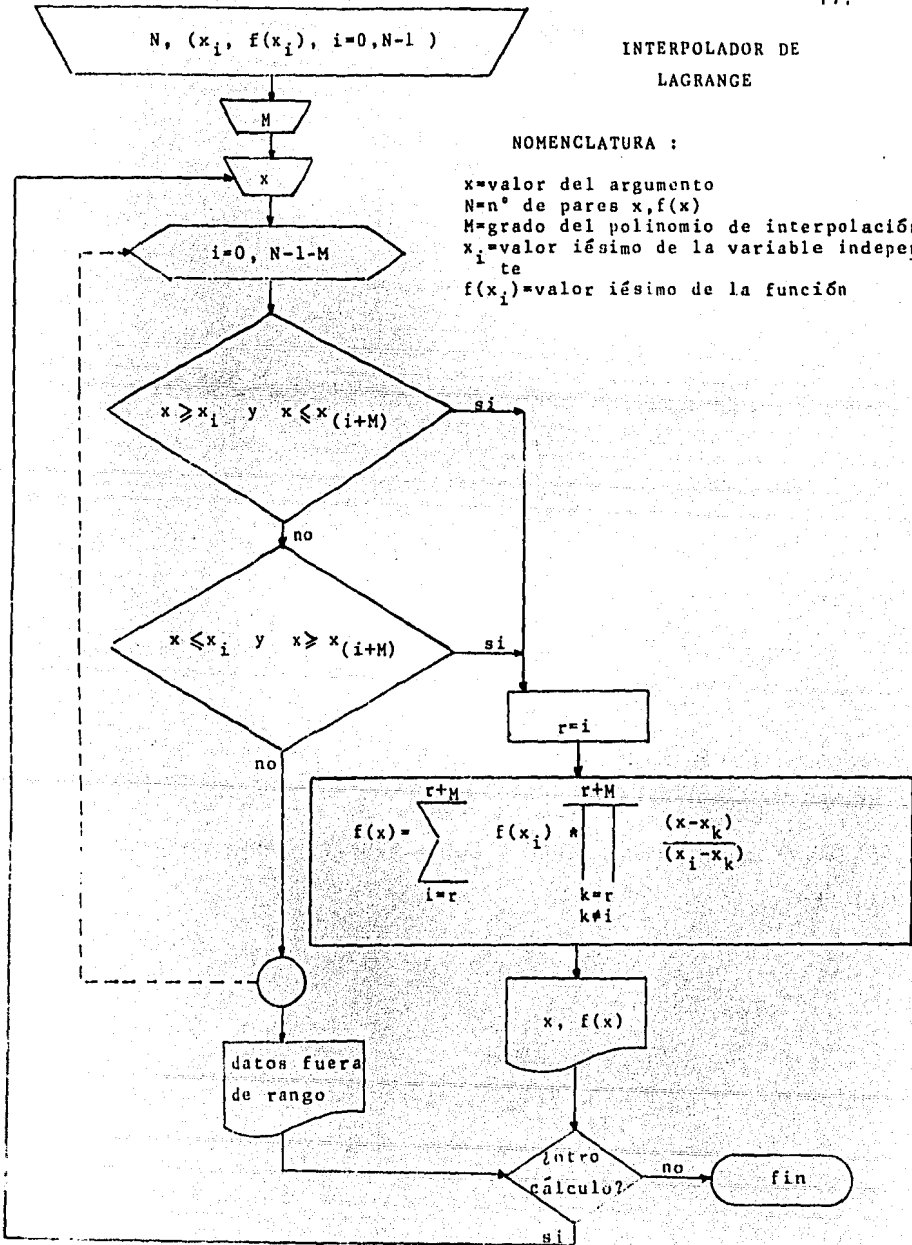
EN BASE AL ARGUMENTO ANTERIOR, SE HA PROLIFERADO EL USO DE POLINOMIOS DE GRADO 3, APLICADOS A PEQUEÑOS INTERVALOS. PARA ESTA INTERPOLACION SE PUEDEN UTILIZAR EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON, EL DE LAGRANGE O CUALQUIER OTRO. EN ESTA SECCION SE PRESENTARA EL POLINOMIO DE HERMITE-BESSEL, EL CUAL OFRECE UNA BUENA APROXIMACION.

UN POLINOMIO DE GRADO 3 REQUIERE 4 PUNTOS PARA LA INTERPOLACION;

INTERPOLADOR DE LAGRANGE

NOMENCLATURA :

x=valor del argumento
 N=n° de pares x,f(x)
 M=grado del polinomio de interpolación
 x_i=valor iésimo de la variable independiente
 f(x_i)=valor iésimo de la función



CON EL OBJETO DE CUBRIR TODOS LOS PUNTOS DE UN INTERVALO $[a, b]$, ESTE SE SEGMENTA EN UN JUEGO DE 4 DATOS, SECUENCIALES Y TRASLAPADOS. A ESTO SE LE CONOCE COMO INTERPOLACION POR SEGMENTACION DE INTERVALO (ESPLINES).

CONSIDERE EL SIGUIENTE POLINOMIO :

$$p(x) = f[x_i] + f[x_i, x_i](x - x_i) + f[x_i, x_i, x_{i+1}](x - x_i)^2 + f[x_i, x_i, x_{i+1}, x_{i+1}](x - x_i)^3$$

EN DONDE

$$f[x_i, x_i] = \frac{f(x_i) - f(x_i)}{x_i - x_i} = \lim_{x_{i+1} \rightarrow x_i} \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = f'(x_i)$$

POR LO TANTO NOS QUEDA :

$$p(x) = f[x_i] + f'(x_i)(x - x_i) + f[x_i, x_i, x_{i+1}](x - x_i)^2 + f[x_i, x_i, x_{i+1}, x_{i+1}](x - x_i)^3$$

OBSERVE COMO ESTE ES EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON APLICADO A LOS PUNTOS $x_i, x_i, x_{i+1}, x_{i+1}$

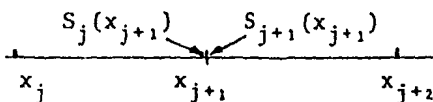
PARA UNA FUNCION f , DEFINIDA EN $[a, b]$ Y UN CONJUNTO DE NUMEROS LLAMADOS "NODOS", $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$, UN POLINOMIO CUBICO SEGMENTADO S DE f , ES UNA FUNCION QUE SATISFACE LAS SIGUIENTES CONDICIONES:

a) S ES UN POLINOMIO CUBICO DENOTADO POR S_j PARA $[x_j, x_{j+1}]$

DONDE $j = 0, N-1$

b) $S(x_j) = f(x_j)$ PARA $j = 0, N$

c) $S_{j+1}(x_{j+1}) = S_j(x_{j+1})$, DESDE $j = 0$ HASTA $j = N-2$, ES DECIR, QUE EL POLINOMIO S_j APLICADO AL PUNTO x_{j+1} ES IGUAL AL POLINOMIO S_{j+1} APLICADO TAMBIEN AL PUNTO x_{j+1} :



EL POLINOMIO DEBE APROXIMARSE AL VALOR DE LA FUNCION EN TODOS LOS PUNTOS x_j , ENTENDIENDOSE QUE j TOMA UN VALOR MAXIMO $N-2$:

$$\begin{array}{c} \text{-----} \\ | \qquad | \qquad | \\ x_{N-2} \quad x_{N-1} \quad x_N \end{array}$$

d) $S'_{j+1}(x_{j+1}) = S'_j(x_{j+1})$ DONDE $j=0, N-2$

e) $S''_{j+1}(x_{j+1}) = S''_j(x_{j+1})$ DONDE $j=0, N-2$

ESTAS DOS ULTIMAS CONDICIONES IMPLICAN QUE LAS DERIVADAS CALCULADAS CON S_j Y S_{j+1} DEBEN SER IGUALES EN EL PUNTO x_{j+1} , INDICANDONOS QUE LA FUNCION ES CONTINUA Y DOS VECES DIFERENCIABLE.

f) $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$ (FRONTERA LIBRE)

EN LUGAR DE LA CONDICION ANTERIOR PODRIAMOS USAR :

$S'(x_0) = f'(x_0)$ Y $S'(x_n) = f'(x_n)$ CONOCIDAS COMO FRONTERAS

ACOTADAS.

PARA ESTAS CONDICIONES ES NECESARIO CONOCER LAS DERIVADAS $S'(x_0)$ Y $S'(x_n)$.

SI EL POLINOMIO S_j SE REPRESENTA COMO :

$$S_j(x) = a_j + b_j(x-x_j) + c_j(x-x_j)^2 + d_j(x-x_j)^3$$

INMEDIATAMENTE SE OBSERVA QUE $S_j(x_j) = a_j = f(x_j)$.

AL SUBSTITUIR LAS CONDICIONES QUE DEBE CUMPLIR EL POLINOMIO SE OBTIENE :

$$h_{j-1}c_{j-1} + 2(h_{j+1} + h_j)c_j + h_jc_{j+1} = \frac{3}{h_j}(a_{j+1} - a_j) - \frac{3}{h_{j-1}}(a_j - a_{j-1}) \dots \text{II.23}$$

DONDE $h_j = x_{j+1} - x_j$ DE $j=0, N-1$

LA ECUACION II.23 TIENE COMO INCOGNITAS A c_{j-1} , c_j Y c_{j+1}

LAS CONDICIONES $S'(x_0) = f'(x_0)$ Y $S'(x_n) = f'(x_n)$ IMPLICAN QUE

$$c_0 = c_n = 0$$

EL SISTEMA ANTERIOR ES UN SISTEMA DE ECUACIONES TRIDIAGONAL DONDE LAS INCOGNITAS SERAN c_1, c_2, \dots, c_{N-1} . TENDREMOS $N-1$ ECUACIONES QUE SERAN :

$$0 + 2(h_0+h_1)c_1+h_1c_2 = \frac{3}{h_1}(a_2-a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1-a_0)$$

⋮

ECUACIONES II.23 DESDE $j=2, N-2$

⋮

$$h_{N-2}c_{N-2} + 2(h_{N-2}+h_{N-1})c_{N-1} + 0 = \frac{3}{h_{N-1}}(a_N-a_{N-1}) - \frac{3}{h_{N-2}}(a_{N-1}-a_{N-2})$$

ESTE SISTEMA PUEDE SER RESUELTO MEDIANTE EL ALGORITMO DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL .

POR OTRO LADO, $b_j = \frac{1}{h_j}(a_{j+1}-a_j) - \frac{h_j}{3}(2c_j + c_{j+1})$

ECUACION OBTENIDA DE LAS CONDICIONES QUE DEBE TENER EL POLINOMIO, SIENDO VALIDA PARA $J=0, N-1$. ANALOGAMENTE, APLICANDO CONDICIONES, OBTENEMOS :

$$d_j = \frac{c_{j+1} - c_j}{3h_j} \quad \text{PARA } J=0, N-1$$

AL CONOCER a_j, b_j, c_j, d_j , PARA $J=0, N-1$, SE CONOCERA EL POLINOMIO S_j , PARA CADA INTERVALO CORRESPONDIENTE. CON ESTOS POLINOMIOS SE PODRAN CALCULAR TODOS LOS PUNTOS INTERMEDIOS A x_j, x_{j+1} QUE SE DESEEN. (DIAGRAMA DE FLUJO EN LAS PAGINAS 21 - 23) .

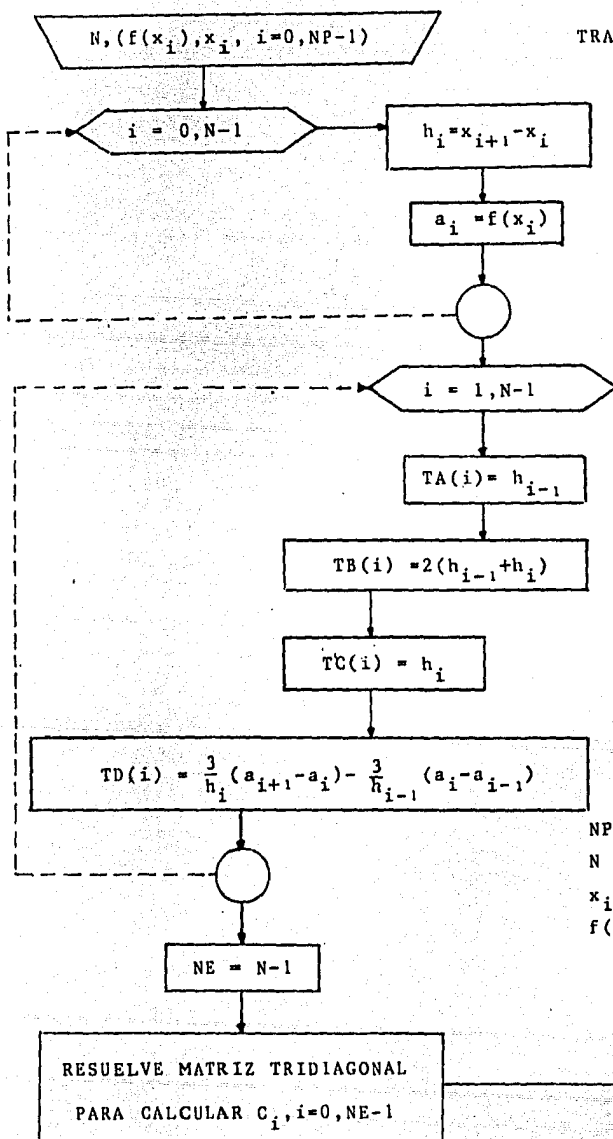
II.2.4 INTERPOLACION EN DOS VARIABLES

PARA REALIZARLA, SE UTILIZA UN POLINOMIO DE GRADO 1. UN POLINOMIO DE MAYOR GRADO NO ES RECOMENDABLE PORQUE EL MODELO DE EXPANSION SE COMPLICA. EL ERROR INTRODUCIDO POR EL POLINOMIO DE GRADO 1 PUEDE SER CONTROLADO SELECCIONANDO UN INTERVALO ADECUADO.

SI TENEMOS UNA FUNCION $f(x,y)$, SU POLINOMIO DE EXPANSION SE

RA :

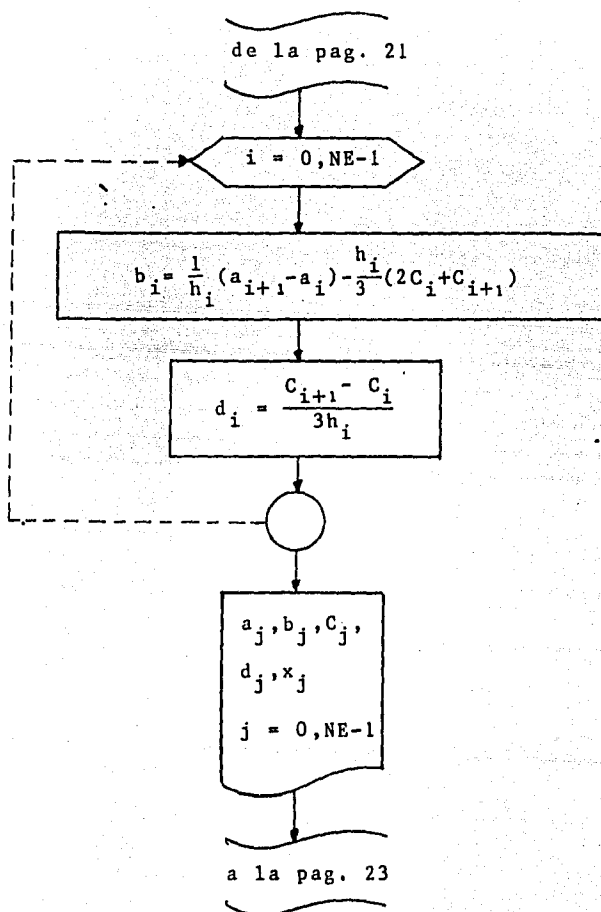
TRAZADOR DE CURVAS



NOMENCLATURA

NP=Número de puntos (x,y)
 N =Número de subintervalos
 x_i =Valor i de x
 $f(x_i)$ =Valor de la función
 en x_i

a la pag. 22



El diagrama de la página 23 corresponde a la sección donde se calculan los puntos adicionales en cada subintervalo. La nomenclatura es

NI = Número de pares x, f a calcular entre cada subintervalo

XX_i = Valor i de la XX calculada

FF_i = Valor de la función en XX_i

II.3 RESOLUCION DE UNA ECUACION ALGEBRAICA NO LINEAL

II.3.0 EN LA RESOLUCION DE ALGUNOS PROBLEMAS DE I.Q. SE PRESENTA LA NECESIDAD DE ENCONTRAR UNA RAIZ REAL DE UNA FUNCION UNIVARIABLE O MULTIVARIABLE. EL PRIMER CASO NOS CONDUCE A UNA ECUACION ALGEBRAICA NO LINEAL Y EL SEGUNDO, A UN SISTEMA DE ECUACIONES NO LINEALES. EN ESTA SECCION TRATAREMOS SOLAMENTE EL CALCULO DE RAICES REALES PARA UNA FUNCION UNIVARIABLE.

II.3.1 TECNICAS BASADAS EN EL POLINOMIO DE SERIE DE TAYLOR O EN EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON.

EXISTEN BASICAMENTE CUATRO TECNICAS DIFERENTES DE RESOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES BASADAS EN LOS POLINOMIOS DE TAYLOR O NEWTON, A PARTIR DE LAS CUALES SE HAN DESARROLLADO OTRAS.

1a. TECNICA: NEWTON-RAPHSON. SE DESARROLLA MEDIANTE LOS SIGUIENTES PASOS :

1°) EXPANSION LINEAL DE SERIE DE TAYLOR

2°) SE APLICA LA CONDICION DE LA EXISTENCIA DE UNA RAIZ x , PARA LA CUAL $f(x) = 0$.

DESARROLLO DEL ALGORITMO

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) (x - x_0) \quad (\text{EXPANSION LINEAL})$$

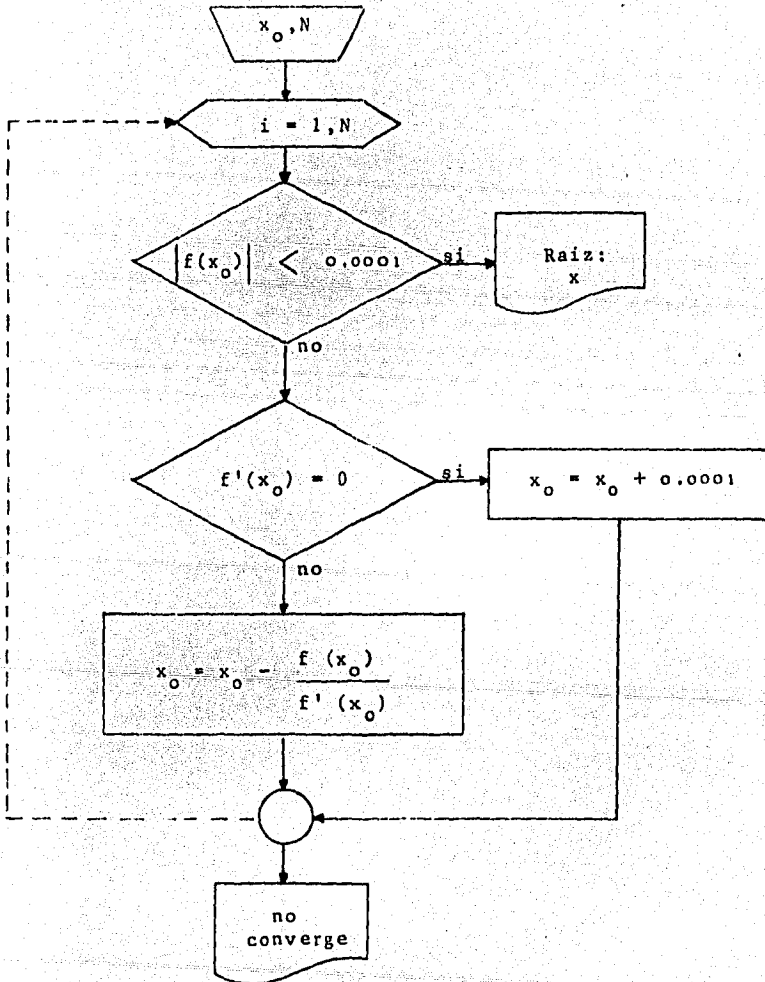
SI x ES RAIZ, ENTONCES

$$0 = f(x_0) + f'(x_0) (x - x_0)$$

DESPEJANDO

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

ENTRE MAS CERCA ESTE x_0 A LA RAIZ, LA SOLUCION SERA MAS DIRECTA, PERO SI ESTA MUY ALEJADA Y LA FUNCION NO ES LINEAL, ENTONCES ESTE ALGORITMO DARA UNA APROXIMACION A LA RAIZ, QUE PODRA SER MEJORADA SI SE UTILIZA A LA x CALCULADA COMO LA NUEVA x_0 EN UN PROCESO ITERATIVO.

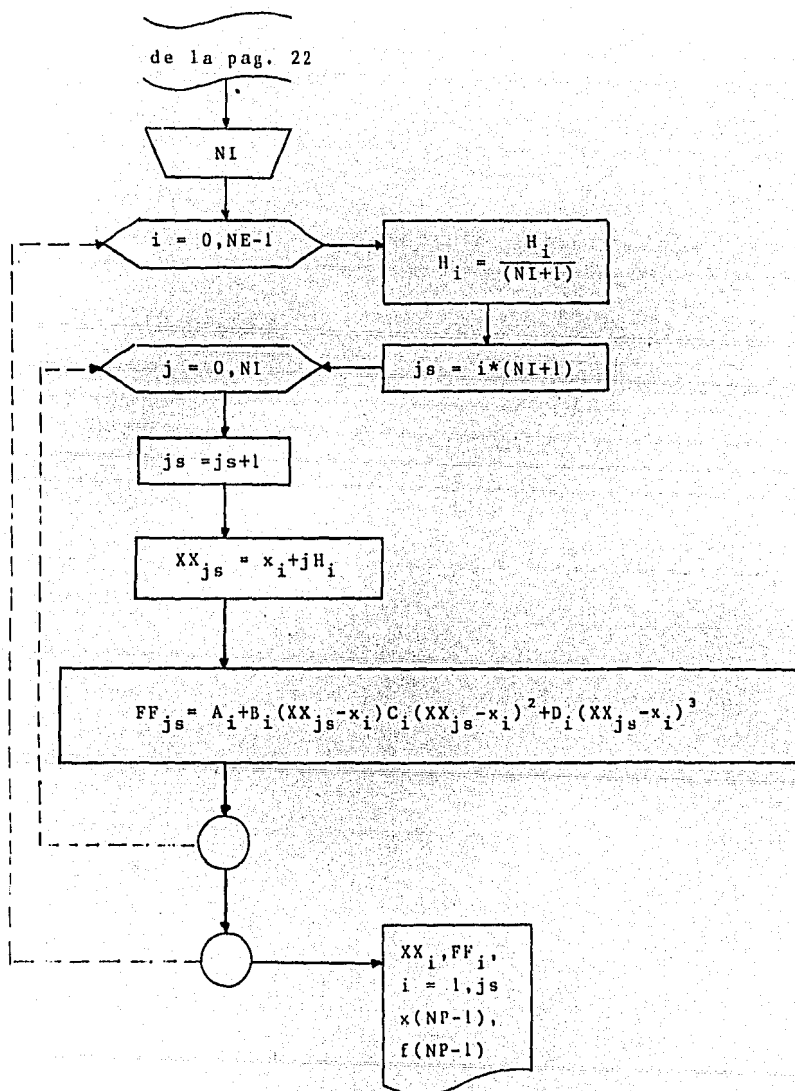


NOMENCLATURA :

x_0 = valor inicial supuesto

N = n° máximo de iteraciones

$f'(x_0)$ = derivada de la función



$$f(x, y) = f(x_0, y_0) + \frac{\partial f}{\partial x} (x-x_0) + \frac{\partial f}{\partial y} (y-y_0) + \text{ERROR DE TRUNCACION}$$

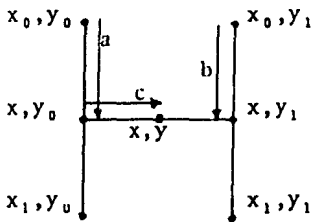
$x_0, y_0 \qquad \qquad \qquad x_0, y_0$

SU REPRESENTACION EN DIFERENCIAS FINITAS SERA :

$$f(x, y) = f(x_0, y_0) + \frac{f(x_1, y_0) - f(x_0, y_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0) +$$

$$\frac{f(x_0, y_1) - f(x_0, y_0)}{y_1 - y_0} (y - y_0) + \text{ERROR DE TRUNCACION}$$

CON EL OBJETO DE TENER UN PROCEDIMIENTO DE CALCULO Y UNA MAYOR APROXIMACION, EN LA PRACTICA SE APLICA EL SIGUIENTE PROCESO :



DONDE a = 1a EXPANSION

b = 2a EXPANSION

c = 3a EXPANSION

1° CALCULAR $f(x, y_0) = f(x_0, y_0) + \frac{f(x_1, y_0) - f(x_0, y_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0)$

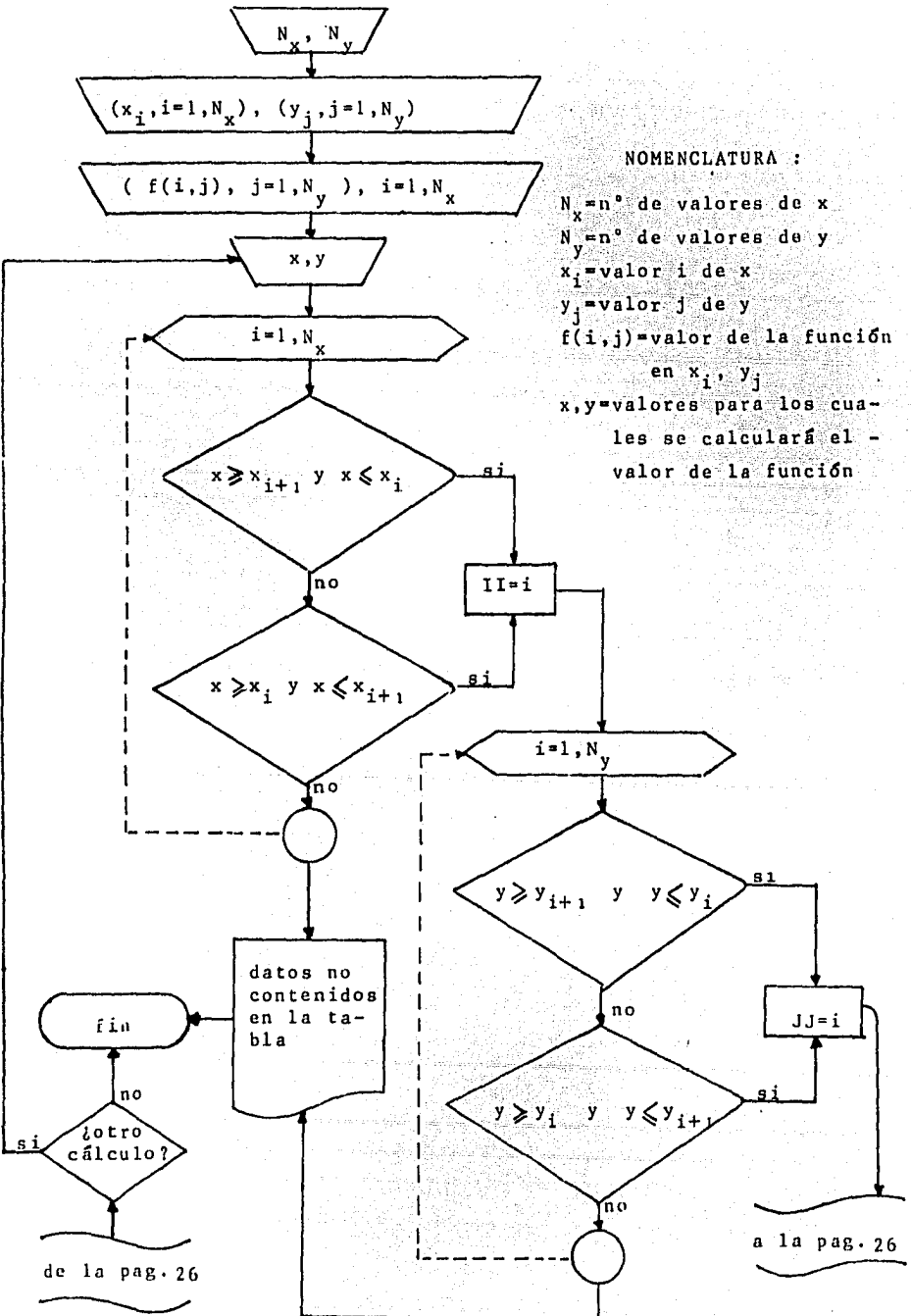
2° CALCULAR $f(x, y_1) = f(x_0, y_1) + \frac{f(x_1, y_1) - f(x_0, y_1)}{x_1 - x_0} (x - x_0)$

3° CALCULAR $f(x, y) = f(x, y_0) + \frac{f(x, y_1) - f(x, y_0)}{y_1 - y_0} (y - y_0)$

ESTAS FORMULAS PUEDEN GENERALIZARSE PARA LOS PARES DE ORDENADAS :

$$(x_i, y_i), (x_{i+1}, y_i), (x_i, y_{i+1}) \text{ Y } (x_{i+1}, y_{i+1})$$

DETERMINADOS LOS VALORES DE x Y y PARA LOS QUE QUEREMOS CONOCER EL VALOR DE LA FUNCION, DEBEMOS LOCALIZAR EN LA TABLA DE DATOS LOS CUATRO PARES DE ORDENADAS CONVENIENTES, COMO SE PUEDE VER EN EL SIGUIENTE DIAGRAMA DE FLUJO.



NOMENCLATURA :

N_x = n° de valores de x
 N_y = n° de valores de y
 x_i = valor i de x
 y_j = valor j de y
 $f(i,j)$ = valor de la función en x_i, y_j
 x, y = valores para los cuales se calculará el - valor de la función

de la pag. 26

a la pag. 26

de la pag. 25

$$f(x, y_{jj}) = f(x_{ii}, y_{jj}) + \frac{f(x_{ii+1}, y_{jj}) - f(x_{ii}, y_{jj})}{x_{ii+1} - x_{ii}} (x - x_{ii})$$

$$f(x, y_{jj+1}) = f(x_{ii}, y_{jj+1}) + \frac{f(x_{ii+1}, y_{jj+1}) - f(x_{ii}, y_{jj+1})}{x_{ii+1} - x_{ii}} (x - x_{ii})$$

$$f(x, y) = f(x, y_{jj}) + \frac{f(x, y_{jj+1}) - f(x, y_{jj})}{y_{jj+1} - y_{jj}} (y - y_{jj})$$

$f(x, y)$

a la pag. 25

2a. TECNICA : METODO DE LA SECANTE. SE DESARROLLA MEDIANTE LOS SIGUIENTES PASOS :

1°) EXPANSION LINEAL MEDIANTE EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON.

2°) SE APLICA LA CONDICION DE LA EXISTENCIA DE UNA RAIZ x , PARA LA CUAL $f(x) = 0$

DESARROLLO DEL ALGORITMO

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1] (x - x_0)$$

SI x ES RAIZ, ENTONCES

$$0 = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0)$$

DESPEJANDO x

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

DESARROLLANDO Y SIMPLIFICANDO, OBTENEMOS

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

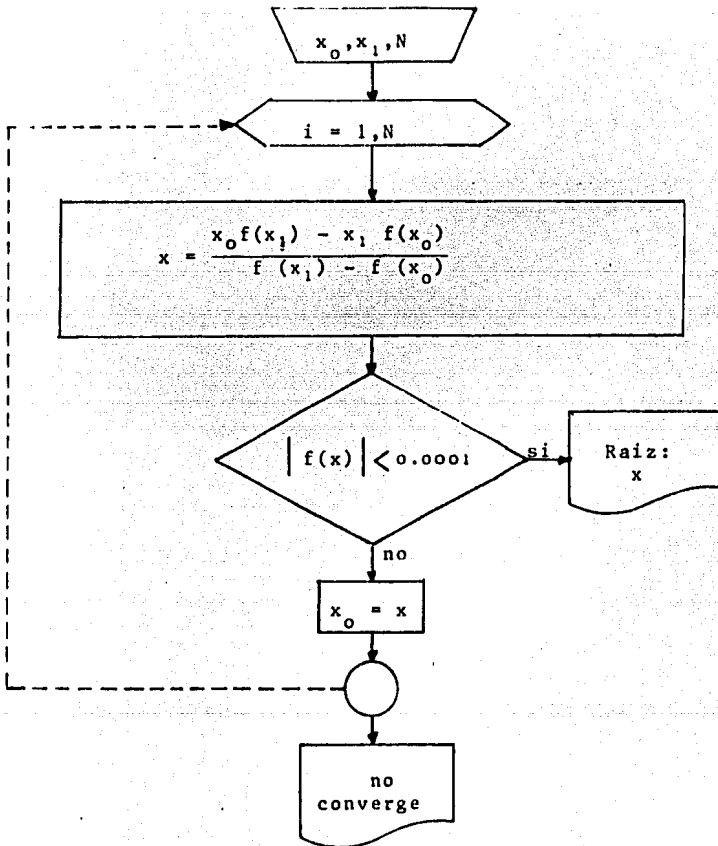
OBSERVE QUE PARA PROCESAR EL ALGORITMO SE NECESITAN 2 PUNTOS, x_0 Y x_1 , PARA EVALUAR LA FUNCION EN ELLOS.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG.30)

2a. TECNICA MODIFICADA : METODO DE REGULA-FALSI.

ESTE METODO ES UNA MODIFICACION DEL METODO DE LA SECANTE, DONDE SE ANALIZAN LOS SUBINTERVALOS $[x, x_0]$ Y $[x, x_1]$ PARA DETECTAR EN CUAL ESTA CONTENIDA LA RAIZ, Y SUBSTITUIR x_0 O x_1 POR x SEGUN CONVENGA. (VER TEOREMA DE LA EXISTENCIA DE RAICES EN UN SUBINTERVALO EN LA PAG. 57). DIAGRAMA DE FLUJO EN LA PAG. 31

METODO DE LA SECANTE



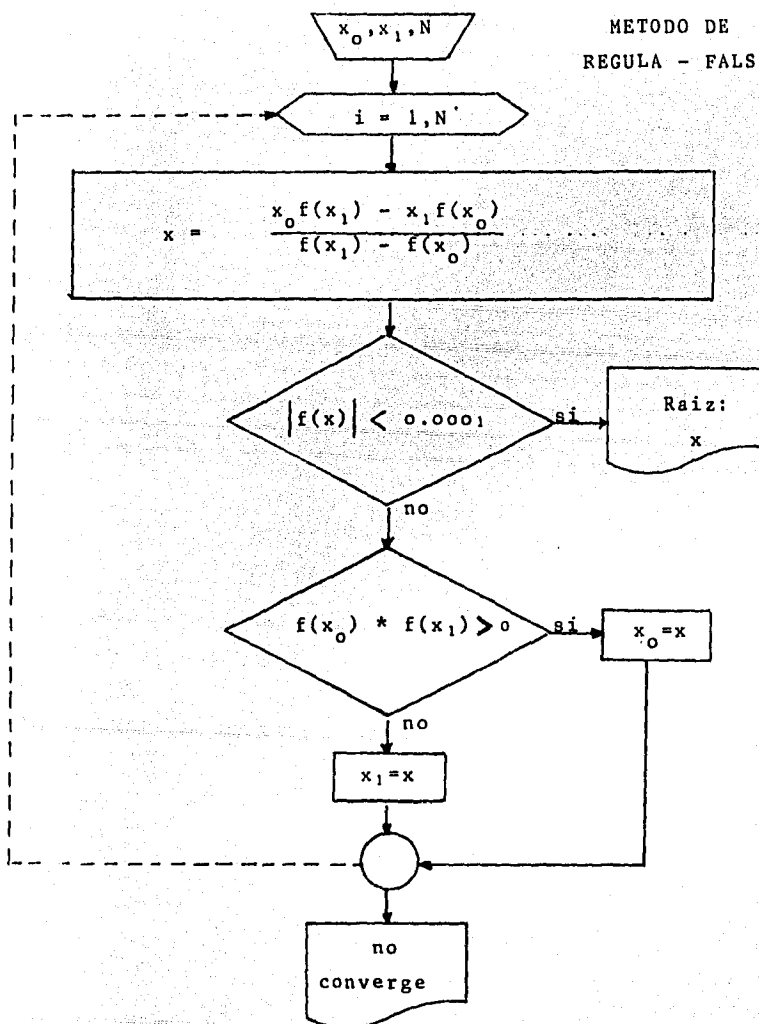
NOMENCLATURA :

x_0, x_1 = valores iniciales
supuestos

N = n° máximo de iteraciones

Nota: Observe como la x calculada se utiliza como x_0 para el siguiente cálculo.

METODO DE
REGULA - FALSI



NOMENCLATURA :

x_0, x_1 = valores iniciales supuestos

N = n° máximo de iteraciones

3a. TECNICA : METODO DE WENGSTEIN. SE DESARROLLA DE ACUERDO A
LOS SIGUIENTES PASOS :

- 1° SE TRANSFORMA LA FUNCION $f(x)$ A $g(x)$, DONDE $g(x) = f(x) + x$
- 2° SE EXPANDE LINEALMENTE POR POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON A $g(x)$
- 3° SE APLICA LA CONDICION DE LA EXISTENCIA DE UNA RAIZ x , -
PARA LA CUAL $f(x) = 0$

DESARROLLO DEL ALGORITMO

$$g(x) = f(x) + x$$

$$g(x) = g(x_0) + \frac{g(x_1) - g(x_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0)$$

SI x ES RAIZ ENTONCES $g(x) = x$

$$x = g(x_0) + \frac{g(x_1) - g(x_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0)$$

DESARROLLANDO Y DESPEJANDO x

$$x = \frac{x_1 g(x_0) - x_0 g(x_1)}{(x_1 - x_0) - g(x_1) + g(x_0)} \quad (\text{Ec. 5})$$

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 33)

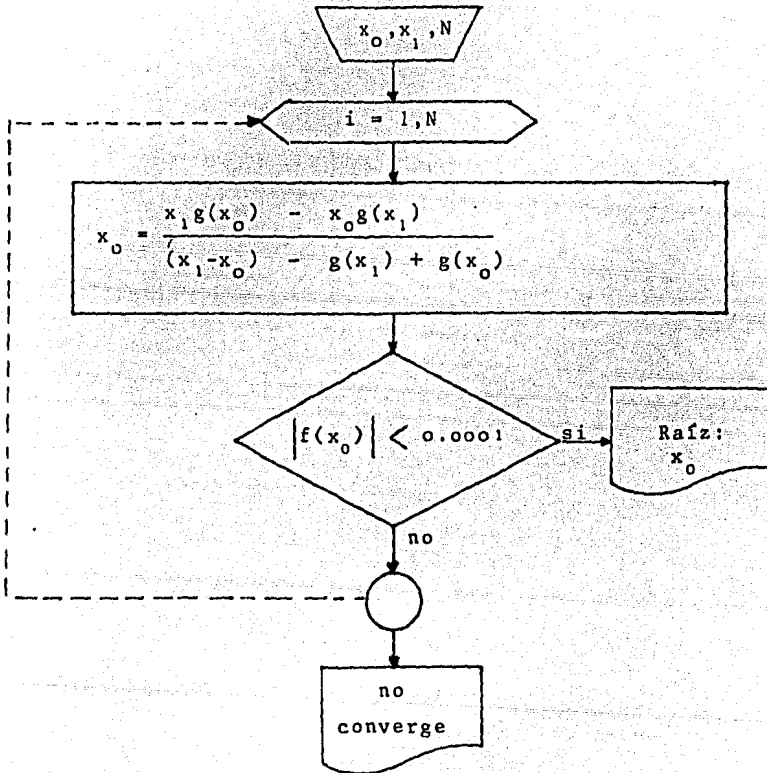
4a. TECNICA : METODO DE MULLER . SE DESARROLLA MEDIANTE LOS SIGUIENTES PASOS :

- 1° EXPANSION CUADRATICA SEGUN EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON PARA $f(x)$
- 2° APLICACION DE LA EXISTENCIA DE UNA RAIZ x

DESARROLLO DEL ALGORITMO :

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

APLICANDO LA CONDICION Y AGRUPANDO :



NOMENCLATURA :

x_0, x_1 = valores supuestos para la raíz

N = n° máximo de iteraciones

Nota: utilizamos x_0 para el nuevo valor de x calculada.

$$0 = f(x_0) - x_0 f[x_0, x_1] + x_0 x_1 f[x_0, x_1, x_2] + \\ \left\{ f[x_0, x_1] - (x_0 + x_1) f[x_0, x_1, x_2] \right\} x + \\ f[x_0, x_1, x_2] x^2$$

SE OBSERVARA QUE TIENE LA FORMA DE UNA ECUACION CUADRATICA

$$ax^2 + bx + c = 0, \text{ DONDE :}$$

$$a = f[x_0, x_1, x_2]$$

$$b = \left\{ f[x_0, x_1] - (x_0 + x_1) f[x_0, x_1, x_2] \right\}$$

$$c = f(x_0) - x_0 f[x_0, x_1] + x_0 x_1 f[x_0, x_1, x_2]$$

Y CUYAS RAICES SON :

$$R_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad \text{Y} \quad R_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

DE LAS TECNICAS ANALIZADAS AQUI, ESTA ES LA UNICA QUE SE PUEDE ADAPTAR PARA CALCULAR RAICES COMPLEJAS.

SI LA FUNCION ES CUADRATICA, LA SOLUCION ES DIRECTA, SI NO, ESTA TECNICA GENERA UNA APROXIMACION A UNA RAIZ.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG.35)

11.3.2 TECNICAS QUE NO DEPENDEN DE LOS POLINOMIOS DE TAYLOR O NEWTON.

ESTAS ESTAN CLASIFICADAS COMO TECNICAS DE BUSQUEDA DIRECTA. EXISTEN TRES METODOS REPRESENTATIVOS DE ESTAS TECNICAS

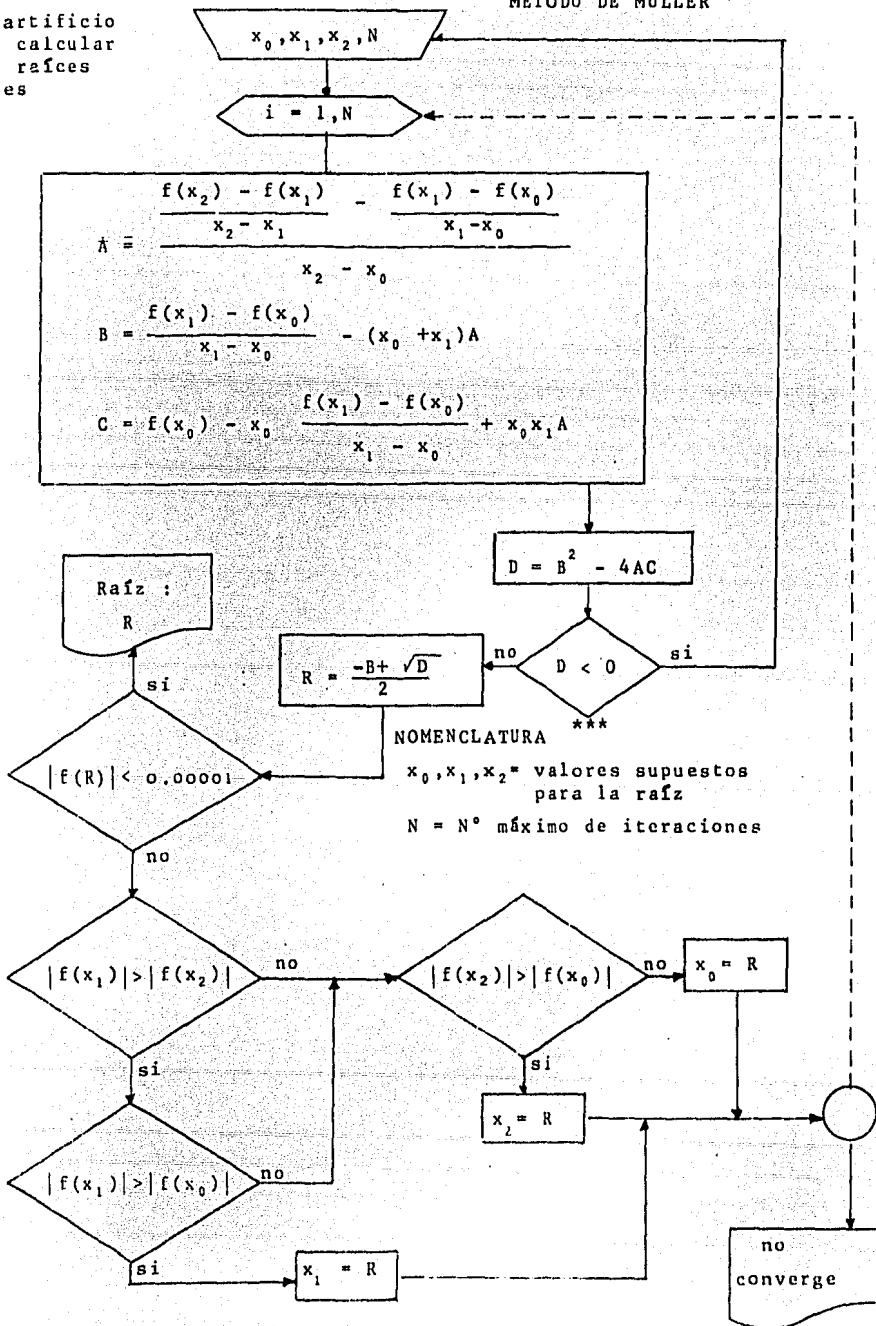
1er METODO : SUBSTITUCION DIRECTA.

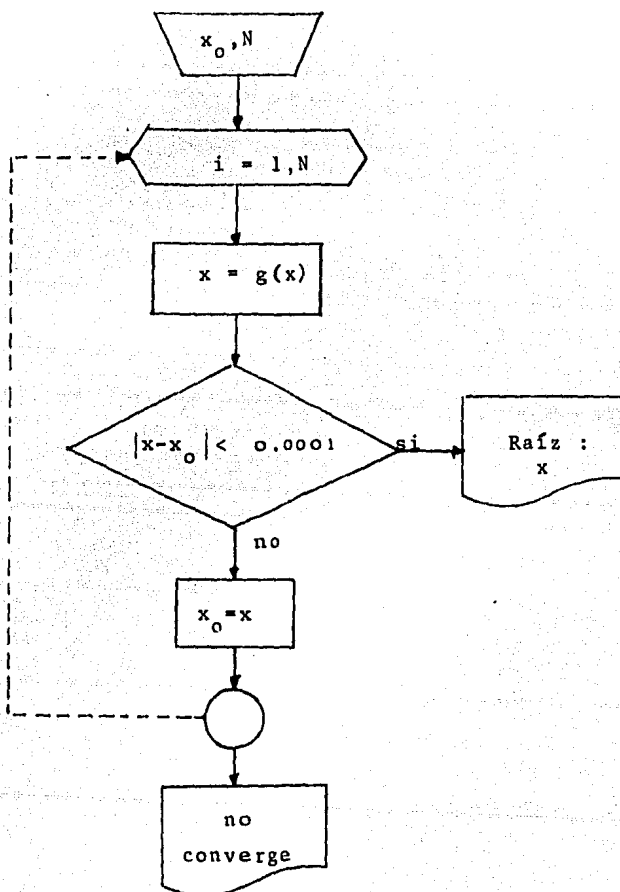
SE DESPEJA IMPLICITAMENTE a x, DE LA FORMA QUE SE PUEDA, DE f(x); DE ESTA MANERA OBTENEMOS LA ECUACION x = g(x)

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG.36)

METODO DE MULLER

*** artificio
para calcular
solo raices
reales





SUBSTITUCION DIRECTA

NOMENCLATURA :

x_0 = valor inicial supuesto

N = N° de iteraciones

$g(x)$ = función resultante al despejar x

Nota: observe como la x calculada se utiliza como x_0 para la siguiente iteración.

2° METODO : MEDIO INTERVALO O BISECCION

SE DESARROLLA MEDIANTE LOS SIGUIENTES PASOS :

1°) BASANDOSE EN LA CONDICION DE EXISTENCIA DE LA RAIZ PARA $f(x)$ SE DETERMINA EL INTERVALO $[x_0, x_1]$ Y SE CALCULA

$$x = \frac{x_0 + x_1}{2} \quad (\text{SE UBICA A } x \text{ EN LA MITAD DEL INTERVALO}).$$

2°) SE DETECTA EN CUAL DE LOS DOS SUBINTERVALOS GENERADOS SE ENCUENTRA LOCALIZADA LA RAIZ, SI EN $[x_0, x]$ O EN $[x, x_1]$. DESPUES SE MODIFICA x_0 O x_1 , SEGUN EL CASO.

TEOREMA DE LA EXISTENCIA DE RAICES EN UN SUBINTERVALO.

SI $f(x)$ ES UNA FUNCION CONTINUA EN UN INTERVALO $[x_0, x_1]$ Y $f(x_0) \cdot f(x_1) < 0$ IMPLICA LA EXISTENCIA DE UN VALOR DE x PARA EL CUAL SE CUMPLE QUE $f(x) = 0$.

(DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 38))

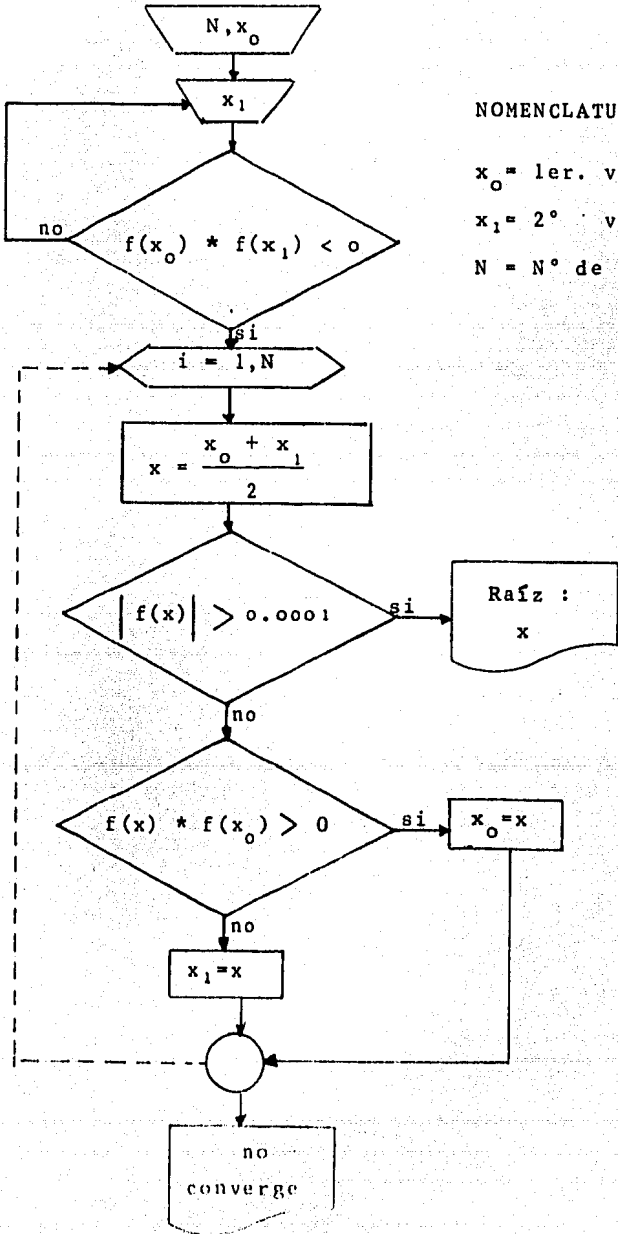
3er. METODO : HOOKE - JEEVES . ESTE SE DESARROLLA CON LOS SIGUIENTES PASOS :

1°) SUPONGA x_0

2°) SE DA UN INCREMENTO A x_0 Y SE VERIFICA SI EL VALOR ABSOLUTO DE LA FUNCION, EN ESTE PUNTO INCREMENTADO, ES MENOR QUE EL VALOR ABSOLUTO DE LA FUNCION EN x_0 . SI ES ASI, SE SUBSTITUYE x_0 POR x_0 INCREMENTADO Y SE REPITE EL PROCESO. EN CASO CONTRARIO, SE PRUEBA CON EL INCREMENTO DE SIGNO CONTRARIO.

3°) SI NO FUNCIONA LA TECNICA PARA DICHO INCREMENTO, ESTE SE DISMINUYE A LA MITAD Y SE REPITE EL PUNTO 2.

SI EL INCREMENTO LLEGA A SER MUY PEQUEÑO Y NO SE HA ENCONTRADO UNA MEJOR SOLUCION, EL METODO NO CONVERGE.



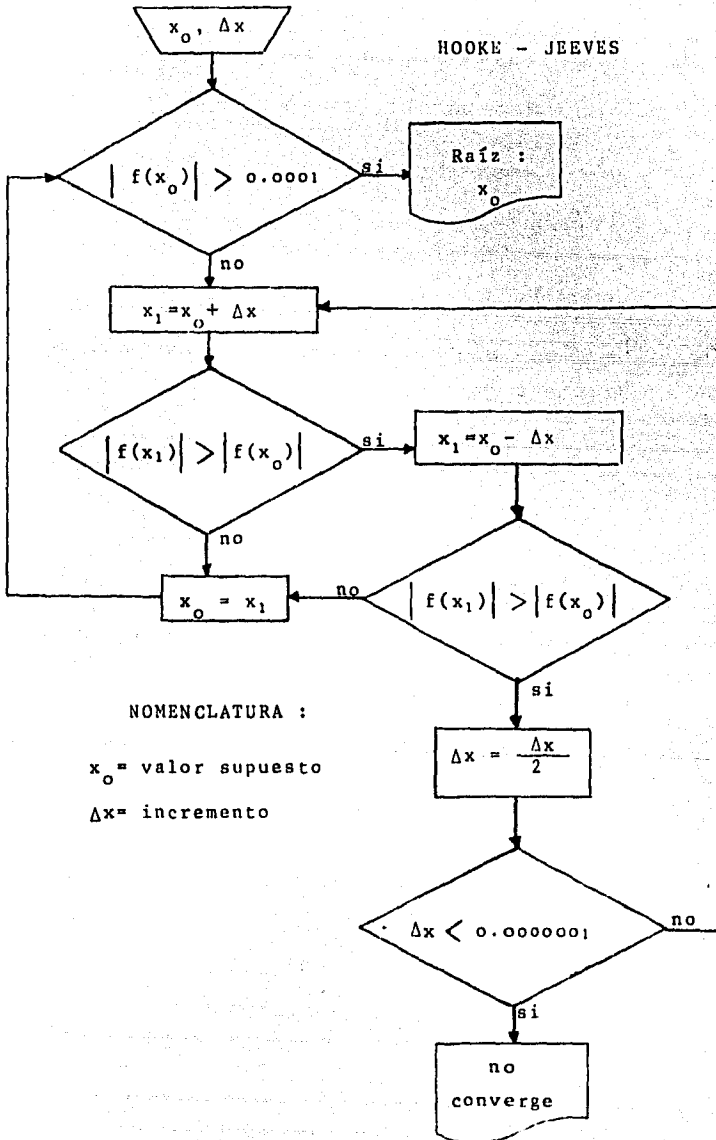
NOMENCLATURA :

x_0 = 1er. valor supuesto

x_1 = 2º valor supuesto

N = Nº de iteraciones.

HOOKE - JEEVES



NO SE RECOMIENDA EL USO DE ESTE METODO, PORQUE ES MUY DEFICIENTE COMPARADO CON LOS ANTERIORMENTE MENCIONADOS.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 39)

II.3.3 OTRAS TECNICAS

A PARTIR DE LAS TECNICAS YA MENCIONADAS, SE HAN GENERADO OTROS METODOS, DENTRO DE LOS CUALES DESTACA EL DEL "FACTOR DE ACELERACION", QUE CONSISTE EN MULTIPLICAR EL INCREMENTO QUE SE LE DA A x POR UN FACTOR PARA OBTENER UN NUEVO VALOR DE LA MISMA. ESTE PUEDE SER APLICADO A LAS CUATRO TECNICAS GENERADAS POR EXPANSION POLINOMIAL O POR BUSQUEDA DIRECTA.

EL METODO DE HOOKE - JEEVES ES LA BASE DE OTROS METODOS, COMO EL LLAMADO SIMPLEX, EN DONDE EL MOVIMIENTO PARA ENCONTRAR UNA NUEVA x , SE HACE A TRAVES DEL CENTROIDE DE UN POLIEDRO GENERADO EN EL ESPACIO, TENIENDO COMO VERTICE VALORES SUPUESTOS DE LA RAIZ CON SUS RESPECTIVOS VALORES DE LA FUNCION.

FINALMENTE, PARA TERMINAR CON ESTA SECCION, SE PRESENTARAN METODOS NO ITERATIVOS DE RESOLUCION DE UNA ECUACION CUADRATICA, DE UNA ECUACION CUBICA Y EL ALGORITMO PARA REALIZAR UNA DIVISION SINTETICA. ESTE ULTIMO, USADO SECUENCIALMENTE A LAS TECNICAS ITERATIVAS, ES UN AUXILIAR EN EL CALCULO DE TODAS LAS RAICES DE UN POLINOMIO DE GRADO N .

II.3.3.1 ECUACION CUADRATICA

TIENE LA FORMA $ax^2+bx+c = 0$ Y TENDRA DOS RAICES (REALES O COMPLEJAS).

LA PODEMOS TRATAR DE LA SIGUIENTE MANERA :

$$x^2 + \frac{b}{a}x = -\frac{c}{a}$$

$$x^2 + \frac{b}{a}x + \frac{1}{4} \frac{b^2}{a} = \frac{1}{4} \frac{b^2}{a^2} - \frac{c}{a}$$

$$\left(x + \frac{1}{2} \frac{b}{a}\right)^2 = \frac{b^2 - 4ac}{4a^2}$$

$$x = -\frac{1}{2} \frac{b}{a} \pm \sqrt{\frac{b^2 - 4ac}{4a^2}}$$

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

ESTO GENERA DOS RAICES, SEGUN SEA \pm ; SERAN COMPLEJAS SI EL DISCRIMINANTE ($b^2 - 4ac$) ES MENOR QUE CERO.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG.42)

11.3.3.2 ECUACION CUBICA

SI TENEMOS UNA ECUACION CUBICA DE LA SIGUIENTE FORMA :

$$x^3 + 3b_1x^2 + 3b_2x + b_3 = 0 \quad (\text{EC. } \lambda)$$

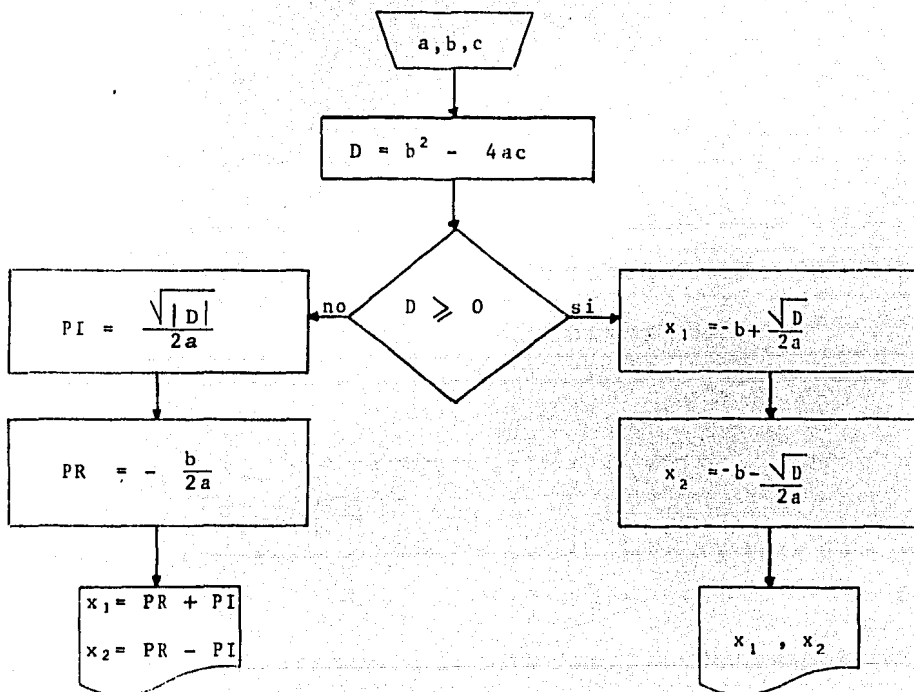
Y SUSTITUIAMOS $x = z - b_1$ SE OBTIENE :

$$z^3 + 3(b_2 - b_1^2)z + (2b_1^3 - 3b_2b_1) + b_3 = 0$$

$$\text{SI } Q = b_2 - b_1^2 \text{ Y } RR = b_3 + 2b_1^3 - 3b_2b_1$$

LA ECUACION SE TRANSFORMA EN $z^3 + 3Qz + RR = 0$

ECUACION CUADRATICA



NOMENCLATURA

a, b, c coeficientes de

$$ax^2 + bx + c = 0$$

SI $Z = u + v$, LA ECUACION SE TRANSFORMA A :

$$u^3 + v^3 + 3uv(u+v) + 3Q(u+v) + RR = 0$$

DEFINIENDO $v = -\frac{Q}{u}$ Y SUBSTITUYENDO, LLEGAMOS A:

$$u^6 + RR \cdot u^3 - Q^3 = 0 \quad (\text{EC. 1})$$

ESTA ECUACION PUEDE RESOLVERSE POR LA FORMULA DE LA ECUACION CUADRATICA. u TENDRA 6 RAICES Y POR CADA UNA, HABRA UNA v . SOLUCIONES DE LA ECUACION 1 :

$$u^3 = -\frac{1}{2} RR \pm \frac{1}{2} \sqrt{RR^2 + 4Q^3}$$

$$\text{SI } R = -\frac{1}{2} RR, \text{ ENTONCES } u^3 = R \pm \sqrt{R^2 + Q^3}$$

$$\text{SEA } u_1 = \sqrt[3]{R + \sqrt{R^2 + Q^3}} \text{ PERO SI } v_1 = -\frac{Q}{u_1}$$

$$\text{POR LO TANTO } v_1 = \sqrt[3]{R - \sqrt{R^2 + Q^3}}$$

$$\text{SI } u_2 = \sqrt[3]{R - \sqrt{R^2 + Q^3}}, \text{ ENTONCES :}$$

$$v_2 = \sqrt[3]{R + \sqrt{R^2 + Q^3}}$$

$$Z_1 = u_1 + v_1 = u_2 + v_2$$

NOTESE COMO DOS PARES DE SOLUCIONES u, v , GENERAN UNA SOLUCION DE Z , Y EN CONSECUENCIA UNA SOLUCION DE x . ESTO NOS INDICA QUE DE LAS 6 SOLUCIONES DE u , MAXIMO SE OBTENDRAN 3 SOLUCIONES DISTINTAS DE x .

CON EL OBJETO DE ANALIZAR LAS POSIBLES SOLUCIONES DE x , SE DEFINIRAN :

$$u^3 = R + \sqrt{R^2 + Q^3} \quad (\text{EC. 2})$$

$$v^3 = R - \sqrt{R^2 + Q^3} \quad (\text{EC. 3})$$

PARA CALCULAR $u_1, u_2, u_3, v_1, v_2, v_3$ UTILIZAREMOS EL TEOREMA DE MOIVRE

— RAICES x_1, x_2, x_3 CUANDO $R^2 + Q^3 < 0$.

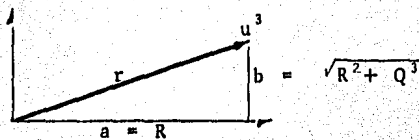
u^3 Y v^3 SERAN NUMEROS COMPLEJOS :

$$u^3 = a + bi, \quad v^3 = a - bi \quad (\text{EC. 4})$$

QUE EN COORDENADAS POLARES, SERAN

$$u^3 = r [\cos \theta + i \operatorname{sen} \theta]$$

$$v^3 = r [\cos \theta - i \operatorname{sen} \theta] \quad (\text{EC. 5})$$



$$u_{j+1} = r^{\frac{1}{3}} \left[\cos \left(\frac{\theta + j * 2\pi}{3} \right) + i \operatorname{sen} \left(\frac{\theta + j * 2\pi}{3} \right) \right] \quad (\text{EC. 6})$$

$$v_{j+1} = r^{\frac{1}{3}} \left[\cos \left(\frac{\theta + j * 2\pi}{3} \right) - i \operatorname{sen} \left(\frac{\theta + j * 2\pi}{3} \right) \right] \quad (\text{EC. 7})$$

PARA $J = 0, 2$

TEOREMA DE MOIVRE

$$x_{j+1} = u_{j+1} + v_{j+1} - b_1 \quad (\text{EC. 8})$$

$$x_{j+1} = 2r^{\frac{1}{3}} \left[\cos \left(\frac{\theta + j * 2\pi}{3} \right) \right] - b_1 \quad \text{PARA } j = 0, 2$$

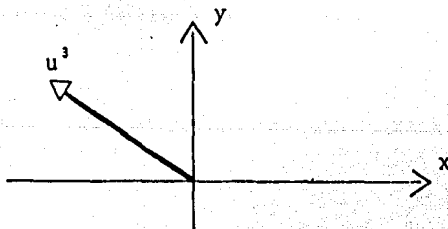
AL COMPARAR LAS ECUACIONES 2, 3, 4 Y 5, SE ESTABLECE

$$r = \sqrt{a^2 + b^2} = \sqrt{R^2 + |R^2 + Q^3|}$$

$$\cos \theta = \frac{R}{r} \quad \text{Y} \quad \text{sen } \theta = \frac{\sqrt{|R^2 + Q^3|}}{r}$$

SI $R < 0$ $\cos \theta < 0$ Y $\text{SEN } \theta > 0$

IMPLICA QUE u^3 ESTARA UBICADO EN EL SEGUNDO CUADRANTE DEL DIAGRAMA DE ARGAND



$$x_{j+1} = 2 \sqrt[3]{R^2 + |R^2 + Q^3|} \left[\cos \left(\frac{\theta + j * 2\pi}{3} \right) \right] - b_1 \quad \text{PARA } j=0, 2$$

$$\theta = \text{arc tg} \left(\frac{\sqrt{|R^2 + Q^3|}}{R} \right)$$

ESTO GENERARA TRES RAICES REALES DISTINTAS

— RAICES x_1, x_2, x_3 CUANDO $R^2 + Q^3 \geq 0$

DADO QUE $\sqrt{R^2 + Q^3}$ ES REAL, PUEDEN RESOLVERSE DIRECTA -
MENTE LAS ECUACIONES 2 Y 3 PARA APLICARLAS A LA EC. 8

$$\text{TENDREMOS : } x_1 = \sqrt[3]{R + \sqrt{R^3 + Q^3}} + \sqrt[3]{R - \sqrt{R^3 + Q^3}} - b_1$$

POR RELACIONES DE COEFICIENTES - RAICES DEL POLINOMIO,

$x_1 + x_2 + x_3 = -3b_1$, PUEDEN EVALUARSE LAS OTRAS DOS RAICES CON

SIDERANDOLAS COMPLEJAS O IGUALES. SI HACEMOS :

$$S = \sqrt[3]{R + \sqrt{R^2 + Q^3}} \quad \text{Y} \quad T = \sqrt[3]{R - \sqrt{R^2 + Q^3}}$$

$$\text{NOS QUEDARAN : } x_2 = -\frac{1}{2}(S + T) - b_1 + \frac{1}{2}i\sqrt{3}(S - T)$$

$$x_3 = -\frac{1}{2}(S + T) - b_1 - \frac{1}{2}i\sqrt{3}(S - T)$$

— GENERALIZACION DEL ALGORITMO DE LA ECUACION CUBICA —

SI TENEMOS LA ECUACION CUBICA EN LA FORMA

$$x^3 + a_1 x^2 + a_2 x + a_3 = 0$$

LA SOLUCION SERIA SIMILAR A LA EC. A HACIENDO

$$b_1 = \frac{a_1}{3}, \quad b_2 = \frac{a_2}{3} \quad \text{Y} \quad b_3 = a_3$$

OBTENIENDO :

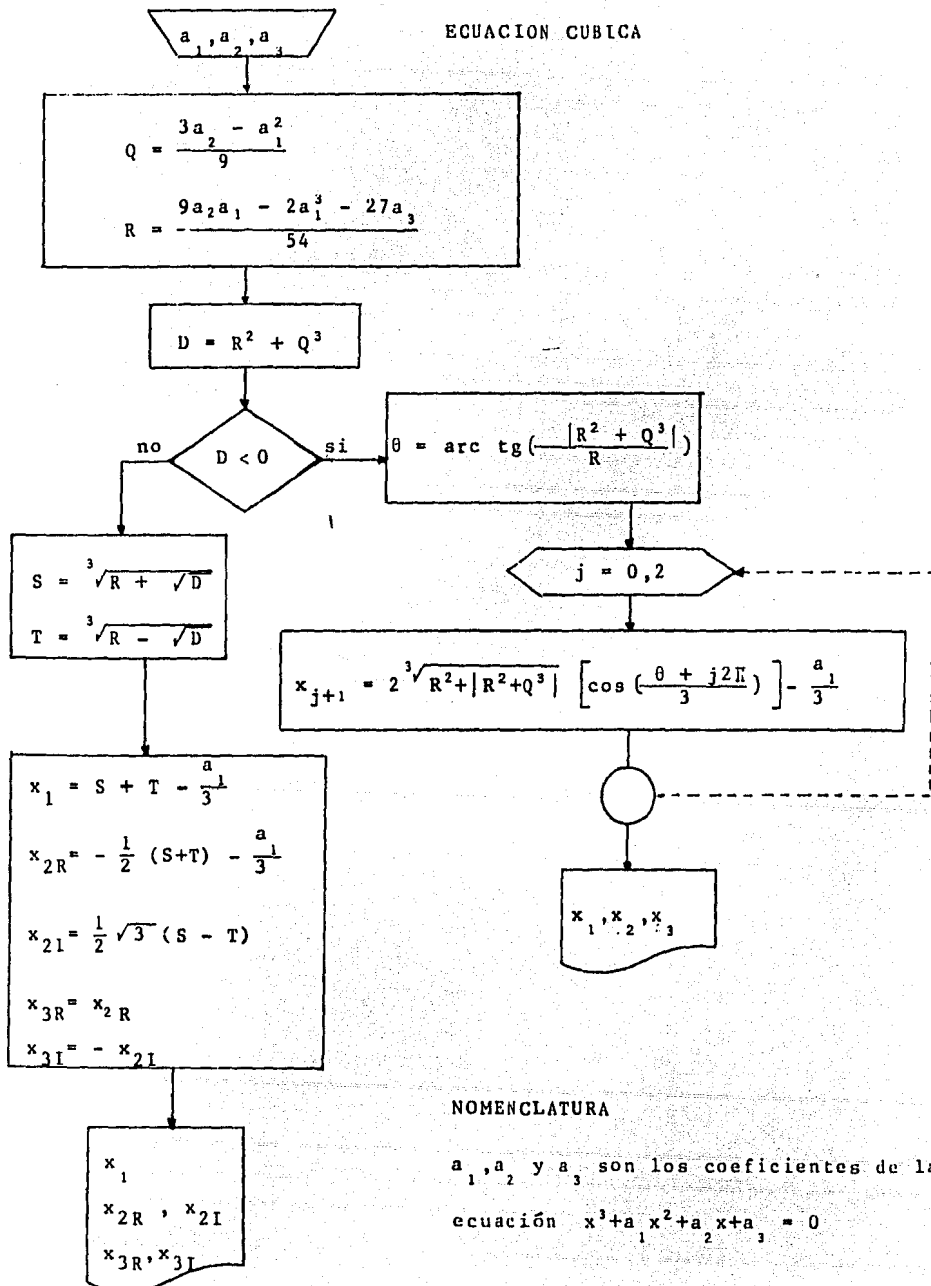
$$R = \frac{9a_2 a_1 - 2a_1^3 - 27 a_3}{54}$$

$$Q = \frac{3a_2 - a_1^2}{9}$$

CON ESTAS MODIFICACIONES, PODRIAN UTILIZARSE LAS ECUACIONES YA OBTENIDAS ANTERIORMENTE PARA CALCULAR x_1 , x_2 , x_3 DE ACUERDO AL CASO DETERMINADO POR EL VALOR DE $R^2 + Q^3$.

(VER DIAGRAMA EN LA PAG. 47)

ECUACION CUBICA



NOMENCLATURA

a_1, a_2 y a_3 son los coeficientes de la ecuación $x^3 + a_1 x^2 + a_2 x + a_3 = 0$

II.3.3.3 DIVISION SINTETICA

SE UTILIZA PARA DISMINUIR EL GRADO DE UN POLINOMIO CUANDO SE CONOCE ALGUNA DE SUS RAICES. SI PARA UN POLINOMIO DE GRADO N SE CALCULA UNA RAIZ MEDIANTE UNA TECNICA ITERATIVA, USANDO LA DIVISION SINTETICA PODRA REDUCIRSE EL GRADO DEL POLINOMIO A N-1. SI SE DESEA, PODRA APLICARSE NUEVAMENTE LA TECNICA ITERATIVA PARA ENCONTRAR OTRA RAIZ.

ESTE PROCESO DE ALTERNAR LA TECNICA ITERATIVA CON LA DIVISION SINTETICA NOS PUEDE LLEVAR A UN POLINOMIO DE SEGUNDO O TERCER GRADO, AL CUAL PODREMOS APLICARLE CUALQUIERA DE LAS TECNICAS PARA ECUACIONES CUADRATICAS O CUBICAS MENCIONADAS ANTERIORMENTE.

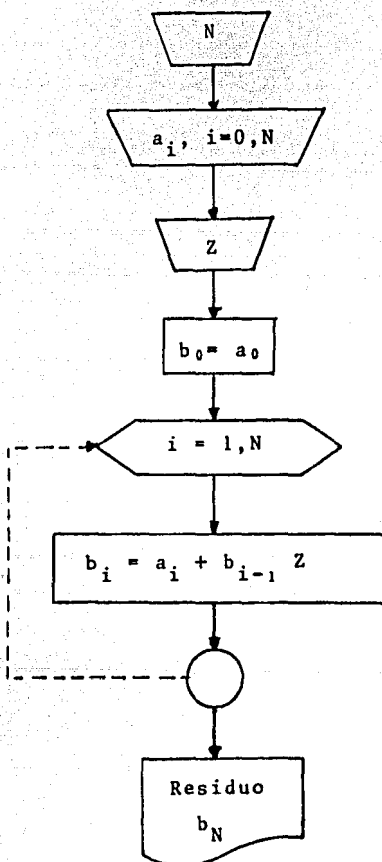
SEA $f(x) = a_0x^N + a_1x^{N-1} + \dots + a_{N-1}x + a_N$ UN POLINOMIO DE GRADO N Y Z UNA RAIZ DEL MISMO. OBSERVAMOS QUE ESTA ORDENADO EN FORMA DE POTENCIAS DECRECIENTES, POR LO QUE a_0 ES EL COEFICIENTE DEL TERMINO DE MAYOR GRADO. EL PROCESO DE LA DIVISION SINTETICA SERA :

a_0	a_1	a_2	\dots	a_{N-1}	a_N	Z
	a_0Z	$a_1Z + a_0Z^2$	\dots			
a_0	$a_1 + a_0Z$	$a_2 + a_1Z + a_0Z^2$	\dots	(residuo)		

PARA LA RAIZ Z, EL RESIDUO DEBE SER IGUAL A CERO. DE OTRA MANERA, SERA DIFERENTE DE CERO E IGUAL A $f(Z)$

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 49)

DIVISION SINTETICA



NOMENCLATURA

N = grado del polinomio

a_i = coeficiente i del polinomio

z = raíz o cantidad entre la que se divide

II.4 TECNICAS DE INTEGRACION.

II.4.0 INTRODUCCION

EL METODO BASICO PARA OBTENER UN VALOR APROXIMADO DE

$$\int_a^b f(x) dx \quad \text{SE LE CONOCE COMO CUADRATURA NUMERICA Y EN GENE-}$$

RAL UTILIZA UNA SUMATORIA DE LA FORMA $\sum_{i=0}^N a_i f(x_i)$ EN DON-

DE a_i SE EVALUA A PARTIR DEL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON O BIEN UTILIZANDO OTRO POLINOMIO DE APROXIMACION. DADO QUE SE UTILIZARA EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON PARA DESARROLLAR LOS DIFERENTES ALGORITMOS CONVIENE POR RAZON DE SIMPLICIDAD REPRESENTAR ESTE POLINOMIO POR MEDIO DE DIFERENCIAS FINITAS SIN DIVIDIR HACIA ADELANTE. DEFINASE EL OPERADOR

$\Delta f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_i)$ COMO OPERADOR DE PRIMERA DIFERENCIA FINITA HACIA ADELANTE PARA EL CUAL SE CUMPLE QUE

$$\Delta^2 = \Delta f(x_{i+1}) - \Delta f(x_i) \quad \text{Y} \quad \Delta^3 = \Delta^2 f(x_{i+1}) - \Delta^2 f(x_i) \quad \text{Y} \quad \dots$$

ETC.

A LOS QUE SE LE DENOMINAN SEGUNDA Y TERCERA DIFERENCIAS, DONDE CON EL EXPONENTE DEL OPERADOR SE INDICA EL ORDEN DE LA DIFERENCIA.

COMO PUEDE OBSERVARSE, EN LA DEFINICION DEL OPERADOR NO INTERVIENE DIRECTA O EXPLICITAMENTE EL SUBINTERVALO DE LA VARIABLE INDEPENDIENTE EN EL CUAL SE ESTA EVALUANDO LA DIFERENCIA.

POR ESTE MOTIVO, SU USO ES RECOMENDABLE UNICAMENTE CUANDO LOS VALORES DE x_i DESDE $i = 1$ HASTA N , SON GENERADOS CON INCREMENTOS CONSTANTES, DE TAL FORMA QUE CUALQUIER SUBINTERVALO TENGA EL MISMO TAMAÑO.

SI h ES EL INCREMENTO O TAMAÑO DEL SUBINTERVALO, ENTONCES $x_{i+1} = x_i + h$; DESDE $i = 0$ HASTA N , FUNDAMENTADOS EN ESTAS CONCLUSIONES, A CONTINUACION SE PRESENTAN LAS EQUIVALENCIAS ENTRE LAS DIFERENCIAS FINITAS DIVIDIDAS Y LAS DIFERENCIAS FINITAS SIN DIVIDIR (HACIA ADELANTE):

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{\Delta f(x_i)}{h}$$

$$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i} =$$

$$= \frac{\frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{x_{i+2} - x_{i+1}} - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}}{x_{i+2} - x_i} = \frac{\frac{\Delta f(x_{i+1})}{h} - \frac{\Delta f(x_i)}{h}}{2h} =$$

$$= \frac{\Delta^2 f(x_i)}{2h^2}$$

$$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}] =$$

$$= \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}] - f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]}{x_{i+3} - x_i} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{f[x_{i+2}, x_{i+3}] - f[x_{i+1}, x_{i+2}]}{x_{i+3} - x_i} - \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i} \\
&= \frac{\left[\frac{f(x_{i+3}) - f(x_{i+2})}{x_{i+3} - x_{i+2}} \right] - \left[\frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{x_{i+2} - x_{i+1}} \right]}{x_{i+3} - x_{i+1}} - \\
&\quad - \frac{\left[\frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{x_{i+2} - x_{i+1}} \right] - \left[\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \right]}{x_{i+2} - x_i} \\
&= \frac{\frac{\Delta f(x_{i+2}) - \Delta f(x_{i+1})}{h} - \frac{\Delta f(x_{i+1}) - \Delta f(x_i)}{h}}{2 \times 3h^2}
\end{aligned}$$

RESUMIENDO:

$$f[x_i] = \Delta^0 f(x_i) = f(x_i)$$

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{\Delta^1 f(x_i)}{h}$$

$$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{\Delta^2 f(x_i)}{2h^2} = \frac{\Delta^2 f(x_i)}{2!h^2}$$

$$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}] = \frac{\Delta^3 f(x_i)}{2 \times 3h^3} = \frac{\Delta^3 f(x_i)}{3!h^3}$$

⋮

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] = \frac{\Delta^k f(x_i)}{k!h^k}$$

PARA PODER HACER LA TRANSFORMACION COMPLETA DEL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON SE DEFINE A x DE LA MANERA SIGUIENTE:

$x = x_i + \alpha h$, DONDE α ES UN NUMERO REAL (ENTERO O FRACCIONARIO), DE TAL FORMA QUE

$$x_{i+1} = x_i + 1 * h \Rightarrow \alpha = 1$$

$$x_{i+2} = x_i + 2 * h \Rightarrow \alpha = 2$$

$$x_{i+3} = x_i + 3 * h \Rightarrow \alpha = 3$$

⋮

ETC.

LOS FACTORES $(x - x_i)$, $(x - x_{i+1})$, $(x - x_{i+2})$, ETC. SERAN TRANSFORMADOS A UNA FUNCION DE α :

$$x - x_i = (x_i + \alpha h - x_i) = \alpha h$$

$$x - x_{i+1} = x_i + \alpha h - (x_i + h) = (\alpha - 1)h$$

$$x - x_{i+2} = x_i + \alpha h - (x_i + 2h) = (\alpha - 2)h$$

POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON:

$$f(x) = f[x_i] + f[x_i, x_{i+1}](x - x_i) + f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}](x - x_i)(x - x_{i+1}) + \\ + f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}](x - x_i)(x - x_{i+1})(x - x_{i+2}) + \dots$$

EN FUNCION DE α EN DIFERENCIAS FINITAS SIN DIVIDIR, SE OBTENDRA:

$$f(x) = f(x_i) + \frac{\Delta f(x_i)}{h} \alpha h + \frac{\Delta^2 f(x_i)}{2!h^2} h^2 \alpha(\alpha - 1) + \\ + \frac{\Delta^3 f(x_i)}{3!h^3} h^3 \alpha(\alpha - 1)(\alpha - 2) + \dots$$

$$f(x) = f(x_i) + \Delta f(x_i)\alpha + \frac{\Delta^2 f(x_i)}{2!} \alpha(\alpha-1) + \\ + \frac{\Delta^3 f(x_i)}{3!} \alpha(\alpha-1)(\alpha-2) + \dots$$

LA ECUACION ANTERIOR SERA UTILIZADA EN LAS SIGUIENTES SECCIONES PARA EL DESARROLLO DE ALGORITMOS.

II.4.1 REGLA DEL TRAPECIO.

SE DESARROLLA MEDIANTE LOS SIGUIENTES PASOS:

1º) PARA RESOLVER LA INTEGRAL $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$, SE EXPANDE LINEALMENTE A LA FUNCION $f(x)$ Y SE REPRESENTA A x EN FUNCION DE α .

2º) SE INTEGRA LA FUNCION RESULTANTE

$$f(x) = f(x_i) + \Delta f(x_i)\alpha$$

$x = x_i + ah$; $x = x_i$ PARA $\alpha = 0$; $x = x_i + 1$ PARA $\alpha = 1$
 $dx = h d\alpha$, CON LO CUAL LA INTEGRAL A RESOLVER ES:

$$\int_0^1 \left[f(x_i) + \Delta f(x_i)\alpha \right] h d\alpha = h \left[f(x_i)\alpha + \frac{\Delta f(x_i)}{2} \alpha^2 \right] \Big|_0^1 =$$

NOTESE QUE SOLO α ES VARIABLE

$$\left[f(x_i) + \frac{\Delta f(x_i)}{2} \right] h = \left[f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{2} \right] h = \\ = \frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} h$$

NOTESE LA ANALOGIA ENTRE ESTA FORMULA Y EL AREA DE UN TRAPEZIO $\left[\frac{b + B}{2} \right] h$.

SI SE QUIERE RESOLVER LA INTEGRAL $\int_a^b f(x) dx$ PUEDE APLICARSE

EL SIGUIENTE PROCEDIMIENTO:

1) DEFINIR A $x_0 = a$ Y $x_N = b$ PARA UN INCREMENTO

$h = \frac{b - a}{N}$, DONDE $N + 1 = NP$, SIENDO NP IGUAL AL NUMERO DE PUNTOS QUE SE TOMARAN EN CONSIDERACION PARA RESOLVER LA INTEGRAL.

DE ACUERDO CON ESTO, SE PUEDE OBTENER LA SIGUIENTE EQUIVALENCIA:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \int_{x_2}^{x_3} f(x) dx + \dots + \int_{x_{N-1}}^N f(x) dx = \sum_{i=0}^{N-1} f(x) dx$$

OBSERVESE QUE TODA EL AREA BAJO LA CURVA DE $f(x)$ CONTRA x EN EL INTERVALO $[a, b]$ SE ESTA DESCOMPONRIENDO EN N AREAS PEQUEÑAS REPRESENTATIVAS DE N SUBINTERVALOS $[x_i, x_{i+1}]$.

TODO LO ANTERIOR IMPLICA QUE LA INTEGRAL DEL INTERVALO TOTAL $[a, b]$ PUEDE SER APROXIMADA POR N INTEGRACIONES CON LA REGLA DEL TRAPEZIO, Y POR LO TANTO:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{NP-1} \frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} * h = h \left[\frac{f(x_0) + f(x_N)}{2} + \sum_{i=1}^{NP-1} f(x_i) \right]$$

DONDE $a = x_0$, Y $b = x_N$.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 57) .

II.4.2 REGLA DE SIMPSON.

SE DESARROLLA MEDIANTE LOS SIGUIENTES PASOS:

- 1) PARA RESOLVER LA INTEGRAL $\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x) dx$, SE EXPANDE MEDIANTE UN POLINOMIO DE SEGUNDO GRADO A LA FUNCION $f(x)$.
- 2) SE INTEGRA LA FUNCION OBTENIDA CON LAS TRANSFORMACIONES CORRESPONDIENTES DE x A ALFA (α).

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x) dx = \int_0^2 \left[f(x_i) + \Delta f(x_i) \alpha + \frac{\Delta^2 f(x_i) \alpha (\alpha - 1)}{2!} \right] h d\alpha =$$

$$= h \left[f(x_i) \alpha + \frac{\Delta f(x_i) \alpha^2}{2} + \frac{\Delta^2 f(x_i)}{2} \left(\frac{\alpha^3}{3} - \frac{\alpha^2}{2} \right) \right] \Big|_0^2 =$$

SUSTITUYENDO $\alpha = 2$

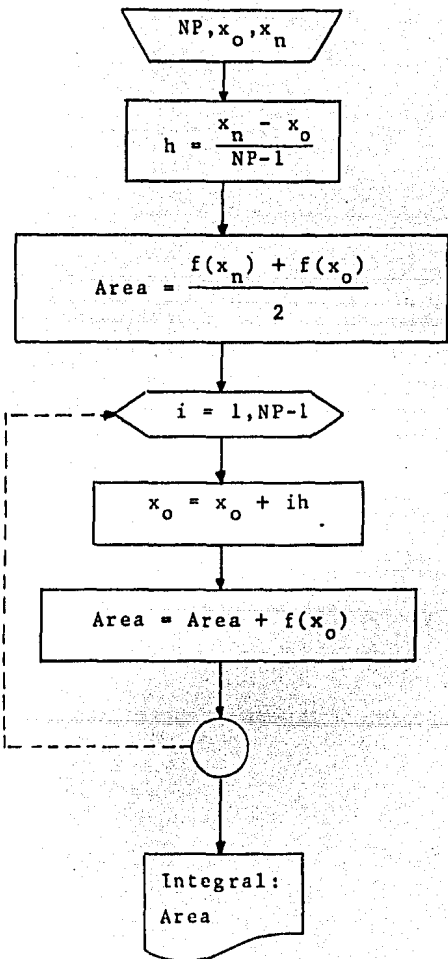
$$h \left[2f(x_i) + 2\Delta f(x_i) + \frac{\Delta^2 f(x_i)}{3} \right] =$$

$$h \left[2f(x_i) + 2\Delta f(x_i) + \frac{1}{3} (\Delta f(x_{i+1}) - \Delta f(x_i)) \right] =$$

$$h \left[2f(x_i) + \frac{5}{3} \Delta f(x_i) + \frac{1}{3} \Delta f(x_{i+1}) \right] =$$

$$h \left[2f(x_i) + \frac{5}{3} (f(x_{i+1}) - f(x_i)) + \frac{1}{3} (f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})) \right] =$$

$$\frac{h}{3} \left[f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2}) \right]$$



REGLA DEL TRAPECIO

NOMENCLATURA :

NP = N° de puntos contenidos en el intervalo -

$[x_0, x_n]$

x_0 = valor inicial de x

x_n = valor final de x

h = incremento de x

f(x) = valor de la función en x

Ver notas pags. 63 y 64

NOTA:

- 1) PARA APLICAR ESTE ALGORITMO N DEBE SER NUMERO PAR.
- 2) EN ESTE ALGORITMO SE RECORREN DOS SUBINTERVALOS CALCULO

DE $\int_a^b f(x) dx$, DEFINIENDO $x_0 = a$, $x_N = b$ PARA N NUMERO PAR.

SE OBTIENE LA SIGUIENTE APROXIMACION

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{NP-2} \frac{h}{3} \left[f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2}) \right]$$

SUMATORIA EN DONDE EL INCREMENTO DE i DEBE SER DE DOS EN DOS.

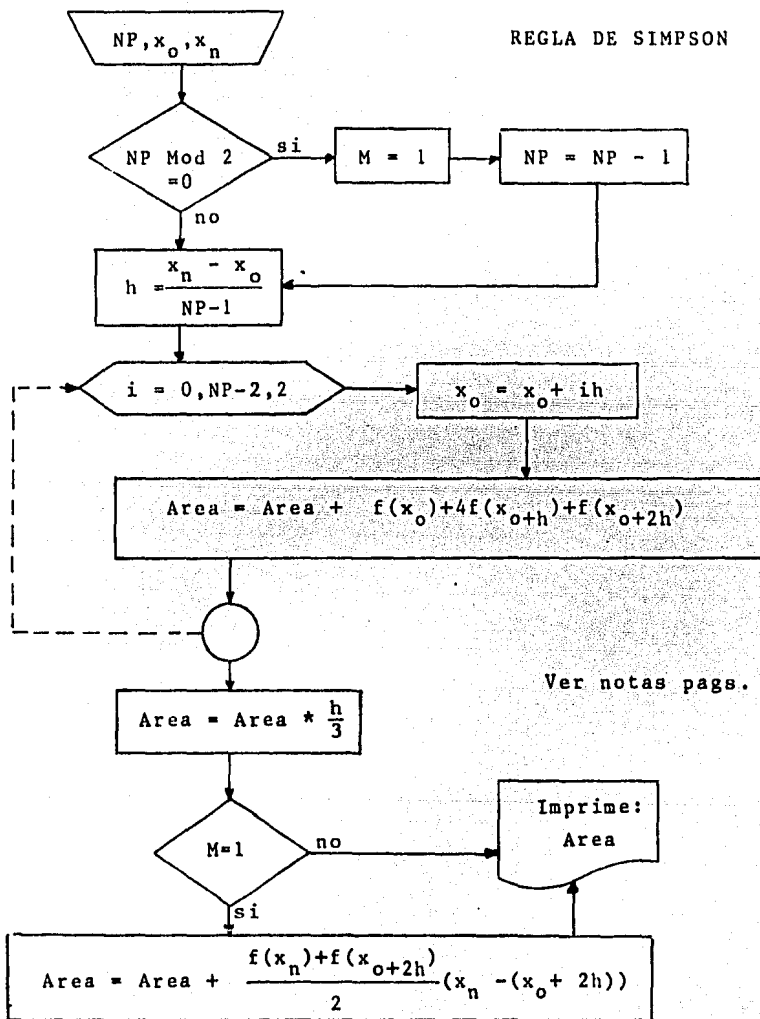
SI ESTE ALGORITMO SE APLICARA PARA INTEGRAR UN CONJUNTO DE DA TOS EXPERIMENTALES EL NUMERO DE ELEMENTOS DEL CONJUNTO DEBE SER IMPAR, DE TAL MANERA QUE HAYA N SUBINTERVALOS DONDE N SEA UN NUMERO PAR. SI ESTE NO FUERA EL CASO INTEGRE POR REGLA DE SIMPSON UTILIZANDO TODOS LOS DATOS MENOS EL ULTIMO. EL AREA CORRESPONDIENTE AL ULTIMO DATO, CALCULELA CON LA REGLA DEL TRAPECIO.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 59).

II.4.3 REGLA DE SIMPSON 3/8.

SE DESARROLLA MEDIANTE LOS SIGUIENTES PASOS:

REGLA DE SIMPSON



Ver notas pags. 63 y 64

NOMENCLATURA :

NP = N° de puntos contenidos en el intervalo (debe ser impar) $|x_0, x_n|$ x_0 = valor inicial de x x_n = valor final de x

h = incremento de x

f(x) = valor de la función en x

Si NP es impar, el último subintervalo se integra con la regla del trapecio .

- 1) PARA RESOLVER LA INTEGRAL $\int_{x_i}^{x_{i+3}} f(x) dx$, SE EXPANDE MEDIANTE EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON DE GRADO TRES.
- 2) INTEGRA LA FUNCION RESULTANTE MEDIANTE LAS TRANSFORMACIONES DE x A α .

$$\int_{x_i}^{x_{i+3}} f(x) dx = \int_0^3 \left[f(x_i) + \Delta f(x_i) \alpha + \frac{\Delta^2 f(x_i) \alpha(\alpha-1)}{2!} + \frac{\Delta^3 f(x_i) \alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!} \right] h d\alpha =$$

$$h \left[f(x_i) \alpha + \Delta f(x_i) \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\Delta^2 f(x_i)}{2} \left(\frac{\alpha^3}{2} - \frac{\alpha^2}{2} \right) + \frac{\Delta^3 f(x_i)}{6} \left(\frac{\alpha^4}{4} - \alpha^3 + \alpha^2 \right) \right] \Big|_0^3 =$$

SUSTITUYENDO $\alpha = 3$

$$h \left[3f(x_i) + \frac{9}{2} \Delta f(x_i) + \frac{9}{4} \Delta^2 f(x_i) + \frac{9}{24} \Delta^3 f(x_i) \right] =$$

DESARROLLANDO Y SIMPLIFICANDO QUEDA:

$$\frac{3}{8} h \left[f(x_i) + 3f(x_{i+1}) + 3f(x_{i+2}) + f(x_{i+3}) \right]$$

DE MANERA SIMILAR A LOS CASOS ANTERIORES LA INTEGRAL

$$\int_a^b f(x) dx \text{ PUEDE SER APROXIMADA POR:}$$

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{NP-3} \frac{3}{8} h \left[f(x_i) + 3f(x_{i+1}) + 3f(x_{i+2}) + f(x_{i+3}) \right]$$

$$\text{CON } x_0 = a, \quad x_N = b \quad \text{Y} \quad h = \frac{x_N - x_0}{NP - 1}.$$

EL INDICE DE LA SUMATORIA DEBE INCREMENTARSE DE TRES EN TRES.

NOTESE COMO ESTA TECNICA VA INTEGRANDO SIMULTANEAMENTE TRES SUBINTERVALOS, POR LO QUE EL NUMERO DE PUNTOS MENOS UNO (NP - 1) DEBE SER MULTIPLO DE TRES.

CONDICIONANDO POR ESTA RAZON SU USO SI SE DESEARA UTILIZARLO CONSTANTEMENTE HABRA QUE DISCRIMINAR HASTA CUANTOS PUNTOS SE PUEDE UTILIZAR ESTA TECNICA Y PARA PUNTOS RESTANTES UTILIZAR SIMPSON (SIMPLE) Y TRAPECIO.

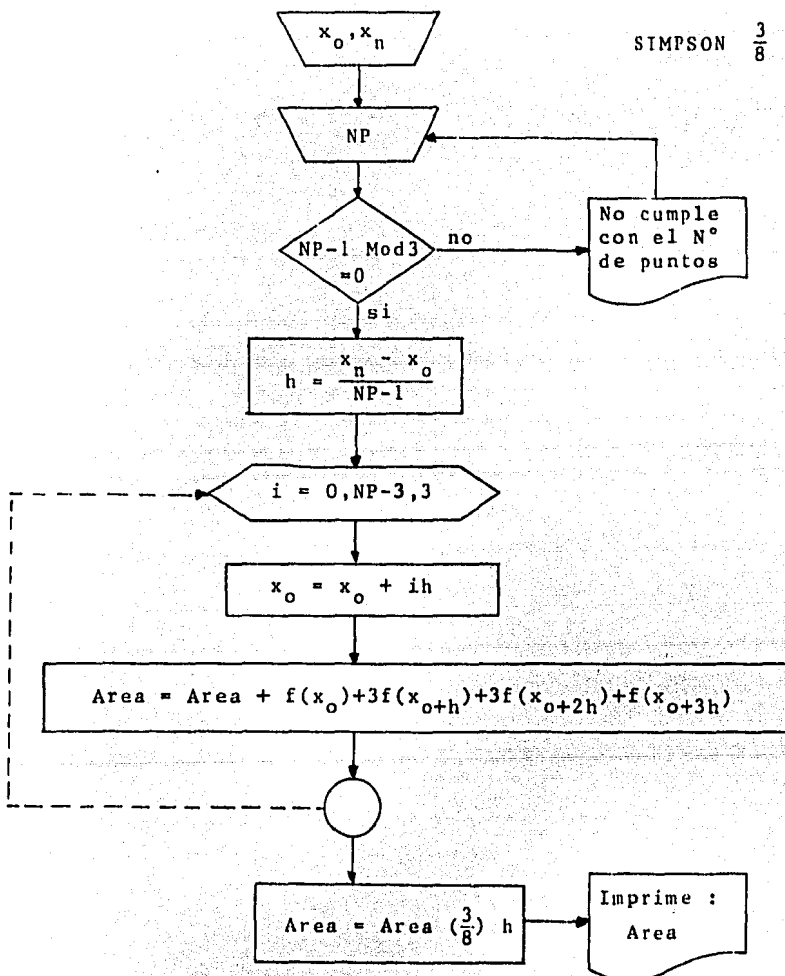
DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 62).

II.4.4 OTRAS TECNICAS GENERADAS POR EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON.

EXISTEN TODA UNA SERIE DE FORMULAS DESARROLLADAS CON EL O LOS PROCEDIMIENTOS ANTERIORES, EN FORMA CONJUNTA CON UN PROCESO DE PRUEBA Y ERROR QUE TIENDE A MEJORAR EL RESULTADO OBTENIDO.

DENTRO DE ESTAS SE ENCUENTRA LA FAMILIA DE TECNICAS DE NEWTON-COTES EN INTERVALO ABIERTO, LAS CUALES SON MENOS APROXIMADAS A LAS DESCRITAS ANTERIORMENTE; MOTIVO POR EL CUAL NO SERAN DESARROLLADAS.

COMO UNA APLICACION RECURSIVA DE LA REGLA DEL TRAPECIO, SURGE

SIMPSON $\frac{3}{8}$ 

NOMENCLATURA :

 x_0 = valor inicial de x x_n = valor final de x NP = N° de puntos contenidos en el intervalo (múltiplo de 3) $[x_0, x_n]$ h = incremento de x $f(x)$ = valor de la función en x

Ver notas pags. 63 y 64

Notas aplicables a los diagramas de la regla del trapecio, regla de Simpson y Simpson $\frac{3}{8}$.

NOTA 1 : Se pueden modificar los diagramas, agregando 2 opciones para el usuario :

- 1 - Un segmento de lectura de los pares $x_i, f(x_i), i=0, NP-1$ (para incluir los NP puntos) .
- 2 - Un segmento en donde se generan las $f(x_i)$ mediante la definición previa de la función $f(x)$ a integrar y de los valores de x_i .

Esto permitirá tener programas que integren funciones, o bien, calculen el area bajo una curva definida por las parejas de datos $x_i, f(x_i)$.

NOTA 2 : En el proceso de integración, h puede ser variable, y en tal caso, los algoritmos deben modificarse para calcular el area de acuerdo con las fórmulas siguientes :

a) regla del trapecio

$$\text{Area} = \sum_{i=0}^{NP-1} \frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} (x_{i+1} - x_i)$$

$$h = x_{i+1} - x_i$$

b) regla de Simpson

$$\text{Area} = \sum_{i=0}^{NP-2} (f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})) \left(\frac{x_{i+2} - x_i}{2} \right) \frac{1}{3}$$

para incremento de i de 2 en 2 y $NP-1$ par

$$\text{donde } \bar{h} = \frac{x_{i+2} - x_i}{2}$$

c) regla de Simpson $\frac{3}{8}$

$$\text{Area} = \sum_{i=0}^{NP-3} (f(x_i) + 3f(x_{i+1}) + 3f(x_{i+2}) + f(x_{i+3})) \left(\frac{x_{i+3} - x_i}{3} \right) \frac{3}{8}$$

para incremento de i de 3 en 3 y $NP-1$ múltiplo de 3

$$\text{donde } \bar{h} = \frac{x_{i+3} - x_i}{3}$$

LA TECNICA DE ROMBERG, LA CUAL SE DESCRIBE A CONTINUACION:

SI EN $\int_{x_i}^x f(x) dx$, $f(x)$ SE EXPANDE MEDIANTE EL POLINOMIO

FUNDAMENTAL DE NEWTON CON DIFERENCIAS FINITAS (SIN DIVIDIR)

HACIA ADELANTE, SE OBTIENE:

$$\int_{x_i}^x f(x) dx = \int_0^\alpha \left[f(x_i) + \Delta f(x_i) \alpha + \frac{\Delta^2 f(x_i) \alpha(\alpha-1)}{2!} + \frac{\Delta^3 f(x_i) \alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!} + \frac{\Delta^4 f(x_i) \alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3)}{4!} + \dots \right] h d\alpha = \left[f(x_i) + \Delta f(x_i) \frac{\alpha^2}{2} + \frac{1}{2} \Delta^2 f \left(\frac{\alpha^3}{3} - \frac{\alpha^2}{2} \right) + \frac{1}{6} \Delta^3 f \left(\frac{\alpha^4}{4} - \alpha^3 + \alpha^2 \right) + \frac{1}{24} \Delta^4 f \left(\frac{\alpha^5}{5} - \frac{6\alpha^4}{4} + \frac{11\alpha^3}{3} - 3\alpha^2 \right) + \dots \right] h$$

EC. A.

ESTA FORMULA PERMITIRA CALCULAR LA INTEGRAL MEDIANTE CUALQUIER TECNICA QUE SE DESEE SELECCIONAR, YA SEA REGLA DEL TRAPECIO, REGLA DE SIMPSON, U OTRA DE ORDEN MAYOR.

SI SE SELECCIONA LA REGLA DEL TRAPECIO, ENTONCES SE INTEGRARA DE x_i A x_{i+1} . SI SE CONSIDERA QUE LOS TERMINOS PREDOMINANTES DE LA SERIE SON LOS TRES PRIMEROS, SE OBTIENE:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \left[f(x_i) + \frac{\Delta f(x_i)}{2} + \frac{1}{2} \Delta^2 f \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2} \right) \right] h = \left[f(x_i) + \frac{\Delta f(x_i)}{2} - \frac{1}{12} \Delta^2 f \right] h = (f(x_i) + \frac{\Delta f}{2}(x_i)) h - \frac{1}{12} h^2 \frac{\Delta^2 f}{h^2} h = (f(x_i) + \frac{\Delta f}{2}(x_i)) h - \frac{1}{12} h^3 f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} h - \frac{1}{12} h^3 f''(x_i)$$

SI SE APLICA AL INTERVALO $[a, b]$ CON $h = \frac{b-a}{N}$ PARA N SUBINTERVALOS, ENTONCES:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum \left[\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} h - \frac{1}{12} h^3 f''(x_i) \right]$$

SI f'' SE REPRESENTA EN FORMA APROXIMADA MEDIANTE f' :

$$f''(x_i) \equiv \frac{f'(b) - f'(a)}{h} \quad \text{POR LO TANTO:}$$

$$\begin{aligned} \sum f''(x_i) &= \sum \frac{f'(x_{i+1}) - f'(x_i)}{h} = \frac{f'(x_N) - f'(x_0)}{h} = \\ &= \frac{f'(b) - f'(a)}{h} \end{aligned}$$

POR LO TANTO:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum \left[\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} h - \frac{h^3}{12} \frac{f'(b) - f'(a)}{h} \right]$$

A ESTA ULTIMA FORMA SE LE CONOCE COMO REGLA DEL TRAPECIO EXTENDIDA. DEPENDIENDO EN CUANTOS SUBINTERVALOS SE DIVIDA EL INTERVALO TOTAL, ASI SERA LA APROXIMACION QUE SE TENGA.

DENOMINANDO A $R_{1,1}, R_{2,1}, R_{3,1}, \dots, R_{K,1}$ A LAS APROXIMACIONES OBTENIDAS POR LA REGLA DEL TRAPECIO SIMPLE PARA $1, 2, 3, \dots, K$ SUBINTERVALOS, ENTONCES: PARA $R_{1,1}$, $h_1 = b - a$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \frac{f(a) + f(b)}{2} (b - a) - \frac{h_1^2}{12} (f'(b) - f'(a)) = \\ &= R_{1,1} - \frac{h_1^2}{12} (f'(b) - f'(a)) \end{aligned}$$

PARA $R_{2,1}$, $h_2 = \frac{b-a}{2} \Rightarrow h_2 = \frac{h_2}{2}$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{f(a) + f\left(\frac{a+b}{2}\right)}{2} h_2 + \frac{f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)}{2} h_2 -$$

$$- \frac{h_2^2}{12} (f'(b) - f'(a)) = R_{2,1} - \frac{h_2^2}{12} (f'(b) - f'(a))$$

PARA K SUBINTERVALOS:

$$h_k = \frac{b-a}{K}, \text{ IMPLICANDO QUE } h_k = \frac{h_{k-1}}{2} \text{ PARA K POR DECIR}$$

$$K = 1, 2, 3, \dots$$

$$\int_a^b f(x) dx = R_{k-1,1} - \frac{1}{12} h_{k-1}^2 (f'(b) - f'(a)) \quad \text{EC. 1}$$

$$\int_a^b f(x) dx = R_{k,1} - \frac{1}{12} h_k^2 (f'(b) - f'(a)) \quad \text{EC. 2}$$

PERO DADO QUE $h_k = \frac{1}{2} h_{k-1}$, ENTONCES LA ECUACION 2 SE TRANSFORMA A

$$\int_a^b f(x) dx = R_{k,1} - \frac{1}{48} h_{k-1}^2 (f'(b) - f'(a))$$

MULTIPLICANDO POR 4 OBTENEMOS:

$$4 \int_a^b f(x) dx = 4R_{k,1} - \frac{1}{12} h_{k-1}^2 (f'(b) - f'(a)) \quad \text{EC. 3}$$

SI A LA ECUACION 3 SE LE RESTA LA ECUACION 1, SE OBTIENE:

$$3 \int_a^b f(x) dx = 4R_{K,1} - R_{K-1,1} \quad \text{DE DONDE, FINALMENTE}$$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{4R_{K,1} - R_{K-1,1}}{3}$$

ESTA SERA UNA MEJOR APROXIMACION DE LA INTEGRAL A PARTIR DE LA REGLA DEL TRAPECIO, LA CUAL FUE POSIBLE OBTENERLA DEBIDO A QUE EL TERMINO $f'(b) - f'(a)$ NO DEPENDE DE h .

SI SE DEFINE A $R_{K,2} = \frac{4R_{K,1} - R_{K-1,1}}{3}$ Y SE CONSIDERA QUE, DADO QUE INVOLUCRA HASTA LA SEGUNDA DIFERENCIA, ES EQUIVALENTE A LA REGLA DE SIMPSON. ENTONCES SE LE PUEDE AGREGAR UN SIGUIENTE TERMINO PARA MEJORAR LA APROXIMACION

$$\int_a^b f(x) dx = R_{K,2} + \text{TERMINO ADICIONAL AL OBSERVAR LA ECUA-}$$

CION (A) SE DEDUCE QUE ESE TERMINO ADICIONAL DEBE SER FUNCION DE:

$$\int_0^2 \left[\frac{\Delta^3 f(x_i) \alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!} + \frac{\Delta^4 f(x_i) \alpha(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-3)}{4!} + \dots \right] h d\alpha =$$

LOS LIMITES DE LA INTEGRAL SON DEFINIDOS POR LA REGLA DE SIMPSON. ESTA INTEGRAL SERA IGUAL A:

$$\left[\frac{1}{6} \Delta^3 f \left(\frac{\alpha^4}{4} - \alpha^3 + \alpha^2 \right) + \frac{1}{24} \Delta^4 f \left(\frac{\alpha^5}{5} - \frac{6\alpha^4}{4} + \frac{11\alpha^3}{3} - 3\alpha^2 \right) + \dots \right] h \Big|_0^2 =$$

$$= -\frac{1}{90} \Delta^4 f h.$$

SI SE MULTIPLICA Y SE DIVIDE POR h^4 SE OBTIENE:

$$-\frac{1}{90} h^5 \frac{\Delta^4 f}{h^4} \cong -\frac{1}{90} h^5 f^4(x_i) = -\frac{1}{90} h^4 (f^3(x_{i+1}) - f^3(x_i))$$

SI SE INTEGRA EN EL INTERVALO $[a, b]$, SE OBTENDRA:

$$\begin{aligned} \text{TERMINO ADICIONAL} &= \int -\frac{1}{90} h^4 (f^3(x_{i+1}) - f^3(x_i)) = \\ &= -\frac{1}{90} h^4 (f^3(b) - f^3(a)) \end{aligned}$$

POR LO TANTO FINALMENTE OBTENEMOS:

$$\int_a^b f(x) dx = R_{K,2} - \frac{1}{90} h_K^4 (f^3(b) - f^3(a)) \quad (4)$$

PARA $K - 1$, SE TENDRA:

$$\int_a^b f(x) dx = R_{K-1,2} - \frac{1}{90} h_{K-1}^4 (f^3(b) - f^3(a)) \quad (5)$$

LA ECUACION (4) TAMBIEN SE PUEDE REPRESENTAR COMO:

$$\int_a^b f(x) dx = R_{K,2} - \frac{1}{90} \left(\frac{h_{K-1}}{2} \right)^4 (f^3(b) - f^3(a))$$

DE DONDE:

$$16 \int_a^b f(x) dx = 16R_{K,2} - \frac{1}{90} h_{K-1}^4 (f^3(b) - f^3(a)) \quad (6)$$

SI A LA ECUACION (6) LE RESTAMOS LA ECUACION (5) SE OBTIENE:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{16R_{K,2} - R_{K-1,2}}{15}. \quad \text{ESTA ECUACION NOS DA UN VALOR}$$

MAS APROXIMADO.

SI SE DENOMINA A $R_{K,3}$ COMO $R_{K,3} = \frac{16R_{K,2} - R_{K-1,2}}{15}$, PUEDE REPETIRSE EL PROCESO PARA MEJORAR LA APROXIMACION, DEFINIENDO ADECUADAMENTE EL TERMINO ADICIONAL.

RESUMIENDO:

$$R_{K,2} = \frac{4R_{K,1} - R_{K-1,1}}{3}$$

$$R_{K,3} = \frac{16R_{K,2} - R_{K-1,2}}{15}$$

DE DONDE SE INDUCE QUE:

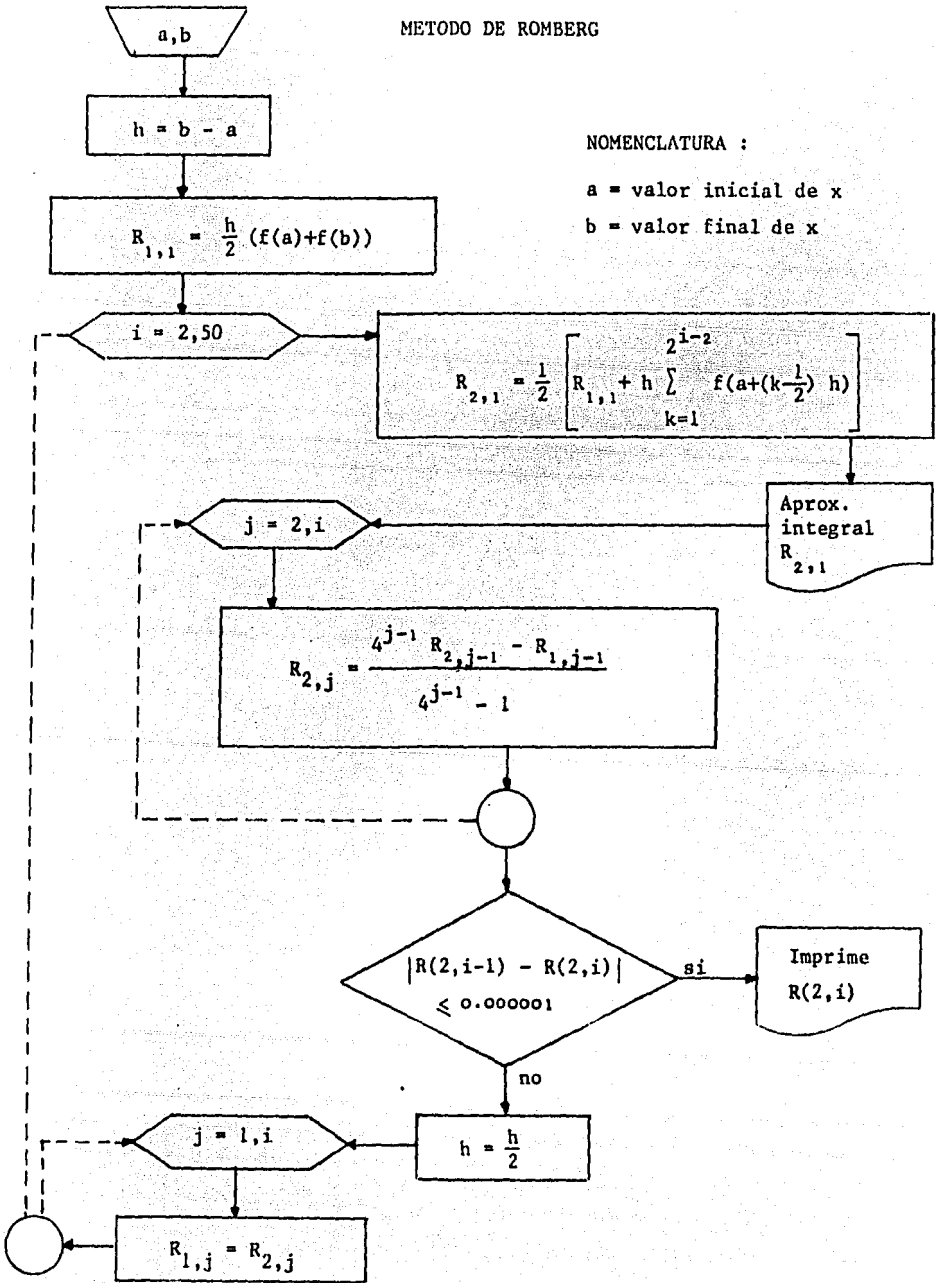
$$R_{K,J} = \frac{4^{J-1}R_{K,J-1} - R_{K-1,J-1}}{4^{J-1} - 1}$$

OBTENIENDOSE UNA FORMA RECURSIVA PARA APROXIMAR AL VALOR DE LA INTEGRAL.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 71).

II.4.5 TECNICAS QUE NO DEPENDEN DEL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON.

METODO DE ROMBERG



NOMENCLATURA :

a = valor inicial de x

b = valor final de x

II.4.5.1 CUADRATURA GAUSSIANA

II.4.5.1.0 INTRODUCCION

PARA CALCULAR $\int_a^b f(x) dx$, GAUSS SE BASO EN QUE LA INTEGRAL

$\int_{-1}^1 (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_N x^N) dx$ ES IGUAL A :

$$a_0 x + \frac{a_1 x^2}{2} + \frac{a_2 x^3}{3} + \frac{a_3 x^4}{4} + \frac{a_4 x^5}{5} + \dots + \frac{a_N x^{N+1}}{N+1} \left. \begin{array}{l} 1 \\ -1 \end{array} \right\}$$

Y OPERANDO NOS QUEDA IGUAL A

$$2a_0 + \frac{2a_2}{3} + \frac{2a_4}{5} + \frac{2a_6}{7} + \dots$$

PODEMOS OBSERVAR QUE NO DEPENDE DE $a_1, a_3, a_5, \dots, a_{2k+1}$

PARA $k = 0$, $\frac{N-1}{2}$ Y QUEDA REDUCIDO EL NUMERO DE CONSTANTES REQUERIDAS PARA EVALUAR LA INTEGRAL.

PARA UTILIZAR ESTA CARACTERISTICA, ES NECESARIO TRANSFORMAR EL INTERVALO DE INTEGRACION $[a, b]$ A $[-1, 1]$ MEDIANTE UN CAMBIO DE VARIABLE Y TRANSFORMAR $f(x)$ EN UNA FUNCION g DEPENDIENTE DE ESTA NUEVA VARIABLE.

PARA CUMPLIR CON EL CAMBIO DE INTERVALOS :

SEA $x = \alpha + \beta a$

DONDE α Y β SON CONSTANTES TALES QUE, CUMPLAN CON LAS CONDICIONES :

$$x = a \text{ PARA } u = -1 \text{ Y } x = b \text{ PARA } u = 1$$

LO ANTERIOR IMPLICA QUE :

$$\alpha = \frac{b+a}{2} \quad \text{Y} \quad \beta = \frac{b-a}{2}$$

POR LO QUE :

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} u$$

SI $f(x) = g(u)$ PARA $a \leq x \leq b$ Y $-1 \leq u \leq 1$ Y ADEMÁS

$$g(u) = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + \dots = \sum_{i=0}^N a_i u^i$$

EN DONDE N ES EL GRADO DEL POLINOMIO, ENTONCES, SUSTITUYENDO EN LA INTEGRAL ORIGINAL, OBTENEMOS :

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_{-1}^1 g(u) \frac{b-a}{2} du \\ &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 \left(\sum_{i=0}^N a_i u^i \right) du \\ &= \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^N \int_{-1}^1 a_i u^i du \\ &= \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^N \left. \frac{a_i u^{i+1}}{i+1} \right|_{-1}^1 \end{aligned}$$

$$\text{SI } i+1 \text{ ES PAR } \left. u^{i+1} \right|_{-1}^1 = 0$$

$$\text{SI } i+1 \text{ ES IMPAR } \left. u^{i+1} \right|_{-1}^1 = 2$$

POR LO TANTO PARA i IMPAR $u^{i+1} \Big|_{-1}^1 = 0$

Y PARA i PAR $u^{i+1} \Big|_{-1}^1 = 2$

SI LA SERIE ANTERIOR SE REPRESENTA COMO LA SUMA DE TERMINOS PARA i , TANTO PAR COMO IMPAR, SE OBTIENE :

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \left[\sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{a_{2i} u^{2i+1}}{2i+1} \Big|_{-1}^1 + \sum_{i=1}^{\frac{N+1}{2}} \frac{a_{2i-1} u^{2i}}{2i} \Big|_{-1}^1 \right]$$

$$= (b-a) \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{a_{2i}}{2i+1}$$

PARA OBTENER UNA MAXIMA REPRESENTACION POLINOMIAL N DEBE SER IMPAR, YA QUE EL ULTIMO TERMINO

$$\frac{a_N u^{N+1}}{N+1} \Big|_{-1}^1 \text{ SERA IGUAL}$$

A CERO Y NO INFLUIRA EN LA EVALUACION DE LA INTEGRAL, SIN EMBARGO, SERA UN GRADO MAS DE APROXIMACION POLINOMIAL.

EN CONCLUSION, SI EL POLINOMIO $g(u) = \sum_{i=0}^N a_i u^i$ REQUIERE DE

$N+1$ CONSTANTES (a_i 'S) PARA SU EVALUACION, SU INTEGRAL

$$\int_{-1}^1 g(u) du = \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{a_{2i}}{2i+1}, \text{ UNICAMENTE REQUERIRA DE}$$

$\frac{N-1}{2} + 1$ CONSTANTES.

DE ACUERDO CON LO ANTERIOR, PUEDE CONSTRUIRSE LA SIGUIENTE

TABLA :

GRADO DEL POLINOMIO (IMPAR)	N° DE CONSTANTES PARA LA EVALUACION DEL PO- LINOMIO	N° DE CONSTANTES PA RA LA EVALUACION DE LA INTEGRAL
1	2	1
3	4	2
5	6	3
7	8	4

NOTESE COMO UN POLINOMIO DE GRADO N PUEDE SER UTILIZADO CONO-
CIENDO UNICAMENTE $\frac{N-1}{2} + 1$ PARES DE VALORES $u_i, g(u_i)$, DE TAL MANE-
RA QUE :

$$\int_{-1}^1 g(u) du = \sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{a_{2i}}{2i+1} = \sum_{i=1}^{\frac{N-1}{2} + 1} k_i g(u_i)$$

DEPENDIENDO DEL NUMERO DE CONSTANTES k_i , SE NOMBRARA AL METODO; ES
DECIR, METODO DE GAUSS DE ORDEN 1, 2, 3, ... ETC.

$$\text{SI } g(u_i) = \sum_{j=0}^N a_j u^j$$

SE OBTIENE

$$\sum_{i=0}^{\frac{N-1}{2}} \frac{a_{2i}}{2i+1} = \sum_{i=1}^{\frac{N-1}{2} + 1} k_i \sum_{j=0}^N a_j u_i^j$$

POR COMPARACION DEL COEFICIENTE a_k , PUEDE FORMULARSE UN SISTEMA DE ECUACIONES QUE PERMITA CALCULAR TODAS LAS k_i Y LAS u_i CORRESPONDIENTES. A CONTINUACION, SE MUESTRA ESTE PROCESO DE CALCULO CON EL METODO DE GAUSS DE DOS PUNTOS, POR SIMPLICIDAD.

GAUSS DE DOS PUNTOS

$$\frac{N-1}{2} + 1 = 2 \quad \text{YA QUE } N = 3 \quad (\text{GRADO DEL POLINOMIO})$$

$$\text{IMPLICANDO QUE } g(u) = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3$$

$$\text{POR LO TANTO} \quad \int_{-1}^1 g(u) du = \sum_{i=0}^{\frac{3-1}{2}} \frac{a_{2i}}{2i+1}$$

$$\int_{-1}^1 g(u) du = \sum_{i=0}^1 \frac{a_{2i}}{2i+1} = a_0 + \frac{a_2}{3}$$

$$\text{SI } a_0 + \frac{a_2}{3} = k_1 g(u_1) + k_2 g(u_2)$$

ENTONCES

$$\begin{aligned} a_0 + \frac{a_2}{3} &= k_1 (a_0 + a_1 u_1 + a_2 u_1^2 + a_3 u_1^3) + k_2 (a_0 + a_1 u_2 + a_2 u_2^2 + a_3 u_2^3) \\ &= (k_1 + k_2) a_0 + (k_1 u_1 + k_2 u_2) a_1 + (k_1 u_1^2 + k_2 u_2^2) a_2 + (k_1 u_1^3 + k_2 u_2^3) a_3 \end{aligned}$$

AL COMPARAR COEFICIENTES EN AMBOS MIEMBROS, SE INFIERE QUE :

$$1 = k_1 + k_2 \quad (\text{EC. 1})$$

$$0 = k_1 u_1 + k_2 u_2 \quad (\text{EC. 2})$$

$$\frac{1}{3} = k_1 u_1^2 + k_2 u_2^2 \quad (\text{EC. 3})$$

$$0 = k_1 u_1^3 + k_2 u_2^3 \quad (\text{EC. 4})$$

TENEMOS CUATRO ECUACIONES CON LAS INCOGNITAS k_1, k_2, u_1 Y u_2 .

A CAMBIO DE REQUERIR MENOS PUNTOS PARA UN POLINOMIO DE ALTO GRADO, SE PRESENTA LA DESVENTAJA DE QUEDAR ESPECIFICADAS LAS u_i . AL NO PODER ESTAS SER SELECCIONADAS, LOS VALORES DE x_i QUEDAN FIJADOS POR EL METODO.

SI SE MULTIPLICA POR u_1 LA ECUACION 1 Y SE RESTA A LA ECUACION 2, OBTENEMOS :

$$- u_1 = k_2(u_2 - u_1) \quad (\text{EC.1}')$$

SI LA ECUACION 2 SE MULTIPLICA POR u_1 Y SE RESTA A LA ECUACION 3, SE OBTIENE :

$$\frac{1}{3} = k_2 u_2 (u_2 - u_1) \quad (\text{EC.2}')$$

SI MULTIPLICAMOS LA ECUACION 3 POR u_1 , Y SE RESTA A LA ECUACION 4, TENDREMOS :

$$- \frac{1}{3} u_1 = k_2 u_2^2 (u_2 - u_1) \quad (\text{EC. 3}')$$

DIVIDIENDO LA ECUACION 3' ENTRE 1', SE OBTIENE :

$$\frac{1}{3} = u_2^2, \quad \text{POR LO TANTO } u_2 = \pm \sqrt{\frac{1}{3}} ;$$

SI TOMAMOS $u_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}$ Y DIVIDIMOS LA ECUACION 2' ENTRE LA ECUACION 1', SE OBTIENE :

$$- \frac{1}{3u_1} = u_2 ; \quad \text{POR LO TANTO } u_1 = - \frac{1}{3u_2} = - \frac{1}{3\sqrt{3}} = - \frac{\sqrt{3}}{9}$$

DE LA ECUACION 1' :

$$k_2 = - \frac{u_1}{u_2 - u_1} = - \frac{-\sqrt{3}}{\sqrt{3} - (-\sqrt{3})} = \frac{1}{2}$$

DE LA ECUACION 1 : $k_1 = 1 - k_2 = \frac{1}{2}$

CON ESTOS VALORES PODRA FINALMENTE EVALUARSE LA INTEGRAL

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= (b-a)(k_1 g(u_1) + k_2 g(u_2)) \\ &= (b-a)(k_1 f(x_1) + k_2 f(x_2)) \end{aligned}$$

$$\text{CON } x_1 = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} u_1$$

$$x_2 = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} u_2$$

PARA EL METODO DE GAUSS DE TRES PUNTOS TENDRIAMOS QUE :

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= a_0 + \frac{a_2}{3} + \frac{a_4}{5} \\ &= k_1 g(u_1) + k_2 g(u_2) + k_3 g(u_3) \end{aligned}$$

Y DE UNA FORMA ANALOGA AL DESARROLLO DE DOS PUNTOS, SE PODRIAN EVALUAR k_1, k_2, k_3, u_1, u_2 Y u_3 .

II.4.5.1.1 METODOS DE GAUSS

EN ESTA SECCION SE PRESENTAN LOS VALORES DE k_j Y u_j PARA LOS DIFERENTES METODOS DE GAUSS APOYADOS EN M NUMERO DE PUNTOS. EL METODO GENERALIZADO DE GAUSS ESTA DADO POR :

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a) \sum_{i=1}^M k_i g(u_i)$$

$$= (b - a) \sum_{i=1}^M k_i f(x_i)$$

$$x_i = \frac{b + a}{2} + \frac{b - a}{2} u_i$$

a) DE UN PUNTO (M = 1)

$$k_1 = 1$$

$$u_1 = 0$$

b) DE DOS PUNTOS (M = 2)

$$k_1 = \frac{1}{2} \quad u_1 = -\sqrt{\frac{1}{3}}$$

$$k_2 = \frac{1}{2} \quad u_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}$$

c) DE TRES PUNTOS (M = 3)

$$k_1 = k_3 = \frac{5}{18} \quad u_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$$

$$k_2 = \frac{4}{9} \quad u_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$$

$$u_2 = 0$$

d) DE CUATRO PUNTOS (M = 4)

$$k_1 = k_4 = 0.1739 \quad u_1 = -0.8611 \quad u_3 = 0.34$$

$$k_2 = k_3 = 0.3261 \quad u_2 = -0.34 \quad u_4 = 0.8611$$

e) DE CINCO PUNTOS (M = 5)

$$k_1 = k_5 = 0.118463 \quad u_1 = - 0.906180$$

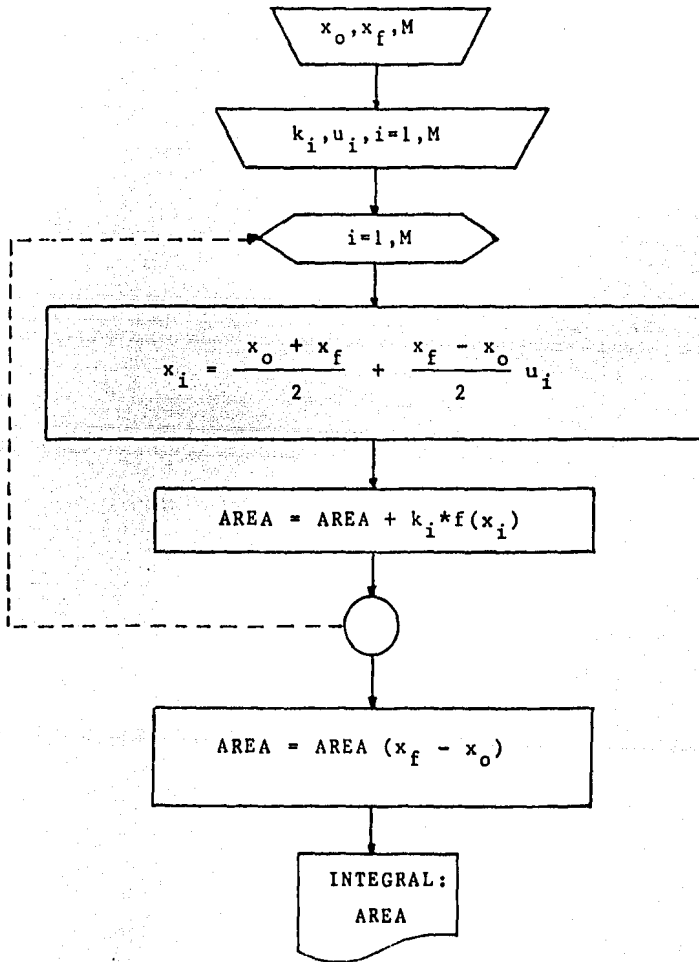
$$k_2 = k_4 = 0.239314 \quad u_2 = - 0.538469$$

$$k_3 = 0.284444 \quad u_3 = 0$$

$$u_4 = 0.538469$$

$$u_5 = 0.906180$$

DIAGRAMA DE FLUJO (PAG. 81)



NOMENCLATURA

x_0 = valor inicial de x

x_f = valor final de x

M = orden del método

k_i, u_i = parámetros i del método

II.5 RESOLUCION DE UNA ECUACION DIFERENCIAL ORDINARIA

II.5.0 INTRODUCCION

SE HAN DESARROLLADO UNA DIVERSIDAD DE METODOS PARA RESOLVER UNA ECUACION DIFERENCIAL DE PRIMER ORDEN $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$. DADO QUE TODAS LAS TECNICAS SON EXPANSIONES A PARTIR DE UN PUNTO BASE x_0, y_0 , LO QUE SE OBTIENE CON ESTOS METODOS ES UNA SOLUCION PARTICULAR. PARA RESOLVER UNA ECUACION DIFERENCIAL DE ORDEN SUPERIOR, SE APLICAN TECNICAS DE DESCOMPOSICION ALGEBRAICA DE ESTA ECUACION DE ORDEN n A UN CONJUNTO DE n ECUACIONES DIFERENCIALES DE PRIMER ORDEN, O BIEN, SE APLICAN TECNICAS DE DIFERENCIAS FINITAS PARA RESOLVER DIRECTAMENTE LA ECUACION DE ORDEN n .

LAS TECNICAS QUE SE HAN DESARROLLADO EN LA ACTUALIDAD SE LES CONOCE COMO TECNICAS DE UN PASO O TECNICAS DE MULTIPASOS ; DEPENDIENDO DE, SI PARA CALCULAR LA y_{i+1} , SE REQUIERE DEL VALOR DE y_i O BIEN, EL VALOR DE y_i Y ADEMAS DE y_{i-j} , DONDE j PUEDE SER 1, 2, ETC.

EN LA BUSQUEDA DE EXACTITUD SE HAN DESARROLLADO METODOS CONOCIDOS COMO METODOS PREDICTORES-CORRECTORES, LOS CUALES APLICAN DOS VECES ALGUNA TECNICA. UNA VEZ PARA PREDECIR Y OTRA PARA CORREGIR.

EL DESARROLLO DE LOS DIFERENTES ALGORITMOS SE BASA EN LA

APLICACION DEL POLINOMIO DE SERIES DE TAYLOR Y EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON.

II.5.1 METODO DE TAYLOR

ESTE METODO SE DESARROLLA SEGUN LOS SIGUIENTES PASOS:

1º) PARA RESOLVER LA ECUACION DIFERENCIAL $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$, SE EXPANDE A y POR EL POLINOMIO DE TAYLOR.

$$y(x) = y(x_0) + y'(x_0)(x-x_0) + y''(x_0) \frac{(x-x_0)^2}{2!} + y'''(x_0) \frac{(x-x_0)^3}{3!} + \dots$$

ESTE POLINOMIO DEBE SER TRUNCADO A CIERTO NUMERO DE TERMINOS PARA PODER HACER EL CALCULO. ENTRE MAYOR SEA EL NUMERO DE TERMINOS EL CALCULO DE LA FUNCION $y(x)$ SERA MAS EXACTO.

ESTE POLINOMIO PUEDE SER TRANSFORMADO A LA SIGUIENTE FORMA: (PARA FACILITAR LA NOTACION SE UTILIZARA f PARA REPRESENTAR A $f(x, y)$)

$$y(x) = y(x_0) + f \Big|_{x_0, y_0} (x-x_0) + (f_x + f_y f) \Big|_{x_0, y_0} \frac{(x-x_0)^2}{2!} + (f_{xx} + 2ff_{xy} + f_y f_x + f^2 f_{yy} + ff_y^2) \Big|_{x_0, y_0} \frac{(x-x_0)^3}{3!} + \dots$$

DONDE $f_x, f_y, f_{xy}, f_{xx}, f_{yy}$ SON DERIVADAS PARCIALES DEL TIPO:

f_x = DERIVADA PARCIAL DE f CON RESPECTO A x Y

f_{xx} = SEGUNDA DERIVADA DE f CON RESPECTO A x , ETC.

SI LA FUNCION f NO DEPENDE DE y , ENTONCES EL POLINOMIO SE TRANSFORMA EN

$$y(x) = y(x_0) + f \Big|_{x_0} (x-x_0) + f_x \Big|_{x_0} \frac{(x-x_0)^2}{2!} + f_{xx} \Big|_{x_0} \frac{(x-x_0)^3}{3!} + \dots$$

DADO QUE ESTE METODO EN REALIDAD ES GENERADOR DE OTROS METODOS AL TRUNCAR LA SERIE, ENTONCES NO SE PRESENTARA EN DIAGRAMA DE FLUJO, YA QUE SERA SIMILAR A LOS METODOS GENERADOS.

II.5.2 METODO DE EULER

SE GENERA AL TRUNCAR EL POLINOMIO DE TAYLOR EN EL SEGUNDO TERMINO. ES DECIR, CONSIDERA QUE LA FUNCION y , SE COMPORTA COMO UNA LINEA RECTA EN EL INTERVALO

$$[x_i, x_{i+1}] .$$

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + f \Big|_{x_i, y_i} (x_{i+1} - x_i)$$

SI $h = x_{i+1} - x_i$, LA ECUACION SE TRANSFORMA EN:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + f \Big|_{x_i, y_i} h \quad (\text{Ec. 1})$$

ESTA ULTIMA ECUACION PERMITE RESOLVER UNA ECUACION DIFERENCIAL DE PRIMER ORDEN EN LA CUAL SE CONOCE x_0, y_0 .

SE PUEDEN PRESENTAR DOS TIPOS DE PROBLEMAS AL RESOLVER UNA

ECUACION DIFERENCIAL

- 1) QUE SE CONOZCA x_0 , y_0 Y LA x FINAL
- 2) QUE SE CONOZCA x_0 , y_0 Y LA y FINAL

EL ALGORITMO SERA SIMILAR EN AMBOS CASOS, CON LA DIFERENCIA DE QUE EL PROCESO RECURSIVO SE TERMINARA SEGUN EL VALOR DE LA VARIABLE DE CONTROL (x FINAL O y FINAL).

EL NUMERO DE y_i QUE SE CALCULEN DEPENDERA DEL NUMERO DE SUBINTERVALOS EN QUE SE DIVIDE EL INTERVALO $[x_0, x \text{ FINAL}]$ O $[y_0, y \text{ FINAL}]$.

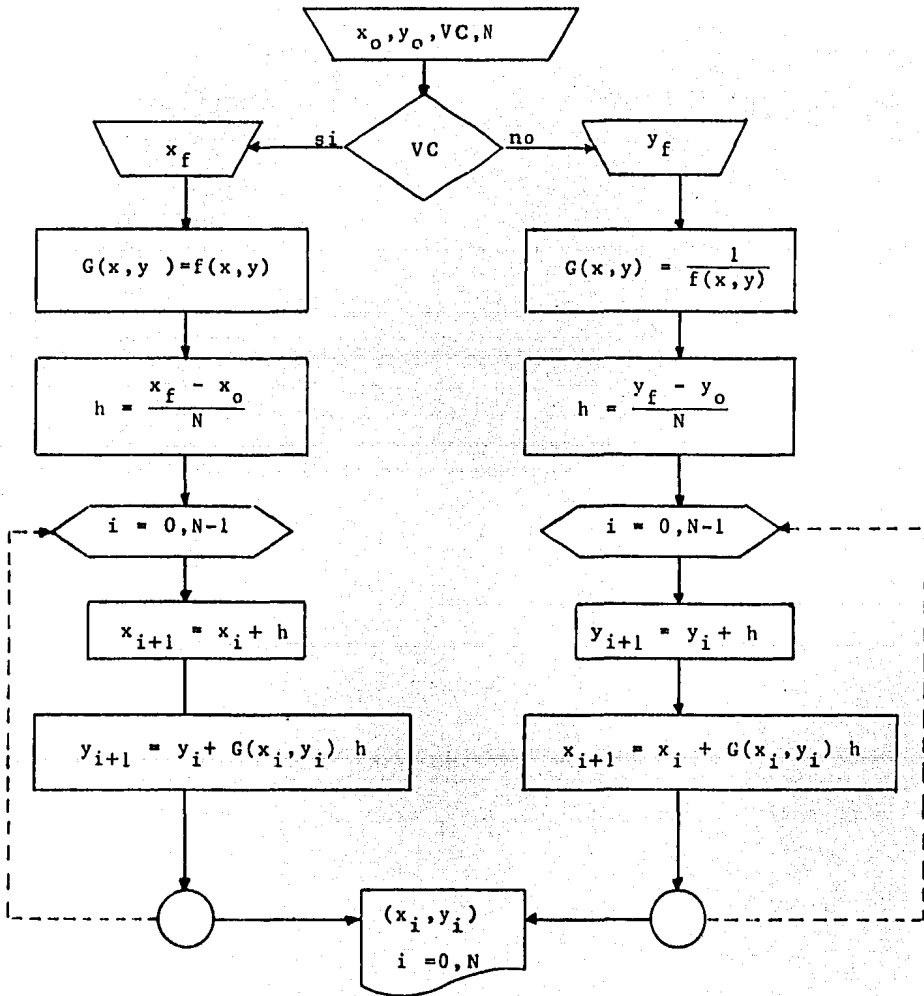
DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 86).

II.5.3 METODO DE EULER MODIFICADO

EL METODO DE EULER SIMPLE CONSIDERA QUE "y" SE COMPORTA COMO UNA LINEA RECTA EN EL INTERVALO $[x_i, x_{i+1}]$. SI SE OBSERVA LA ECUACION 1 REPRESENTATIVA DE ESTE ALGORITMO, LA PENDIENTE DE ESTA LINEA RECTA ES $f(x_i, y_i)$, ES DECIR: SI $y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)(x_{i+1} - x_i)$ ENTONCES,

$$f(x_i, y_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

EL EULER MODIFICADO CONSIDERA QUE EL COMPORTAMIENTO LINEAL ES BUENA APROXIMACION, SI LA PENDIENTE DE LA LINEA SE CALCULA COMO EL PROMEDIO DE DOS PENDIENTES, DE TAL MANERA QUE EL ALGORITMO QUEDA $y_{i+1} = y_i + f^*h$, DONDE f^* ES LA PENDIENTE



NOMENCLATURA :

- | | |
|----------------------------|---------------------------|
| x_0 = valor inicial de x | N = n° de subintervalos |
| y_0 = valor inicial de y | x_f = valor final de x |
| VC = variable de control | y_f = valor final de y |

PROMEDIO; ESTA SE CALCULA CON LA ECUACION:

$$f^* = \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})}{2}$$

DADO QUE NO SE CONOCE LA PENDIENTE EN (x_{i+1}, y_{i+1}) ESTA SE APROXIMA MEDIANTE EL CALCULO DE y_{i+1} CON LA TECNICA DEL EULER SIMPLE, DE TAL FORMA QUE:

$$f^* = \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_i + f(x_i, y_i)h)}{2}$$

ESTE METODO PUEDE INCLUIRSE EN LA CLASIFICACION DE LOS METODOS PREDICTORES-CORRECTORES, YA QUE COMO PUEDE OBSERVARSE, PRIMERO PREDICE UN VALOR DE y_{i+1} PARA CALCULAR LA PENDIENTE EN EL PUNTO EXTREMO (x_{i+1}, y_{i+1}) Y A CONTINUACION CORRIJE O RECALCULA EL PUNTO y_{i+1} . ESTE METODO ESTABLECE LAS BASES PARA EL DESARROLLO DE TODOS LOS METODOS DE LA FAMILIA RUNGE-KUTTA.

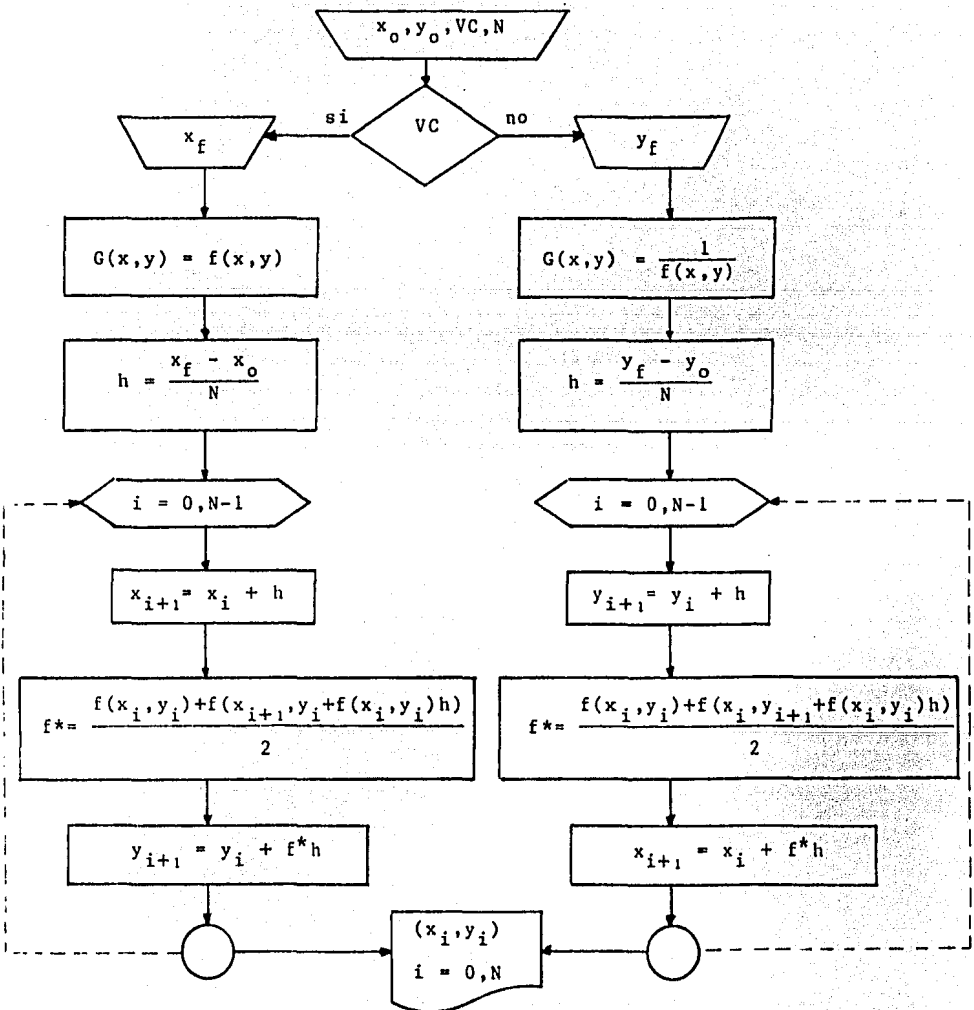
DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 88).

II.5.4 METODOS RUNGE-KUTTA DE ORDEN m .

II.5.4.0 INTRODUCCION

OBSERVANDO LA ECUACION DE EULER

$y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i)$ SE CONCLUYE QUE LA EXPANSION ES LINEAL CON PENDIENTE IGUAL AL VALOR DE LA FUNCION f EN EL PUNTO (x_i, y_i) . RUNGE Y KUTTA TRABAJARON EN FORMA INDEPENDEN-



NOMENCLATURA :

- x_0 = valor inicial de x
- y_0 = valor inicial de y
- VC = variable de control
- N = N° de subintervalos
- x_f = valor final de x
- y_f = valor final de y

DIENTE PARA MEJORAR ESTA ECUACION PROPONIENDO LA SIGUIENTE:

$$y_{i+1} = y_i + hf^*$$

DONDE f^* DEBE SER UNA PENDIENTE REPRESENTATIVA DEL INTERVALO $[x_i, x_{i+1}]$; DICHA PENDIENTE ES EVALUADA POR COMPARACION DE MODELOS PROPUESTOS CON EXPANSION DE TAYLOR EQUIVALENTE.

DEPENDIENDO DEL NUMERO DE PUNTOS QUE SE UTILICEN EN LA EVALUACION DE LA PENDIENTE, ASI SERA EL ORDEN DEL METODO.

SEAN K_1, K_2, \dots , ETC. VALORES DE LA PENDIENTE EN DIFERENTES PUNTOS DENTRO DEL INTERVALO CERRADO $[x_i, x_{i+1}]$; CON ESTOS PUEDE DETERMINARSE EL VALOR DE f^* CON UN PROMEDIO PESADO, DE LA FORMA SIGUIENTE:

$$f^* = \sum_{i=1}^N a_i K_i,$$

SIENDO N EL ORDEN DEL METODO, a_i EL PESO DE CADA PENDIENTE Y K_i LA PENDIENTE RESPECTIVA.

EL POLINOMIO DE TAYLOR EQUIVALENTE SERA DE GRADO N .

II.5.4.1 RUNGE-KUTTA DE 2° ORDEN

SE DESARROLLA MEDIANTE LOS SIGUIENTES

PASOS:

1) $f^* = a_1 K_1 + a_2 K_2$

- 2) $K_1 = f(x_i, y_i)$
- 3) $K_2 = f(x_i + ph, y_i + phK_1)$
- 4) EXPANDA LINEALMENTE A K_2
- 5) $y_{i+1} = y_i + f^*h$
- 6) COMPARE CON EL POLINOMIO DE TAYLOR DE 2° GRADO PARA y

DESARROLLO:

$$f^* = a_1K_1 + a_2K_2$$

$$K_1 = f(x_i, y_i) \quad K_1 = K_2 \quad \text{EN } x_i, y_i, \quad \text{O SEA } p = 0$$

$$K_2 = f(x_i + ph, y_i + phK_1)$$

$$K_2(x, y) = K_2(x_i, y_i) + dK_2$$

$$dK_2 = \frac{\partial K_2}{\partial x} \bigg|_{x_i, y_i} \Delta x + \frac{\partial K_2}{\partial y} \bigg|_{x_i, y_i} \Delta y = \frac{\partial K_2}{\partial x} \bigg|_{x_i, y_i} \Delta x + \frac{\partial K_2}{\partial y} \bigg|_{x_i, y_i} \frac{\partial y}{\partial x} \bigg|_{x_i, y_i} \Delta x$$

$$dK_2 = K_1(x_i, y_i) + \frac{\partial f}{\partial x} \bigg|_{x_i, y_i} \Delta x + \frac{\partial f}{\partial y} f \bigg|_{x_i, y_i} \Delta x$$

$$\Delta x = ph$$

$$K_2(x, y) = K_1(x_i, y_i) + f_x ph + f_y f ph$$

$$\text{DONDE } f_x = \frac{\partial f}{\partial x} \bigg|_{x_i, y_i} \quad \text{y} \quad f_y = \frac{\partial f}{\partial y} \bigg|_{x_i, y_i}$$

$$y_{i+1} = y_i + (a_1K_1(x_i, y_i) + a_2(K_1(x_i, y_i) + f_x ph + f_y f ph))h$$

(EC. 1)

O BIEN,

$$y_{i+1} = y_i + (a_1f + a_2(f + f_x ph + f_y f ph))h \quad \text{DONDE } f = K_1(x_i, y_i)$$

ESTA ECUACION SERA COMPARADA CON LA EXPANSION DE TAYLOR DE

2° ORDEN:

$$y = y_i + y' \left| \Delta x \right. + y'' \left| \frac{\Delta x^2}{2} \right.$$

$$\left. \begin{matrix} \\ \\ \end{matrix} \right|_{x_i, y_i} \left. \begin{matrix} \\ \\ \end{matrix} \right|_{x_i, y_i}$$

SI $\Delta x = h$ PARA $h = x_{i+1} - x_i$

$$y_{i+1} = y_i + y' \left| h \right. + y'' \left| \frac{h^2}{2} \right. \quad (\text{Ec. 2})$$

$$\left. \begin{matrix} \\ \\ \end{matrix} \right|_{x_i, y_i} \left. \begin{matrix} \\ \\ \end{matrix} \right|_{x_i, y_i}$$

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) = y'$$

$$y'' = \frac{d}{dx} y' = \frac{d}{dx} f(x, y) = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x}$$

$$y' \left|_{x_i, y_i} = f(x_i, y_i) = f$$

$$y'' \left|_{x_i, y_i} = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \left|_{x_i, y_i} + \frac{\partial f}{\partial y} (x, y) \left|_{x_i, y_i} + f(x_i, y_i) = f_x + f_y f$$

SUBSTITUYENDO EN LA ECUACION 2 SE OBTIENE:

$$y_{i+1} = y_i + fh + (f_x + f_y f) \frac{h^2}{2} \quad (\text{Ec. 3})$$

COMPARANDO LA ECUACION 3 CON LA ECUACION 1 (TAYLOR VS. RUNGE-KUTTA) SE OBTIENE:

DE LOS TERMINOS QUE CONTIENEN UNICAMENTE A f : $a_1 + a_2 = 1$

DE LOS TERMINOS QUE CONTIENEN UNICAMENTE A f_x : $a_2 P = \frac{1}{2}$

DE LOS TERMINOS QUE CONTIENEN UNICAMENTE A $f_y f$: $a_2 P = \frac{1}{2}$

NOTESE QUE SE HAN OBTENIDO DOS ECUACIONES INDEPENDIENTES CON

TRES INCOGNITAS, POR LO QUE EXISTE UN GRADO DE LIBERTAD, ES DECIR, SE PUEDE ASIGNAR VALOR A ALGUNA DE LAS TRES VARIABLES a_1 , a_2 Y P . ESTE GRADO DE LIBERTAD HA PROLIFERADO EL DESARROLLO DE METODOS DE RUNGE-KUTTA, DEPENDIENDO DE QUE VALOR Y A CUAL VARIABLE SE LE ASIGNE. PARA ESTE CASO SE PRESENTARAN LOS METODOS DE RUNGE-KUTTA MAS USUALES.

METODO DEL PUNTO MEDIO

SISTEMA DE ECUACIONES RESUELTO PARA $a_1 = 0$ POR LO QUE $a_2 = 1$ Y $P = \frac{1}{2}$ Y EL ALGORITMO SERA:

PASO 1) $K_1 = f(x_i, y_i)$

PASO 2) $K_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} K_1)$

PASO 3) $f^* = K_2$

PASO 4) $y_{i+1} = y_i + f^*h$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO DEBERAN CONOCERSE x_0 , y_0 PARA LA ECUACION $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 93).

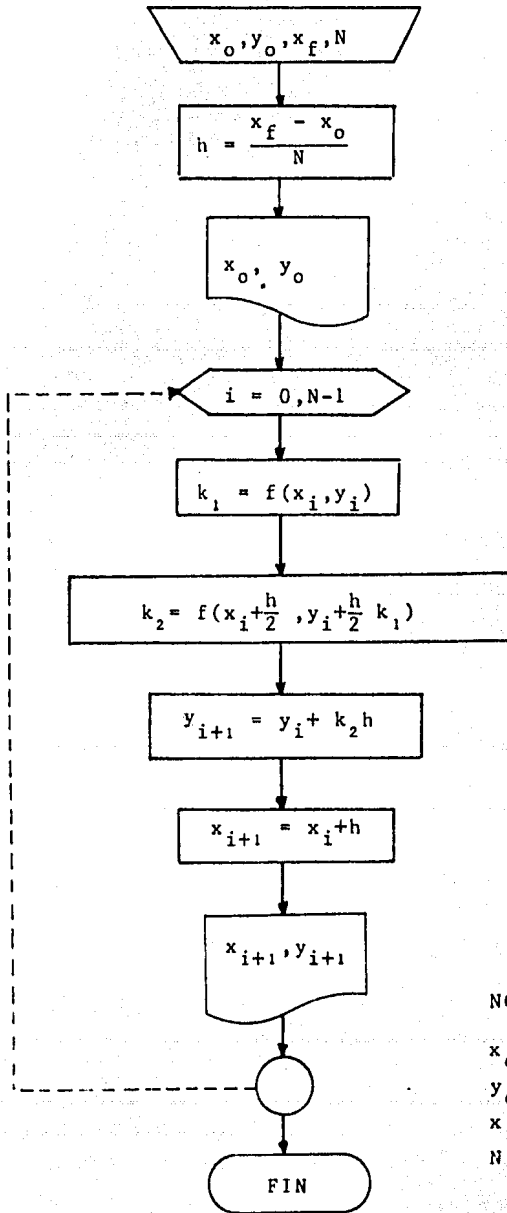
METODO DE EULER MODIFICADO

EL SISTEMA DE ECUACIONES SE RESUELVE PARA $a_1 = \frac{1}{2}$, DE DONDE OBTENEMOS $a_2 = \frac{1}{2}$ Y $P = 1$. EL ALGORITMO SE RESUELVE CON LOS SIGUIENTES PASOS:

1) $K_1 = f(x_i, y_i)$

2) $K_2 = f(x_i + h, y_i + hK_1)$

3) $f^* = \frac{K_1 + K_2}{2}$



NOMENCLATURA

- x_0 = valor inicial de x
- y_0 = valor inicial de y
- x_f = valor final de x
- N = N° de incrementos

$$4) \quad y_{i+1} = y_i + f^*h$$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO DEBERAN CONOCERSE x_0 Y y_0
 PARA RESOLVER LA ECUACION $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$. EL DIAGRAMA DE FLUJO YA FUE PRESENTADO EN LA SECCION CORRESPONDIENTE. (PAG. 88).

METODO DE HEUN

SE OBTIENE ASIGNANDOLE EL VALOR A $a_1 = \frac{1}{4}$; AL RESOLVER EL SISTEMA OBTENEMOS $a_2 = \frac{3}{4}$ Y $P = \frac{2}{3}$. EL ALGORITMO SE RESUELVE CON LOS SIGUIENTES PASOS:

- 1) $K_1 = f(x_i, y_i)$
- 2) $K_2 = f(x_i + \frac{2}{3}h, y_i + \frac{2}{3}hK_1)$
- 3) $f^* = \frac{1}{4}K_1 + \frac{3}{4}K_2$
- 4) $y_{i+1} = y_i + f^*h$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO DEBERAN CONOCERSE x_0 Y y_0

PARA RESOLVER LA ECUACION $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 95).

II.5.4.2 RUNGE-KUTTA DE TERCER ORDEN, UTILIZANDO CINCO CONSTANTES.

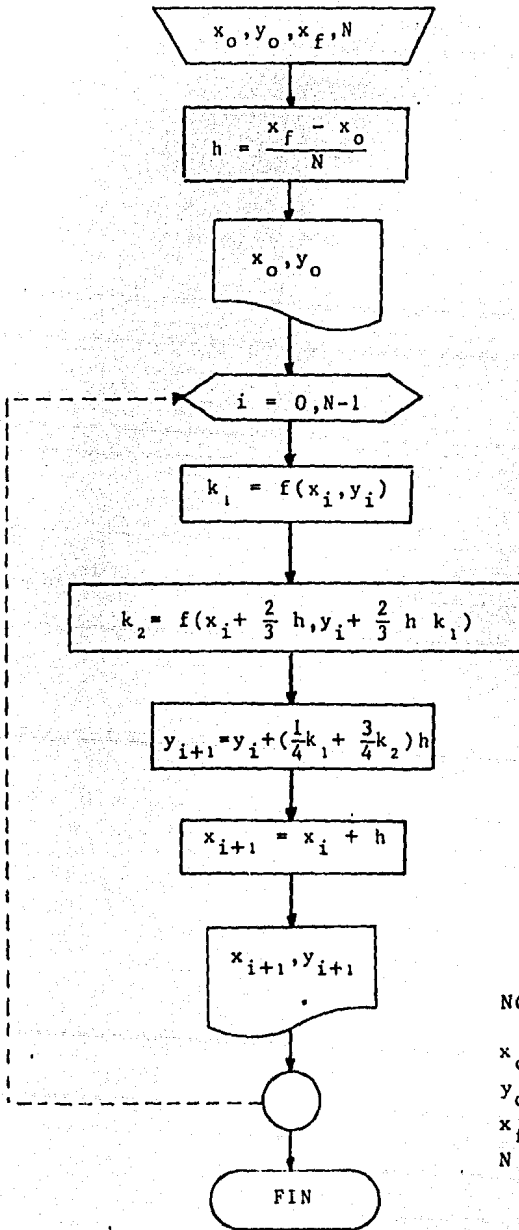
EL METODO TENDRA LA SIGUIENTE FORMA:

$$y_{i+1} = y_i + f^*h$$

$$\text{DONDE } f^* = a_1K_1 + a_2K_2 + a_3K_3$$

$$K_1 = f(x_i, y_i)$$

PUNTO DE REFERENCIA



NOMENCLATURA

- x_0 = valor inicial de x
- y_0 = valor inicial de y
- x_f = valor final de x
- N = N° de incrementos

$$K_2 = f(x_i + mh, y_i + mhK_1)$$

$$K_3 = f(x_i + ph, y_i + phK_2)$$

AL SER TRES PUNTOS, EL METODO SERA EQUIVALENTE A UN POLINOMIO DE TAYLOR DE TERCER GRADO:

$$y_{i+1} = y_i + y' \Big|_{x_i, y_i} h + y'' \Big|_{x_i, y_i} \frac{h^2}{2} + y''' \Big|_{x_i, y_i} \frac{h^3}{6} \quad (\text{II.5})$$

PARA PODER COMPARAR LAS FORMULAS DE TAYLOR Y RUNGE-KUTTA, K_2 Y K_3 DEBERAN EXPANDERSE HASTA UN POLINOMIO DE SEGUNDO GRADO, PARA QUE AL HACER EL PRODUCTO $f \cdot h$ SE OBTENGA LA h^3 CORRESPONDIENTE AL ULTIMO TERMINO DE LA EXPANSION DE TAYLOR. AL REALIZAR ESTAS EXPANSIONES LOS POLINOMIOS OBTENIDOS SON LOS SIGUIENTES:

$$K_1 = f$$

$$K_2 = f + mh f_x + mh f_y + \frac{m^2 h^2}{2} (f_{xx} + 2f f_{xy} + f^2 f_{yy})$$

$$K_3 = f + ph f_x + ph K_2 f_y + \frac{p^2 h^2}{2} (f_{xx} + 2K_2 f_{xy} + K_2^2 f_{yy})$$

SUSTITUYENDO K_2 EN LA ULTIMA ECUACION OBTENEMOS:

$$\begin{aligned} K_3 = & f + ph f_x + ph f_y + mph^2 f_y (f_x + f_y f) \\ & + \frac{p^2 h^2}{2} (f_{xx} + 2f_{xy} (f_x + mh(f_x + f_y f)) \\ & + f_{yy} (f^2 + 2mh f (f_x + f_y f))) \end{aligned}$$

SI CON ESTAS ECUACIONES SE OBTIENE LA ECUACION $f \cdot h$ Y DE ESTA, A SU VEZ, LA ECUACION DE y_{i+1} , AL COMPARARLO CON EL

POLINOMIO (II.5) SE OBTENDRA EL SIGUIENTE SISTEMA DE ECUACIONES:

$$1) \quad a_1 + a_2 + a_3 = 1$$

$$2) \quad ma_2 + pa_3 = \frac{1}{2}$$

$$3) \quad m^2a_2 + p^2a_3 = \frac{1}{3}$$

$$4) \quad mpa_3 = \frac{1}{6}$$

SON CUATRO ECUACIONES INDEPENDIENTES CON CINCO INCOGNITAS

UNO DE LOS ALGORITMOS DE TERCER ORDEN DE RUNGE-KUTTA UTILIZADO MUY FRECUENTEMENTE ES EL OBTENIDO AL RESOLVER EL SISTEMA DE ECUACIONES PARA $m = \frac{1}{2}$; CON LO CUAL SE OBTIENE $a_1 = \frac{2}{9}$, $a_2 = \frac{3}{9}$, $a_3 = \frac{4}{9}$, $p = \frac{3}{4}$. CON ESTOS VALORES ESTABLECEMOS EL SIGUIENTE ALGORITMO:

$$1) \quad K_1 = f(x_i, y_i)$$

$$2) \quad K_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hK_1)$$

$$3) \quad K_3 = f(x_i + \frac{3}{4}h, y_i + \frac{3}{4}hK_2)$$

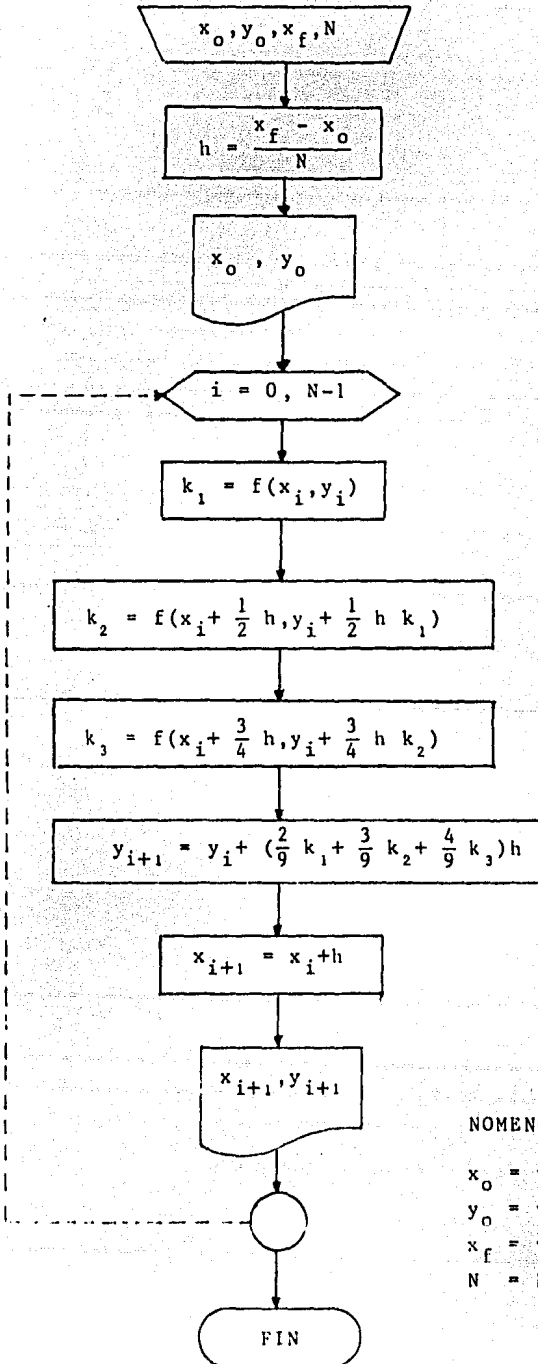
$$4) \quad f^* = \frac{2}{9}K_1 + \frac{3}{9}K_2 + \frac{4}{9}K_3$$

$$5) \quad y_{i+1} = y_i + f^*h$$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO DEBERAN CONOCERSE x_0, y_0 PARA RESOLVER $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 98).

ALGORITMO DE RUNGE-KUTTA DE TERCER ORDEN UTILIZANDO SEIS PARAMETROS:



NOMENCLATURA

- x_0 = valor inicial de x
- y_0 = valor inicial de y
- x_f = valor final de x
- N = N° de incrementos

CON EL OBJETO DE OBTENER MAYOR APROXIMACION EN EL CALCULO DE y_{i+1} PARA DEFINIR K_3 , SE APROVECHA EL CONOCIMIENTO QUE SE TIENE DE K_2 Y K_1 , DE TAL MANERA QUE K_3 SE DEFINE COMO:

$$K_3 = f(x_i + ph, y_i + qhK_2 + (p - q)hK_1)$$

NOTESE QUE, CON RESPECTO AL METODO ANTERIOR, SE HA INTRODUCIDO UNA NUEVA VARIABLE q , DE TAL FORMA QUE $K_3 = f(K_2, K_1)$. AL HACER LAS EXPANSIONES CORRESPONDIENTES PARA K_1 , K_2 , K_3 MEDIANTE UN POLINOMIO DE TAYLOR DE SEGUNDO GRADO Y AL COMPARAR $y_{i+1} = y_i + f \cdot h$, CON EL POLINOMIO DE EXPANSION DE SERIES DE TAYLOR DE TERCER GRADO, SE OBTIENE EL SIGUIENTE SISTEMA DE ECUACIONES:

$$a_1 + a_2 + a_3 = 1$$

$$ma_2 + pa_3 = \frac{1}{2}$$

$$m^2a_2 + p^2a_3 = \frac{1}{3}$$

$$mqa_3 = \frac{1}{6}$$

NOTESE QUE EXISTEN CUATRO ECUACIONES CON SEIS INCOGNITAS, LO QUE IMPLICA FIJAR EL VALOR DE DOS DE ELLAS PARA OBTENER UNA SOLUCION. FIJANDO $m = \frac{1}{2}$ Y $p = 1$ SE OBTIENE LO SIGUIENTE:

$$a_1 = \frac{1}{6}, a_2 = \frac{4}{6}, a_3 = \frac{1}{6} \text{ Y } q = 2$$

CON ESTO SE OBTIENE EL SIGUIENTE ALGORITMO:

- 1) $K_1 = f(x_i, y_i)$
- 2) $K_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hK_1)$
- 3) $K_3 = f(x_i + h, y_i + 2hK_2 - hK_1)$
- 4) $f^* = \frac{K_1 + 4K_2 + K_3}{6}$
- 5) $y_{i+1} = y_i + f^*h$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO DEBERAN CONOCERSE x_0, y_0 PARA RESOLVER $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 101).

II.5.4.3 RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN, UTILIZANDO SIETE CONSTANTES.

UNO DE LOS METODOS MAS UTILIZADOS ES EL QUE SE OBTIENE MEDIANTE LA EXPANSION Y COMPARACION CON EL POLINOMIO DE TAYLOR DE CUARTO GRADO, RESPECTIVO DE K_2, K_3, K_4 , REPRESENTADAS EN EL SISTEMA DE ECUACIONES SIGUIENTE:

$$f^* = a_1K_1 + a_2K_2 + a_3K_3 + a_4K_4$$

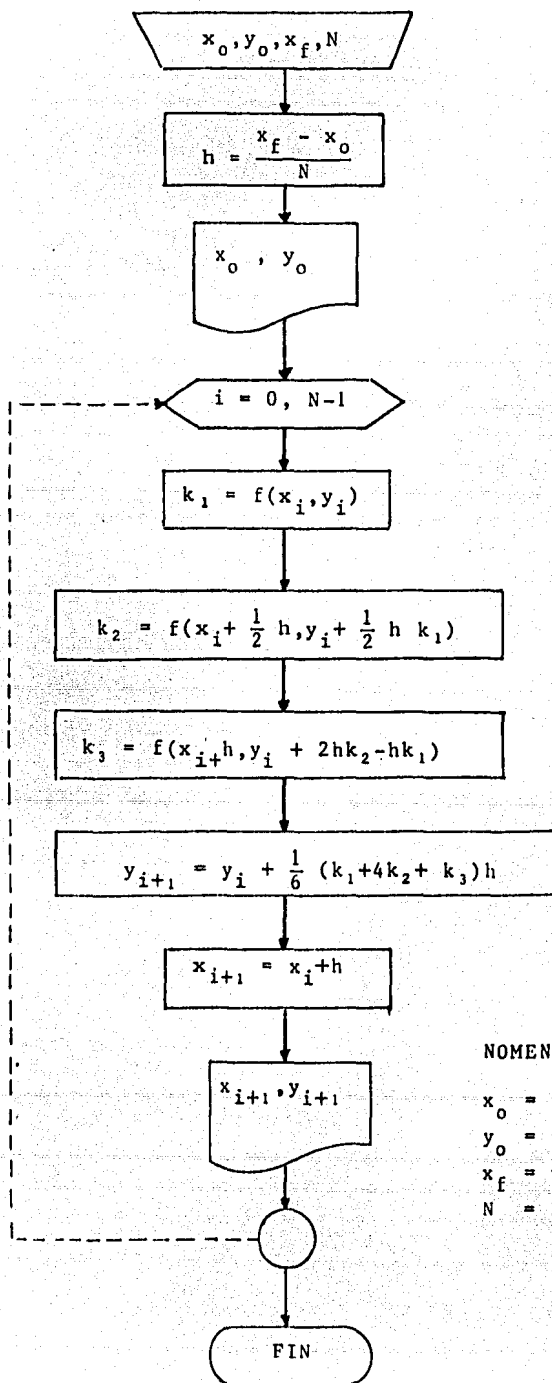
$$K_1 = f(x_i, y_i)$$

$$K_2 = f(x_i + mh, y_i + mhK_1)$$

$$K_3 = f(x_i + ph, y_i + phK_2)$$

$$K_4 = f(x_i + qh, y_i + qhK_3)$$

K_2, K_3 Y K_4 DEBEN EXPANDERSE A UN POLINOMIO DE GRADO 3,



NOMENCLATURA

- x_0 = valor inicial de x
- y_0 = valor inicial de y
- x_f = valor final de x
- N = N° de incrementos

PARA QUE, AL MULTIPLICARLO POR LA h DEL TERMINO f^*h , SE
 GENERE EL TERMINO h^4 , EL CUAL CORRESPONDERA AL EXPONENTE
 DE h DEL ULTIMO TERMINO DE LA EXPANSION EN SERIE DE TAYLOR
 DE GRADO 4 DE y_{i+1} .

LA SOLUCION DEL SISTEMA DE ECUACIONES OBTENIDAS, GENERA EL
 SIGUIENTE ALGORITMO:

- 1) $K_1 = f(x_i, y_i)$
- 2) $K_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hK_1)$
- 3) $K_3 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hK_2)$
- 4) $K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3)$
- 5) $f^* = \frac{K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4}{6}$
- 6) $y_{i+1} = y_i + f^*h$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO DEBERAN CONOCERSE x_0, y_0 PARA
 RESOLVER $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$.

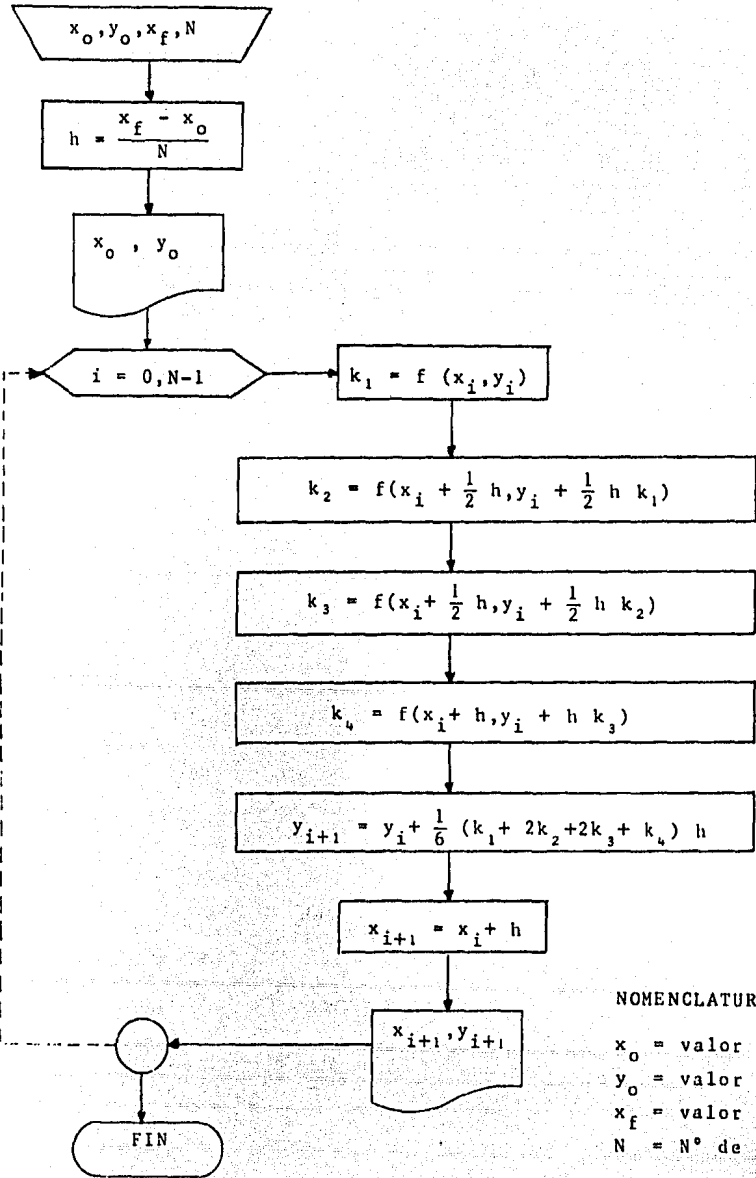
DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 103).

OTRO ALGORITMO DE CUARTO ORDEN CON DIEZ CONSTANTES, USADO
 CON MENOS FRECUENCIA QUE EL ANTERIOR, ES EL QUE SE OBTIENE
 AL CONSIDERAR QUE $K = f(K_2, K_1)$ Y QUE $a_4 = f(K_3, K_2, K_1)$.
 LAS ECUACIONES QUE GENERAN EL ALGORITMO SON LAS SIGUIENTES:

$$f^* = a_1K_1 + a_2K_2 + a_3K_3 + a_4K_4$$

$$K_1 = f(x_i, y_i)$$

$$K_2 = f(x_i + mh, y_i + mhK_1)$$



NOMENCLATURA

- x_0 = valor inicial de x
- y_0 = valor inicial de y
- x_f = valor final de x
- N = N° de incrementos

$$K_3 = f(x_i + ph, y_i + qhK_2 + (p - q)hK_1)$$

$$K_4 = f(x_i + rh, y_i + thK_3 + (r - t)hK_2 + shK_1)$$

DE LA COMPARACION DE LOS POLINOMIOS SE OBTIENE EL SIGUIENTE ALGORITMO:

$$1) K_1 = f(x_i, y_i)$$

$$2) K_2 = f(x_i + \frac{1}{3}h, y_i + \frac{1}{3}hK_1)$$

$$3) K_3 = f(x_i + \frac{2}{3}h, y_i - \frac{1}{3}hK_1 + hK_2)$$

$$4) K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_1 - hK_2 + hK_3)$$

$$5) f^* = \frac{1}{8}(K_1 + 3K_2 + 3K_3 + K_4)$$

$$6) y_{i+1} = y_i + f^*h$$

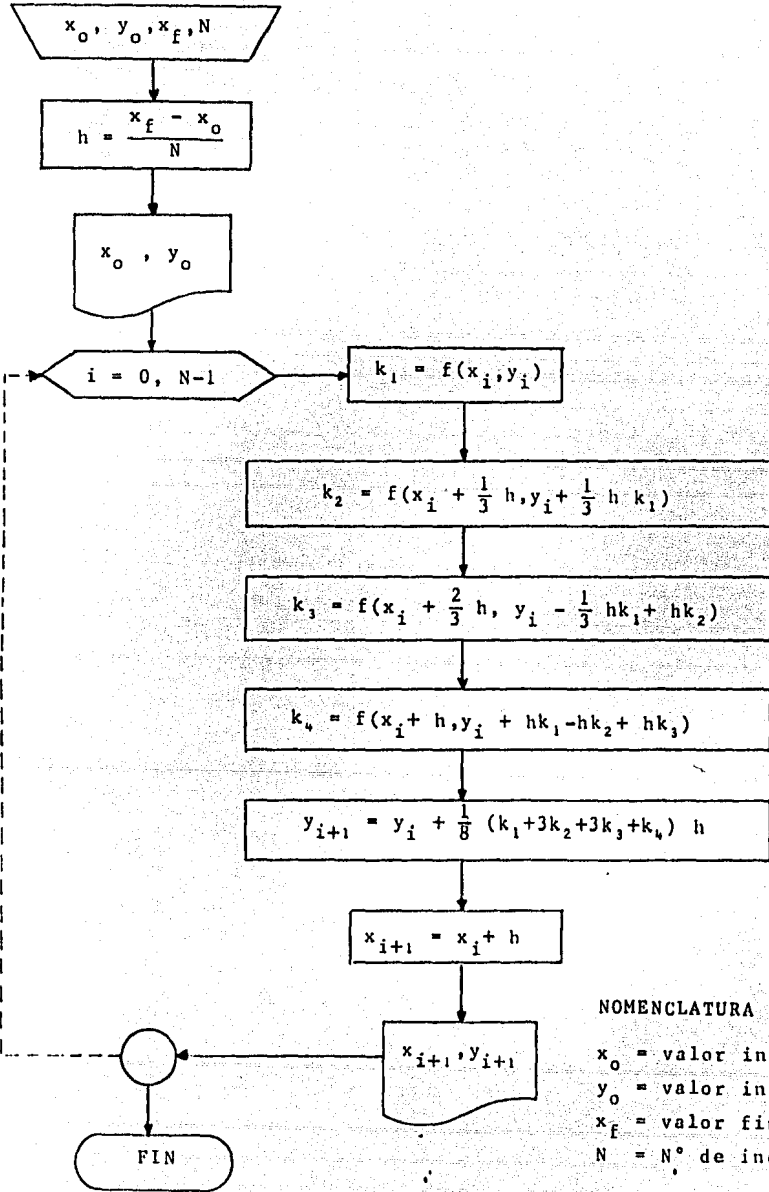
PARA INICIAR ESTE ALGORITMO DEBERAN CONOCERSE x_0, y_0 PARA RESOLVER $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 105).

II.5.5 METODOS DE MULTIPASOS DE INTEGRACION ABIERTA

II.5.5.0 INTRODUCCION

TODOS LOS METODOS ANTERIORES SE APOYAN EN EL PUNTO ANTERIOR (x_i, y_i) PARA ESTIMAR EL NUEVO PUNTO (x_{i+1}, y_{i+1}) . EXISTE OTRA FAMILIA DE METODOS, LOS CUALES PARA EVALUAR EL PUNTO (x_{i+1}, y_{i+1}) SE APOYAN EN VARIOS PUNTOS ANTERIORES, CONOCIENDOLOS COMO METODOS DE MULTIPASOS. PARA DESARROLLAR ESTOS METODOS LA EXPANSION DE LA FUNCION $f(x, y)$ SE LLEVA A CABO MEDIANTE EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON, CON DIFERENCIAS FINITAS SIN DIVIDIR



NOMENCLATURA

- x_0 = valor inicial de x
- y_0 = valor inicial de y
- x_f = valor final de x
- N = N° de incrementos

HACIA ATRAS. LO ANTERIOR IMPLICA QUE EN LUGAR DE UTILIZAR VALORES DE y_i , SE UTILIZARAN VALORES DE $f(x_i, y_i)$ LOS CUALES PUEDEN SER REPRESENTADOS COMO f_i .

EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON CON DIFERENCIAS FINITAS SIN DIVIDIR HACIA ATRAS QUEDA REPRESENTADO POR LA SIGUIENTE ECUACION:

$$f(x) = f_i + \nabla f_i \alpha + \frac{\nabla^2 f_i}{2!} \alpha(\alpha + 1) + \frac{\nabla^3 f_i}{3!} \alpha(\alpha + 1)(\alpha + 2) + \dots$$

DONDE $f_i = f(x_i, y_i)$

$$x = x_i + \alpha h$$

$$\nabla f_i = f_i - f_{i-1}$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 f_i &= \nabla f_i - \nabla f_{i-1} = (f_i - f_{i-1}) - (f_{i-1} - f_{i-2}) \\ &= f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2} \end{aligned}$$

ESTE POLINOMIO PUEDE SER UTILIZADO PARA RESOLVER LA ECUACION DIFERENCIAL $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ CON CONDICIONES INICIALES $y = y_0$ Y $x = x_0$. DICHA ECUACION DIFERENCIAL SE PUEDE TRANSFORMAR A $dy = f(x, y) dx$, QUE PUEDE SER INTEGRADA APOYANDOSE EN K PUNTOS HACIA ATRAS, ES DECIR A PARTIR DEL PUNTO x_{i-k}, y_{i-k} HASTA EL PUNTO x_{i+1}, y_{i+1} QUE ES EL QUE SE DESEA EVALUAR. AL APLICAR EL OPERADOR DE INTEGRACION OBTENEMOS:

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} f(x, y) dx$$

SI SE APROXIMA A $f(x, y)$ POR DIFERENCIAS FINITAS HACIA ATRAS

SE OBTIENE:

$$y_{i+1} =$$

$$= y_{i-K} + \int_{-K}^1 (f_i + \nabla f_i \alpha + \frac{\nabla^2 f_i}{2!} \alpha(\alpha+1) + \frac{\nabla^3 f_i}{3!} \alpha(\alpha+1)(\alpha+2) + \dots) h \alpha$$

$$y_{i+1} =$$

$$= y_{i-K} + h \left[\alpha f_i + \frac{\alpha^2}{2} \nabla f_i + \alpha^2 \left(\frac{\alpha}{3} + \frac{1}{2} \right) \frac{\nabla^2 f_i}{2!} + \alpha^2 \left(\frac{\alpha^2}{4} + \alpha + 1 \right) \frac{\nabla^3 f_i}{3!} + \right.$$

$$\left. + \alpha^2 \left(\frac{\alpha^3}{5} + \frac{3\alpha^2}{2} + 11 \frac{\alpha}{3} + 3 \right) \frac{\nabla^4 f_i}{4!} + \dots \right]_{-K}^1 \quad (\text{Ec. 1})$$

AL ANALIZAR LA ULTIMA ECUACION SE CONCLUYE QUE LAS DIFERENCIAS NO ESTAN AFECTANDO AL INTERVALO $[x_i, x_{i+1}]$; POR ESTE HECHO, A ESTOS METODOS SE LES CONOCE COMO METODOS DE INTEGRACION ABIERTA.

EN LAS SIGUIENTES SECCIONES, NO SE PRESENTARA EL DIAGRAMA DE FLUJO DE CADA UNO DE LOS METODOS, YA QUE POR SER UNA FAMILIA, QUEDARAN IMPLICITOS EN UN DIAGRAMA DE FLUJO GENERAL.

II.5.5.1 METODO DE ADAMS-BASHFORTH DE DOS PASOS

EL NOMBRE DEL METODO INDICA QUE SE APOYA EN DOS PUNTOS: (x_i, y_i) Y (x_{i-1}, y_{i-1}) . PARA QUE ESTOS PUNTOS SEAN LOS UNICOS QUE PARTICIPEN EN EL PROCESO RECURSIVO, LA INTEGRAL DEBERA SER RESUELTA DE x_i A x_{i+1} .

POR LO TANTO LA K DE LA ECUACION 1 ES IGUAL A CERO.

SI LA ECUACION 1 SE TRUNCA A PARTIR DE LA SEGUNDA DIFERENCIA, OBTENDREMOS:

$$y_{i+1} = y_i + h \left[\alpha f_i + \frac{\alpha^2}{2} \nabla f_i \right]_0^1$$

$$y_{i+1} = y_i + hf_i + \frac{1}{2} h(f_i - f_{i-1})$$

$$y_{i+1} = y_i - \frac{1}{2} hf_{i-1} + \frac{3}{2} hf_i = y_i - \frac{1}{2} hf(x_{i-1}, y_{i-1}) + \frac{3}{2} hf(x_i, y_i)$$

OBSERVE COMO PARA UTILIZAR ESTE ALGORITMO, SE REQUIERE CONOCER LOS PUNTOS (x_0, y_0) , (x_1, y_1) PARA CALCULAR EL PUNTO (x_2, y_2) Y ASI SUCESIVAMENTE. DADO QUE (x_0, y_0) ES UN DA TO, SE RECOMIENDA CALCULAR EL PUNTO (x_1, y_1) CON EL METODO DE EULER POR SIMPLICIDAD.

II.5.5.2 METODO DE ADAMS-BASHFORTH DE TRES PASOS

ES UN METODO QUE SE APOYA EN TRES PUN TOS ANTERIORES (AL PUNTO EN QUE QUEREMOS EVALUAR), ES DECIR, PARTICIPARAN LOS PUNTOS (x_i, y_i) , (x_{i-1}, y_{i-1}) Y (x_{i-2}, y_{i-2}) . SI SE TRUNCA LA ECUACION 1 A PARTIR DE LA TER CERA DIFERENCIA Y PARA $K = 0$, SE OBTIENE:

$$y_{i+1} = y_i + h \left[\alpha f_i + \frac{\alpha^2}{2} \nabla f_i + \alpha^2 \left(\frac{\alpha}{3} + \frac{1}{2} \right) \frac{\nabla^2 f_i}{2!} \right]_0^1$$

$$y_{i+1} = y_i + h \left[f_i + \frac{1}{2}(f_i - f_{i-1}) + \frac{5}{6}(f_i - 2f_{i-1} - f_{i-2}) \frac{1}{2} \right]$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} \left[23f(x_i, y_i) - 16f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 5f(x_{i-2}, y_{i-2}) \right]$$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO, DEBERAN CONOCERSE LOS PUNTOS (x_0, y_0) , (x_1, y_1) Y (x_2, y_2) PARA CALCULAR EL PUNTO (x_3, y_3) Y ASI SUCESIVAMENTE. DADO QUE (x_0, y_0) ES UN DATO, SE RECOMIENDA CALCULAR LOS PUNTOS (x_1, y_1) Y (x_2, y_2) CON EL METODO DE EULER POR SIMPLICIDAD.

II.5.5.3 METODO DE ADAMS-BASHFORTH DE CUATRO PASOS

SE OBTIENE EVALUANDO LA ECUACION 1 DESDE x_i A x_{i+1} , TRUNCANDO DICHA ECUACION A PARTIR DE LA CUARTA DIFERENCIA. LA ECUACION RESULTANTE DE y_{i+1} DEPENDERA DE CUATRO PUNTOS ANTERIORES: (x_i, y_i) , (x_{i-1}, y_{i-1}) , (x_{i-2}, y_{i-2}) , (x_{i-3}, y_{i-3}) . DE MANERA ANALOGA AL DESARROLLO ALGEBRAICO DE LAS SECCIONES ANTERIORES, SE OBTIENE LA SIGUIENTE ECUACION:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} \left[55f(x_i, y_i) - 59f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 37f(x_{i-2}, y_{i-2}) - 9f(x_{i-3}, y_{i-3}) \right]$$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO, DEBERAN CONOCERSE LOS PUNTOS (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , (x_2, y_2) Y (x_3, y_3) PARA CALCULAR EL

PUNTO (x_4, y_4) Y ASI SUCESIVAMENTE. DADO QUE EL PUNTO (x_0, y_0) ES UN DATO, SE RECOMIENDA CALCULAR LOS PUNTOS (x_1, y_1) , (x_2, y_2) Y (x_3, y_3) CON EL METODO DE EULER POR SIMPLICIDAD.

II.5.5.4 METODO DE ADAMS-BASHFORTH DE CINCO PASOS

SE OBTIENE EVALUANDO LA ECUACION 1 DESDE x_i A x_{i+1} , TRUNCANDO DICHA ECUACION A PARTIR DE LA QUINTA DIFERENCIA. LA ECUACION RESULTANTE DE y_{i+1} DEPENDERA DE CINCO PUNTOS ANTERIORES: (x_i, y_i) , (x_{i-1}, y_{i-1}) , (x_{i-2}, y_{i-2}) , (x_{i-3}, y_{i-3}) Y (x_{i-4}, y_{i-4}) . DE MANERA ANALOGA AL DESARROLLO ALGEBRAICO DE LAS SECCIONES ANTERIORES, SE OBTIENE LA SIGUIENTE ECUACION:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720} \left[1901f(x_i, y_i) - 2774f(x_{i-1}, y_{i-1}) + \right. \\ \left. + 2616f(x_{i-2}, y_{i-2}) - 1274f(x_{i-3}, y_{i-3}) + \right. \\ \left. + 251f(x_{i-4}, y_{i-4}) \right]$$

PARA INICIAR ESTE ALGORITMO, DEBERAN CONOCERSE LOS PUNTOS (x_i, y_i) , $i = 0, 4$ PARA CALCULAR EL PUNTO (x_5, y_5) Y ASI SUCESIVAMENTE. DADO QUE EL PUNTO (x_0, y_0) ES UN DATO, SE RECOMIENDA CALCULAR LOS PUNTOS (x_i, y_i) , $i = 1, 4$ CON EL METODO DE EULER, POR SIMPLICIDAD.

II.5.5.5 DIAGRAMA DE FLUJO GENERAL

(VER PAG. 112).

II.5.6 METODOS DE MULTIPASOS DE INTEGRACION
CERRADA

LA DIFERENCIA DE ESTOS METODOS CON LOS METODOS DE LA SECCION II.5.4 (PAG. 87) ES QUE LAS DIFERENCIAS FINITAS HACIA ATRAS SE EVALUAN A PARTIR DEL PUNTO (x_{i+1}, y_{i+1}) . ESTO INDICA QUE LA ECUACION PARA CALCULAR y_{i+1} DEPENDERA A SU VEZ DEL PUNTO (x_{i+1}, y_{i+1}) QUE NO SE CONOCE. ESTE CRITERIO GENERA UNA FAMILIA DE METODOS, CONOCIDOS COMO METODOS IMPLICITOS. SI EN LA ECUACION 1 DE LA SECCION II.5.4 SE SUSTITUYEN $\nabla f_i, \nabla^2 f_i, \dots$, ETC. POR $\nabla f_{i+1}, \nabla^2 f_{i+1}, \dots$, ETC., EN DONDE

$$\nabla f_{i+1} = f_{i+1} - f_i$$

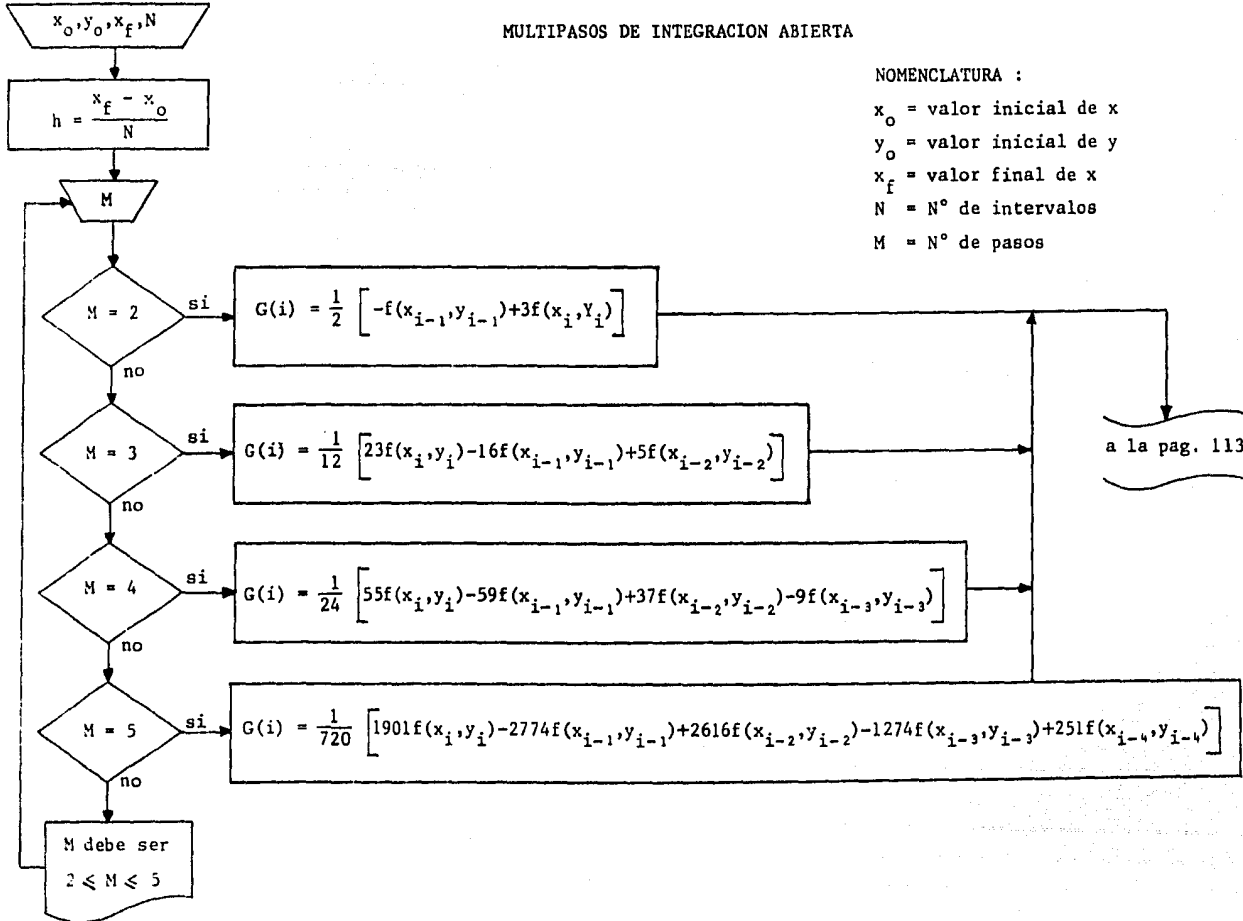
$$\nabla^2 f_{i+1} = \nabla f_{i+1} - \nabla f_i = (f_{i+1} - f_i) - (f_i - f_{i-1}) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}$$

SIGUIENDO EL PROCEDIMIENTO DE LA SECCION II.5.5.1 (VER PAG. 107) DE EVALUACION DE LA INTEGRAL PARA $k = 0$ Y UNA TRUNCACION DEPENDIENDO DEL NUMERO DE PASOS, SE OBTIENE LO SIGUIENTE:

ECUACION DE ADAMS-MOULTON DE DOS PASOS:

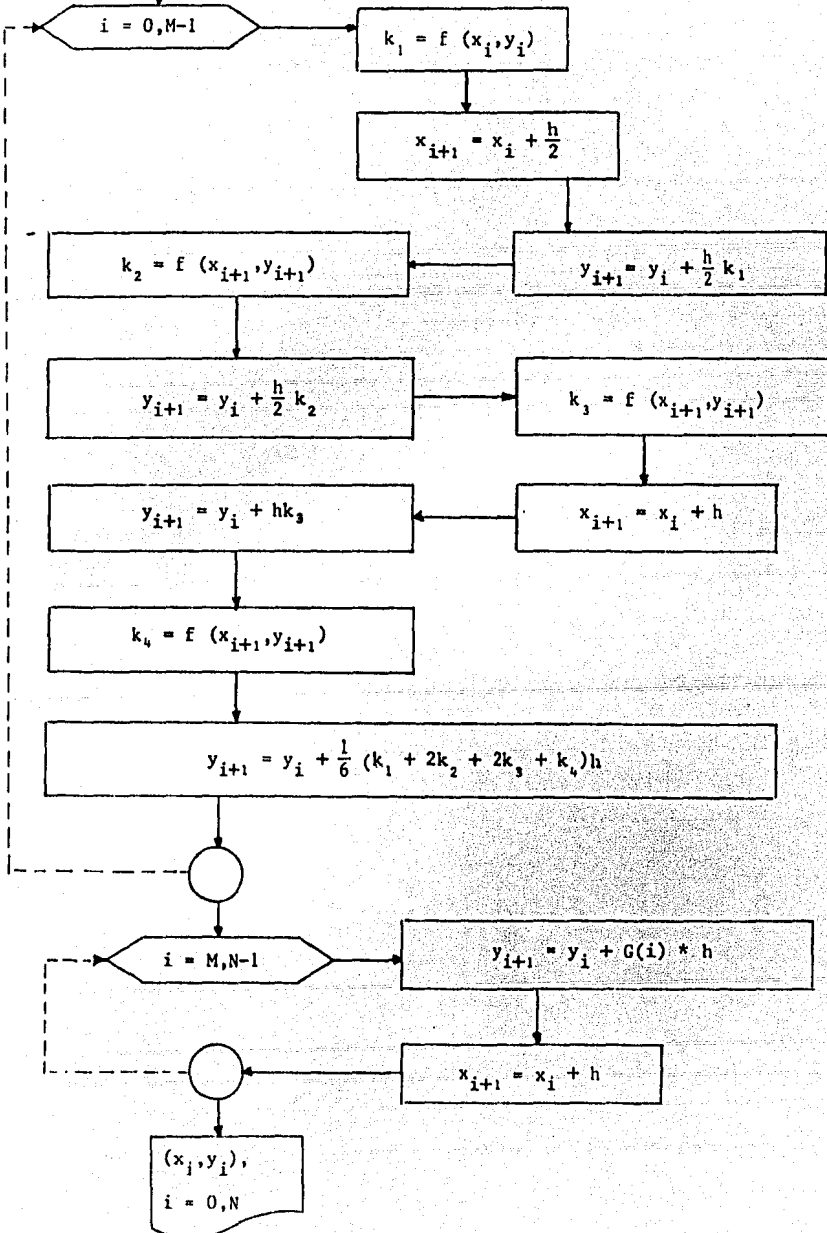
$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} \left[5f(x_{i+1}, y_{i+1}) + 8f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1}) \right]$$

MULTIPASOS DE INTEGRACION ABIERTA



NOMENCLATURA :

- x_0 = valor inicial de x
- y_0 = valor inicial de y
- x_f = valor final de x
- N = N° de intervalos
- M = N° de pasos



ECUACION DE ADAMS-MOULTON DE TRES PASOS:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} \left[9f(x_{i+1}, y_{i+1}) + 19f(x_i, y_i) - 5f(x_{i-1}, y_{i-1}) + f(x_{i-2}, y_{i-2}) \right]$$

ECUACION DE ADAMS-MOULTON DE CUATRO PASOS:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{120} \left[251f(x_{i+1}, y_{i+1}) + 646f(x_i, y_i) - 264f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 106f(x_{i-2}, y_{i-2}) - 19f(x_{i-3}, y_{i-3}) \right]$$

DADO EL DESCONOCIMIENTO DE y_{i+1} , ESTOS METODOS NO SE UTILIZAN DIRECTAMENTE, SINO QUE DEBERAN COMBINARSE CON OTRO, EL CUAL VAYA PREDICIENDO VALORES DE y_{i+1} , PARA QUE NUESTRA ULTIMA FAMILIA DE METODOS VAYAN CORRIENDO LOS VALORES DE y_{i+1} . A LA COMBINACION DE DOS METODOS DONDE UNO PREDICE Y OTRO CORRIGE SE LE CONOCE COMO METODO PREDICTOR-CORRECTOR. DADO QUE ESTA FAMILIA DE METODOS NO SE USAN INDEPENDIENTEMENTE NO SE LES HARA DIAGRAMA DE FLUJO.

II.5.7 METODOS PREDICTORES-CORRECTORES

II.5.7.0 INTRODUCCION

COMO SE MENCIONO EN LA SECCION ANTERIOR, ESTOS METODOS SE GENERAN AL COMBINAR UN METODO DE

INTEGRACION ABIERTA, CON UN METODO DE INTEGRACION CERRADA. POR LO TANTO, EL DESARROLLO DE FORMULAS SEGUIRA UN PROCEDIMIENTO ANALOGO AL DESCRITO EN LAS SECCIONES II.5.4 (PAG. 87) Y II.5.5 (PAG.104), POR LO QUE EN ESTA SECCION, SOLO SE PRESENTARAN LAS FORMULAS CORRESPONDIENTES A LOS METODOS DE ESTE TIPO MAS UTILIZADOS.

II.5.7.1 METODOS MAS UTILIZADOS

METODO DE MILNE DE CUARTO ORDEN:

PREDICTOR:

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3} \left[2f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 2f(x_{i-2}, y_{i-2}) \right]$$

CORRECTOR:

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} \left[f(x_{i+1}, y_{i+1}) + 4f(x_i, y_i) + f(x_{i-1}, y_{i-1}) \right]$$

METODO DE MILNE DE SEXTO ORDEN:

PREDICTOR:

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3h}{10} \left[11f(x_i, y_i) - 14f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 26f(x_{i-2}, y_{i-2}) - 14f(x_{i-3}, y_{i-3}) + 11f(x_{i-4}, y_{i-4}) \right]$$

CORRECTOR:

$$Y_{i+1} = Y_{i-3} + \frac{2h}{45} \left[7f(x_{i+1}, Y_{i+1}) + 32f(x_i, Y_i) + 12f(x_{i-1}, Y_{i-1}) \right. \\ \left. + 32f(x_{i-2}, Y_{i-2}) + 7f(x_{i-3}, Y_{i-3}) \right]$$

METODO DE ADAMS-MOULTON O ADAMS MODIFICADO:

PREDICTOR:

$$Y_{i+1} = Y_i + \frac{h}{24} \left[55f(x_i, Y_i) - 59f(x_{i-1}, Y_{i-1}) + 37f(x_{i-2}, Y_{i-2}) \right. \\ \left. - 9f(x_{i-3}, Y_{i-3}) \right]$$

CORRECTOR:

$$Y_{i+1} = Y_i + \frac{h}{24} \left[9f(x_{i+1}, Y_{i+1}) + 19f(x_i, Y_i) - 5f(x_{i-1}, Y_{i-1}) \right. \\ \left. + f(x_{i-2}, Y_{i-2}) \right]$$

SE UTILIZAN ESTOS METODOS CUANDO SE BUSCA MUCHA PRECISION CON POCOS SUBINTERVALOS DE INTEGRACION, YA QUE COMO PUEDE OBSERVARSE EN LAS FORMULAS, SE REQUIEREN MUCHAS EVALUACIONES DE LA FUNCION. POR ENDE, EN POS DE LA EXACTITUD, SE RECOMIENDA QUE LOS PUNTOS QUE INICIAN EL CALCULO SE ESTIMEN (EVALUEN) CON UN RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 118).

II.5.8 METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

II.5.8.0 INTRODUCCION

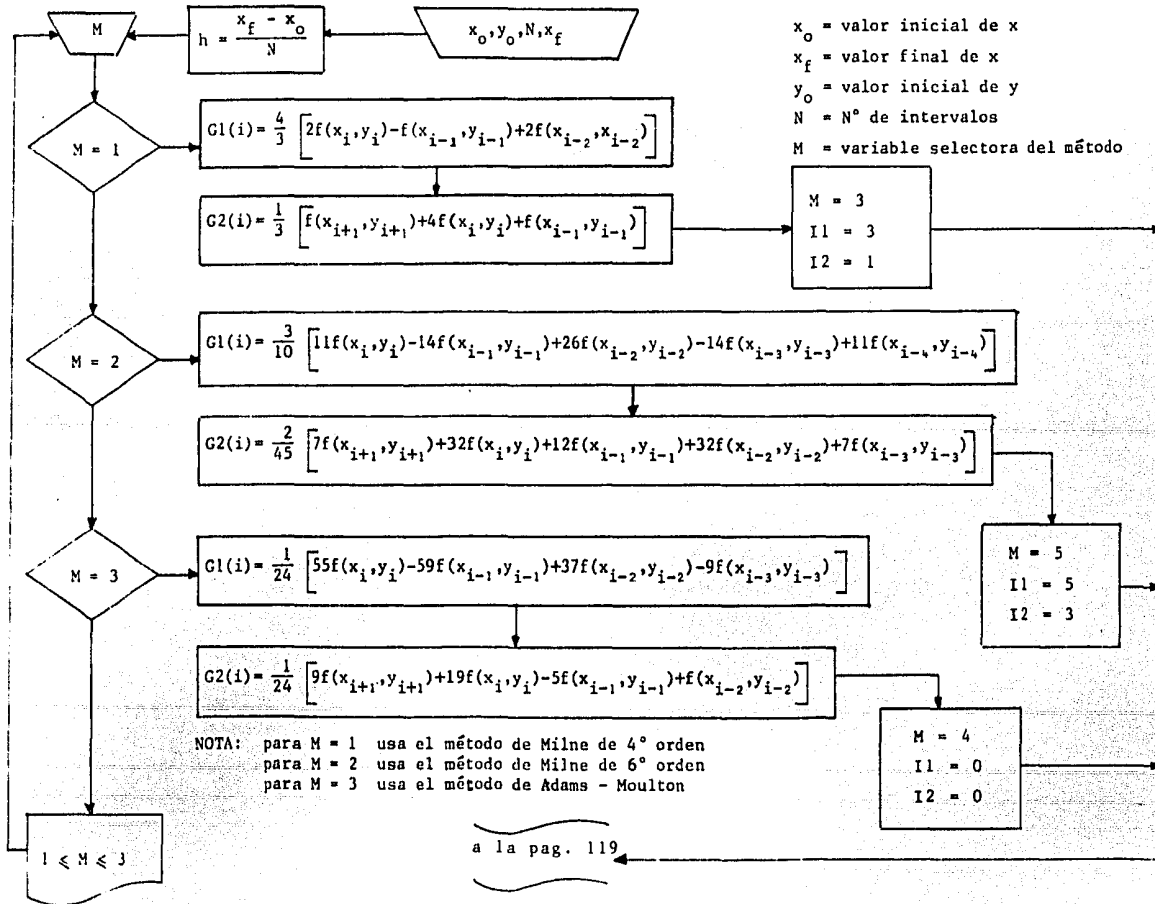
ESTE METODO SE BASA EN LA APROXIMACION DE LAS DERIVADAS MEDIANTE DIFERENCIAS FINITAS. EXISTEN MUCHAS FORMAS DE OBTENER ESTAS APROXIMACIONES, UNA DE ELLAS ES LA SIGUIENTE:

SI $f(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots$ Y SE DERIVA CON RESPECTO A x ESTE POLINOMIO, SE OBTIENE:

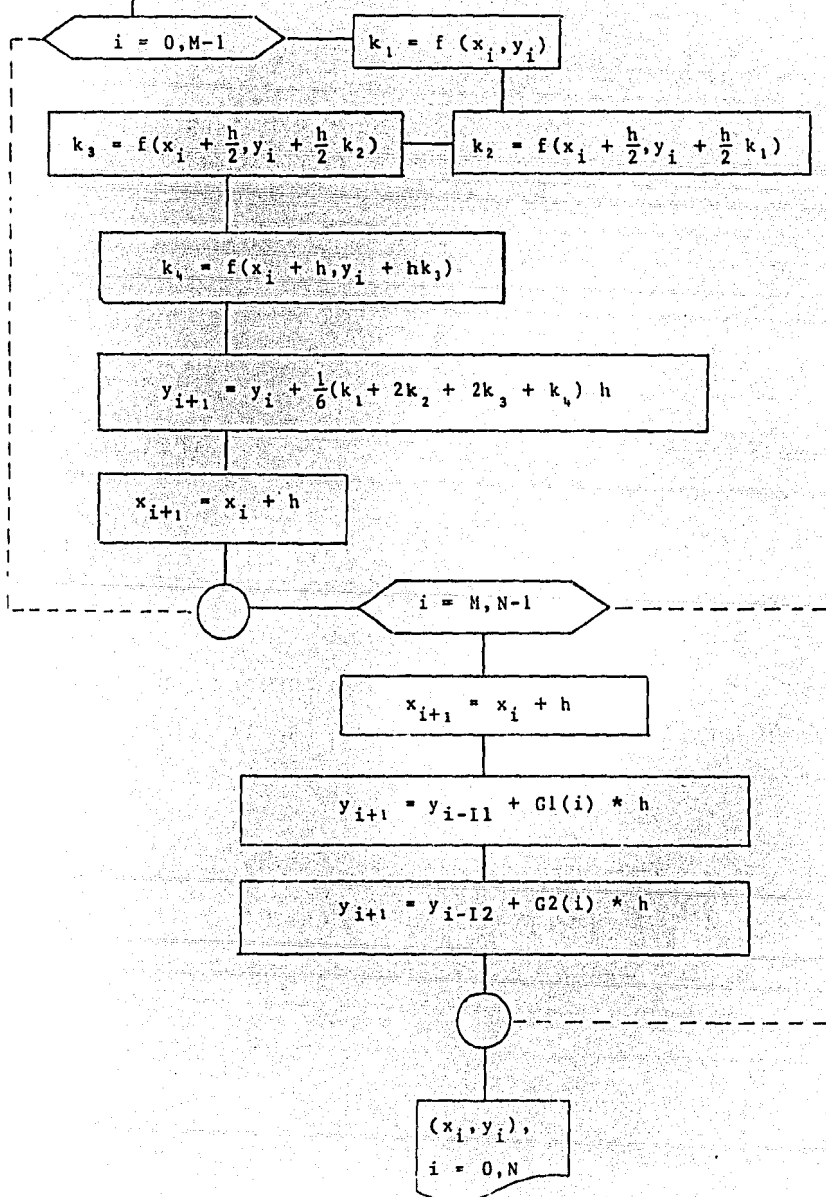
$$\begin{aligned} f'(x) &= f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0 + (x - x_1)) + \dots \\ &= \left[f(x_0) \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + f(x_1) \frac{2x - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \right. \\ &\quad \left. + f(x_2) \frac{2x - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \right] + \dots \end{aligned}$$

SI $f(x)$ SE APROXIMASE A UN POLINOMIO DE SEGUNDO GRADO, ENTONCES $f'(x)$ ESTARIA DADO POR LOS TERMINOS ENCERRADOS ENTRE PARENTESIS CUADRADOS DE LA ECUACION ANTERIOR. POR TANTO LA DERIVADA EN x_0 (CONSIDERANDO QUE LOS PUNTOS x_0, x_1 ESTAN IGUALMENTE ESPACIADOS CON UN INCREMENTO h) SERA:

$$\begin{aligned} f'(x_0) &\cong \frac{1}{h} \left[-\frac{3}{2} f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2} f(x_2) \right] = \\ &= \frac{1}{h} \left[-\frac{3}{2} f(x_0) + 2f(x_0 + h) - \frac{1}{2} f(x_0 + 2h) \right] \end{aligned}$$



de la pag. 118



ESTA DERIVADA OBTENIDA PUEDE MEJORARSE EN SU APROXIMACION, APLICANDO UNA TECNICA DE EXTRAPOLACION.

SI SE EVALUA LA PRIMERA DERIVADA EN x_1 , SE OBTIENE:

$$f'(x_1) = \frac{1}{h} \left[-\frac{1}{2} f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_2) \right] = \frac{1}{h} \left[-\frac{1}{2} f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_0 + 2h) \right]$$

Y A SU VEZ,

$$f'(x_1) = f(x_0 + h)$$

SI EN ESTA ULTIMA ECUACION SE SUSTITUYE x_0 POR $x_0 - h$, SE OBTIENE:

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left[-\frac{1}{2} f(x_0 - h) + \frac{1}{2} f(x_1) \right]$$

ESTA SERIA UNA FORMA DE EVALUAR LA PRIMERA DERIVADA. DE MANERA SIMILAR, PODRIA CALCULARSE LA SEGUNDA DERIVADA RESPECTIVA, POR EXPANSION DE LA FUNCION $f(x)$ A UN POLINOMIO DE TERCER GRADO.

PODEMOS OBSERVAR QUE EN ESTE METODO EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON SE TRUNCA EN UN GRADO MAYOR AL ORDEN DE LA DERIVADA QUE SE DESEA EVALUAR.

DADOS LOS ERRORES IMPLICITOS EN ESTOS CALCULOS, LA MAYORIA DE LOS METODOS NUMERICOS QUE UTILIZAN TECNICAS DE DIFERENCIAS FINITAS UTILIZAN APROXIMACIONES MENOS EXACTAS, TRUNCANDO

EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON EN EL ORDEN DE DIFERENCIA
CORRESPONDIENTE A LA DERIVADA QUE SE DESEA EVALUAR. SIGUIENDO
ESTE PROCEDIMIENTO SE OBTENDRA:

PARA $f'(x)$

$$f(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0)$$

DERIVANDO:

$$f'(x) = f[x_0, x_1] = \frac{\Delta f(x_0)}{h} = \frac{\nabla f(x_0)}{h}$$

PARA $f''(x)$

$$f(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

DERIVANDO:

$$\begin{aligned} f''(x) &= \frac{d^2}{dx^2} \left[f[x_0, x_1, x_2](x^2 - (x_0 + x_1)x + x_0x_1) \right] \\ &= 2f[x_0, x_1, x_2] = \frac{\Delta^2 f(x_0)}{h^2} = \frac{\nabla^2 f(x_0)}{h^2} \end{aligned}$$

PARA $f'''(x)$

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \\ &\quad + f[x_0, x_1, x_2, x_3](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \end{aligned}$$

DERIVANDO:

$$\begin{aligned} f'''(x) &= \frac{d^3}{dx^3} \left[f[x_0, x_1, x_2, x_3](x^3 - (x_0 + x_1 + x_2)x^2 + \right. \\ &\quad \left. + (x_0x_1 - (x_0 + x_1)x_2)x - x_2x_1x_0) \right] \end{aligned}$$

DE DONDE

$$f'''(x) = 6f \left[x_0, x_1, x_2, x_3 \right] = \frac{\Delta^3 f(x_0)}{h^3} = \frac{\nabla^3 f(x_0)}{h^3}$$

GENERALIZANDO SE OBTIENE

$$f^K(x) = K! f \left[x_0, x_1, \dots, x_K \right] = \frac{\Delta^K f(x_0)}{h^K} = \frac{\nabla^K f(x_0)}{h^K}$$

TAMBIEN SE PODRIA USAR EL OPERADOR DE DIFERENCIA FINITA CENTRAL, EL CUAL SE DEFINE COMO:

$$\delta f(x_0) = f(x_0 + \frac{1}{2} h) - f(x_0 - \frac{1}{2} h)$$

Y OBTENER $f^K(x)$ COMO:

$$f^K(x) = \frac{\delta^K f(x_0)}{h^K}$$

II.5.8.1 SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES LINEALES.

ESTE METODO SE FUNDAMENTA EN LA APROXIMACION DE LAS DERIVADAS A DIFERENCIAS FINITAS, CON LA CUAL UNA ECUACION DIFERENCIAL LINEAL SE TRANSFORMA A UN SISTEMA DE n ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES, QUE PRESENTAN LA CARACTERISTICA DE SER BI, TRI, CUATRI, ETC. DIAGONAL. EL NUMERO DE ECUACIONES SERA FUNCION DEL NUMERO DE SUBINTERVALOS CON LOS QUE SE QUIERAN RESOLVER LA ECUACION DIFERENCIAL.

UNA ECUACION DIFERENCIAL DE PRIMER ORDEN GENERARA UNA MATRIZ BIDIAGONAL, UNA ECUACION DIFERENCIAL DE SEGUNDO ORDEN GENERARA UNA MATRIZ TRIDIAGONAL Y ASI SUCESIVAMENTE.

ESTA TECNICA ES MUY UTILIZADA PARA RESOLVER PROBLEMAS DE VALOR A LA FRONTERA, EN ECUACIONES DE ORDEN MAYOR QUE 1. SE PRESENTARA EL PROCEDIMIENTO DE SOLUCION EJEMPLIFICANDOLO CON UNA ECUACION DIFERENCIAL DE PRIMER ORDEN.

RESOLVER $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$ CON LA CONDICION $x = A, y = B$

APROXIMANDO:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_i \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta x}$$

SUSTITUYENDO PARA x_i, y_i

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i, y_i)$$

$y_{i+1} - y_i = hf(x_i, y_i)$ EN CONDICIONES INICIALES $x_\phi = A,$
 $y_\phi = B.$

SI ESTA ECUACION SE DESEA RESOLVER HASTA UN VALOR DE x_F

(FINAL) CON N INCREMENTOS ENTONCES: $h = \frac{x_F - x_0}{N}$ Y SE OBTENDRA EL SIGUIENTE SISTEMA DE ECUACIONES:

$$\begin{array}{cccccc} y_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & = y_0 + hf(x_0, y_0) \\ -y_1 & y_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & = hf(x_1, y_1) \\ 0 & -y_2 & y_3 & 0 & 0 & 0 & = hf(x_2, y_2) \\ 0 & 0 & -y_3 & y_4 & 0 & 0 & = hf(x_3, y_3) \\ 0 & 0 & 0 & -y_4 & y_5 & 0 & = hf(x_4, y_4) \\ & & \vdots & & & & \\ & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -y_{N-1} & y_N & = hf(x_{N-1}, y_{N-1}) \end{array}$$

ESTE SISTEMA PUEDE SER RESUELTO SIMULTANEAMENTE CON $x_{i+1} = x_i + h$. DADA LA FRECUENCIA DE APARICION DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES DE SEGUNDO ORDEN Y DADO QUE SU SISTEMA DE ECUACIONES ALGEBRAICAS CORRESPONDIENTES ES UN SISTEMA DE ECUACIONES TRIDIAGONAL, EN LA SECCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES SE INTRODUCIRA LA TECNICA DE SOLUCION PARA LA MATRIZ TRIDIAGONAL.

II.5.8.2 METODOS DE RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES DE ORDEN SUPERIOR.

EXISTEN DOS METODOS PARA RESOLVER UNA ECUACION DIFERENCIAL DE ORDEN n . EL PRIMERO ES EL QUE SE MENCIONO EN LA SECCION ANTERIOR (POR DIFERENCIAS FINITAS) Y EL SEGUNDO CONSISTE EN DESCOMPONER LA ECUACION DE ORDEN n A UN SISTEMA DE n ECUACIONES DIFERENCIALES DE PRIMER ORDEN, LAS CUALES PUEDEN SER RESUELTAS EN PARALELO CON LAS TECNICAS RECURSIVAS YA DESCRITAS. EL PROCEDIMIENTO SERA MOSTRADO EN LA SECCION CORRESPONDIENTE A SOLUCION DE SISTEMA DE ECUACIONES. AQUI NOS LIMITAREMOS EXCLUSIVAMENTE A DEMOSTRAR COMO SE TRANSFORMA UNA ECUACION DIFERENCIAL DE ORDEN n A UN SISTEMA DE n ECUACIONES, MEDIANTE LA SUSTITUCION DE VARIABLES.

EJEMPLO: TRANSFORMACION DE UNA ECUACION DIFERENCIAL DE TERCER ORDEN.

$$y''' + xy'' + y = e^x$$

SI $y' = z$, ENTONCES:

$$y'' = z'$$

SI $z' = w$, ENTONCES:

$$w' = z'' = y'''$$

LAS TRES ECUACIONES QUE SE GENERAN SON:

$$y' = z$$

$$z' = w$$

$$w' = e^x - xw - y$$

EXISTIRAN TRES VARIABLES DEPENDIENTES: y , z Y w Y UNA VARIABLE INDEPENDIENTE x .

PARA RESOLVER UN SISTEMA DE ECUACIONES, OBTENIDO DE LA DESCOMPOSICION DE UNA ECUACION DE ORDEN n , DEBERAN ANALIZARSE LAS CONDICIONES QUE DEBA CUMPLIR LA SOLUCION DE DICHO SISTEMA.

SI TODAS LAS CONDICIONES ESTAN REFERIDAS A UN SOLO VALOR DE LA VARIABLE INDEPENDIENTE x , EL PROBLEMA PUEDE SER RESUELTO YA QUE SE CUMPLE EL REQUISITO DE EXPANSION DE SERIE DE TAYLOR. SI LAS CONDICIONES NO ESTAN REFERIDAS A UN MISMO VALOR DE x (PROBLEMA DE VALOR A LA FRONTERA), ENTONCES DEBERA COMBINARSE UNA TECNICA DE INTERPOLACION PARA PODER RESOLVER EL PROBLEMA. PARA MOSTRAR LO ANTERIOR LO EJEMPLIFICAREMOS CON UNA ECUACION DE SEGUNDO ORDEN:

$$y'' + xy' + y = e^x$$

(EC. 1)

1ª CON DICION $x = a$ $y = b$ RECUERDESE QUE LA FUNCION (y) ESTA
 2ª CON DICION $x = c$ $y' = d$ EVALUADA PARA UN VALOR DE x Y y'
 ESTA EVALUADA PARA OTRO VALOR DE x.

DESCOMPONENDO LA ECUACION DE SEGUNDO ORDEN EN UN SISTEMA DE DOS ECUACIONES, DEFINIENDO

$$y' = z$$

$$\therefore y'' = z'$$

SUSTITUYENDO EN LA ECUACION 1, Y DESPEJANDO z' , OBTENEMOS:

$$z' = e^x - xz - y$$

$$Y \quad y' = z$$

CON LAS SIGUIENTES DOS CONDICIONES:

$$1a) \quad x = a ; \quad y = b$$

$$2a) \quad x = c ; \quad z = d$$

ESTE SISTEMA NO PUEDE RESOLVERSE POR EXPANSION DE SERIE DE TAYLOR, YA QUE SI SE INICIASE LA EXPANSION EN $x = a$, NO SE CONOCERIA EL VALOR DE z Y NO PODRIA EXPANDERSE. LO MISMO OCURRE PARA EL PUNTO $x = c$, EN DONDE NO SE CONOCE A y .

EL PROCEDIMIENTO PROPUESTO PARA SU SOLUCION CONSISTE EN SUPONER EL DATO FALTANTE PARA EL VALOR DE x RESPECTIVO. ASI, SI EL PROCESO RECURSIVO SE INICIA EN $x = a$, SUPONE UN VALOR DE $z = a'$. RESUELVA EL SISTEMA DE ECUACIONES Y COMPARE

EL VALOR DE z OBTENIDO PARA $x = c$ CON EL d . PARA FACILITAR LA CONVERGENCIA SUGIERO UTILIZAR EL METODO DE LA SECANTE, QUE POR INTERPOLACION SE OBTENGA UN NUEVO VALOR PROPUESTO DE a' , HASTA QUE SE LOGRE LA CONVERGENCIA.

SI SE DEFINE $f(a') = z(a') - d$, EN DONDE $z(a')$ ES EL VALOR DE d CALCULADO PARA UN VALOR SUPUESTO DE a' Y $f(a')$ VIENE REPRESENTANDO EL ERROR ENTRE EL VALOR CALCULADO Y EL VALOR REAL DE z , PARA $x = c$. DEL METODO DE LA SECANTE SE OBTIENE LA SIGUIENTE RELACION:

$$a'_k = \frac{a'_{k-2} f(a'_{k-1}) - a'_{k-1} f(a'_{k-2})}{f(a'_{k-1}) - f(a'_{k-2})}$$

ESTA FORMULA IMPLICA DOS SUPOSICIONES ANTERIORES.

DADO QUE ES UNA COMBINACION DE METODOS NO SE PRESENTARA EL DIAGRAMA ESPECIFICO DEL ALGORITMO.

II.6 RESOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES.

EN LAS SECCIONES SIGUIENTES SE PRESENTARAN LOS METODOS PARA LA RESOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES, SISTEMA DE ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES Y SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.

II.6.1 SOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES.

SE EXPONDRAN CINCO METODOS, DE LOS CUALES DOS

SON ITERATIVOS (DE SUSTITUCION DIRECTA) Y TRES SON DE SOLUCION DIRECTA.

II.6.1.1 METODOS ITERATIVOS.

ESTOS METODOS SE BASAN EN EL METODO DE SUSTITUCION DIRECTA YA MENCIONADO EN LA SECCION DE SOLUCION DE UNA ECUACION ALGEBRAICA NO LINEAL, EL CUAL CONSISTE EN DESPEJAR DE LA ECUACION 1, x_1 ; DE LA ECUACION 2, x_2 Y ASI SUCESIVAMENTE (VER PAG. 34). SI SE SUPONEN VALORES INICIALES DE x_1, x_2, \dots , HASTA x_n , POR SUSTITUCION DE ESTOS VALORES EN LAS FORMULAS DESPEJADAS, SE OBTENDRAN VALORES NUEVOS PARA x_1, x_2, \dots , LOS CUALES PUEDEN SER NUEVAMENTE SUSTITUIDOS COMO VALORES SUPUESTOS PARA OBTENER OTROS VALORES CALCULADOS HASTA QUE SE CUMPLA LA CONDICION:

$$\sum_{i=1}^n \left| x_i \text{ supuesta} - x_i \text{ calculada} \right| \leq \text{tolerancia}$$

DONDE TOLERANCIA = ERROR MAXIMO PERMISIBLE.

METODO DE JACOBI.

SEA EL SISTEMA DE ECUACIONES $Ax = u$, DONDE

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{DONDE } n = \text{NUMERO DE ECUACIONES A RESOLVER}$$

SI

$$\begin{array}{l}
 \left. \begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{array} \right\} \text{ ES EL VECTOR DE} \\
 \text{ } \quad \quad \quad \text{INCOGNITAS, Y} \\
 \left. \begin{array}{c} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_n \end{array} \right\} \text{ ES EL VECTOR DE LA} \\
 \text{ } \quad \quad \quad \text{PARTE NO HOMOGENEA} \\
 \text{ } \quad \quad \quad \text{DEL SISTEMA DE} \\
 \text{ } \quad \quad \quad \text{ECUACIONES,}
 \end{array}$$

Y DESPEJAMOS x_i , SE OBTIENE:

$$u_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j \\
 x_{ci} = \frac{\quad}{a_{ii}} \quad \text{PARA } i = 1 \text{ HASTA } n \quad (\text{EC. 1})$$

DONDE x_{ci} ES LA x CALCULADA.

EL ALGORITMO PROPUESTO ES EL SIGUIENTE:

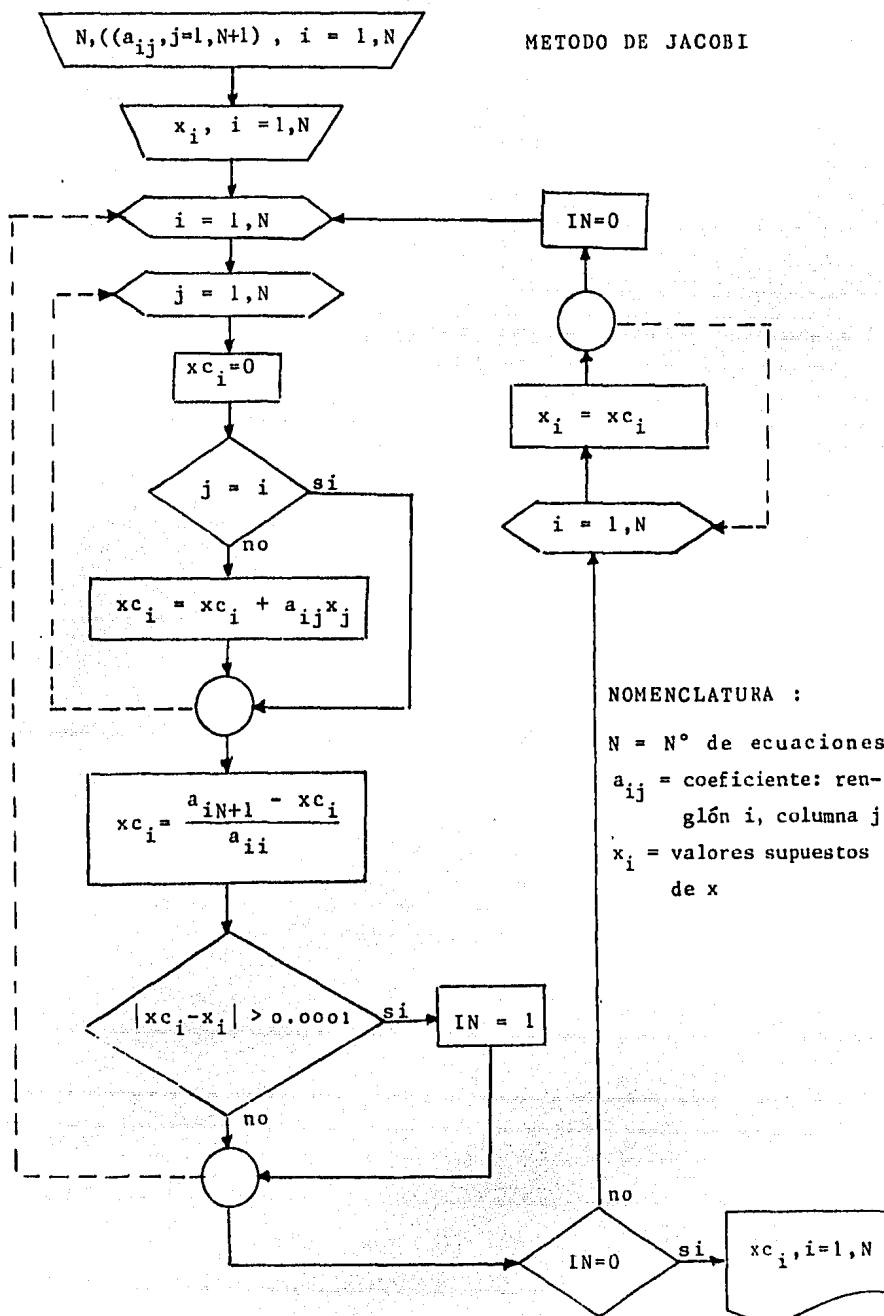
- 1) SUPONGA VALORES PARA x_i DESDE $i = 1, n$
- 2) CALCULE x_{ci} CON LA ECUACION 1.
- 3) VERIFIQUE EL CRITERIO DE COVERGENCIA.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 130).

METODO DE GAUSS-SEIDEL.

MEJORA EL METODO DE JACOBI UTILIZANDO LOS NUEVOS VALORES DE LAS VARIABLES CONFORME SE VAYAN CALCULANDO. COMO PUEDE OBSERVARSE EN EL DIAGRAMA DE FLUJO ANTERIOR, LAS SUSTITUCIONES PARA EL METODO DE JACOBI DE LOS VALORES CALCULADOS,

METODO DE JACOBI



SE HACE HASTA QUE SE HAN EVALUADO TODAS LAS INCOGNITAS. ESTE METODO PROPONE UTILIZAR x_{c_1} PARA CALCULAR x_{c_2} , UTILIZAR x_{c_1} , x_{c_2} PARA CALCULAR x_{c_3} Y ASI SUCESIVAMENTE, POR LO QUE LA ECUACION 1 PUEDE SER MODIFICADA A:

$$x_i = \frac{u_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N a_{ij} x_j}{a_{ii}} \quad \text{NOTESE QUE NO SE ESTA CALCULANDO } x_{ci}$$

SINO QUE DIRECTAMENTE SE REEMPLAZA LA x_i SUPUESTA PARA EL SIGUIENTE CALCULO.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 132).

ESTOS METODOS CONVERGEN PARA EL CASO EN QUE

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \quad i = 1, n \quad \text{ES DECIR, QUE LOS ELEMENTOS}$$

DE LA DIAGONAL PRINCIPAL DE LA MATRIZ DE COEFICIENTES SEAN PREDOMINANTES.

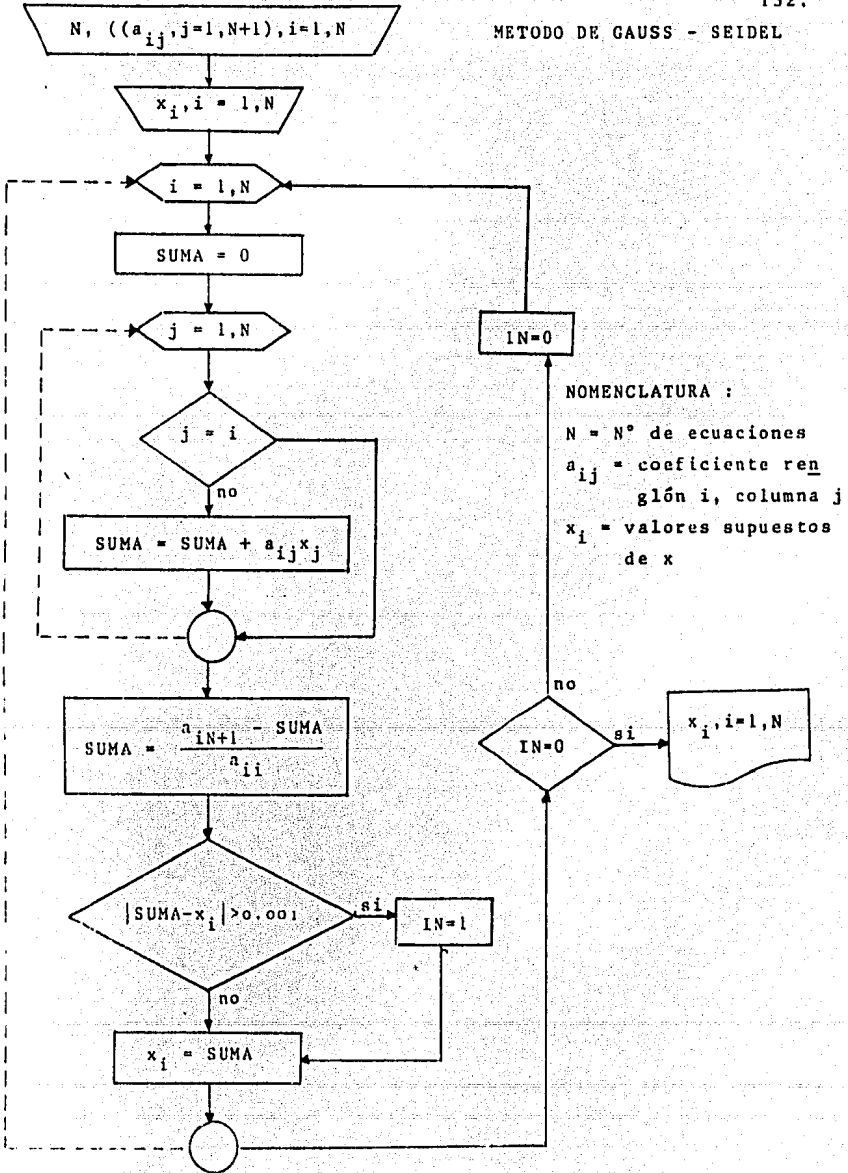
II.6.1.2 METODOS DIRECTOS.

ESTOS METODOS SE BASAN EN LAS OPERACIONES ELEMENTALES POR RENGLONES DE UNA MATRIZ PARA TRANSFORMARLA EN UNA MATRIZ TRIANGULAR O UNA MATRIZ DIAGONAL.

ELIMINACION GAUSSIANA.

ESTE METODO OBTIENE UNA MATRIZ TRIANGULAR SUPERIOR A

METODO DE GAUSS - SEIDEL



PARTIR DE LA MATRIZ DE COEFICIENTES, HACIENDO LOS CAMBIOS DE TAL MANERA QUE EL SISTEMA DE ECUACIONES NO SE DESBALANCEE, ES DECIR, OPERANDO SOBRE LA MATRIZ AUMENTADA. ESTE SISTEMA TRIANGULAR PUEDE SER RESUELTO FACILMENTE.

SE PRESENTARA EL METODO CON UN SISTEMA DE TRES ECUACIONES PARA DESARROLLAR EL ALGORITMO.

$$a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 = u_1$$

$$a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + a_{23} x_3 = u_2$$

$$a_{31} x_1 + a_{32} x_2 + a_{33} x_3 = u_3$$

MATRIZ AUMENTADA

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & u_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & u_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & u_3 \end{pmatrix}$$

OBJETIVO: TRANSFORMARLA A UNA MATRIZ EQUIVALENTE:

$$\begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} & u_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & u_2 \\ 0 & 0 & a'_{33} & u_3 \end{pmatrix} \quad \text{matriz triangular}$$

SI $a_{11} \neq 0$, DIVIDA EL PRIMER RENGLON DE LA MATRIZ AUMENTADA ENTRE a_{11} , SI NO, INTERCAMBIE ECUACIONES DE TAL MANERA QUE a_{11} SEA DIFERENTES DE 0 Y REALICE LA DIVISION:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \frac{a_{13}}{a_{11}} & \frac{u_1}{a_{11}} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & u_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & u_3 \end{pmatrix}$$

REDUCCION A CERO DEL ELEMENTO a_{21} :

MULTIPLIQUE EL PRIMER RENGLON POR a_{21} Y RESTELO AL SEGUNDO:

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \frac{a_{13}}{a_{11}} & \frac{u_1}{a_{11}} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12}}{a_{11}} a_{21} & a_{23} - \frac{a_{13}}{a_{11}} a_{21} & u_2 - \frac{u_1}{a_{11}} a_{21} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & u_3 \end{array} \right|$$

REDUCCION A CERO DEL ELEMENTO a_{31} :

MULTIPLIQUESE EL PRIMER RENGLON POR a_{31} Y RESTELO AL TERCE

RO:

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \frac{a_{13}}{a_{11}} & \frac{u_1}{a_{11}} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12}}{a_{11}} a_{21} & a_{23} - \frac{a_{13}}{a_{11}} a_{21} & u_2 - \frac{u_1}{a_{11}} a_{21} \\ 0 & a_{32} - \frac{a_{12}}{a_{11}} a_{31} & a_{33} - \frac{a_{13}}{a_{11}} a_{31} & u_3 - \frac{u_1}{a_{11}} a_{31} \end{array} \right|$$

CUANDO SE HAN REDUCIDO A CERO TODOS LOS ELEMENTOS INTERIORES A LA DIAGONAL PRINCIPAL DE LA PRIMERA COLUMNA, SE DICE QUE SE HA COMPLETADO UN CICLO, EL CUAL ESTA COMPUESTO POR UN PASO DE NORMALIZACION (DIVISION ENTRE EL ELEMENTO a_{11}) Y POR $n - 1$ PASOS DE REDUCCION (A CERO).

SI SE DESARROLLA OTRO CICLO, PERO AHORA CONSIDERANDO AL SISTEMA DE DOS ECUACIONES REPRESENTADO POR LOS DOS ULTIMOS RENGLONES SIN ALTERAR EL PRIMER RENGLON, SE LOGRARA TRIANGULIZAR LA MATRIZ. PARA ELLO CONSIDERE QUE LOS ELEMENTOS DE LA ULTIMA MATRIZ SON LOS SIGUIENTES:

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & a'_{12} & a'_{13} & u'_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & u'_2 \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & u'_3 \end{array} \right| \quad \begin{array}{l} \text{EN DONDE } a'_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{1j}}{a_{11}} a_{i1} \\ \text{PARA } \frac{a_{1j}}{a_{11}} = a'_{1j} \\ \therefore a'_{ij} = a_{ij} - a'_{1j} a_{i1} \end{array} \quad (\text{EC. 1})$$

NORMALIZACION. SI $a'_{22} \neq 0$, DIVIDA EL RENGLON 2 ENTRE a'_{22} ; DE OTRA MANERA, INTERCAMBIE ECUACIONES Y REALICE LA DIVISION. SI a'_{32} FUESE CERO TAMBIEN, ENTONCES NO PODRIA REALIZARSE EL INTERCAMBIO Y LA MATRIZ SERIA SINGULAR.

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & a'_{12} & a'_{13} & u'_1 \\ 0 & 1 & \frac{a'_{23}}{a'_{22}} & \frac{u'_2}{a'_{22}} \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & u'_3 \end{array} \right|$$

REDUCCION. DADO QUE SOLO HAY UN RENGLON INTERIOR, SOLO HABRA UN PASO DE REDUCCION. PARA ELLO MULTIPLIQUE EL SEGUNDO RENGLON POR a'_{32} Y RESTELO AL TERCERO

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & a'_{12} & a'_{13} & u'_1 \\ 0 & 1 & \frac{a'_{23}}{a'_{22}} & \frac{u'_2}{a'_{22}} \\ 0 & 0 & a'_{33} - \frac{a'_{33}}{a'_{22}} a'_{32} & u'_3 - \frac{u'_2}{a'_{22}} a'_{32} \end{array} \right|$$

SI SE REPRESENTA POR:

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & a'_{12} & a'_{13} & u' \\ 0 & 1 & a''_{23} & u'' \\ 0 & 0 & a''_{33} & u'' \end{array} \right| \quad \begin{array}{l} \text{DONDE:} \\ a''_{ij} = a'_{ij} - a'_{2j} a'_{i2} \end{array} \quad (\text{EC. 2})$$

ESTA MATRIZ RESULTANTE PERMITE CALCULAR LOS VALORES DE LAS

INCOGNITAS SI SE RESUELVE EN FORMA ASCENDENTE.

SISTEMA DE ECUACIONES RESULTANTES:

$$x_1 + a'_{12} x_2 + a'_{13} x_3 = u'_1$$

$$x_2 + a''_{23} x_3 = u''_2$$

$$a'''_{33} x_3 = u'''_3$$

DE LA TERCERA ECUACION PUEDE EVALUARSE x_3 ; CONOCIENDO A ESTA Y LA SEGUNDA ECUACION EVALUAMOS x_2 Y FINALMENTE CONOCIENDO x_3 Y x_2 , PODREMOS EVALUAR x_1 EN LA PRIMERA ECUACION.

PARA ESTE SISTEMA DE TRES ECUACIONES SE REQUIRIERON DE DOS CICLOS. EL PRIMER CICLO CONSISTIO EN UN PASO DE NORMALIZACION Y DOS PASOS DE REDUCCION. EL SEGUNDO CICLO CONSISTIO DE UN PASO DE NORMALIZACION Y UN PASO DE REDUCCION. GENERALIZANDO A UN SISTEMA DE n ECUACIONES, REQUERIRA DE $n - 1$ CICLOS.

SI SE COMPARAN LAS ECUACIONES 1 Y 2 SE CONCLUIRA QUE LOS SUB INDICES 1 y 2 RESPECTIVOS IDENTIFICAN EL NUMERO DE CICLO, DE TAL MANERA QUE SE PUEDE OBTENER UNA FORMULA GENERALIZADA PARA EL CICLO K .

$$a'_{ij} = a_{ij} - a'_{kj} a_{ik} \quad (\text{EC. 3})$$

ALGORITMO PROPUESTO:

1º) $K = 1$ (CONTROL DEL CICLO)

- 2º) VERIFICAR SI $a_{Kj} \neq 0$ POR SI PROCEDE INTERCAMBIO DE ECUACIONES.
- 3º) $a_{Kj} = a_{Kj} / a_{KK}$ ETAPA DE NORMALIZACION ($j = N+1, 1, -1$).
- 4º) $a_{ij} = a_{ij} - a_{Kj} a_{iK}$ ETAPA DE REDUCCION DEL RENGLON i .
($j = N+1, 1, -1$ E $i = K+1, N$).
- 5º) $K = K + 1$. SI $K < N$ REGRESA AL PASO 2.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG.138).

EVALUACION ASCENDENTE.

SI TENEMOS UN SISTEMA DE ECUACIONES:

$$x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 = a_{14}$$

$$x_2 + a_{23} x_3 = a_{24}$$

$$a_{33} x_3 = a_{34}$$

EVALUAMOS:

$$x_3 = \frac{a_{34}}{a_{33}}$$

$$(x_N = \frac{a_{N,N+1}}{a_{N,N}} \text{ si generalizamos})$$

$$x_2 = a_{24} - a_{23} x_3$$

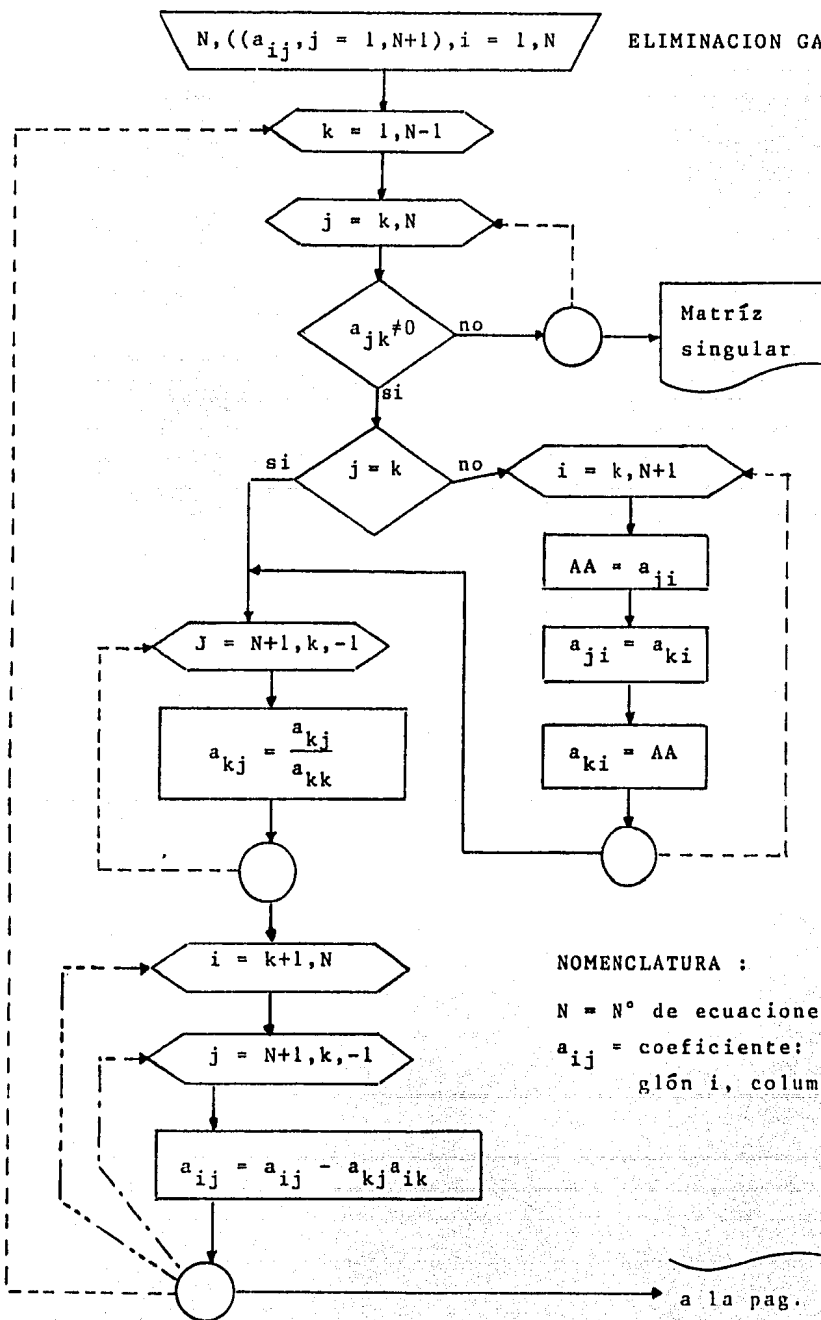
$$x_1 = a_{14} - a_{13} x_3 - a_{12} x_2$$

$$x_K = a_{K,N+1} - \sum_{j=K+1}^N a_{Kj} x_j$$

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 139).

GAUSS-JORDAN.

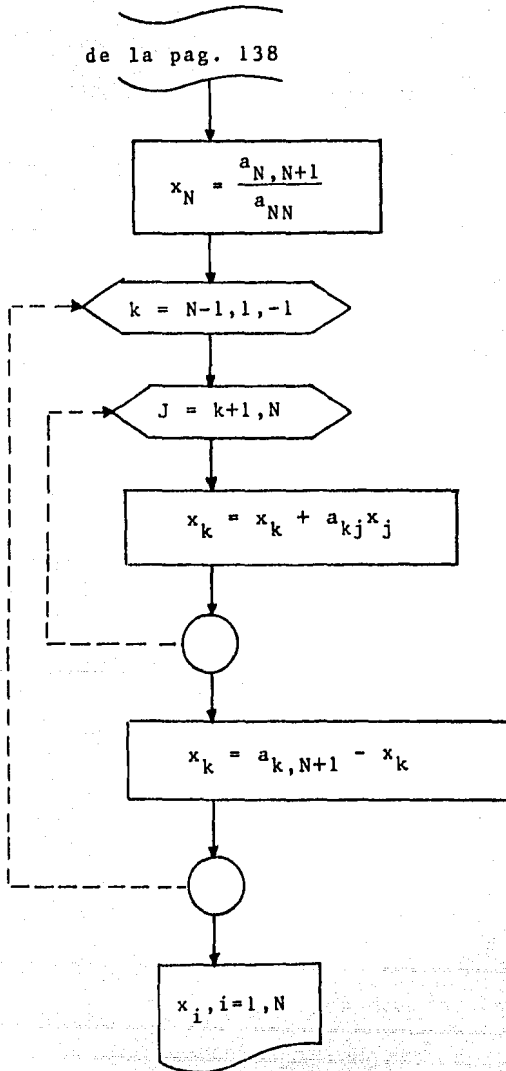
ESTE METODO TRANSFORMA LA MATRIZ DE COEFICIENTES DEL



NOMENCLATURA :

N = N° de ecuaciones

a_{ij} = coeficiente: renglón i, columna j



Esta parte del diagrama corresponde a la evaluación ascendente.

SISTEMA DE ECUACIONES A UNA MATRIZ UNITARIA MEDIANTE OPERACIONES ELEMENTALES CON RENGLONES, TAL Y COMO SE HACE EN EL METODO DE ELIMINACION GAUSSIANA, DE MANERA QUE EL ALGORITMO DE LA DIAGONALIZACION (OBTENCION DE LA MATRIZ UNITARIA) ES SIMILAR AL ALGORITMO DE TRIANGULARIZACION, CON LA VARIANTE DE QUE LOS PASOS DE REDUCCION SE APLICAN TANTO A LOS ELEMENTOS INTERIORES COMO SUPERIORES A LA DIAGONAL PRINCIPAL.

SEA LA MATRIZ AUMENTADA

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1 \ n+1} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2 \ n+1} \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{n \ n+1} \end{array} \right)$$

AL APLICAR EL PROCESO DE DIAGONALIZACION SE OBTIENE:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 0 & \cdots & a'_{1 \ n+1} \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & a'_{2 \ n+1} \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a'_{n \ n+1} \end{array} \right)$$

ESTA MATRIZ CORRESPONDE AL SIGUIENTE SISTEMA DE ECUACIONES:

$$x_1 = a'_{1 \ n+1}$$

$$x_2 = a'_{2 \ n+1}$$

$$\vdots$$

$$x_n = a'_{n \ n+1}$$

OBSERVANDOSE QUE ESTE METODO OBTIENE LA SOLUCION DEL SISTEMA DIRECTAMENTE DEL PROCESO DE DIAGONALIZACION.

EL DIAGRAMA DE FLUJO SERA EL MISMO QUE EL PROCESO DE TRIANGULARIZACION MODIFICANDOLE EL CIRCUITO DE REDUCCION.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 142).

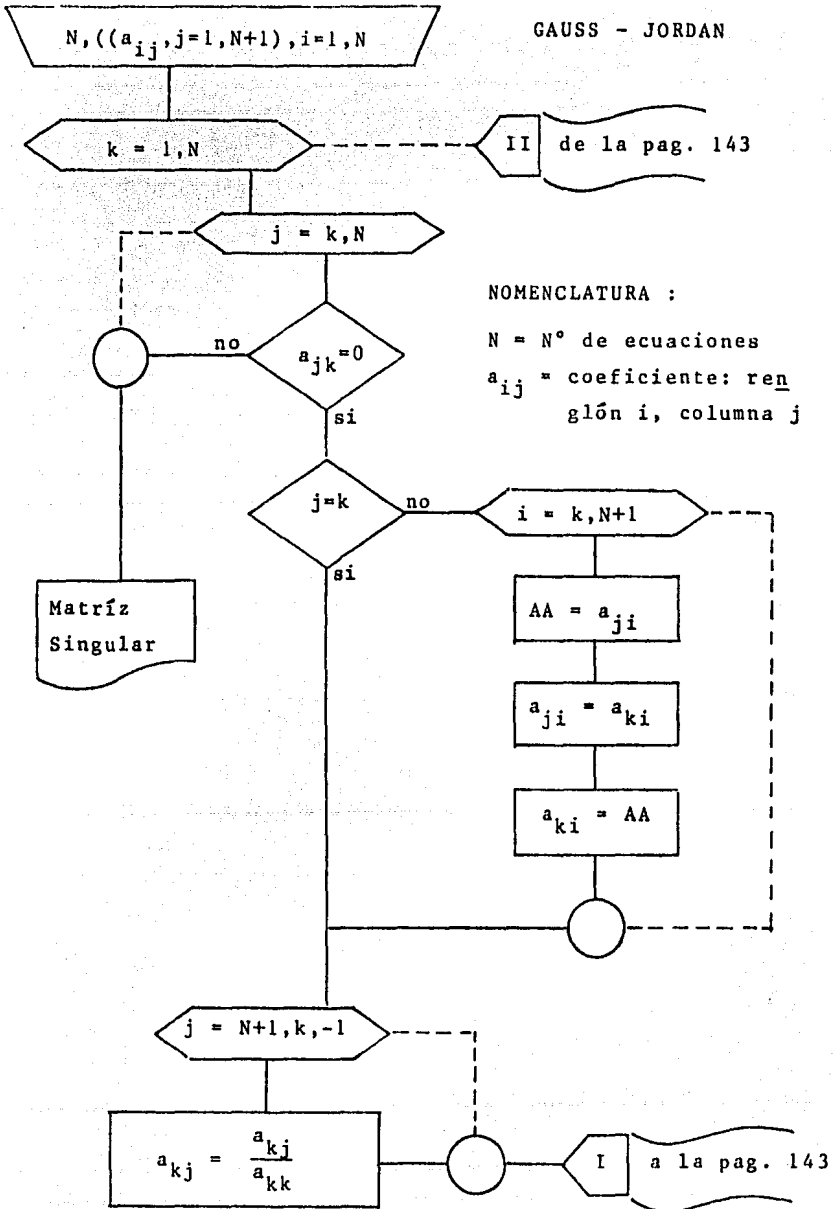
MAXIMO ELEMENTO PIVOTE .

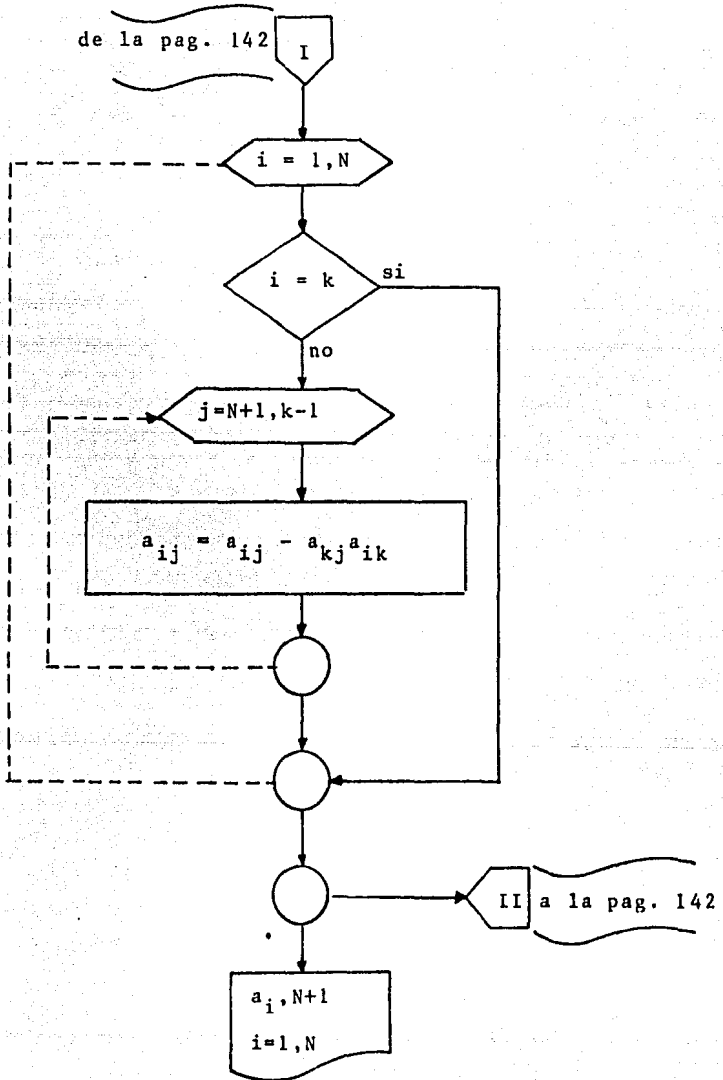
ESTE METODO TAMBIEN OBTIENE LA MATRIZ UNITARIA, DIFERENCIANDOSE DEL GAUSS - JORDAN EN LA ETAPA DE NORMALIZACION, YA QUE NO DIVIDE ENTRE EL ELEMENTO a_{kk} , SINO QUE SE HACE UNA BUSQUEDA EN TODOS LOS RENGLONES Y COLUMNAS DE LA MATRIZ DE COEFICIENTES, PARA SELECCIONAR EL ELEMENTO DE MAXIMO VALOR ABSOLUTO, Y TOMA A ESE ELEMENTO COMO DIVISOR. ESTO LO HACE CON EL OBJETO DE DISMINUIR EL ERROR DE REDONDEO, RESULTANDO MUY EFECTIVO PARA MATRICES CASI SINGULARES.

PARA OBTENER LA MATRIZ UNITARIA, IMPONE LA CONDICION DE QUE NO DEBE DE HABER MAS DE UN ELEMENTO DIVISOR (ELEMENTO PIVOTE), EN LA MISMA COLUMNA O EN EL MISMO RENGLON, DE TAL MANERA QUE PARA LA BUSQUEDA IGNORA ESTOS RENGLONES Y COLUMNAS EN LOS QUE PREVIAMENTE LOCALIZO Y UTILIZO ALGUN OTRO ELEMENTO DIVISOR.

SU ALGORITMO SERA SIMILAR AL GAUSS - JORDAN, ADICIONANDOLE EL PROCESO DE BUSQUEDA.

EN LA ACTUALIDAD, DADA LA APROXIMACION QUE SE OBTIENE CON LOS





PROCESADORES, EL GAUSS-JORDAN ES EFICIENTE PARA RESOLVER CUALQUIER SISTEMA DE ECUACIONES. POR ESTA RAZON NO PRESENTAREMOS EL DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO DEL MAXIMO ELEMENTO PIVOTE.

SI LA MATRIZ DE COEFICIENTES SE ESTA TRANSFORMANDO A LA MATRIZ UNITARIA, IMPLICA QUE TODO EL CONJUNTO DE OPERACIONES ELEMENTALES CON RENGLONES EQUIVALEN A MULTIPLICAR LA MATRIZ DE COEFICIENTES POR SU MATRIZ INVERSA, LO CUAL INDICA QUE, SI AL INICIO DEL PROCESO SE LE AGREGA A LA MATRIZ AUMENTADA LA MATRIZ UNITARIA CORRESPONDIENTE ($N \times N$), AL FINAL DEL PROCESO ESTA MATRIZ UNITARIA SE HABRA TRANSFORMADO EN LA MATRIZ INVERSA DE LA MATRIZ DE COEFICIENTES, DE TAL MANERA QUE EL DIAGRAMA DE FLUJO DE GAUSS-JORDAN PODRIA SER FACILMENTE MODIFICADO DEFINIENDO LA MATRIZ $A = A + I$ Y QUE LAS OPERACIONES POR COLUMNAS, CONTROLADAS POR $N + 1$, SE CONTROLEN POR $2N + 1$.

ALGORITMO DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL.

SI EL SISTEMA DE ECUACIONES ESTA REPRESENTADA POR LA SIGUIENTE MATRIZ AUMENTADA

$$\left| \begin{array}{ccc|c} b_1 & c_1 & & d_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & d_2 \\ & a_3 & b_3 & c_3 & d_3 \\ & & a_4 & b_4 & c_4 & d_4 \\ & & & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_n & b_n & c_{n+1} & d_n \end{array} \right|$$

SE PUEDE RESOLVER POR EL METODO DE ELIMINACION GAUSSIANA PARA OBTENER LAS SIGUIENTES FORMULAS DE RECURRENCIA:

$$\beta_1 = b_1$$

$$\gamma_1 = d_1 / \beta_1$$

$$\beta_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\beta_{i-1}} \quad i = 2, N \quad (N = \text{N}^\circ \text{ DE ECUACIONES})$$

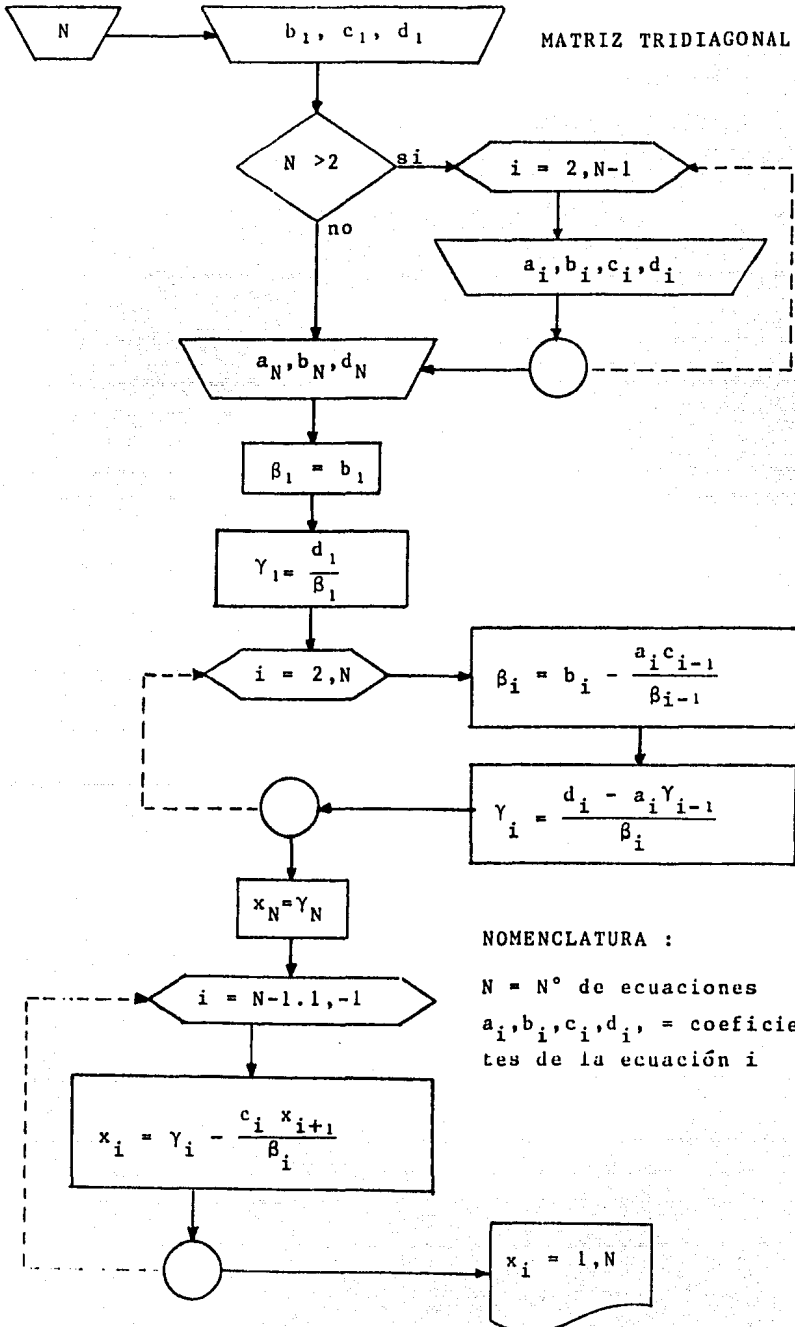
$$\gamma_i = \frac{d_i - a_i \gamma_{i-1}}{\beta_i} \quad i = 2, N$$

$$x_n = \gamma_n$$

$$x_i = \gamma_i - \frac{c_i x_{i+1}}{\beta_i} \quad i = N-1, 1$$

NOTA: ESTE TIPO DE ECUACIONES SE GENERAN, COMO SE MENCIONO ANTERIORMENTE, AL REPRESENTAR UNA ECUACION DIFERENCIAL ORDINARIA LINEAL POR DIFERENCIAS FINITAS. TAMBIEN SE OBTIENE ESTE TIPO DE ECUACIONES AL APLICAR BALANCE DE MATERIALES A OPERACIONES DE CONTACTO POR ETAPAS, EN LAS CUALES INTERACCIONEN TRES O CUATRO CORRIENTES DEL PROCESO.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 146).



NOMENCLATURA :

$N = N^\circ$ de ecuaciones
 $a_i, b_i, c_i, d_i,$ = coeficientes de la ecuación i

II.6.2 SOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES.

LOS METODOS UTILIZADOS PARA UNA SOLA ECUACION (SECCION II.3) SE PUEDEN UTILIZAR PARA RESOLVER UN SISTEMA DE ECUACIONES. POR SU RAPIDA CONVERGENCIA, HA PROLIFERADO EL USO DE DOS METODOS : EL NEWTON-RAPHSON Y EL DE LA SECANTE.

———— NEWTON - RAPHSON. PARA RESOLVER UNA ECUACION $f(x) = 0$, EL PROCEDIMIENTO ITERATIVO DE CALCULO SE GENERA POR LA EXPANSION CON EL POLINOMIO DE TAYLOR DE GRADO UNO A $f(x)$ CON LO QUE SE OBTIENE $x = x_0 - f(x_0) / f'(x_0)$ AL APLICAR LA CONDICION DE EXISTENCIA DE RAIZ x PARA $f(x)$. DE MANERA SIMILAR, PARA UN SISTEMA DE ECUACIONES

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0$$

$$\vdots$$

$$f_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0$$

DONDE LAS INCOGNITAS SON x_1, x_2, \dots, x_N , PUEDE APLICARSE EL PROCESO DE EXPANSION LINEAL EN EL POLINOMIO DE TAYLOR Y OBTENER :

$$f_1(x_1, \dots, x_N) = f_1(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{N0}) + \sum_{i=1}^N \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \right|_{x_{10}, x_{20}, \dots, x_{N0}} \Delta x_i$$

$$f_2(x_1, \dots, x_N) = f_2(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{N0}) + \sum_{i=1}^N \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_i} \right|_{x_{10}, x_{20}, \dots, x_{N0}} \Delta x_i$$

$$f_N(x_1, \dots, x_N) = f(x_{10}, x_{20}, \dots, x_{N0}) + \sum_{i=1}^N \frac{\partial f_N}{\partial x_i} \bigg|_{x_{10}, x_{20}, \dots, x_{N0}} \Delta x_i$$

SI x_1, x_2, \dots, x_N SON RAICES DE f_1, f_2, \dots, f_N , ESTAS DEBEN SER IGUALES A CERO, POR LO TANTO TENDRIAMOS :

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial f_1}{\partial x_i} \bigg|_{x_{10}, \dots, x_{N0}} \Delta x_i = -f_1(x_{10}, \dots, x_{N0})$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial f_2}{\partial x_i} \bigg|_{x_{10}, \dots, x_{N0}} \Delta x_i = -f_2(x_{10}, \dots, x_{N0})$$

⋮

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial f_N}{\partial x_i} \bigg|_{x_{10}, \dots, x_{N0}} \Delta x_i = -f_N(x_{10}, \dots, x_{N0})$$

SI SE SUPONEN VALORES DE x_{10}, \dots, x_{N0} , ENTONCES PODRAN EVALUARSE LAS Δx_i 'S. EL SISTEMA OBTENIDO, ES LINEAL DE N ECUACIONES CON N INCOGNITAS, QUE PUEDE RESOLVERSE POR EL ALGORITMO DE GAUSS - JORDAN.

UNA VEZ CALCULADAS LAS Δx_i 'S, PUEDEN CALCULARSE NUEVOS VALORES DE x_1, \dots, x_N MEDIANTE LA ECUACION :

$$x_i = x_{i0} + \Delta x_i \quad \text{PARA } i = 1, N$$

YA QUE LAS f_i SON NO LINEALES, LOS VALORES CALCULADOS DE x_i , POSIBLEMENTE NO SEAN LAS RAICES DE DICHAS FUNCIONES, POR LO QUE TALES VALORES DEBERAN CONSIDERARSE COMO NUEVAS APROXIMACIONES PARA REPETIR EL PROCESO Y CUMPLIR CON UN DETERMINADO MARGEN DE ERROR.

DESARROLLO DEL ALGORITMO

1°) SUPONGA x_{i_0} , PARA $i = 1, N$

2°) CALCULE $a_{ki} = \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \Big|_{x_{i_0}, i=1, N}$ PARA $k=1, N$ E $i=1, N$

ESTO LO HARA DERIVANDO PARCIALMENTE Y REPRESENTANDO LAS DERIVADAS OBTENIDAS, EN FUNCION DE LAS x_{i_0} 'S CORRESPONDIENTES A LAS x_i 'S QUE PERMANEZCAN DESPUES DE DERIVAR.

3°) DEFINA $a_{kN+1} = -f(k) \Big|_{x_{i_0}, i=1, N}$

4°) RESUELVA PARA LAS Δx_i CON LA MATRIZ AUMENTADA a_{ki} PARA $i = 1, N+1$ Y $k = 1, N$

UTILIZANDO EL METODO DE GAUSS - JORDAN

5°) SI $\sum_{i=1}^N |\Delta x_i| \leq 0.000.1$, ENTONCES SE IMPRIME

x_{i_0} PARA $i = 1, N$ Y FINALIZA

6°) $x_{i_0} = x_{i_0} + \Delta x_i$ PARA $i = 1, N$ Y REGRESA AL PASO 2

— METODO DE LA SECANTE. ES SIMILAR AL METODO DE NEWTON, SOLO QUE LA EXPANSION LINEAL SE HACE MEDIANTE EL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON. ESTO EQUIVALE A APROXIMAR LAS PRIMERAS DERIVADAS POR MEDIO DE PRIMERAS DIFERENCIAS, ES DECIR :

$$\frac{\partial f_k}{\partial x_i} = \frac{f_k(x_{10}, \dots, x_{i0}, \dots, x_{N0}) - f_k(x_{10}, \dots, x_{i1}, \dots, x_{N0})}{x_{i1} - x_{i0}}$$

SIENDO $x_{i1} = x_{i0} + \text{INCREMENTO DE } x$

EL INCREMENTO DE x DEBERA ESPECIFICARSE Y SELECCIONARSE MUY PEQUEÑO .

EVIDENTEMENTE, EL SISTEMA DE ECUACIONES LINEALES A RESOLVER PARA EVALUAR LAS Δx_i 'S, SERA EL MISMO DEL METODO ANTERIOR. POR LO TANTO SOLO SE MODIFICARA EL PASO 2, CALCULANDO A a_{ki} COMO :

$$a_{ki} = \frac{f_k(x_{10}, \dots, x_{i0} + \text{INCX}, \dots, x_{N0}) - f_k(x_{10}, \dots, x_{i0}, \dots, x_{N0})}{\text{INCX}}$$

DONDE INCX = INCREMENTO MUY PEQUEÑO DE X.

II.6.3 SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.

LOS METODOS DE RESOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS SE BASAN EN LOS ALGORITMOS YA PRESENTADOS EN LA SECCION II.5. SI SE DESEAN RESOLVER N ECUACIONES DE LA FORMA :

$$\frac{dy_1}{dx} = f_1(y_1, y_2, \dots, y_N, x)$$

⋮

$$\frac{dy_N}{dx} = f_N(y_1, y_2, \dots, y_N, x)$$

DONDE $x = x_0$ Y $y_i = y_{i0}$ PARA $i=1, N$

AL DEPENDER TODAS DE x , PUEDE PROPONERSE UN METODO QUE EN FORMA INDIVIDUAL CALCULE EL INCREMENTO DE y_i PARA $i=1, N$ DE LA MANERA SIGUIENTE :

$$\Delta y_1 = f_1^*(y_{10}, y_{20}, \dots, y_{N0}, x_0) \Delta x$$

$$\Delta y_2 = f_2^*(y_{10}, y_{20}, \dots, y_{N0}, x_0) \Delta x$$

⋮

$$\Delta y_N = f_N^*(y_{10}, y_{20}, \dots, y_{N0}, x_0) \Delta x$$

EN DONDE $\Delta y_1, \Delta y_2, \dots, \Delta y_N$ SON LOS INCREMENTOS DE LAS y_i 'S, CORRESPONDIENTES AL INCREMENTO DE x Y LAS $f_1^*, f_2^*, \dots, f_N^*$ SON VALORES CARACTERISTICOS DE LAS f_1, f_2, \dots, f_N . SE CONCLUYE QUE EL PROCESO DE CALCULO SERA EQUIVALENTE A LA RESOLUCION DE UNA SOLA ECUACION DIFERENCIAL, PERO APLICADO N VECES EN PARALELO, INTERCALANDO EL PROCEDIMIENTO DE TAL MANERA QUE OBTENGAMOS UNA BUENA APROXIMACION.

CON LO ANTERIOR, ESTAMOS INDICANDO QUE PODRIAN UTILIZARSE LOS METODOS DE EULER, RUNGE - KUTTA, MULTIPASOS O PREDICTORES - CORRECTORES PARA RESOLVER UN SISTEMA DE N ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.

A CONTINUACION SE PRESENTA EL ALGORITMO PARA RESOLVER N ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS, UTILIZANDO EL METODO DE RUNGE - KUTTA. ESTE PUEDE SERVIR DE EJEMPLO PARA ESTRUCTURAR CUALQUIER OTRO METODO.

LA INTEGRACION ES DE x_0 A x_f Y N ES EL NUMERO DE ECUACIONES.

- 1 : LEE $x_0, y_{10}, y_{20}, \dots, y_{N0}$
- 2 : LEE x_f
- 3 : LEE NI (N° DE INCREMENTOS)
- 4 : $H = \frac{x_f - x_0}{NI}$ (N° DE PASOS)
- 5 : $I = 1$
- 6 : $K_{j1} = f_j(x_i, y_{1i}, y_{2i}, \dots, y_{Ni})$ PARA $j = 1, N$
- 7 : $k_{j2} = f_j(x_i + \frac{1}{2} H, y_{1i} + \frac{1}{2} Hk_{11}, y_{2i} + \frac{1}{2} Hk_{21}, \dots,$
 $y_{Ni} + \frac{1}{2} Hk_{N1})$ PARA $j = 1, N$
- 8 : $k_{j3} = f_j(x_i + \frac{1}{2} H, y_{1i} + \frac{1}{2} Hk_{12}, y_{2i} + \frac{1}{2} Hk_{22}, \dots,$
 $y_{Ni} + \frac{1}{2} Hk_{N2})$ PARA $j = 1, N$
- 9 : $k_{j4} = f_j(x_i + \frac{1}{2} H, y_{1i} + \frac{1}{2} Hk_{13}, y_{2i} + \frac{1}{2} Hk_{23}, \dots,$
 $y_{Ni} + \frac{1}{2} Hk_{N3})$ PARA $j = 1, N$
- 10 : $y_{ji} = y_{ji-1} + \frac{1}{6} (k_{j1} + 2k_{j2} + 2k_{j3} + k_{j4}) H$ PARA $j = 1, N$
- 11 : $x_i = x_{i-1} + H$
- 12 : IMPRIME x_i ($y_{ji}; j=1, N$)
- 13 : $i=i+1$; SI $i < NI$ REGRESA AL PUNTO 6.
- 14 : FIN

II.7 AJUSTE DE DATOS

II.7.0 INTRODUCCION

EL OBJETIVO DE LAS TECNICAS DE AJUSTE DE DATOS ES: PARA UN CONJUNTO DE DATOS ESPECIFICOS, ESTIMAR LOS PARAMETROS (CONSTANTES) DE ALGUN MODELO MATEMATICO, TALES QUE EL MODELO REPRESENTA EN FORMA ADECUADA A DICHO CONJUNTO DE DATOS.

AL ESTUDIAR UN FENOMENO FISICO Y/O QUIMICO, CON EL OBJETO DE PODER SIMULAR EL COMPORTAMIENTO DE DICHO FENOMENO, SE FORMULAN ECUACIONES QUE PERMITAN EL CALCULO DE ALGUNA PROPIEDAD DEPENDIENTE EN FUNCION DE PROPIEDADES INDEPENDIENTES.

DEBIDO A LAS TECNICAS QUE SE UTILIZAN AL FORMULAR TALES ECUACIONES, HABRA CONSTANTES EXPLICITAS CUYOS VALORES NUMERICOS DEBEN SER CONOCIDOS, ESTE ULTIMO REQUERIMIENTO NOS CONDUCE AL CAMPO DE LAS TECNICAS DE ESTIMACION DE PARAMETROS.

SEA y LA VARIABLE (PROPIEDAD) DEPENDIENTE, SEAN x_1, x_2, \dots, x_M LAS M VARIABLES (PROPIEDADES) INDEPENDIENTES.

HABRA UNA FUNCION f TAL QUE $y = f(x_1, x_2, \dots, x_M)$ QUE MEJOR REPRESENTA A UN CONJUNTO DE N DATOS

$(y_i, x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{Mi})$ PARA $i = 1, N$.

SI y_i TIENE UN COMPORTAMIENTO DEPENDIENTE DE $x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{Mi}$. ENTONCES PODRA FORMULARSE UN MODELO MATEMATICO

BASTANTE REPRESENTATIVO DE TAL COMPORTAMIENTO.

SI NO HAY RELACION DE y_i CON RESPECTO A $x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{Mi}$ EL MODELO QUE SE FORMULE Y SE ACEPTE COMO EL MAS ADECUADO, POSIBLEMENTE DE UNA MALA REPRESENTACION DEL COMPORTAMIENTO ESPERADO.

LO ANTERIOR IMPLICA QUE DEBE TENERSE MUCHO CUIDADO AL ACEPTAR QUE UN MODELO MATEMATICO REPRESENTA EN FORMA ADECUADA A UN CONJUNTO DE DATOS. EXISTEN PARAMETROS ESTADISTICOS O FUNCIONES DE DISTRIBUCION DE PROBABILIDAD QUE NOS AUXILIAN PARA CONCLUIR QUE TAN ADECUADO ES UN MODELO. UN PARAMETRO MUY UTILIZADO ES EL COEFICIENTE DE CORRELACION LINEAL.

CUANDO SE PROPONEN VARIOS MODELOS Y SE DESEA SELECCIONAR EL MAS REPRESENTATIVO DE UN CONJUNTO DE DATOS; UN PARAMETRO MUY UTILIZADO ES LA SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS (VARIANZA), SELECCIONANDOSE EL DE MENOR SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS.

EN OCASIONES SE UTILIZA EL PORCIENTO (%) DE ERROR PUNTUAL DE FINIDO COMO:

$$\% \text{ ERROR DATO } i = \frac{y \text{ CALCULADA DATO } i - y \text{ EXPERIMENTAL DATO } i}{y \text{ EXPERIMENTAL DATO } i} * 100$$

RECOMENDABLE COMO MEDIDA DE ACEPTACION DE MODELOS CUANDO EL GRADO DEL MODELO (POTENCIA MAXIMA VARIABLE INDEPENDIENTE), Y EL NUMERO DE VARIABLES INDEPENDIENTES SON MUCHO MENOR QUE EL

NUMERO DE DATOS.

EXISTEN CUATRO PROCEDIMIENTOS UTILIZADOS MUY FRECUENTEMENTE, EN ESTIMACION DE PARAMETROS PARA LA OBTENCION DE CORRELACIONES O MODELOS MATEMATICOS EMPIRICOS (O SEMIEMPIRICOS). TALES PROCEDIMIENTOS SERAN ANALIZADOS EN LAS SECCIONES SIGUIENTES.

II.7.1 POLINOMIO DE INTERPOLACION.

ESTA TECNICA CONSISTE EN DETERMINAR LOS COEFICIENTES DEL POLINOMIO DE GRADO $N - 1$ QUE REPRESENTA EN FORMA EXACTA A LOS N DATOS (x_i, y_i) , $i = 1, N$. O BIEN PARA DETERMINAR LOS COEFICIENTES DEL MODELO LINEAL DEPENDIENTE DE $x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{N-1i}$.

NOTESE QUE ESTA TECNICA UNICAMENTE SE APLICA A LOS DOS SIGUIENTES MODELOS:

$$y_i = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_{N-1} x_i^{N-1}$$

$$y_i = a_0 + a_1 x_{1i} + a_2 x_{2i} + \dots + a_{N-1} x_{N-1i}$$

AFORTUNADAMENTE, LA GRAN MAYORIA DE MODELOS FORMULADOS EN EL ESTUDIO DE FENOMENOS FISICOS Y/O QUIMICOS, MEDIANTE MANIPULACION ALGEBRAICA, PUEDEN TRANSFORMARSE A LAS DOS ESTRUCTURAS ANTERIORES. LA TECNICA DE ESTIMACION DE PARAMETROS CONSISTE EN SUBSTITUIR CADA UNO DE LOS DATOS (x_i, y_i) EN EL MODELO LINEAL PROPUESTO. LO QUE CONDUCE A UN SISTEMA DE N ECUACIONES CON N INCOGNITAS $(a_0, a_1, \dots, a_{N-1})$.

$$y_1 = a_\phi + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \dots + a_{N-1} x_1^{N-1}$$

$$y_2 = a_\phi + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 + \dots + a_{N-1} x_2^{N-1}$$

$$\vdots$$

$$y_N = a_\phi + a_1 x_N + a_2 x_N^2 + \dots + a_{N-1} x_N^{N-1}$$

EL CUAL PUEDE SER RESUELTO POR ALGUN ALGORITMO DE SOLUCION DE SISTEMA DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES.

DE MANERA SIMILAR PARA EL OTRO MODELO SE OBTENDRA EL SIGUIENTE SISTEMA.

$$y_1 = a_\phi + a_1 x_{11} + a_2 x_{21} + \dots + a_{N-1} x_{N-1,1}$$

$$y_2 = a_\phi + a_1 x_{12} + a_2 x_{22} + \dots + a_{N-1} x_{N-1,2}$$

$$\vdots$$

$$y_N = a_\phi + a_1 x_{1N} + a_2 x_{2N} + \dots + a_{N-1} x_{N-1,N}$$

LA DESVENTAJA DE ESTE PROCEDIMIENTO ES QUE PARA MUCHOS DATOS, EL GRADO DEL POLINOMIO SERA MUY GRANDE, E INMANEJABLE.

POR OTRO LADO, ESTE PROCEDIMIENTO UNICAMENTE GARANTIZA EL QUE TODOS LOS DATOS (x_i, y_i) ESTAN REPRESENTADOS PERO NO GARANTIZA EL COMPORTAMIENTO EN PUNTOS INTERMEDIOS, Y PUEDE HABER PROBLEMAS DE OSCILACION DEL POLINOMIO.

SI EL NUMERO DE DATOS ES GRANDE, TAMBIEN, EL PROCESO DE SOLUCION DEL SISTEMA DE ECUACIONES LINEALES SERA TARDADO.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 158).

II.7.2 POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON.

CONSISTE EN EXPANDER LA FUNCION (VARIABLE DEPENDIENTE), EN UN POLINOMIO DE DIFERENCIAS FINITAS DIVIDIDAS. ESTA TECNICA DIFIERE A LA ANTERIOR EN LA ESTRUCTURA DEL POLINOMIO QUE REPRESENTA A LOS N DATOS (x_i, y_i) . DEBIDO A DICHA DIFERENCIA SE EVITA EL RESOLVER UN SISTEMA DE N ECUACIONES, CON LO CUAL, EL PROCESO DE ESTIMACION DE PARAMETROS SERA RAPIDO, PERO EL POLINOMIO TENDRA LA SIGUIENTE ESTRUCTURA:

$$y_i = a_\phi + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2) + \dots + a_{N-1}(x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_{N-1})$$

EN DONDE $a_\phi, a_1, a_2, \dots, a_{N-1}$ SON DIFERENCIAS FINITAS DIVIDIDAS EVALUADAS EN x_1 .

$a_\phi = f[x_1]$ DIFERENCIA DE ORDEN CERO

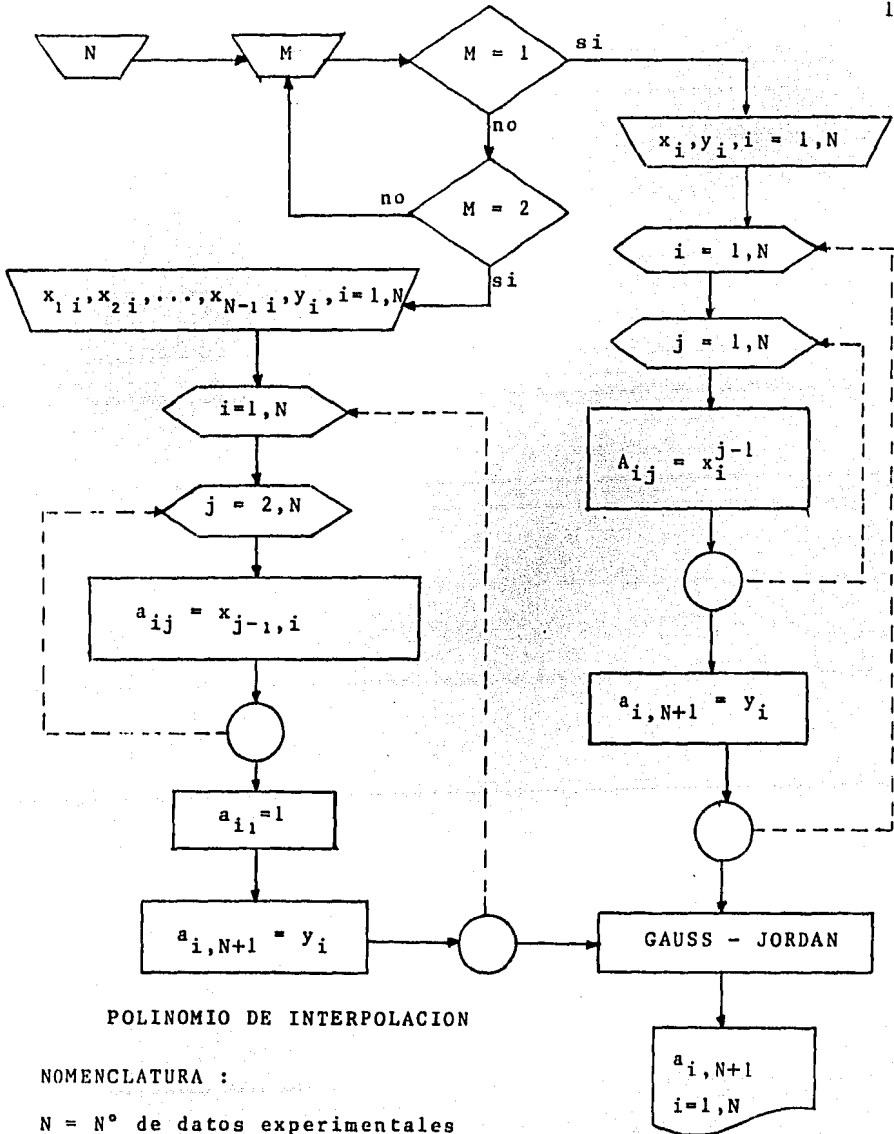
$a_1 = f[x_1, x_2]$ DIFERENCIA DE ORDEN UNO

$a_2 = f[x_1, x_2, x_3]$ DIFERENCIA DE ORDEN DOS

⋮

ETC.

DE MANERA QUE PUEDEN SER EVALUADAS A PARTIR DE LOS DATOS.



POLINOMIO DE INTERPOLACION

NOMENCLATURA :

N = N° de datos experimentales

M = tipo de modelo

para M=1 : $y_i = A_0 + A_1 x_i + A_2 x_i^2 + \dots$

para M=2 : $y_i = A_0 + A_1 x_{1i} + A_2 x_{2i} + \dots$

Después del Gauss-Jordan : $A_k = a_{k+1, N+1}$ para $k = 0, N$

PRESENTA LAS MISMAS DESVENTAJAS DE LA TECNICA ANTERIOR Y AMBAS CONDUCE AL MISMO POLINOMIO.

SI SE DESARROLLAN LOS PRODUCTOS DE LOS FACTORES

$(x - x_1)(x - x_2)$, ETC. AL AGRUPAR TERMINOS SEMEJANTES SE OBTENDRA UN POLINOMIO DE LA FORMA:

$$y_i = a_0^1 + a_1^1 x_i + a_2^1 x_i^2 + \dots + a_{N-1}^1 x_i^{N-1}$$

EQUIVALENTE AL DE LA PRIMERA TECNICA.

PARA UN MODELO MULTIVARIABLE NO SE RECOMIENDA, DEBIDO A QUE CONTENDRA MUCHOS TERMINOS; COMO CONSECUENCIA DE DERIVADAS PARCIALES INTRODUCIDAS, AL EXPANDER LA VARIABLE DEPENDIENTE EN UN POLINOMIO DE DIFERENCIAS FINITAS.

LA APLICACION DEL POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON PARA DETERMINAR ESTRUCTURAS POLINOMIALES, SE APOYA EN LA FORMULA DE RECURRENCIA PARA CALCULAR DIFERENCIAS FINITAS. LA PRIMERA DIFERENCIA FINITA DIVIDIDA EVALUADA EN x_1 SE DEFINE COMO:

$$f[x_1, x_2] = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \quad \begin{array}{l} \text{RESTA DE DOS FUNCIONES O} \\ \text{DIFERENCIAS DE ORDEN CERO.} \end{array}$$

LA SEGUNDA DIFERENCIA:

$$f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_3, x_2] - f[x_2, x_1]}{x_3 - x_1} \quad \begin{array}{l} \text{RESTA DE DOS PRIMERAS} \\ \text{DIFERENCIAS.} \end{array}$$

LA TERCERA DIFERENCIA:

$$f[x_1, x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_2, x_3, x_4] - f[x_1, x_2, x_3]}{x_4 - x_1} \quad \begin{array}{l} \text{RESTA} \\ \text{DE DOS} \end{array}$$

SEGUNDAS DIFERENCIAS.

DE ESTAS ECUACIONES SE INFIERE QUE:

SI $F(I, J)$ ES LA DIFERENCIA DE ORDEN I EVALUADA EN x_j
ENTONCES:

$$F(I, J) = \frac{F(I-1, J+1) - F(I-1, J)}{x_{j+1} - x_j} \quad (1)$$

EN DONDE LAS DIFERENCIAS DE ORDEN CERO EVALUADAS EN x_j SERAN:

$$F[\phi, J] = f(x_j)$$

OBSERVESE EN LA FORMULA DE RECURRENCIA, COMO AL CRECER EL ORDEN DE LA DIFERENCIA AUMENTA EL NUMERO DE PARES DE DATOS (x_j, y_j) QUE SE INCLUYEN EN EL CALCULO.

HABRAN $N - 1$ PRIMERAS DIFERENCIAS, $N - 2$ SEGUNDAS DIFERENCIAS, LAS CUALES SE EVALUAN CON LAS $N - 1$ PRIMERAS DIFERENCIAS ; $N - 3$ TERCERAS DIFERENCIAS, LAS CUALES SE EVALUAN A PARTIR DE LAS $N - 2$ SEGUNDAS DIFERENCIAS, Y ASI SUCESIVAMENTE HASTA UNA DIFERENCIA DE ORDEN $N - 1$, LA CUAL SERA FUNCION DE LAS $N - 1$ PRIMERAS DIFERENCIAS, $N - 2$

SEGUNDAS DIFERENCIAS, ..., HASTA DOS DIFERENCIAS DE ORDEN
N - 2.

UN POLINOMIO QUE REPRESENTA LOS N PARES (x_j, y_j) REQUERIRÁ EXPANDERSE HASTA LA DIFERENCIA DE ORDEN N - 1, EN CONSECUENCIA, EN LA FORMULA (1), I VARIARA DESDE 1 HASTA N - 1 Y J DESDE 1 HASTA N - 1.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 162).

II.7.3 MINIMOS CUADRADOS.

LA TECNICA DE MINIMOS CUADRADOS SE HA APLICADO TANTO A MODELOS LINEALES COMO A MODELOS NO LINEALES. EN LA PRESENTACION DE ESTA TECNICAS SE MENCIONARAN LAS DOS APLICACIONES.

II.7.3.1 MINIMOS CUADRADOS PARA MODELOS LINEALES.

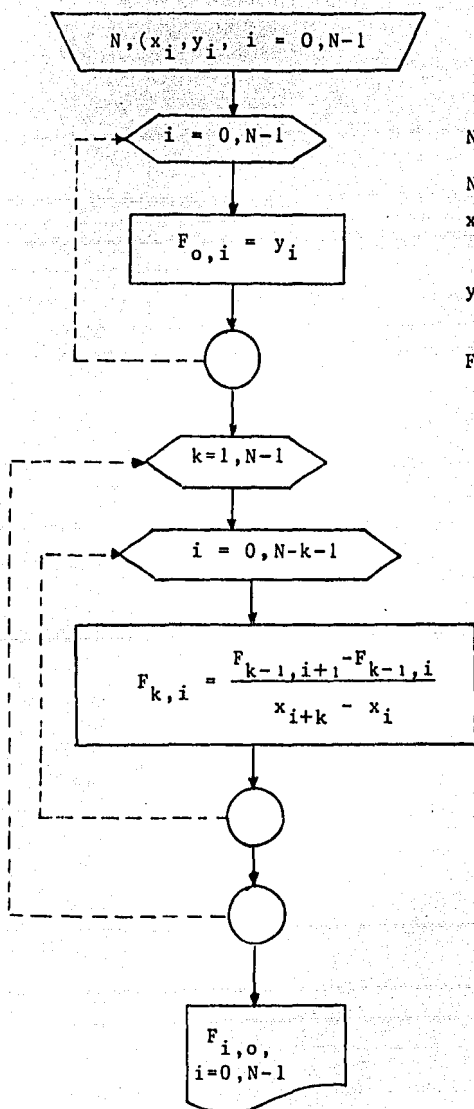
SE UTILIZA PARA LA ESTIMACION DE PARAMETROS DE MODELOS MATEMATICOS QUE SEAN EQUIVALENTES A LOS SIGUIENTES MODELOS:

$$y_i = a_\phi + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_{N-1} x_i^{N-1} \quad (2)$$

$$y_i = a_\phi + a_1 x_{1i} + a_2 x_{2i} + \dots + a_{N-1} x_{N-1,i} \quad (3)$$

SON LOS MISMOS MODELOS EN LOS QUE APLICA LA PRIMERA TECNICA. LA DIFERENCIA DE ESTA ULTIMA TECNICA CONSISTE EN QUE PARA REPRESENTAR LOS N DATOS, EL GRADO DEL POLINOMIO O EL NUMERO

POLINOMIO FUNDAMENTAL DE NEWTON



NOMENCLATURA :

N = número de datos - 1

x_i = valor i variable independiente

y_i = valor i variable dependiente

$F_{i,0} = a_i$; $i=0, N$ = coeficientes del polinomio

DE VARIABLES INDEPENDIENTES NO NECESARIAMENTE SERA IGUAL A $N - 1$, SINO QUE PUEDE SER MEMOR. ESTO LE DA UNA GRAN VERSATILIDAD A ESTA TECNICA.

MUCHAS PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS AL ESTUDIARSE FENOMENO LOGICAMENTE, QUEDAN REPRESENTADAS POR ECUACIONES QUE PUEDEN SER LINEARIZADAS Y LOS PARAMETROS SE ESTIMAN MEDIANTE MINIMOS CUADRADOS.

POR LO GENERAL SE DISPONE DE UNA GRAN CANTIDAD DE DATOS, TALES QUE DESCARTAN LA APLICACION DE LAS DOS TECNICAS ANTERIORES. ES DECIR EL MODELO LINEARIZADO DE LA PROPIEDAD NO COINCIDE CON EL MODELO APLICABLE EN LAS TECNICAS, EXCEPTUANDO LA DE MINIMOS CUADRADOS POR QUE NO TIENE RESTRICCION EN CUANTO AL GRADO DEL POLINOMIO.

FUNDAMENTOS DEL METODO DE MINIMOS CUADRADOS.

PARA DESARROLLAR UN PROCEDIMIENTO GENERAL PARA MINIMOS CUADRADOS CONSIDERE QUE EN EL MODELO:

$$y_i = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_M x_i^M$$

$M =$ GRADO DEL POLINOMIO

$$x_{1i} = x_i$$

$$x_{2i} = x_i^2$$

$$\vdots$$

$$x_{Mi} = x_i^M$$

DE MANERA QUE SE TRANSFORME EL MODELO EN

$$y_i = a_\phi + a_1 x_{1i} + a_2 x_{2i} + \dots + a_M x_{Mi}$$

PARA ANALIZAR UN MODELO UNICO, EN DONDE M SERA EL NUMERO DE VARIABLES INDEPENDIENTES.

SEA e_i EL ERROR ENTRE y_i DATO Y y_{ci} CALCULADA POR EL MODELO (y_{ci}) DEFINIDO DE LA FORMA SIGUIENTE:

$$e_i = (y_i - y_{ci})^2, \text{ PARA } i = 1, N \text{ DATOS}$$

EL ERROR TOTAL DE LOS N DATOS SERA:

$$e_T = \sum_{i=1}^N (y_i - y_{ci})^2$$

DE DONDE:

$$e_T = \sum_{i=1}^N (y_i - a_\phi - a_1 x_{1i} - a_2 x_{2i} - \dots - a_M x_{Mi})^2$$

$$e_T = \sum_{i=1}^N (y_i - a_\phi - \sum_{j=1}^M a_j x_{ji})^2$$

EL METODO DE MINIMOS CUADRADOS CALCULA VALORES DE

$a_\phi, a_1, a_2, \dots, a_M$ TALES QUE e_T SEA MINIMO PARA LA FORMA DEL MODELO SELECCIONADO Y PARA LOS N DATOS.

LO ANTERIOR IMPLICA QUE:

$$\frac{\partial e_T}{\partial a_\phi} = \phi, \quad \frac{\partial e_T}{\partial a_1} = \phi, \quad \text{Y} \quad \frac{\partial e_T}{\partial a_M} = \phi$$

ES DECIR e_T SERA MINIMO CON RESPECTO A LOS PARAMETROS SI LAS DERIVADAS RESPECTIVAS SON IGUALES A CERO. EL PROCESO DE DERIVACION CONducIRA A M+1 ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES CON M+1 INCOGNITAS $(a_\phi, a_1, \dots, a_M)$, EL CUAL PUEDE SER RESUELTO POR ALGUNO DE LOS ALGORITMOS DESCRITOS EN LA SECCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES.

DESARROLLO DEL ALGORITMO DE MINIMOS CUADRADOS.

AL DERIVAR PARCIALMENTE SE OBTIENE:

$$\frac{\partial e_T}{\partial a_\phi} = 2 \sum_{i=1}^N \left[(y_i - a_\phi - \sum_{j=1}^M a_j x_{ji}) (-1) \right] = \phi$$

$$\frac{\partial e_T}{\partial a_K} = 2 \sum_{i=1}^N \left[(y_i - a_\phi - \sum_{j=1}^M a_j x_{ji}) \left(- \sum_{j=1}^M x_{ji} \frac{\partial a_j}{\partial a_K} \right) \right] = \phi$$

PARA $K = 1, M$

$$\frac{\partial a_j}{\partial a_K} = \phi \quad \text{PARA } K \neq j$$

$$\frac{\partial a_j}{\partial a_K} = 1 \quad \text{PARA } K = j$$

POR LO TANTO:

$$\frac{\partial e_T}{\partial a_K} = 2 \sum_{i=1}^N \left[(y_i - a_\phi - \sum_{j=1}^M a_j x_{ji}) (-x_{Ki}) \right] = \phi \quad \text{PARA } K = 1, M$$

O BIEN:

$$\sum_{j=1}^M a_j \sum_{i=1}^N x_{ji} x_{ki} + a_{\phi} \sum_{i=1}^N x_{ki} = \sum_{i=1}^N y_i x_{ki}$$

PARA $K = 1, M$ ECUACIONES

Y DE LA ECUACION PARA $\frac{\partial e_T}{\partial a_{\phi}}$, SE GENERA LA ECUACION $M+1$:

$$\sum_{j=1}^M a_j \sum_{i=1}^N x_{ji} + N a_{\phi} = \sum_{i=1}^N y_i$$

EL ESTRUCTURARLO DE ESTA MANERA INTRODUCE MAYOR VERSATILIDAD AL METODO. ES DECIR SI $a_{\phi} = \phi$ EL NUMERO DE ECUACIONES A RESOLVER SERA M , SI $a_{\phi} \neq \phi$ EL NUMERO DE ECUACIONES A RESOLVER SERA $M + 1$; ESTO IMPLICA QUE MEDIANTE LA SOLUCION DE ESTE SISTEMA DE ECUACIONES, SE TENDRA LA POSIBILIDAD DE PROCESAR LOS DOS MODELOS SIGUIENTES:

$$y = a_{\phi} + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_M x_M$$

CON ORDENADA AL ORIGEN $\neq \phi$

$$y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_M x_M$$

CON ORDENADA AL ORIGEN $= \phi$

ESTE ULTIMO ES MUY UTIL EN EL TRATAMIENTO DE LAS PROPIEDADES TERMODINAMICAS.

LOS COEFICIENTES DE LA ECUACION K PARA CADA INCOGNITA a_j SON:

$$A(K, j) = \sum_{i=1}^N x_{ji} x_{Ki}, \quad K = 1, M; \quad j = 1, M \quad (4)$$

Y ULTIMO COEFICIENTE PARA LA INCOGNITA a_ϕ ES:

$$A(K, M+1) = \sum_{i=1}^N x_{Ki} \quad (5)$$

LA PARTE NO HOMOGENEA DEL SISTEMA DE ECUACIONES SERA:

$$A(K, M+2) = \sum_{i=1}^N y_i x_{Ki} \quad \text{PARA } K = 1, M \quad (6)$$

COEFICIENTES DE LA ULTIMA ECUACION $M+1$:

$$A(M+1, j) = \sum_{i=1}^N x_{ji} \quad (7)$$

$$A(M+1, M+1) = N \quad (8)$$

$$A(M+1, M+2) = \sum_{i=1}^N y_i \quad (9)$$

SI NO EXISTE LA EC. $M+1$, ENTONCES LA EC. 6 SE SUSTITUYE POR :

$$A(K, M+1) = \sum_{i=1}^N y_i x_{Ki} \quad \text{PARA } K = 1, N$$

NO EXISTIENDO LAS ECUACIONES 7, 8 Y 9

OPCIONES QUE PUEDE PROCESAR ESTE ALGORITMO.

- 1.- $y =$ FUNCION UNIVARIABLE DE GRADO M . UNA VARIABLE INDEPENDIENTE.
- 2.- $y =$ FUNCION MULTIVARIABLE. M VARIABLES INDEPENDIENTES.
- 3.- MODELO CON ORDENADA AL ORIGEN $\neq \phi$.
- 4.- MODELO CON ORDENADA AL ORIGEN $= \phi$.

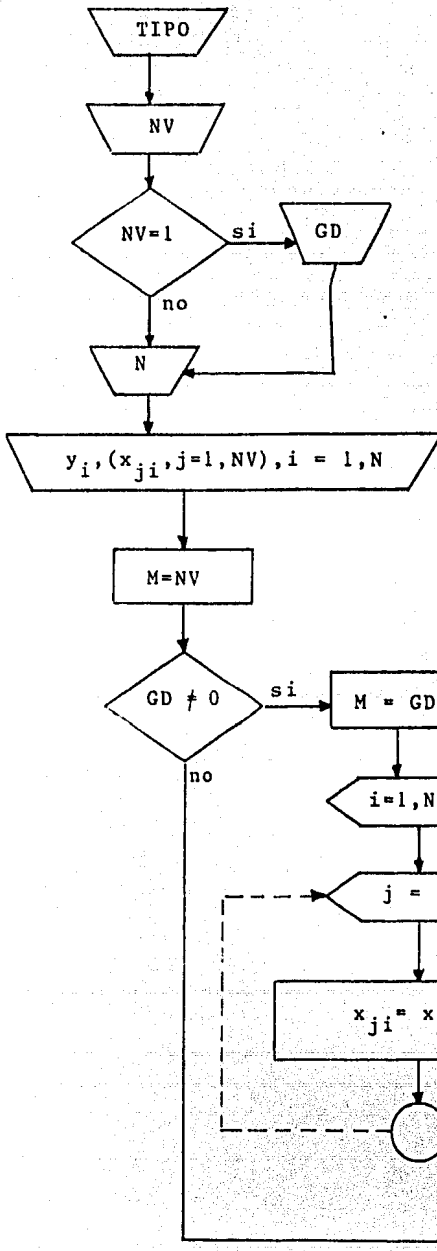
DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 169).

II.7.3.2 MINIMOS CUADRADOS NO LINEALES.

LOS FUNDAMENTOS SON LOS MISMOS QUE PARA EL CASO DE MODELOS LINEALES, DIFERENCIANDOSE EN QUE AL GENERAR EL SISTEMA DE ECUACIONES POR EL PROCESO DE DERIVACION PARCIAL DEL ERROR TOTAL, LAS ECUACIONES OBTENIDAS SERAN NO LINEALES Y CARACTERISTICAS DEL MODELO ORIGINAL, ES DECIR, NO SERAN GENERALES PARA CUALQUIER MODELO.

SE PUEDE DESARROLLAR UN ALGORITMO GENERAL UTILIZANDO DERIVADAS NUMERICAS EN LUGAR DE DERIVADAS ANALITICAS, PERO DADA LA COMPLEJIDAD DE MODELOS, TAMPOCO SERA APLICABLE A CUALQUIER CASO POR PROBLEMAS DE CONVERGENCIA.

SE HAN DESARROLLADO ALGUNAS TECNICAS (MARQUARDT, POWELL, ETC.), QUE NO SERAN PRESENTADAS EN ESTA SECCION CUYO OBJETIVO HA SIDO RESOLVER EL PROBLEMA DE CONVERGENCIA, PERO NO SE HA LOGRADO GENERALIZAR PARA CUALQUIER MODELO NO LINEAL.



NOMENCLATURA :

TIPO = 0 modelo sin orde-
nada al origen

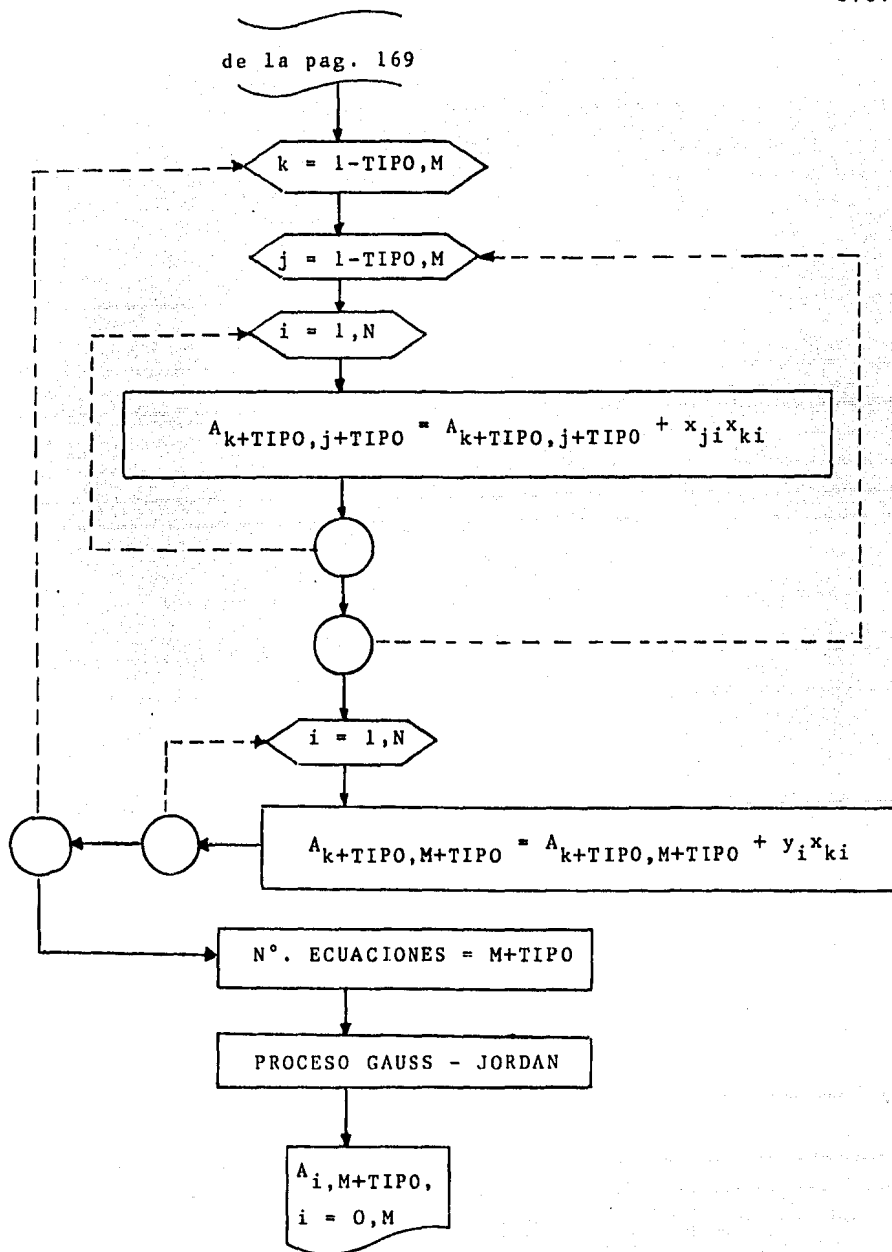
TIPO = 1 modelo con orde-
nada al origen

NV = número de variables
independientes (x's)
GD = grado del polinomio
para una sola varia-
ble x

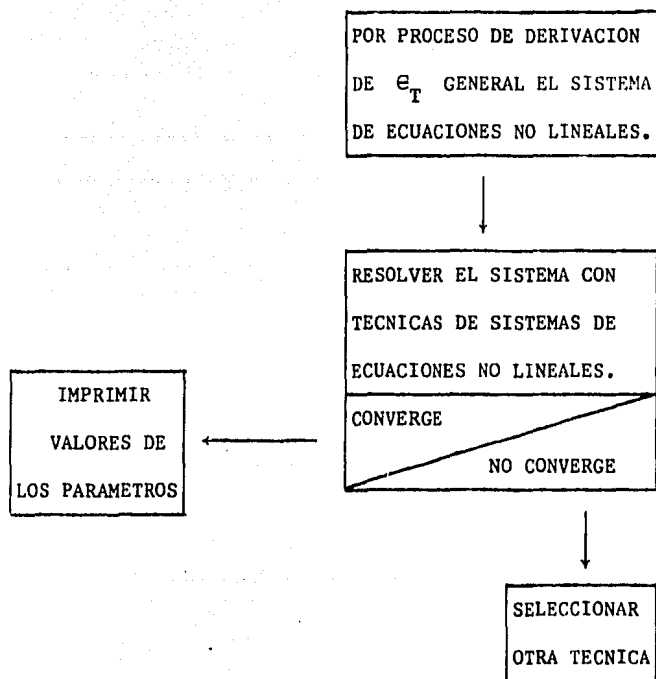
N = número de datos

y_i = valor i de y

x_{ji} = valor i de x_j



A CONTINUACION SE PRESENTA UN DIAGRAMA DE BLOQUES PARA ESTE METODO.



LO RECOMENDABLE PARA MODELOS NO LINEALES ES LINEALIZAR EL MODELO MEDIANTE TRANSFORMACIONES ALGEBRAICAS Y APLICAR EL METODO DE MINIMOS CUADRADOS LINEALES.

II.7.4. MINIMOS CUADRADOS PARA MODELOS MATEMATICOS REPRESENTADOS POR POLINOMIOS ORTOGONALES.

SI AL APLICAR LOS METODOS DE AJUSTE DE DATOS, SE HACE CON EL OBJETO DE ENCONTRAR LOS PARAMETROS DE CIERTO MODELO PROPUESTO, LA TECNICA DE POLINOMIOS ORTOGONALES NO FUNCIONARA. SI NO EXISTE ESTA RESTRICCIÓN (ESTRUCTURA DEL MODELO), ENTONCES PODREMOS APLICAR EL METODO DE POLINOMIOS ORTOGONALES.

$$\text{SEA : } P(x) = D_0 P_0(x) + D_1 P_1(x) + \dots + D_k P_k(x)$$

EN DONDE P_i , $i = 0, k$, SON POLINOMIOS ORTOGONALES:

D_i , $i = 0, k$, LOS COEFICIENTES DE COMBINACION Y

$P(x)$ EL POLINOMIO DE GRADO k CORRESPONDIENTE.

EL PROBLEMA DE MINIMOS CUADRADOS SERA :

$$\text{ERROR TOTAL} = \sum_{i=1}^N (y_i - P(x_i))^2$$

Y DE MANERA GENERAL SERA :

$$\text{ERROR TOTAL} = \sum_{i=1}^N (y_i - P(x_i))^2 * w(x_i)$$

EN DONDE $w(x_i)$ SERA UNA FUNCION PESO ARBITRARIA PARA TENER MAS GRADOS DE LIBERTAD AL SELECCIONAR LOS POLINOMIOS ORTOGONALES.

ESTA DEFINICION DE ERROR CORRESPONDE A LA DEFINICION DEL PRODUCTO ESCALAR $\langle y - P(x), y - P(x) \rangle$.

SI SE SUSTITUYE $P(x)$ POR SUS POLINOMIOS ORTOGONALES, SE OBTIENE :

$$\begin{aligned} \text{ERROR TOTAL} &= \sum_{i=1}^N (y_i - D_0 P_0(x_i) - D_1 P_1(x_i) \dots) * W(x_i) \\ &= \sum_{i=1}^N \left(y_i - \sum_{j=0}^k D_j P_j(x_i) \right)^2 * W(x_i) \dots (A) \end{aligned}$$

k = GRADO DEL POLINOMIO $P(x)$.

$$\begin{aligned} \langle y - P(x), y - P(x) \rangle &= \sum_{i=1}^N \left(y_i - \sum_{j=0}^k D_j P_j(x_i) \right)^2 * W(x_i) \\ &= \langle y - D_0 P_0(x) - D_1 P_1(x) - \dots - D_k P_k(x), f(x) - \\ &\quad D_0 P_0(x) - D_1 P_1(x) - \dots - D_k P_k(x) \rangle \end{aligned}$$

D_0, D_1, \dots SERAN SELECCIONADAS TALES QUE

$$\frac{\partial \text{ERROR TOTAL}}{\partial d_L} = 0 \quad \text{PARA } L = 0, \dots, k$$

SI SE APLICA A LA ECUACION (A) SE OBTIENE :

$$\frac{\partial \text{ERROR TOTAL}}{\partial d_L} = 0 = \sum_{i=1}^N 2 \left[y_i - \sum_{j=0}^k D_j P_j(x_i) \right] * (-P_j(x_i)) * W(x_i) * \frac{\partial D_j}{\partial d_L}$$

$$\text{SI } L \neq j \quad \frac{\partial D_j}{\partial d_L} = 0$$

$$\text{SI } L = j \quad \frac{\partial D_j}{\partial d_L} = 1$$

$$0 = \sum_{i=1}^N \left[y_i - \sum_{j=0}^k D_j P_j(x_i) \right] * P_L(x_i) * W(x_i)$$

$$0 = \sum_{i=1}^N y_i * P_L(x_i) * W(x_i) - \sum_{j=0}^k D_j \sum_{i=1}^N P_j(x_i) P_L(x_i) * W(x_i)$$

$$\sum_{i=1}^N D_j P_j(x_i) P_L(x_i) = \langle P_j(x), P_L(x) \rangle$$

PARA $j \neq L$, DADO QUE P_j Y P_L SON ORTOGONALES

ENTONCES : $\langle P_j(x), P_L(x) \rangle = 0$

POR LO TANTO :

$$0 = \sum_{i=1}^N y_i * P_L(x_i) * W(x_i) - d_L \sum_{i=1}^N [P_L^2(x_i) * W(x_i)]$$

$$d_L = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i * P_L(x_i) * W(x_i))}{\sum_{i=1}^N [P_L^2(x_i) * W(x_i)]}$$

$$d_L = \frac{\langle y, P_L \rangle}{\langle P_L, P_L \rangle} : L = 0, k$$

$W(x)$ POR LO GENERAL SE SELECCIONA = 1 .

SI SE SELECCIONAN CIERTOS POLINOMIOS ORTOGONALES, PODRAN EVALUAR SE TODAS LAS d_L Y EL MODELO QUEDARA DEFINIDO.

$$y = D_0 P_0(x) + D_1 P_1(x) + \dots$$

SE PUEDEN UTILIZAR POLINOMIOS ORTOGONALES YA CONOCIDOS O BIEN ME DIANTE UN PROCESO DE ORTOGONALIZACION, GENERAR LOS POLINOMIOS ORTOGONALES $P_L(x)$, $L = 1, k$, A PARTIR DE $P_0(x)$ ESPECIFICADA.

FORSYTH, HA DEMOSTRADO QUE UN CONJUNTO DE POLINOMIOS ORTOGONALES, SE PUEDE GENERAR A PARTIR DE LAS SIGUIENTES FORMULAS DE RECURRENCIA :

$$P_{-1}(x) = 0$$

$$P_0(x) = 1$$

$$Y_k = \sum_{i=1}^N x_i P_{k-1}^2(x_i)$$

$$\delta_k = \frac{\sum_{i=1}^N x_i P_{k-1}(x_i) P_{k-2}(x_i)}{\sum_{i=1}^N P_{k-2}^2(x_i)}$$

$$P_k(x) = (x - Y_k) P_{k-1}(x) - \delta_k P_{k-2}(x) \dots \dots (B)$$

DONDE EL POLINOMIO P_k TIENE LA PROPIEDAD DE ORTOGONALIDAD DEFINIDA PARA $W(x) = 1$

$$\langle P_k, P_L \rangle = \sum_{i=1}^N P_{ik} P_{iL} = 0$$

PARA ESTOS POLINOMIOS ORTOGONALES, SE TENDRA :

$$d_L = \frac{\langle y, P_L \rangle}{\langle P_L, P_L \rangle} = \frac{\sum_{i=1}^N P_L(x_i) y_i}{\sum_{i=1}^N P_L^2(x_i)}$$

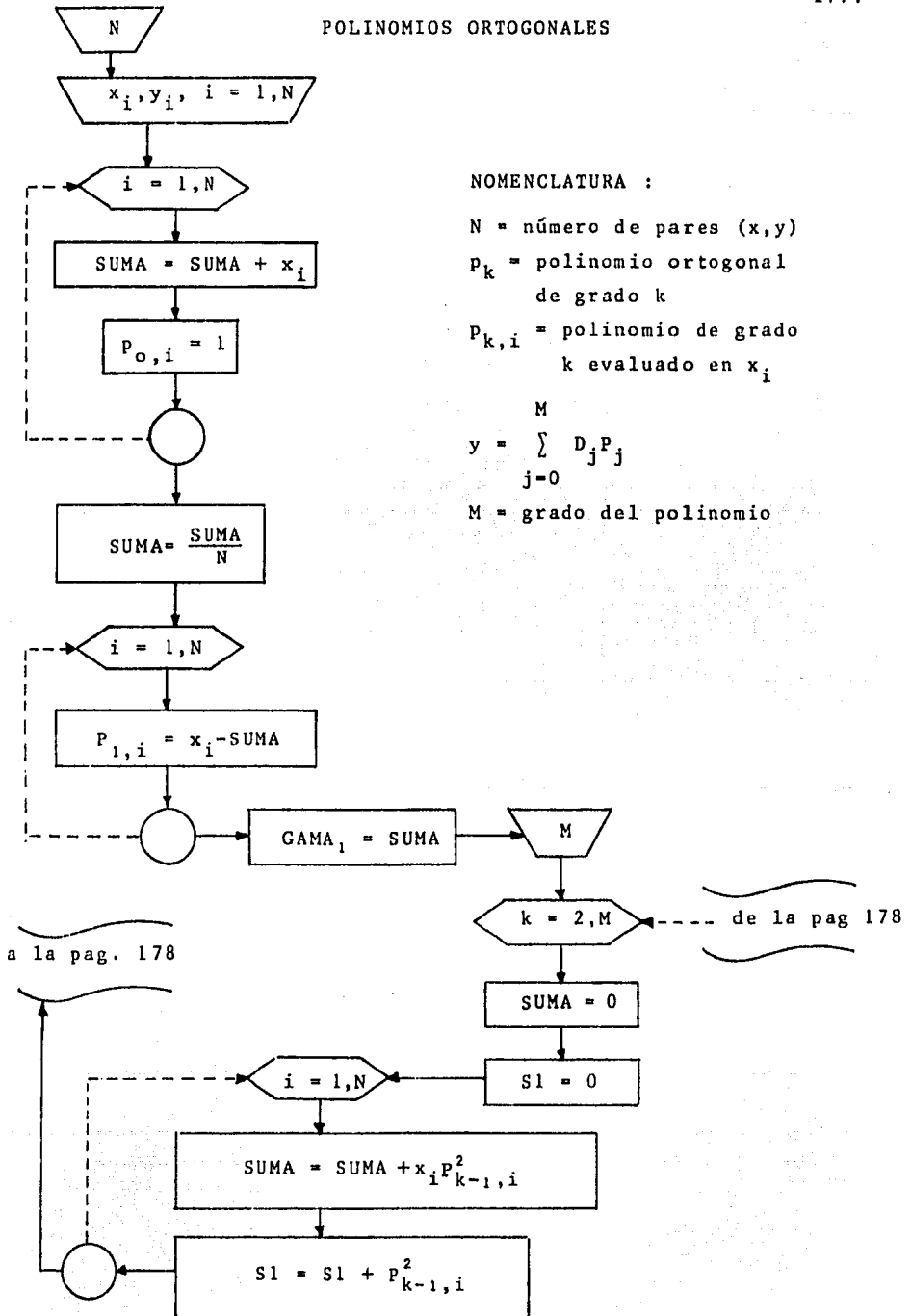
OBSERVE DE LA ECUACION (B) COMO LOS POLINOMIOS $P_k(x)$ SE VAN COMPLICANDO AL AUMENTAR EL GRADO k . POR ESTE MOTIVO ESTE METODO HA SIDO DESPLAZADO POR EL METODO MOSTRADO EN LA SECCION ANTERIOR.

UNA VEZ CALCULADAS LAS d_L , $L = 0, M$ DEBERAN ESTRUCTURARSE LOS POLINOMIOS P_k DE ACUERDO CON LA ECUACION (B) Y FINALMENTE OBTENER EL POLINOMIO DE AJUSTE MEDIANTE :

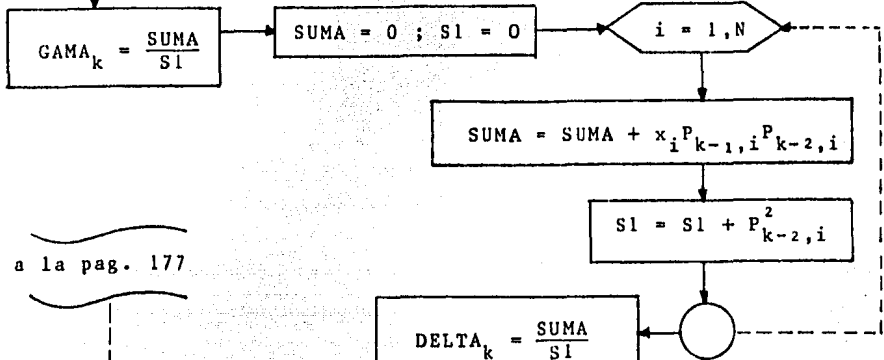
$$\text{POLINOMIO DE AJUSTE} = D_0 P_0 + D_1 P_1 + \dots + D_M P_M$$

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG.177)

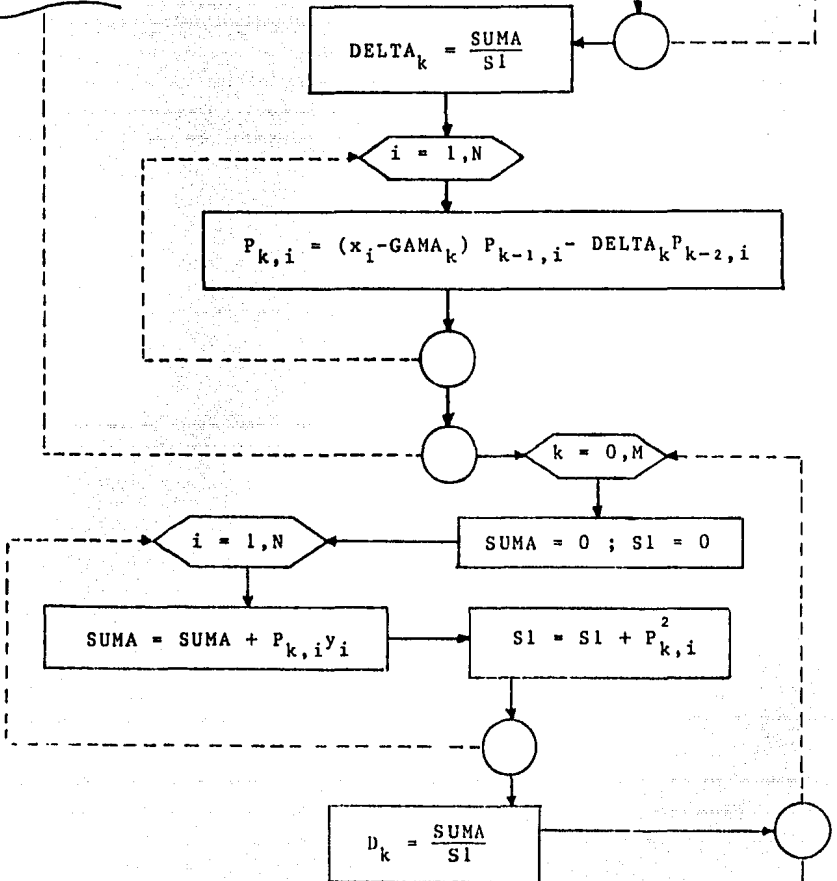
POLINOMIOS ORTOGONALES



de la pag. 177

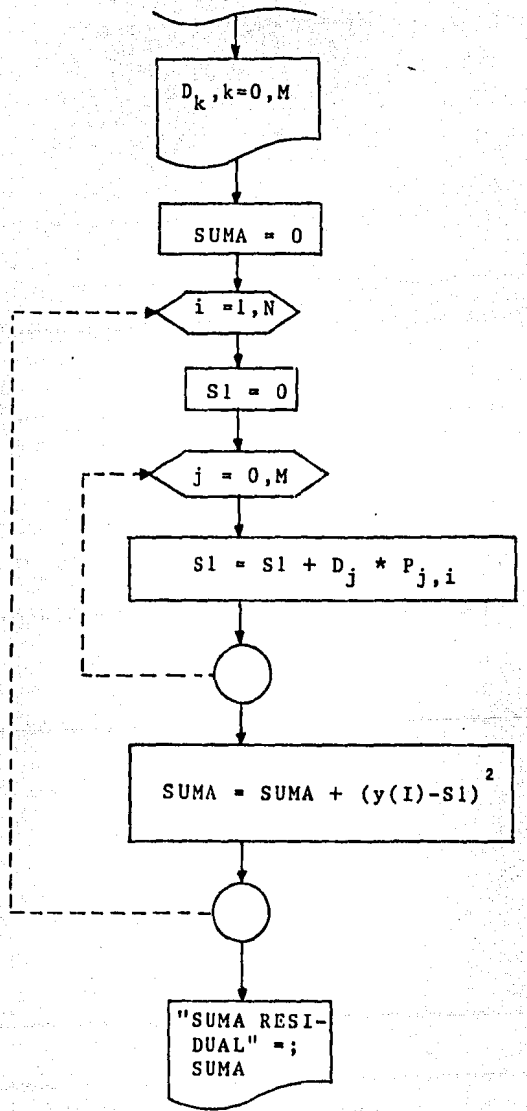


a la pag. 177



a la pag. 179.

de la pag. 178

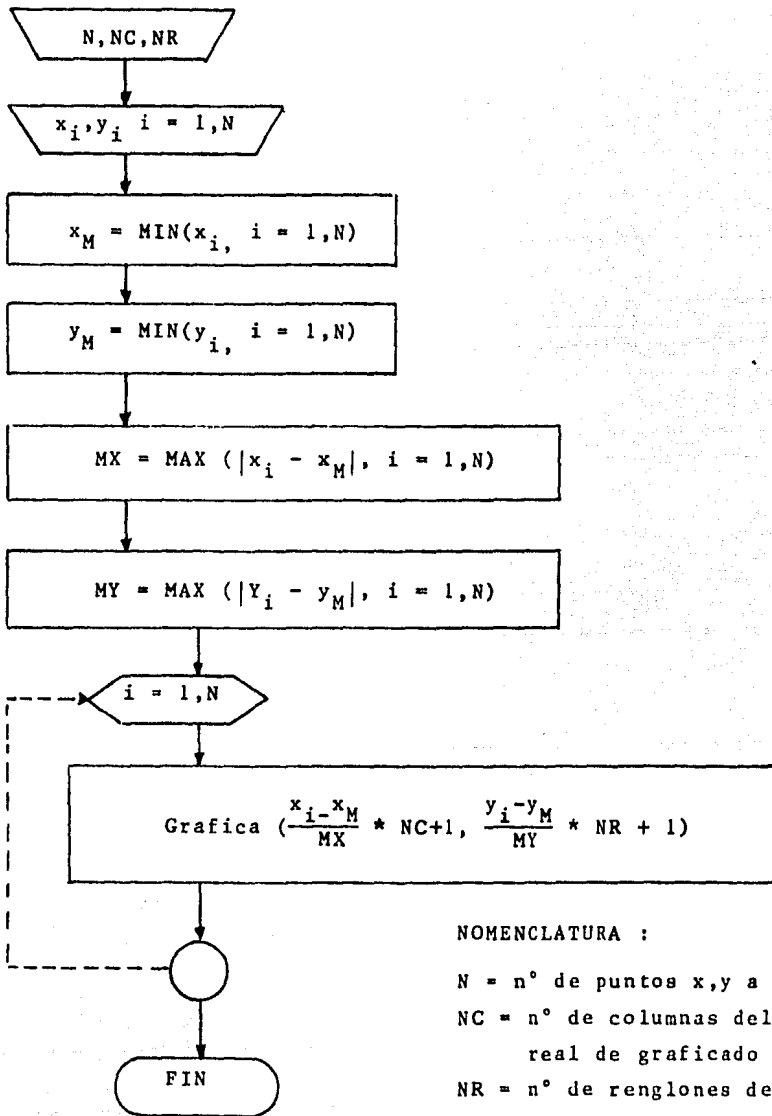


II.8 TECNICA DE GRAFICACION.

LA LIMITANTE FUNDAMENTAL EN LA CONSTRUCCION DE UNA GRAFICA ES LA DISPONIBILIDAD DEL NUMERO DE COLUMNAS Y RENGLONES QUE DEFINEN EL PLANO DE GRAFICACION (PAPEL DE IMPRESORA O PANTALLA DE VIDEO).

TODAS LAS TECNICAS DE GRAFICADO CONSISTEN BASICAMENTE EN ETAPAS DE ESCALAMIENTO Y TRANSLACION DE EJES, QUE TIENEN POR OBJETO ADAPTARSE AL PLANO REAL DE GRAFICADO.

DIAGRAMA DE FLUJO (VER PAG. 181).



NOMENCLATURA :

N = n° de puntos x, y a graficar
 NC = n° de columnas del plano
 real de graficado (pantalla)

NR = n° de renglones del plano
 real de graficado

x_i = valor i de x

y_i = valor i de y

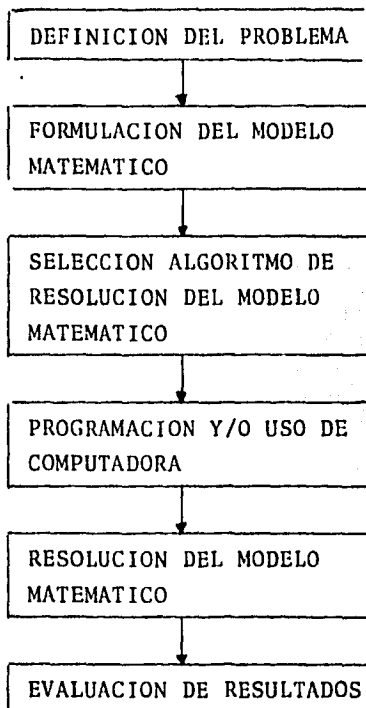
CAPITULO III RESOLUCION DE PROBLEMAS DE INGENIERIA QUIMICA.

III.0 GENERALIDADES

UNA DE LAS CARACTERISTICAS FUNDAMENTALES DE LA INGENIERIA QUIMICA ES LA NECESIDAD FRECUENTE DE RESOLVER MODELOS MATEMATICOS POR LO GENERAL BASTANTE COMPLEJOS, LOS CUALES PARA RESOLVERLOS SIN EL USO DE UNA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL, DEBERAN SER SIMPLIFICADOS MEDIANTE PROCEDIMIENTOS ALGEBRAICOS DE LINEARIZACION, O BIEN RESOLVER EL MODELO MEDIANTE TECNICAS DE PRUEBA Y ERROR LOS CUALES, AL NO DISPONER DE UNA COMPUTADORA, REQUIEREN DE UN GRAN ESFUERZO DE CALCULO.

EL OBJETIVO DE ESTA SECCION SERA APLICAR LAS TECNICAS NUMERICAS MENCIONADAS EN EL CAPITULO ANTERIOR PARA LA RESOLUCION DE PROBLEMAS DE INGENIERIA QUIMICA, Y DE ESTA MANERA DAR UNA VISION DE COMO UNA COMPUTADORA Y LAS TECNICAS NUMERICAS, ESPECIFICAN ALTERNATIVAS DE SOLUCION DE PROBLEMAS, LAS CUALES AHORRARAN TIEMPO Y ESFUERZO AL INGENIERO QUIMICO.

DENTRO DEL CONTEXTO GENERAL DE ANALISIS, DESARROLLO Y DISEÑO DE PROCESOS, EN LOS CUALES LA MATERIA SE TRANSFORMA QUIMICA Y/O FISICAMENTE, SE PUEDE PRESENTAR EL SIGUIENTE DIAGRAMA DE BLOQUES:



PARA LA DEFINICION DEL PROBLEMA DEBERAN TENERSE CONOCIMIENTOS SOBRE LAS DIFERENTES OPERACIONES Y PROCESOS UNITARIOS, PARA PODER IDENTIFICAR QUE FENOMENOS OCURREN DENTRO DEL PROCESO Y DE ESTA MANERA REGIRSE POR LAS LEYES DE LA NATURALEZA CARACTERISTICAS DE TALES FENOMENOS. LEYES FORMULADAS EN DIFERENTES RAMAS DE LA FISICA Y LA QUIMICA, TALES COMO : LA TERMODINAMICA, FENOMENOS DE TRANSPORTE, ETC.

PARA LA FORMULACION DEL MODELO ES NECESARIO TENER CONOCIMIENTO ACERCA DE ANALISIS DIMENSIONAL Y DE BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA.

EN ANALISIS DIMENSIONAL SE APLICAN LOS TEOREMAS DE BUCKINGHAM Y RAYLEIGH, LOS CUALES ESTABLECEN QUE UN FENOMENO FISICO PUE DE REPRESENTARSE POR LAS VARIABLES FISICAS RELEVANTES AISLADAS O COMBINADAS DE TAL MANERA QUE LA ECUACION DEL MODELO SEA DIMENSIONALMENTE HOMOGENEA.

LOS BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA APOYANDOSE EN LAS LEYES DE CONSERVACION DE LA MASA Y LA ENERGIA CUANTIFICAN LA CANTIDAD DE MATERIA Y ENERGIA QUE SE ESTE PROCESANDO. DICHS BALANCES ESTAN REPRESENTADOS POR LA SIGUIENTE EXPRESION :

$$\text{ENTRADA} + \text{GENERACION} = \text{SALIDA} + \text{ACUMULACION}$$

EL TERMINO ENTRADA CORRESPONDE A LA CANTIDAD DE MATERIA O ENERGIA QUE ESTE ENTRANDO AL SISTEMA DE ANALISIS.

EL TERMINO DE SALIDA CORRESPONDE A LA CANTIDAD DE MATERIA O ENERGIA QUE ESTE SALIENDO DEL SISTEMA DE ANALISIS

EL TERMINO ACUMULACION CORRESPONDERA A LA RAPIDEZ CON QUE CAMBIA LA MASA O LA ENERGIA DENTRO DEL SISTEMA DE ANALISIS (SI LOS BALANCES NO SE HACEN POR UNIDAD DE TIEMPO LA ACUMULACION SERA LA DIFERENCIA DE MASA O DE ENERGIA CON RESPECTO A DOS ESTADOS DIFERENTES O A DOS TIEMPOS DIFERENTES).

LA GENERACION CORRESPONDE A LA MASA O A LA ENERGIA QUE SE LIBERE O SE CONSUMA DENTRO DEL SISTEMA (APLICABLE A CASOS DE SISTEMAS CON REACCION QUIMICA O CASOS DE MEZCLADO) .

SISTEMA : PARTE DEL UNIVERSO QUE SE ENCUENTRA BAJO OBSERVACION Y/O EXPERIMENTACION.

COMO EJEMPLOS DE APLICACION, SE RESOLVERAN PROBLEMAS CORRESPONDIENTES A LOS SIGUIENTES TEMAS :

- 1) PROPIEDADES TERMODINAMICAS Y DE TRANSPORTE
- 2) BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA
- 3) TRANSFERENCIA DE CALOR
- 4) FLUJO DE FLUIDOS

EN LOS CASOS QUE ASI SE REQUIERA, SE FORMULARA EL MODELO CORRESPONDIENTE MEDIANTE BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA, DEPENDIENDO DEL CASO.

UN MISMO PROBLEMA SERA RESUELTO CON LAS DIVERSAS TECNICAS APLICABLES PARA EL CASO, CON EL OBJETO DE COMPARARLAS Y HACER RECOMENDACIONES EN LOS CASOS EN QUE SEA NECESARIO.

III.1 PROBLEMAS

PARA FACILITAR EL ORDEN Y ACCESO, LOS ENCABEZADOS DE LOS PROBLEMAS APARECERAN AL TOPE DE LA PAGINA.

1) FORMULE UNA ECUACION EMPIRICA PARA CALCULAR LA CAPACIDAD CALORIFICA DEL ALCOHOL ETILICO EN FUNCION DE LA TEMPERATURA, UTILIZANDO LOS SIGUIENTES DATOS :

T °C	Cp $\frac{\text{cal}}{\text{g}^\circ\text{C}}$
0	0.505
10	.537
20	.570
30	.607
40	.642
50	.675
60	.705
70	.737
80	.77
90	.808
100	.840

UTILIZAMOS LA TECNICA DE MINIMOS CUADRADOS PARA MODELOS ORTOGONALES.

PARA LOS 11 DATOS Y UN POLINOMIO DE SEGUNDO GRADO OBTENEMOS :

FORMA DEL MODELO :

$$Y = D_0 P_0 + D_1 P_1 + D_2 P_2$$

DONDE : $D_1 = 0.6723$

$$D_2 = 3.3472E-3$$

$$D_0 = -3.7296E-7$$

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = (X - 50)$$

$$P_2 = (X - 50) * P_1 - 1000 * P_0$$

SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS = $4.077E-5$

% ERROR MAXIMO = 0.4

2) DESARROLLE UNA EXPRESION ANALITICA PARA LA PRESION DE VA
POR DEL IODURO DE METILO A PARTIR DE LOS SIGUIENTES DATOS :

T °C	P _{vap} mmHg
-55	5
-45.8	10
-35.6	20
-24.2	40
-16.9	60
-7.0	100
8.0	200
25.3	400
42.4	760

UTILIZAMOS LA TECNICA DE MINIMOS CUADRADOS
PARA MODELOS ORTOGONALES. PARA LOS 9 PA-
RES DE DATOS Y UN POLINOMIO DE GRADO 6 :

$$Y = D_0P_0 + D_1P_1 + D_2P_2 + D_3P_3 + D_4P_4 + D_5P_5 + D_6P_6$$

OBTENEMOS :

$$D_0 = 177.222$$

$$D_1 = 6.955$$

$$D_2 = 0.1156$$

$$D_3 = 1.1883E-3$$

$$D_4 = 8.7067E-6$$

$$D_5 = 1.0087E-7$$

$$D_6 = 1.9384E-9$$

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = (X + 12.0888)$$

$$P_2 = (X + 1.4877) P_1 - 944.092 P_0$$

$$P_3 = (X + 7.4529) P_2 - 819.830 P_1$$

$$P_4 = (X + 4.9849) P_3 - 634.698 P_2$$

$$P_5 = (X + 10.9559) P_4 - 603.287 P_3$$

$$P_6 = (X + 11.2059) P_5 - 487.247 P_4$$

SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS = 0.0845

% ERROR MAXIMO = 0.9

3) LA VISCOSIDAD DE UN GAS ES APROXIMADAMENTE PROPORCIONAL A LA TEMPERATURA ABSOLUTA ELEVADA A CIERTA POTENCIA.

DETERMINE EL EXPONENTE DE T Y LA CONSTANTE DE PROPORCIONALIDAD PARA LOS SIGUIENTES DATOS DEL DIOXIDO DE CARBONO A 1 atm DE PRESION :

SI SABEMOS QUE : $\mu = kT^N$ (Ec. 1)

USANDO LOGARITMOS, TENDREMOS : $\log \mu = \log k + N \log T$

EL MODELO TIENE LA FORMA : $Y = A_0 + A_1 X_1$

DONDE $Y = \log \mu$; $A_0 = \log k$; $A_1 = N$; $X = \log T$

SI UTILIZAMOS LA TECNICA DE MINIMOS CUADRADOS PARA MODELOS LINEALES, TRUNCANDO A PARTIR DEL TERMINO $A_2 X_2$ Y ALIMENTAMOS LOS DATOS DE LOGARITMOS DE T Y LOGARITMOS DE μ :

DATOS :

T °k	μ cp	$\log T$	$\log \mu$
288	0.01457	2.4593	-1.8365
293	0.01480	2.4668	-1.8297
303	0.0153	2.4814	-1.8153
313	0.0157	2.4955	-1.8041
372	0.01861	2.5705	-1.7302
455	0.02221	2.6580	-1.6534
575	0.0268	2.7596	-1.5718
763	0.033	2.8825	-1.4814
958	0.038	2.9813	-1.4202
1123	0.0436	3.0503	-1.3605
1325	0.0479	3.1222	-1.3196

OBTENEMOS :

$$A_0 = -3.7667$$

$$A_1 = 0.7889$$

DE DONDE :

$$\text{ANTILOG } A_0 = k = 1.71119E-4$$

$$N = 0.7889$$

SUBSTITUYENDO EN LA EC. 1

$$\mu = 1.71119E-4 T^{0.7889}$$

- 4) UTILIZANDO EL DIAGRAMA DE MOODY PROPONGA UN MODELO DEL FACTOR DE FRICCIÓN EN FUNCIÓN DEL NÚMERO DE REYNOLDS Y LAS CARACTERÍSTICAS DE LA TUBERÍA, PARA FLUJO A RÉGIMEN TURBULENTO .

TABLA DE LECTURAS

Re	$\frac{\epsilon}{D}$					
	0.00001	0.0004	0.001	0.006	0.02	0.05
4E3	0.0396	0.0400	0.0410	0.0455	0.0570	0.0770
2E4	0.0257	0.0267	0.0280	0.0360	0.0505	0.0730
5E4	0.0208	0.0224	0.0240	0.0340	0.0495	0.0725
1E5	0.0179	0.0200	0.0223	0.0330	0.0490	0.0725
2E5	0.0156	0.0184	0.0212	0.0325	0.0490	0.0725
4E5	0.0138	0.0175	0.0206	0.0322	0.0490	0.0725
1E6	0.0129	0.0167	0.0200	0.0320	0.0490	0.0725
5E6	0.0096	0.0160	0.0197	0.0320	0.0490	0.0725
1E7	0.0091	0.0160	0.0197	0.0320	0.0490	0.0725
4E7	0.0084	0.0160	0.0197	0.0320	0.0490	0.0725

AL OBSERVAR LA FUENTE DE INFORMACIÓN (DIAGRAMA DE MOODY), SE SUGIERE UN COMPORTAMIENTO PARABÓLICO DEL LOGARITMO NATURAL DEL FACTOR DE FRICCIÓN CON RESPECTO AL LOGARITMO NATURAL DEL NÚMERO DE REYNOLDS PARA $\frac{\epsilon}{D}$ CONSTANTE.

TAMBIÉN SE SUGIERE UN COMPORTAMIENTO PARABÓLICO DEL LOGARITMO NATURAL DE f CON RESPECTO AL LOGARITMO NATURAL DE $\frac{\epsilon}{D}$ PARA UN NÚMERO DE REYNOLDS CONSTANTE.

EN CONSECUENCIA EL MODELO PROPUESTO ES EL SIGUIENTE :

$$\ln f = \left[a_0 + a_1 \ln Re + a_2 (\ln Re)^2 \right] \left(b_0 + b_1 \ln \left(\frac{E}{D} \right) + b_2 \left[\ln \left(\frac{E}{D} \right) \right]^2 \right)$$

DESARROLLANDO SE OBTIENE :

$$Y = A_0 + A_1 X_1 + A_2 X_2 + \dots + A_8 X_8$$

DONDE : $Y = \ln f$

$$X_1 = \ln Re$$

$$X_5 = \ln \left(\frac{E}{D} \right) \ln Re$$

$$X_2 = \ln \left(\frac{E}{D} \right)$$

$$X_6 = \ln \left(\frac{E}{D} \right) (\ln Re)^2$$

$$X_3 = (\ln Re)^2$$

$$X_7 = \left[\ln \left(\frac{E}{D} \right) \right]^2 \ln Re$$

$$X_4 = \left[\ln \left(\frac{E}{D} \right) \right]^2$$

$$X_8 = \left[\ln \left(\frac{E}{D} \right) \right]^2 (\ln Re)^2$$

UTILIZANDO EL PROGRAMA DE MINIMOS CUADRADOS CORRESPONDIENTE SE OBTIENE :

$$A_0 = -5.42218719$$

$$A_1 = 0.627111222$$

$$A_2 = -1.08481601$$

$$A_3 = -0.0226561557$$

$$A_4 = -0.053118523$$

$$A_5 = 0.248509343$$

$$A_6 = -9.14426583E-3$$

$$A_7 = 0.0131129544$$

$$A_8 = -5.27981288E-4$$

SUMA RESIDUAL DE CUADRADOS = 0.0780334344

COEFICIENTE DE CORRELACION = 0.998

% DE ERROR MAXIMO = 3.217

- 5) CALCULE EL VOLUMEN MOLAR DEL METANO A UNA PRESTION DE 200 BARS Y A UNA TEMPERATURA DE 400 °C .

UTILIZANDO :

- a) LA ECUACION DEL GAS IDEAL
- b) LA ECUACION DE VAN DER WAALS
- c) LA ECUACION DE REDLICH - KWONG
- d) LA ECUACION DE BEATTIE - BRIDGEMAN
- e) LA ECUACION DE BENEDICT - WEBB - RUBIN

- a) ECUACION DEL GAS IDEAL

$$PV = nRT$$

$$\bar{V} = \frac{RT}{P}$$

DATOS :

$$T = 1211.7 \text{ } ^\circ\text{R}$$

$$P = 197.38 \text{ atm.}$$

$$R = 0.7302 \frac{\text{atm pie}^3}{\text{lb-mol } ^\circ\text{R}}$$

SOLUCION $\bar{V} = 4.4826 \frac{\text{pie}^3}{\text{lb-mol}}$

- b) ECUACION DE VAN DER WAALS

$$\left(P - \frac{a}{\bar{V}^2}\right)(\bar{V} - b) - RT = 0$$

DATOS :

$$T = 673 \text{ } ^\circ\text{k}$$

$$P = 197.38 \text{ atm}$$

ESTA ECUACION ES RESUELTA CON

DIFERENTES TECNICAS Y LOS RE-

SULTADOS SE PRESENTAN EN LA

TABLA 1.1

$$R = 1.314 \frac{\text{atm pie}^3}{\text{lb-mol } ^\circ\text{k}}$$

$$a = 579$$

$$b = 0.684$$

LA ECUACION DE VAN DER WAALS SE PUEDE MODIFICAR DE LA SIGUIENTE MANERA :

$$\bar{V}^3 - \frac{Pb + RT}{P} \bar{V}^2 + \frac{a}{P} \bar{V} - \frac{ab}{P} = 0$$

LA CUAL PUEDE SER RESUELTA CON EL ALGORITMO DE LA ECUACION CUBICA, DE DONDE SE OBTIENEN LAS SIGUIENTES RAICES :

$$X1 = 4.62372526$$

$$X2 = 0.270288 + 0.6007i$$

$$X3 = 0.270288 - 0.6007i$$

$$\text{TIEMPO DE PROCESO} \rightarrow 0$$

c) ECUACION DE REDLICH - KWONG

$$\frac{RT}{\bar{V}-b} - \frac{a}{T^{0.5} \bar{V}(\bar{V}-b)} - P = 0$$

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

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c}$$

DATOS :

$$T_c = 190.5 \text{ } ^\circ\text{k (temp. crítica)}$$

$$P_c = 45.8 \text{ atm (presión crítica)}$$

$$R = 1.314 \frac{\text{atm pie}^3}{\text{lb-mol } ^\circ\text{k}}$$

$$a = 8071.95$$

$$b = 0.473525$$

ESTA ECUACION ES RESUELTA CON DIFERENTES TECNICAS Y LOS RESULTADOS SE PRESENTAN EN LA TABLA 1.2

d) ECUACION DE BEATTIE - BRIDGEMAN

$$RT \left[\bar{V} + B_0 \left(1 - \frac{b}{\bar{V}} \right) \right] \left(1 - \frac{c}{\bar{V}T^3} \right) - A_0 \left(1 - \frac{a}{\bar{V}} \right) - P \bar{V}^2 = 0$$

DATOS :

$$P = 197.38 \text{ atm}$$

$$c = 128300$$

$$T = 673 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$a = 0.01855$$

$$R = 0.082 \frac{\text{lt atm}}{\text{g-mol } ^\circ\text{K}}$$

$$b = - 0.01587$$

$$A_0 = 2.2769$$

$$B_0 = 0.5587$$

ESTA ECUACION ES RESUELTA CON DIFERENTES TECNICAS Y LOS RESULTADOS SE PRESENTAN EN LA TABLA 1.3

e) ECUACION DE BENEDICT - WEBB - RUBIN

$$\frac{RT}{V} + \frac{1}{V^2} (RTB_0 - A_0 - \frac{C_0}{T^2}) + \frac{1}{V^3} (RTb - a) + \frac{a\alpha}{V^b} + \frac{c}{T^2 V^3} \left(1 + \frac{Y}{V^2} \right) * \exp \left(- \frac{Y}{V^2} \right) - P = 0$$

DATOS :

$$P = 197.38 \text{ atm}$$

$$a = 0.494$$

$$T = 673 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$b = 0.00338004$$

$$R = 0.082 \frac{\text{lt atm}}{\text{g-mol } ^\circ\text{K}}$$

$$c = 2545$$

$$A_0 = 1.855$$

$$\alpha = 0.000124359$$

$$B_0 = 0.0426$$

$$Y = 0.006$$

$$C_0 = 22570$$

ESTA ECUACION ES RESUELTA CON DIFERENTES TECNICAS Y LOS RESULTADOS SE PRESENTAN EN LA TABLA 1.4

CALCULO DEL VOLUMEN MOLAR DEL METANO RESOLVIENDO LA ECUACION DE VAN DER WAALS, CON DIFERENTES TECNICAS NUMERICAS.

TECNICA	RAIZ	TIEMPO	VALORES INICIALES
SECANTE	4.623725	3.45 seg	1 10
REGULA - FALSI	4.623725	4.43 seg	1 10
WENGSTEIN	4.623725	3.50 seg	1 10
MULLER	4.623725	4.36 seg	-1, 5, 10
SUBSTITUCION DIRECTA	4.623715	1.98 seg	1
MEDIO INTERVALO	4.623725	11.52 seg	1 10
HOOKE - JEEVES	4.623724	16.70 seg	1 $\Delta x=0.5$
NEWTON - RAPHSON	4.623725	1.55 seg	1

TABLA 1.1

NOTA :

EL VOLUMEN MOLAR ESTA DADO EN $\left(\frac{P_i e^3}{1b\text{-mol}}\right)$

CALCULO DEL VOLUMEN MOLAR DEL METANO RESOLVIENDO LA ECUACION DE REDLICH - KWONG, CON DIFERENTES TECNICAS NUMERICAS.

TECNICA	RAIZ	TIEMPO	VALORES INICIALES
SECANTE	4.612023	6.85 seg.	1 3
REGULA - FALSI	4.612023	8.55 seg.	1 3
WENGSTEIN	4.612023	6.54 seg.	1 3
MULLER	NO CONVERGE		
SUBST. DIRECTA	4.612023	1.58 seg.	1
MEDIO INTERVALO	4.612023	7.34 seg.	1 5
HOOKE - JEEVES	4.612023	13.08 seg.	1 $\Delta X=0.5$
NEWTON RAPHSON	4.612023	4.01 seg.	1

TABLA 1.2

NOTA :

EL VOLUMEN MOLAR ESTA DADO EN $\left(\frac{\text{Pie}^3}{\text{lb-mol}}\right)$

CALCULO DEL VOLUMEN MOLAR DEL METANO RESOLVIENDO LA
 ECUACION DE BEATTIE - BRIDGEMAN, CON DIFERENTES TEC-
 NICAS NUMERICAS

TECNICA	RAIZ	TIEMPO	VALORES INICIALES
SECANTE	0.29802638	40.85 seg	0.1 1
REGULA FALSI	0.29802638	56.29 seg	0.1 1
WENGSTEIN	0.29802638	40.68 seg	0.1 1
MULLER	NO CONVERGE		-
SUBST. DIRECTA	0.29797384	3.74 seg	0.1
MEDIO INTERVALO	0.29802856	14.52 seg	0.1 1
HOOKE JEEVES	0.29802856	26.39 seg	0.1 $\Delta x=0.5$
NEWTON - RAPHSON	0.29802762	7.94 seg	1

TABLA 1.3

NOTA :

EL VOLUMEN MOIAR ESTA DADO EN $\left(\frac{lt}{gmol}\right)$

CALCULO DEL VOLUMEN MOLAR DEL METANO RESOLVIENDO LA ECUACION DE BENEDICT - WEBB - RUBIN, CON DIFERENTES TECNICAS NUMERICAS.

TECNICA	RAIZ	TIEMPO	VALORES INICIALES
SECANTE	0.2679947	47.45 seg	1,0.1
REGULA FALSI	0.2679947	1 min 4.55 seg	1,0.1
WENGSTEIN	0.2679947	47.36 seg	1,0.1
MULLER	NO CONVERGE		
SUBST.DIRECTA	0.26691395	5.17 seg	0.1
MEDIO INTERVALO	0.2679946	41.02 seg	1,0.1
HOOKE JEEVES	0.2679944	1 min 25.27 seg	.1 $\Delta x=0.5$
NEWTON - RAPHSON	0.2668095	10.20 seg	0.1

TABLA 1.4

NOTA :

EL VOLUMEN MOLAR ESTA DADO EN $\left(\frac{1t}{gmol}\right)$

- 6) CALCULE LAS TEMPERATURAS DE BURBUJA Y DE ROCIO PARA LA SIGUIENTE MEZCLA : 20% EN MOL DE ETANO, 40% EN MOL DE PROPANO, 40% EN MOL DE BUTANO, A UNA PRESION DE 760 mmHg.
- a) UTILIZANDO LA LEY DE RAOULT Y LA ECUACION DE ANTOINE.
- b) UTILIZANDO EL FACTOR k DE EQUILIBRIO (CONSTANTE DE EQUILIBRIO, REPORTADO EN EL DIAGRAMA DE DEPRIESTER).

SOLUCION :

PARA UN SISTEMA DE EQUILIBIO LIQUIDO - VAPOR SE CUMPLE QUE :

$y_i = k_i x_i$, EN DONDE y_i, x_i, k_i , SON LA FRACCION MOL EN EL VAPOR, FRACCION MOL EN EL LIQUIDO Y CONSTANTE DE EQUILIBRIO PARA EL COMPONENTE i

PUNTO DE BURBUJA :

$$\sum_{i=1}^N k_i x_i - 1 = 0$$

PUNTO DE ROCIO

$$\sum_{i=1}^N \frac{y_i}{k_i} - 1 = 0$$

$N = N^\circ$ COMPONENTES QUIMICOS

a) LEY DE RAOULT

$$k_i = \frac{P_i^{\circ}}{P_T} = \frac{10^{(A_i - \frac{B_i}{C_i + T})}}{P_T}$$

P_i° = PRESION DE VAPOR DEL COMPONENTE i

A_i, B_i, C_i = CONSTANTES DE ANTOINE DEL COMPONENTE i

T = TEMPERATURA DE EQUILIBRIO PARA LA PRESION TOTAL P_T

PUNTO DE BURBUJA

$$\sum_{i=1}^N \frac{10^{(A_i - \frac{B_i}{C_i + T})}}{P_T} * x_i - 1 = 0$$

PUNTO DE ROCIO

$$\sum_{i=1}^N \frac{P_T * y_i}{10^{(A_i - \frac{B_i}{C_i + T})}} - 1 = 0$$

CONSTANTES DE ANTOINE

COMPONENTE	A	B	C
ETANO	6.8026	656.4	256
n-PROPANO	6.8297	813.2	248
n-BUTANO	6.8302	945.9	240

DE LA APLICACION DE LAS DIVERSAS TECNICAS SE OBTIENE LA SIGUIENTE TABLA :

CALCULO DE LA TEMPERATURA BURBUJA Y LA TEMPERATURA DE ROCIO PARA LA MEZCLA ETANO,
PROPANO Y BUTANO UTILIZANDO LA LEY DE RAOULT.

TECNICA	T.ROCIO(°C)	TIEMPO	VALORES INICIALES			T.BURBUJA(°C)	TIEMPO	VALORES INICIALES
			1°	2°	3°			
SECANTE	-18.292934	9.84 Seg		- 50, - 10		-58.422703	22.68 seg	-100, -10
REGULA FALSI	-18.291977	38.17 Seg		- 50, - 10		-58.422703	30.62 Seg	-100, -10
WENGSTEIN	-18.292934	10.00 Seg		- 50, - 10		-58.422703	22.57 Seg	-100, -10
MULLER	NO CONVERGE	-		-		-58.42084	9.85 Seg	-100, -50, -10
MEDIO INTERVALO	-18.29589	15.17 Seg		- 50, - 10		-58.42241	16.50 Seg	-100, -10
HOOKE JEEVES	-18.292968	42.05 Seg		- 30, $\Delta x = 0.5$		-58.42241	39.00 Seg	-70 $\Delta x=0.5$

b) UTILIZANDO EL FACTOR k DE EQUILIBRIO

k

TEMPERATURA (°F)	ETANO	PROPANO	N-BUTANO
-100	2.3	0.17	0.13
-80	3.4	0.36	0.03
-60	4.8	0.66	0.07
-40	6.8	1.15	0.16
-20	9.2	1.8	0.3
0	12.0	2.6	0.52
20	15.5	3.7	0.85
40	19.0	5.0	1.28
60	23.5	6.8	1.85

HACIENDO UN AJUSTE POR MINIMOS CUADRADOS, ENCONTRAMOS EL MODELO Y LOS VALORES DE LAS CONSTANTES PARA EVALUAR LA k DE EQUILIBRIO.

$$k_i = \frac{e^{A_i - \frac{B_i}{C_i + T}}}{P_T}$$

CONSTANTES.

COMPONENTE	A	B	C
ETANO	14.7108243	-2441.6943	436.398167
PROPANO	13.2861863	-1747.35481	307.524278
N-BUTANO	13.1398735	-1994.37739	278.659715

b.1 PUNTO DE BURBUJA.

$$\sum_{i=1}^N \frac{e^{(A_i - \frac{B_i}{C_i + T})}}{P_T} * x_i - 1 = 0$$

b.2 PUNTO DE ROCIO

$$\sum_{i=1}^N \frac{P_T * y_i}{e^{(A_i - \frac{B_i}{C_i + T})}} - 1 = 0$$

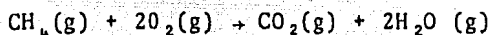
DE LA APLICACION DE LAS DIVERSAS TECNICAS SE OBTIENE LA SIGUIENTE TABLA :

CALCULO DE LA TEMPERATURA DE BURBUJA Y DE LA TEMPERATURA DE ROCIO UTILIZANDO EL FACTOR k DE EQUILIBRIO

TECNICA	T. ROCIO (°C)	TIEMPO	VALORES INICIALES	T.BURBUJA(°C)	TIEMPO	VALORES INICIALES
SECANTE	-19.3047	8.59 seg	-50, -10	-57.6655	10.92 seg	-100, -30
REGULA FALSI	-19.3047	11.08 seg	-50, -10	-57.6655	14.43 seg	-100, -30
WENGSTEIN	-19.3047	8.58 seg	-50, -10	-57.6655	10.83 seg	-100, -30
MULLER	NO CONVERGE	-	-	-57.6647	9.90 seg	-100, -50, -30
MEDIO INTERVALO	-19.3022	18.05 seg	-50, +10	-57.6628	11.15 seg	-100, -30
HOOKE JEEVES	-19.3055	1 min.20.18 seg	-30, $\Delta X=0.5$	-57.6648	16.28 seg	-70, $\Delta X=0.5$

- 7) CALCULE LA MAXIMA TEMPERATURA DE LOS PRODUCTOS SI SE QUEMA METANO CON 50% DE EXCESO DE AIRE Y SI AMBOS REACTIVOS SE ALIMENTAN AL QUEMADOR A 77 °F

REACCION QUIMICA (BASE 1 MOL DE CH₄)



PARA MAXIMA TEMPERATURA EL PROCESO SE CONSIDERARA ADIABATICO Y LA EFICIENCIA DE LA REACCION 100 %, IMPLICANDO QUE EN EL PRODUCTO NO HABRA CH₄ Y QUE TODO EL CARBONO SE CONVIERTE EN CO₂.

SI SE ALIMENTA OXIGENO EN EXCESO ENTONCES EN EL PRODUCTO HABRA OXIGENO ADEMAS DEL NITROGENO ALIMENTADO CON EL AIRE .

PRODUCTO

CO₂ ----- 1 mol

H₂O ----- 2 moles

O₂ ----- 1 mol

N₂ -- 11.2857 moles (ALIMENTADAS CON TRES MOLES DE O₂).

MOLES TOTALES DE PRODUCTO = 15.2857

BALANCE DE ENERGIA

CONSIDERANDO PROCESO A REGIMEN ESTACIONARIO

H (ENTRADA) + "GENERACION" = H (SALIDA); H= ENTALPIA

T (ENTRADA) = 298 °K

$$H(\text{ENTRADA}) = \text{MOLES MEZCLA REACTIVA} * \int_{298}^{298} C_p(\text{REACTIVOS}) * dT = 0$$

$$H(\text{SALIDA}) = \text{MOLES PRODUCTO} * \int_{298}^{T_f} C_p(\text{PRODUCTO}) * dT$$

$$\text{GENERACION} = - \Delta H_r^\circ$$

SE CALCULARA EL CALOR DE REACCION A 298 °k (TEMPERATURA A LA QUE SE REPORTA LA INFORMACION DE CALORES DE FORMACION Y COMBUSTION).

$$\Delta H_r^\circ = \sum H_f \text{ PRODUCTOS} - \sum H_f \text{ REACTIVOS}$$

$$\Delta H_r^\circ = H_{f\text{CO}_2}^\circ + 2H_{f\text{H}_2\text{O}}^\circ - H_{f\text{CH}_4}^\circ - 0$$

$$\Delta H_r^\circ = - 94051.8 + 2 * (-57798) - (-17889) - 0$$

$$\Delta H_r^\circ = - 191758.8 \frac{\text{cal}}{\text{gmol}}$$

COMPONENTE	FRACCION MOL	$C_p \left(\frac{\text{CAL}}{\text{GMOL} \cdot ^\circ\text{K}} \right)$		
		A	$B * 10^3$	$C * 10^6$
CO ₂	0.06542	6.214	10.396	-3.545
H O	0.13084	7.256	2.298	0.283
O	0.06542	6.148	3.102	-0.923
N	0.7383	6.524	1.250	-0.001
MEZCLA PRODUCTO		$A_m = 6.57489$	$B_m = 2.10661$	$C_m = 0.88311$

$$H(\text{ENTRADA}) + \text{"GENERACION"} = H(\text{SALIDA})$$

EL MODELO MATEMATICO QUE SE OBTENDRA SERA :

$$191758.8 = 15.2857 * \int_{298}^{T_f} (A_m + B_m T + C_m T^2) dT$$

$$15.2857 \left[A_m (T_f - 298) + B_m * \frac{(T_f^2 - 298^2)}{2} + C_m * \frac{(T_f^3 - 298^3)}{3} \right]$$

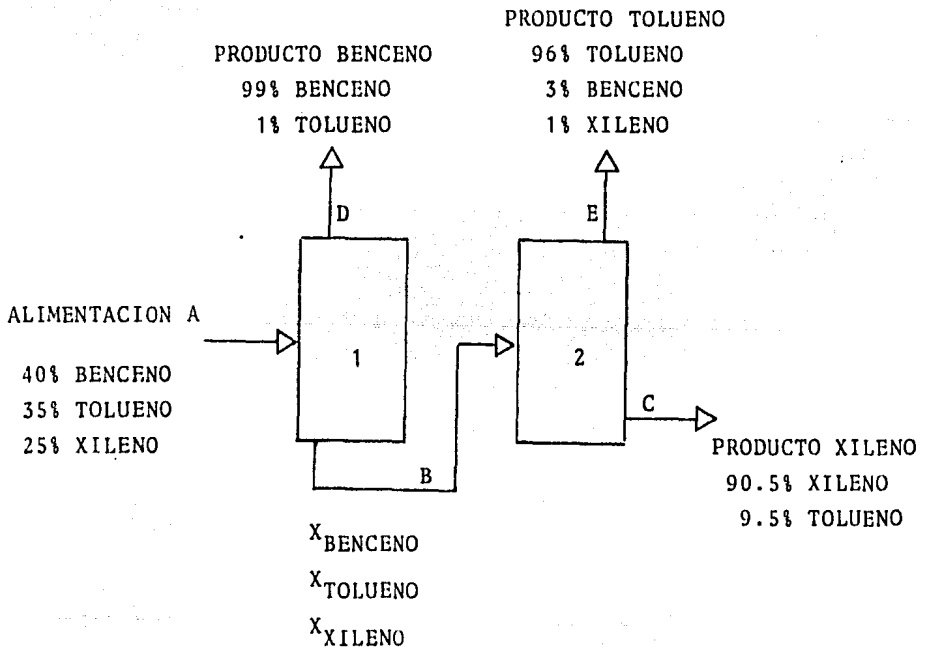
$$- 191758.8 = 0$$

ESTA ECUACION ES RESUELTA CON DIFERENTES TECNICAS Y LOS RESULTADOS SE PRESENTAN EN LA SIGUIENTE TABLA :

TECNICA	RAIZ	TIEMPO	VALORES INICIALES
SECANTE	1614.99604	19.17 seg.	350, 1000
REGULA-FALSI	1614.99603	18.68 seg.	350, 1000
WENGSTEIN	1614.99604	19.08 seg.	350, 1000
MULLER	1614.9960	16.53 seg.	350, 700, 1000
SUBSTITUCION DIRECTA	NO CONVIRGIO	-	-
MEDIO INTERVALO	1614.99604	42.93 seg.	350, 2000
HOOKER-JEEVES	1614.99603	6 min. 31.37 seg.	1700, ΔX = 0.5

8) EN EL PROCESO A REGIMEN ESTACIONARIO QUE SE MUESTRA EN LA FIGURA DE ABAJO TODAS LAS COMPOSICIONES SE DAN EN PORCIENTO EN MOL CALCULE :

- a) EL PORCENTAJE DE RECUPERACION DE CADA COMPONENTE EN SU RESPECTIVA CORRIENTE DE PRODUCTO
- b) LA COMPOSICION DE LA CORRIENTE B



DESTILACION DE BENCENO, TOLUENO Y XILENO.

a)

$$\% \text{ RECUPERACION BENCENO} = \frac{0.99 D}{0.40 A} * 100$$

$$\% \text{ RECUPERACION TOLUENO} = \frac{0.96 E}{0.35 A} * 100$$

$$\% \text{ RECUPERACION XILENO} = \frac{0.905 C}{0.25 A} * 100$$

LAS TRES PROPIEDADES SON INTENSIVAS Y SON INDEPENDIENTES DE LA CANTIDAD DE A ALIMENTADA, ESTO ES CIERTO DESDE EL PUNTO DE VISTA DE CONSERVACION DE LA MASA.

POR BALANCES DE MATERIA SE PUEDEN CALCULAR D, E, Y C.

b) LOS VALORES x_b , x_t , x_x (PROPIEDADES INTENSIVAS), TAMBIEN SERAN INDEPENDIENTES DEL VALOR DE A. ESTO IMPLICA QUE LOS DOS INCISOS PODRAN SER RESUELTOS SIMULTANEAMENTE, AL RESOLVER LAS ECUACIONES DE BALANCES DE MATERIA.

a) BALANCES DE MATERIA GLOBALES.

$$A = D + C + E$$

$$0.4A = 0.99D + 0.03 E$$

$$0.35A = 0.01D + 0.96E + 0.095C$$

BASE DE CALCULO A = 100

TRES ECUACIONES CON TRES INCOGNITAS D, E, Y C

SISTEMA DE ECUACIONES

$$D + E + C = 100$$

$$0.99D + 0.03E = 40$$

$$0.01D + 0.96E + 0.095C = 35$$

MATRIZ AUMENTADA

1	1	1	100
0.99	0.03	0	40
0.01	0.96	0.095	35

DE LA APLICACION DE LAS DIVERSAS TECNICAS, SE OBTIENE LA SIGUIENTE TABLA :

METODO	RAICES	TIEMPO	COMENTARIOS
ELIMINACION GAUSSIANA	X(1)=39.3934 X(2)=33.3507 X(3)=27.2557	1.02 seg.	X(1) = D X(2) = E X(3) = C
GAUSS JORDAN	X(1)=39.3934 X(2)=33.3507 X(3)=27.2557	1.12 seg.	
MAXIMO ELEMENTO PIVOTE	X(1)=39.3934 X(2)=33.3507 X(3)=27.2557	1.80 seg.	
JACOBI	NO CONVERGE		
GAUSS-SEIDEL	NO CONVERGE		

b) BALANCES PARCIALES (DESTILADOR 1)

$$A = B + D$$

$$0.4A = X_{\text{benceno}} B + 0.99D$$

$$0.35A = X_{\text{tolueno}} B + 0.01D$$

D FUE RESUELTO PARA A = 100 EN EL INCISO ANTERIOR POR LO TANTO :

$$B = A - D$$

$$X_{\text{xileno}} = 1 = X_{\text{benceno}} - X_{\text{tolueno}}$$

$$X_{\text{benceno}} = \frac{0.4A - 0.99D}{B}$$

$$X_{\text{tolueno}} = \frac{0.35A - 0.01D}{B}$$

a) PORCENTAJE DE RECUPERACION DE CADA COMPONENTE .

$$\% \text{ REC. BENCENO} = \frac{0.99 * 39.3934}{0.40 * 100} * 100 = 97.4986$$

$$\% \text{ REC. TOLUENO} = \frac{0.96 * 33.3507}{0.35 * 100} * 100 = 91.4762$$

$$\% \text{ REC. XILENO} = \frac{0.905 * 27.2557}{0.25 * 100} * 100 = 98.6656$$

b) COMPOSICION DE LA CORRIENTE B .

$$B = A - D$$

$$B = 100 - 39.3934 = 60.6066$$

$$X_{\text{benceno}} = \frac{0.4A - 0.99D}{B} = \frac{0.4 * 100 - 0.99 * 39.3934}{60.6066}$$

$$X_{\text{benceno}} = 0.0165$$

$$X_{\text{tolueno}} = \frac{0.35A - 0.01D}{B} = \frac{0.35 * 100 - 0.01 * 39.3934}{60.6066}$$

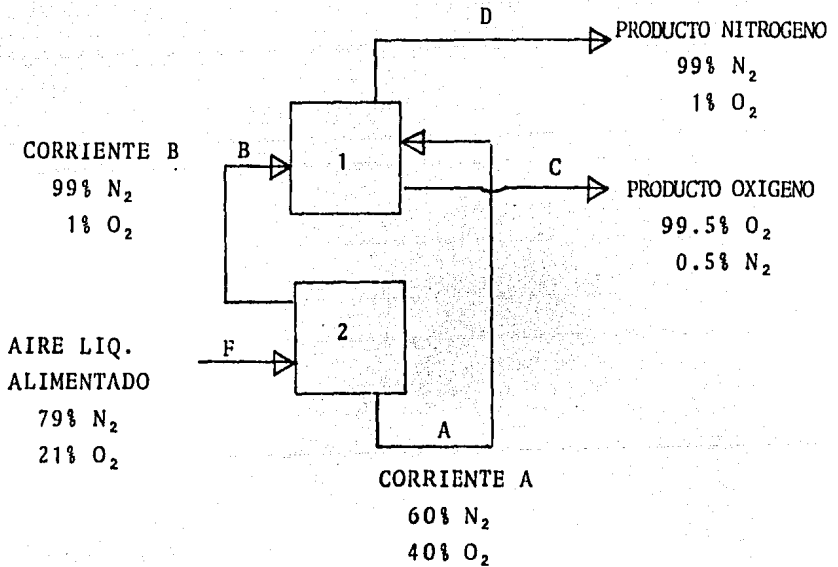
$$X_{\text{tolueno}} = 0.5709$$

$$X_{\text{xileno}} = 1 - X_{\text{benceno}} - X_{\text{tolueno}} = 1 - 0.0165 - 0.5709$$

$$X_{\text{xileno}} = 0.4126$$

9) BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA.

SE PRODUCE OXIGENO PURO MEDIANTE LA DESTILACION DE AIRE LIQUIDO A BAJAS TEMPERATURAS. PARA SEPARAR EL NITROGENO Y EL OXIGENO, SE UTILIZAN DOS COLUMNAS DE DESTILACION TAL Y COMO SE ILUSTRA EN LA SIGUIENTE FIGURA :



SI EL PROCESO ES A REGIMEN ESTACIONARIO

- CALCULE EL PORCENTAJE DE OXIGENO ALIMENTADO EN LA CORRIENTE DE AIRE, QUE ES RECUPERADO EN LA CORRIENTE DE PRODUCTO OXIGENO.
- CALCULE EL FLUJO DE LA CORRIENTE A PARA $100 \frac{\text{lbmol}}{\text{h}}$ DE PRODUCTO OXIGENO.

a) PORCIENTO DE RECUPERACION DE OXIGENO

$$\% \text{ REC. OXIGENO} = \frac{0.995 C}{0.21 F} * 100$$

EL % DE N_2 ES UNA PROPIEDAD INTENSIVA E INDEPENDIENTE DE LA BASE DE CALCULO.

PARA 100 $\frac{\text{lbmol}}{\text{h}}$ DE C CUANTO VALE F.

PARA RESOLVER EN FORMA CONJUNTA LOS DOS INCISOS, Y TOMANDO COMO BASE $C = 100$. SE RESOLVERAN LAS ECUACIONES DE BALANCES DE MATERIA CORRESPONDIENTES.

BALANCE DE MATERIA

ENTRADA = SALIDA

$$F = D + C$$

$$0.79F = 0.99D + 0.005C$$

$$F = B + A$$

$$0.79F = 0.6A + 0.99B$$

$$C = 100$$

SISTEMA DE ECUACIONES

$$F - D = 100$$

$$0.79F - 0.99D = 0.5$$

$$F - B - A = 0$$

$$0.79F - 0.6A - 0.99B = 0$$

MATRIZ AUMENTADA

1	-1	0	0	100
0.79	-0.99	0	0	0.5
1	0	-1	-1	0
0.79	0	-0.6	-0.99	0

DE LA APLICACION DE LAS DIVERSAS TECNICAS SE OBTIENE LA SI
GUIENTE TABLA :

METODO	VALORES INICIALES	RAICES	TIEMPO	COMEN- TARIOS
JACOBI	X1 = 120 X2 = 20 X3 = 60 X4 = 60	X(1)=492.4998 X(2)=392.4999 X(3)=252.5641 X(4)=239.9358	1 min 5 seg.	X1 = F X2 = D X3 = A X4 = B
GAUSS-SEIDEL	X2 = 20 X3 = 60 X4 = 60	X(1)=492.4996 X(2)=392.4996 X(3)=252.5641 X(4)=239.9355	24.02 seg.	
ELIMINACION GAUSSIANA		X(1)=492.5 X(2)=392.5 X(3)=252.5641 X(4)=239.9358	1.57 seg.	
GAUSS-JORDAN		X(1)=492.5 X(2)=392.5 X(3)=252.5641 X(4)=239.9358	1.85 seg.	
MAXIMO ELEMEN TO PIVOTE		X(1)=492.500001 X(2)=392.500001 X(3)=252.564103 X(4)=239.935898	3.33 seg.	

a) PORCIENTO DE OXIGENO RECUPERADO

$$\% \text{ REC. OXIGENO} = \frac{0.995 C}{0.21 F} * 100$$

$$\% \text{ REC. OXIGENO} = \frac{0.995 * 100}{0.21 * 492.49} * 100$$

$$\% \text{ REC. OXIGENO} = 96.2069$$

b) FLUJO DE LA CORRIENTE A PARA 100 $\frac{\text{lbmol}}{\text{h}}$ DE PRODUCTO OXIGENO

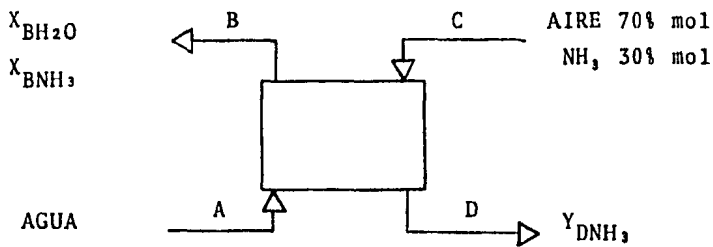
DE LA TABLA DE RESULTADOS OBTUVIMOS :

$$A = 252.5641 \frac{\text{lbmol}}{\text{h}}$$

10) EN UN PROCESO ISOTERMICO A 20 °C, SE MEZCLAN 1000 lb-mol DE UNA CORRIENTE DE AIRE QUE CONTIENE 30% EN MOL DE AMONIACO Y 3000 lb-mol DE AGUA. AMBAS CORRIENTES SE ENCUENTRAN A 1 atm. DE PRESION, SI SE ESTABLECE EL EQUILIBRIO FISICO CALCULE :

- LA COMPOSICION DEL GAS DE SALIDA
- LA COMPOSICION DEL LIQUIDO DE SALIDA

PROCESO DE ABSORCION DE AMONIACO EN AGUA A 20 °C



LAS CORRIENTES B Y D ESTAN EN EQUILIBRIO POR LO QUE X_{BNH_3} ESTARA RELACIONADO CON Y_{DNH_3}

BALANCES DE MATERIA

B. TOTAL $A + C = B + D$

B. AGUA $A = BX_{BH_2O}$

B. NH_3 $CY_{CNH_3} = BX_{BNH_3} + DY_{DNH_3}$

SUMA FRACCION MOL $X_{BH_2O} + X_{BNH_3} = 1$

RELACION DE EQUILIBRIO $Y_{DNH_3} = f(X_{BNH_3})$

LA RELACION DE EQUILIBRIO SE OBTENDRA APLICANDO LA TECNICA DE MINIMOS CUADRADOS A LOS DATOS DE SOLUBILIDAD CORRESPONDIENTES.

X_{NH_3}	Y_{NH_3}
0.02073	0.01644
0.03078	0.02434
0.04062	0.02960
0.05972	0.05263
0.07808	0.07236
0.09567	0.09210

HACIENDO EL AJUSTE POR MINIMOS CUADRADOS SE OBTIENE EL SIGUIENTE MODELO :

$$Y_{\text{DNH}_3} = 6.6675E-4 + 0.653067X_{\text{BNH}_3} + 3.24274X_{\text{BNH}_3}^2$$

$$B + D - 4000 = 0$$

$$BX_{\text{BH}_2\text{O}} - 3000 = 0$$

$$BX_{\text{BNH}_3} + DY_{\text{DNH}_3} - 300 = 0$$

$$X_{\text{BH}_2\text{O}} + X_{\text{BNH}_3} - 1 = 0$$

$$6.6675E-4 + 0.653067X_{\text{BNH}_3} + 3.24274X_{\text{BNH}_3}^2 - Y_{\text{DNH}_3} = 0$$

SISTEMA DE 5 ECUACIONES CON 5 INCOGNITAS

$$B = X(1), D = X(2), X_{\text{BH}_2\text{O}} = X(3), X_{\text{BNH}_3} = X(4), Y_{\text{DNH}_3} = X(5)$$

ESTE SISTEMA SE RESUELVE APLICANDO LA TECNICA DE NEWTON RAPHSON (SOLUCION DE UN SISTEMA DE N ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES).

$$X(1) = 3247.81597$$

$$X(2) = 752.184032$$

$$X(3) = 0.923697657$$

$$X(4) = 0.0763023431$$

$$X(5) = 0.0693766809$$

a) $Y_{\text{DNH}_3} = 0.0693766809$

b) $X_{\text{BH}_2\text{O}} = 0.923697$

$$X_{\text{BNH}_3} = 0.0763023431$$

- 11) CALCULE EL CALOR REQUERIDO PARA INCREMENTAR LA TEMPERATURA DE 1 GMOL DE ETILENO DESDE 100 HASTA 700 °C A 1 ATMOSFERA DE PRESION, UTILIZANDO LOS SIGUIENTES DATOS :

TEMPERATURA °k	C_p ($\frac{\text{CAL}}{\text{GMOL} \cdot ^\circ\text{K}}$)
298	10.41
500	15.16
700	18.76
1000	22.57

- a) POR INTEGRACION NUMERICA UTILIZANDO DIRECTAMENTE LA INFORMACION TABULADA.
- b) DESARROLLANDO PREVIAMENTE UN MODELO DE C_p VS. TEMPERATURA E INTEGRACION ANALITICA.
- c) DESARROLLANDO PREVIAMENTE UN MODELO DE C_p VS TEMPERATURA E INTEGRACION NUMERICA.

CALCULO DEL CALOR REQUERIDO

$$Q = M \int_{T_o}^{T_f} C_p dT$$

Q = CALOR REQUERIDO

M = MOLES DEL COMPUESTO

C_p = CAPACIDAD CALORIFICA DEL COMPUESTO

T_o = TEMPERATURA INICIAL

T_f = TEMPERATURA FINAL

LA INTEGRACION SE PODRA EFECTUAR EN FORMA NUMERICA O ANALITICA.

a) INTEGRACION NUMERICA UTILIZANDO DIRECTAMENTE LOS DATOS

$$T_o = 100 \text{ } ^\circ\text{C} = 373 \text{ } ^\circ\text{k}$$

$$T_f = 700 \text{ } ^\circ\text{C} = 973 \text{ } ^\circ\text{k}$$

SE OBSERVA QUE T_o Y T_f NO ESTAN INCLUIDAS EN LA TABLA, PARA EVITAR ESTA DIFICULTAD, A PARTIR DE LA TABLA DE DATOS SE GENERARAN DATOS QUE INCLUYAN LOS LIMITES DE INTEGRACION Y ESTO SE HARA UTILIZANDO TECNICAS DE INTERPOLACION

DATOS GENERADOS POR INTERPOLACION

TEMPERATURA $^\circ\text{k}$	C_p ($\frac{\text{CAL}}{\text{GMOL } ^\circ\text{K}}$)
373	12.31
500	15.16
700	18.76
973	22.28

a)

TECNICA	Q (CALORIAS)
REGLA DEL TRAPEZIO	10738.305
REGLA DE SIMPSON	9484.35
REGLA DE SIMPSON $\frac{3}{8}$	10226.25

- b) DESARROLLO DEL MODELO C_p VS. TEMPERATURA UTILIZANDO LA TECNICA DE POLINOMIO DE INTERPOLACION OBTENEMOS :

$$A_0 = 0.800624317$$

$$A_1 = 0.0379998569$$

$$A_2 = -2.0883432E-5$$

$$A_3 = 4.64244173E-9$$

EL MODELO TIENE LA FORMA SIGUIENTE :

$$Y = A_0 + A_1X + A_2X^2 + A_3X^3$$

INTEGRACION ANALITICA

$$Q = M \int_{T_0}^{T_f} (A_0 + A_1T + A_2T^2 + A_3T^3) dT$$

$$Q = 1 * \left[A_0(T_f - T_0) + \frac{A_1}{2}(T_f^2 - T_0^2) + \frac{A_2}{3}(T_f^3 - T_0^3) + \frac{A_3}{4}(T_f^4 - T_0^4) \right]$$

$$Q = 10791.3723 \text{ CALORIAS}$$

- c) EL MODELO DE C_p SERA EL MISMO QUE EL OBTENIDO EN EL INCISO (b).

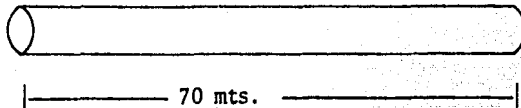
APLICANDO LAS DISTINTAS TECNICAS SE OBTIENE :

TECNICA	Q (CALORIAS)
REGLA DEL TRAPECIO	10745.3309
REGLA DE SIMPSON	10779.7391
REGLA DE SIMPSON $\frac{3}{8}$	10791.3723
INTEGRACION DE ROMBERG	10791.3723
INTEGRACION GAUSSIANA	10791.3589

12) POR UNA TURBINA HORIZONTAL DE ACERO COMERCIAL CEDULA 40 DE 1'' DE DIAMETRO NOMINAL, FLUYE ARGON, EL CUAL ENTRA A LA TUBERIA A UNA PRESION DE 7 atm ABS., A UNA TEMPERATURA DE 100 °C Y A UNA VELOCIDAD DE $30 \frac{m}{s}$.

- a) SI EL PROCESO ES ISOTERMICO, QUE PRESION Y VELOCIDAD TENDRA EL ARGON A 70 mts. DENTRO DE LA TUBERIA, CON RESPECTO A LA ENTRADA.

SOLUCION :



$$P_1 = 7 \text{ atm}$$

$$P = ?$$

$$T_1 = 100 \text{ °C}$$

$$V_1 = 30 \frac{m}{s}$$

$$V = ?$$

$$D_{\text{nominal}} = 1''$$

$$D_{\text{interior}} = 1.049'' \quad (\text{Ap. C-6 FOUST})$$

BALANCE DE ENERGIA POR UNIDAD DE MASA :

$$\frac{dP}{\rho} + \frac{V}{2g_c} dV = - dh_{f,s}$$

CONSIDERANDO COMPORTAMIENTO GAS IDEAL

$$\rho = \frac{P}{RT} * PM$$

$$\frac{RT}{PM} \frac{d\vec{P}}{\vec{P}} + \frac{V}{2g_c} dV = -\frac{1}{2} \frac{f}{g_c} * V^2 \frac{dL}{Di}$$

BALANCE DE MATERIA

$$Q_1 \rho_1 = Q_2 \rho_2 = Q \rho$$

PARA AREA DE FLUJO CONSTANTE :

$$AV\rho = AV_1\rho_1$$

$$V \frac{\vec{P} * PM}{RT} = V_1 \frac{\vec{P}_1 * PM}{RT} \Rightarrow V = \frac{V_1 \vec{P}_1}{\vec{P}}$$

DE DONDE :

$$dV = -V_1 \vec{P}_1 \frac{d\vec{P}}{\vec{P}^2}$$

$$\frac{RT}{PM} \frac{d\vec{P}}{\vec{P}} + \frac{V_1 \vec{P}_1}{2g_c \vec{P}} * (-V_1 \vec{P}_1 \frac{d\vec{P}}{\vec{P}^2}) = -\frac{1}{2} \frac{f}{g_c} \left(\frac{V_1 \vec{P}_1}{\vec{P}} \right)^2 \frac{dL}{Di}$$

FINALMENTE

$$\left[\frac{RT}{PM * \vec{P}} - \frac{1}{2g_c} \frac{V_1^2 \vec{P}_1^2}{\vec{P}^3} \right] d\vec{P} = -\frac{1}{2} \frac{f}{g_c} \left(\frac{V_1 \vec{P}_1}{\vec{P}} \right)^2 \frac{dL}{Di}$$

$$\frac{d\vec{P}}{dL} = -\frac{1}{2Di} \frac{f}{g_c} \left(\frac{V_1 \vec{P}_1}{\vec{P}} \right)^2 \left/ \left[\frac{RT}{PM * \vec{P}} - \frac{1}{2g_c} \frac{V_1^2 \vec{P}_1^2}{\vec{P}^3} \right] \right.$$

ESTA ECUACION DEBERA RESOLVERSE CON LA SIGUIENTE CONDICION INICIAL PARA $L = 0$, $P = 14817.6$

DATOS TRANSFORMADOS AL SISTEMA DE UNIDADES FPS.

$$V_1 = 98.4252 \frac{\text{pies}}{\text{s}}$$

$$P_1 = 14817.6 \frac{\text{lb}}{\text{pie}^2}$$

$$T = 672 \text{ } ^\circ\text{R}$$

$$R = 1545.2 \frac{\text{lb pie}}{\text{lb-mol } ^\circ\text{R}}$$

$$g_c = 32.2 \frac{\text{pie}}{\text{s}^2}$$

$$D_i = 0.0874167 \text{ pies}$$

$$PM = 40 \frac{\text{lb}}{\text{lb-mol}}$$

$$L = 229.6588 \text{ pies (LONGITUD DE TUBO).}$$

SOLUCION :

$$N_{RE} = \frac{D_i V \rho}{\mu} = \frac{D_i G}{\mu}$$

PARA AREA CONSTANTE Y REGIMEN ESTACIONARIO, $G = \text{CONSTANTE}$

$$G = V_1 \rho_1 = 98.4252 * \frac{14817.6 * 40}{1545.2 * 672}$$

$$G = 56.181094 \frac{\text{lb}}{\text{pie}^2 \text{s}}$$

$$\mu_{672^\circ \text{R}} = 1.74712 \text{ E-5} \frac{\text{lb}}{\text{pie} \text{ s}} \quad (\text{SE SUPONDRÁ CONSTANTE EN TODA LA TRAYECTORIA DE FLUJO}).$$

$$N_{\text{RE}} = \frac{0.0874167 * 56.181094}{1.74712 \text{ E-5}} = 281100.659$$

$$\text{ASPEREZA RELATIVA} = \frac{\epsilon}{D} = 0.00175 \quad (\text{Ap. C FOUST})$$

$$f = 0.023 \quad (\text{Ap. C - 3 FOUST})$$

DE LA APLICACION DE LAS DIFERENTES TECNICAS NUMERICAS, SE OB
TIENE LA SIGUIENTE TABLA :

METODO	SOLUCION ($P = \frac{1b}{pie^2}$)	TIEMPO (SEG.)	% DE ERROR CON RES- PECTO A LA SOLUCION ANALITICA
EULER	8113.68356	10.40	-1.0250
EULER MODIFICADO	8015.02866	18.64	-6.6215E-5
PUNTO MEDIO	8016.22023	18.41	-0.0122
HEUN	8015.82672	19.30	-8.222E-3
RUNGE KUTTA 3ER ORDEN 5 CONSTANTES	8015.03402	27.72	-8.42E-5
RUNGE KUTTA 3ER ORDEN 6 CONSTANTES	8015.01634	27.15	5.972E-5
RUNGE KUTTA 4TO ORDEN 7 CONSTANTES	8015.02209	35.50	9.236E-7
RUNGE KUTTA 4TO ORDEN 10 CONSTANTES	8015.02213	36.15	4.874E-7
(METODO DE MULTIPASOS).			
1) DOS PASOS	8020.59159	19.48	-0.0569
2) TRES PASOS	8015.62841	27.33	-6.196E-3
3) CUATRO PASOS	8015.12065	34.31	-1.006E-3
4) CINCO PASOS	8015.04325	41.23	-2.153E-4
(METODOS PREDICTORES CORRECTORES).			
1) MILNE 4TO. ORDEN	8015.02041	48.75	1.806E-5
2) MILNE 6TO. ORDEN	8015.02212	74.26	5.9E-7
3) ADAMS - MOULTON	8015.01436	62.40	7.98E-5

CONDICIONES INICIALES

X INICIAL = 0

X FINAL = 229.6588

Y INICIAL = 14817.6

Nº INTERVALOS = 30

CAPITULO IV. CONCLUSIONES

IV.1 GENERALES

EN LAS POCAS APLICACIONES ANALIZADAS EN ESTA TESIS, PUDO CONSTATARSE LA NECESIDAD DE UTILIZAR TECNICAS NUMERICAS RESOLUTIVAS DE MODELOS MATEMATICOS POR PROCEDIMIENTOS DE PRUEBA Y ERROR, DEBIDO FUNDAMENTALMENTE AL COMPORTAMIENTO DE LAS PROPIEDADES FISICAS IMPLICITAS EN EL SISTEMA ANALIZADO, Y QUE INTRODUCEN EFECTOS DE NO LINEARIDAD EN LAS ECUACIONES OBTENIDAS. ESTO JUSTIFICA LA PROFUNDIDAD Y EXTENSION DEL ANALISIS DE TEMAS Y CONCEPTOS QUE SERVIRAN PARA LA RESOLUCION DE LOS MODELOS MATEMATICOS DERIVADOS DE LOS SISTEMAS INGENIERILES.

DE TODA LA INFORMACION DENTRO DEL AREA DE ANALISIS NUMERICOS, SE SELECCIONARON LOS METODOS DE USO MAS FRECUENTE EN LA RESOLUCION DE PROBLEMAS DE INGENIERIA QUIMICA.

EN ALGUNOS CASOS, LA SOLUCION AL PROBLEMA EXIGIRA LA COMBINACION DE DOS O MAS METODOS, SIN EMBARGO, EL MATERIAL PRESENTADO SERA SUFICIENTE PARA OBTENER UN RESULTADO.

EL USO DE LA METODOLOGIA PRESENTADA SERA MAS EFICIENTE SI SE DISPONE DE UN PROCESADOR, QUE PERMITA ELEGIR ENTRE TIEMPO DE PROCESO Y EXACTITUD DE LOS RESULTADOS. ES IMPORTANTE SEÑALAR QUE EL LENGUAJE ESQUEMATICO (DIAGRAMA DE FLUJO) UTILIZADO EN LA PRESENTACION DE LOS METODOS, LE DA UNA GRAN VERSATILIDAD PARA EL USO DE ESTE MATERIAL, HACIENDOLO INDEPENDIENTE DEL TIPO DE PROCE-

SADOR QUE SE VAYA A UTILIZAR. CONSIDERAMOS ESTE ASPECTO COMO LA APORTACION MAS IMPORTANTE DE ESTA TESIS.

IV.2 ANALISIS DE LAS DIVERSAS TECNICAS PRESENTADAS.

EN LA ACTUALIDAD ESTA MAS GENERALIZADO EL USO DE MODELOS MATEMATICOS QUE EL USO DE TABLAS, NOMOGRAMAS O GRAFICAS; ESTO ESTA DESPLAZANDO EL USO DE TECNICAS DE INTERPOLACION EN LOS CALCULOS. AUN CUANDO ESTAS TIENDAN A DESAPARECER, TOMAMOS LA DECISION DE INCLUIRLAS EN ESTA TESIS, FUNDAMENTALMENTE POR EL SOPORTE QUE DAN AL DESARROLLO DE LAS DIVERSAS TECNICAS NUMERICAS. POR TODO LO ANTERIOR, LA INTERPOLACION NO SE INCLUYE EN EL SIGUIENTE RESUMEN, OBTENIDO DE LA APLICACION DE LAS TECNICAS NUMERICAS EN LA RESOLUCION DE PROBLEMAS.

RESUMEN

PROBLEMA DE : RESOLUCION DE UNA ECUACION ALGEBRAICA NO LINEAL

TECNICAS POSIBLES A UTILIZAR :

- | | |
|------------------|------------------------|
| - SECANTE | - SUBSTITUCION DIRECTA |
| - REGULA - FALSI | - MEDIO INTERVALO |
| - WENGSTEIN | - HOOKE - JEEVES |
| - MULLER | - NEWTON - RAPHSON |

RECOMENDACION :

- SUBSTITUCION DIRECTA

- NEWTON - RAPHSON (SI LA DERIVADA DE LA FUNCION NO IMPLICA COMPLEJIDAD ALGEBRAICA.)

PROBLEMA DE : INTEGRACION

TECNICAS POSIBLES A UTILIZAR :

- REGLA DEL TRAPECIO
- REGLA DE SIMPSON
- ROMBERG
- REGLA DE SIMPSON $\frac{3}{8}$
- GAUSS

RECOMENDACION :

- ROMBERG
- SIMPSON $\frac{3}{8}$ (DE MAYOR FACILIDAD EN LA PROGRAMACION)

PROBLEMA DE : RESOLUCION DE UNA ECUACION DIFERENCIAL ORDINARIA .

TECNICAS POSIBLES A UTILIZAR :

- EULER
- EULER MODIFICADO
- PUNTO MEDIO
- HEUN
- RUNGE - KUTTA 3er. ORDEN 5 CONSTANTES
- RUNGE - KUTTA 3er. ORDEN 6 CONSTANTES
- RUNGE - KUTTA 4° ORDEN 7 CONSTANTES
- RUNGE - KUTTA 4° ORDEN 10 CONSTANTES
- METODO DE MULTIPASOS

- 1) DOS PASOS
- 2) TRES PASOS
- 3) CUATRO PASOS
- 4) CINCO PASOS

— PREDICTORES CORRECTORES

- 1) MILNE 4° ORDEN
- 2) MILNE 6° ORDEN
- 3) ADAMS - MOULTON

RECOMENDACION :

TODOS LOS METODOS ACUMULAN UN ERROR DE TRUNCACION O REDONDEO DE UN PASO ANTERIOR, RAZON POR LA CUAL, LAS RESOLUCIONES DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES E INTEGRACIONES, TIENEN COMO CRITERIO PRIORITARIO LA EXACTITUD; EN CASO DE DOS O MAS TECNICAS CON UN MISMO RESULTADO, SE RECOMIENDA LA DE MENOR TIEMPO DE PROCESO .

AL APLICAR LAS DIVERSAS TECNICAS EN LA RESOLUCION DEL PROBLEMA 12 (PAG. 224), SE SELECCIONO UN NUMERO GRANDE DE INCREMENTOS (30), POR LO CUAL TODAS CONVERGIERON A LA SOLUCION EN DIFERENTE TIEMPO DE PROCESO. PARA EVALUAR LA EXACTITUD, CONSIDERAMOS PRUDENTE AGREGAR LA COLUMNA DE % DE ERROR EN LA TABLA DE RESULTADOS (PAG. 228). OBSERVANDO ESTA ULTIMA, SUGERIMOS :

- RUNGE KUTTA DE 4° ORDEN, 7 CONSTANTES
- RUNGE KUTTA DE 4° ORDEN, 10 CONSTANTES
- PREDICTOR - CORRECTOR : MILNE 6° ORDEN.

PROBLEMA DE : SISTEMA DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES

TECNICAS POSIBLES A UTILIZAR :

- JACOBI
- GAUSS - SEIDEL
- ELIMINACION GAUSSIANA
- MAXIMO ELEMENTO PIVOTE
- GAUSS - JORDAN
- MATRIZ TRIDIAGONAL

RECOMENDACION :

AL COMPARAR LAS TABLAS DE RESULTADOS DE LOS PROBLEMAS 8 Y 9 (PAGS. 210 Y 216 RESPECTIVAMENTE) RECOMENDAMOS LOS METODOS DE GAUSS - JORDAN Y LA ELIMINACION GAUSSIANA. POR FACILIDAD EN LA PROGRAMACION SUGERIMOS EL PRIMERO.

PROBLEMA DE : SISTEMA DE ECUACIONES ALGEBRAICAS NO-LINEALES

TECNICAS POSIBLES A UTILIZAR :

- NEWTON RAPHSON
- SECANTE

RECOMENDACION :

COMPARANDO EL METODO DE NEWTON-RAPHSON CON EL METODO DE LA SECANTE, OBSERVAMOS UNA MISMA ESTRATEGIA DE CAL CULO, CON LA DIFERENCIA DE QUE EL SEGUNDO INTRODUCE ERRO RES ADICIONALES AL EVALUAR NUMERICAMENTE LAS DERIVADAS. ESTO SUGIERE QUE CUANDO LAS FUNCIONES REPRESENTATIVAS DE

LAS ECUACIONES A RESOLVER SEAN DERIVABLES SIN MUCHA DIFICULTAD, SE APLIQUE LA TECNICA DE RUNGE - KUTTA.

PROBLEMA DE : SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES

TECNICAS POSIBLES A UTILIZAR :

LAS MISMAS QUE SE APLICAN A UNA SOLA ECUACION .

RECOMENDACIONES :

APOYANDONOS EN LAS CONCLUSIONES OBTENIDAS PARA EL CASO DE UNA ECUACION DIFERENCIAL ORDINARIA Y EN EL HECHO DE QUE UN SISTEMA DE n ECUACIONES DIFERENCIALES SE RESUELVE APLICANDO EN PARALELO n VECES LA TECNICA PARA RESOLVER UNA SOLA ECUACION, NUESTRA RECOMENDACION ES EL METODO DE RUNGE - KUTTA DE 4° ORDEN CON 7 CONSTANTES.

B I B L I O G R A F I A

- MC. CABE, SMITH
UNIT OPERATIONS OF CHEMICAL ENGINEERING
KOGAKUSHA, 1976
- FOUST, WENZEL, CLUP, MAUS, ANDERSEN
PRINCIPIOS DE OPERACIONES UNITARIAS
COMPANIA EDITORIAL CONTINENTAL S.A., 1974
- TREYBAL
MASS TRANSFER OPERATIONS
KOGAKUSHA, 1968
- PERRY, CHILTON
CHEMICAL ENGINEERS' HANDBOOK (FIFTH EDITION)
KOGAKUSHA, 1973
- FORMAN
NUMERICAL METHODS THAT WORK
HARPER INTERNATIONAL, 1970
- JACQUEZ
A FIRST COURSE IN COMPUTING AND NUMERICAL METHODS
ADDISON - WESLEY, 1970
- CONTE, DE BOOR
ANALISIS NUMERICO (SEGUNDA EDICION)
MC. GROW - HILL, 1974
- COLLATZ
THE NUMERICAL TREATMENT OF DIFFERENTIAL EQUATIONS (THIRD EDITION)
SPRINGER - VERLAG NEW YORK INC., 1966

- CARNAHAN, LUTHER, WILKES
APPLIED NUMERICAL METHODS
JOHN WILEY & SONS, INC., 1969
- SPIEGEL
MANUAL DE FORMULAS Y TABLAS MATEMATICAS
MC GRAW - HILL, 1970
- BURDEN, FAIRES, REYNOLDS
NUMERICAL ANALYSIS (SECOND EDITION)
PRINDLE WEBER & SCHMIDT, 1981
- KREYSZIG
ADVANCED ENGINEERING MATHEMATICS (THIRD EDITION)
JOHN WILEY, 1972
- FRANKS
MODELING AND SIMULATION IN CHEMICAL ENGINEERING
JOHN WILEY, 1972
- SHERWOOD, REED
APPLIED MATHEMATICS IN CHEMICAL ENGINEERING (SECOND EDITION)
MC. GRAW - HILL, 1957
- JENSON, JEFFREYS
MATHEMATICAL METHODS IN CHEMICAL ENGINEERING
ACADEMIC PRESS, 1969
- AGUILAR DOMINGUEZ, M.D.
TESIS : TECNICAS DE SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES
PARCIALES APLICADAS EN INGENIERIA QUIMICA. 1986