CAPITULO 16

Ecuaciones algebraicas

16.1 INTRODUCCION

Frecuentemente, la resolución numérica de los problemas se limita a resolver una o más ecuaciones algebraicas. Una ecuación algebraica es aquella que implica algunas variables pero no integrales o derivadas de esa variable. Los siguientes son ejemplos de ecuaciones algebraicas:

$$-x^3 + 2x + 1 = 0 \tag{16.1}$$

$$5x - 6 = 0 \tag{16.2}$$

$$3x + y = 7 \tag{16.3a}$$

$$x + 3y = 5 \tag{16.3b}$$

Las ecuaciones 16.1 y 16.2 constituyen una sola ecuación para una sola variable, x. Las ecuaciones 16.3 son dos ecuaciones que deben resolverse simultáneamente para las dos variables, x y y. Tales sistemas de ecuaciones se conocen algunas veces como ecuaciones *dobles.*

Las ecuaciones algebraicas se clasifican en forma general como *lineales* o *no lineales.* Las ecuaciones lineales son aquellas en que todas las variables aparecen elevadas a la primera potencia y, si hay dos o más variables, no hay productos. Las ecuaciones 16.2 y 16.3 son lineales. La ecuación 16.1 no es lineal puesto que x aparece elevada a la tercera potência. Es mucho más fácil resolver las ecuaciones lineales.

16.2 ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES

Las ecuaciones algebraicas lineales se resuelven multiplicando y dividiendo todos los términos entre valores constantes y sumando y restando para manipular las ecuaciones y convertirlas en una nueva forma que dé la respuesta explícita. Por ejemplo, la ecuación 16.2 se resuelve dividiendo cada término entre cinco para obtener:

$$x - \tfrac{6}{5} = 0$$

ó $x = 6/5$. Las ecuaciones 16.3 se resuelven multiplicando cada término de la segunda ecuación por 3 para obtener:

$$3x + y = 7$$

$$3x + 9y = 15$$

y restando la primera de la segunda para obtener:

$$8y = 8$$

ó $y = 1$. La ecuación 16.3b puede escribirse entonces:

$$x + 3 = 5$$

ó $x = 2$.

Cuando el número de ecuaciones y de incógnitas es pequeño, por ejemplo dos o tres, la solución es bastante elemental. Sin embargo, para números más grandes de ecuaciones, es necesario contar con un método sistemático que pueda ser adaptado fácilmente a una computadora. De tales métodos, probablemente el más simple sea el método de *eliminación de Gauss*. Suponga que se tiene N ecuaciones para N variables representadas como $x_1, x_2, \ldots, x_N$:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1N}x_N &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2N}x_N &= b_2 \\ \vdots \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \quad &\quad \vdots \\ a_{N1}x_1 + a_{N2}x_2 + \cdots + a_{NN}x_N &= b_N \end{aligned} \tag{16.4}$$

Aquí, las *a's* y *b's* son números dados. El sistema de ecuaciones se manipula para convertirlo a una forma *triangular:*

$$\begin{aligned} x_1 + c_{12}x_2 + c_{13}x_3 + \cdots + c_{1,N-1}x_{N-1} + c_{1N}x_N &= d_1 \\ x_2 + c_{23}x_3 + \cdots + c_{2,N-1}x_{N-1} + c_{2N}x_N &= d_2 \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \quad &\quad \vdots \\ x_{N-1} + c_{N-1,N}x_N &= d_{N-1} \\ x_N &= d_N \end{aligned} \tag{16.5}$$

Entonces la solución se obtiene, resolviendo a su vez $x_N, x_{N-1}, \ldots, x_1$.

El mecanismo de la eliminación de Gauss se ilustra mediante el siguiente ejemplo:

$$
\begin{array}{r|l}
+2x_1 + 3x_2 + 5x_3 = +9 & \text{(a1)} \\
+4x_1 - x_2 + 3x_3 = +11 & \text{(b1)} \\
-x_1 + 2x_2 + 2x_3 = -1 & \text{(c1)} \\
\hline
x_1 + \tfrac{3}{2}x_2 + \tfrac{5}{2}x_3 = +\tfrac{9}{2} & \text{(a2)} = \dfrac{+1}{+2}\,\text{(a1)} \\
-7x_2 - 7x_3 = -7 & \text{(b2)} = \text{(b1)} - \dfrac{+4}{+2}\,\text{(a1)} \\
+\tfrac{7}{2}x_2 + \tfrac{9}{2}x_3 = \dfrac{+7}{2} & \text{(c2)} = \text{(c1)} - \dfrac{-1}{+2}\,\text{(a1)} \\
\hline
x_1 + \tfrac{3}{2}x_2 + \tfrac{5}{2}x_3 = \tfrac{9}{2} & \text{(a3)} = \text{(a2)} \\
x_2 + 1x_3 = +1 & \text{(b3)} = \dfrac{+1}{-7}\,\text{(b2)} \\
1x_3 = 0 & \text{(c3)} = \text{(c2)} - \dfrac{+\frac{7}{2}}{-7}\,\text{(b2)}
\end{array}
$$

En este punto, el sistema está en la forma triangular de la ecuación 16.5. Una operación de adición conduce a la solución:

$$
\begin{array}{r|l}
x_3 = 0 & \text{(c4)} = \text{(c3)} \\
x_2 \quad = +1 & \text{(b4)} = \text{(b3)} - 1\text{(c4)} \\
x_1 \quad = +3 & \text{(a4)} = \text{(a3)} - \tfrac{3}{2}\text{(b4)} - \tfrac{5}{2}\text{(c4)}
\end{array}
$$

En el proceso de triangulación se divide entre la secuencia de coeficientes encerrados en círculos, llamados *pivotes*, se multiplican las ecuaciones restantes por una constante apropiada y se resta. La figura 16.1 es un programa Fortran IV para la solución de N ecuaciones utilizando este método, y se muestran los datos específicos para el ejemplo utilizado aquí.

En la práctica se necesitan dos tipos de modificaciones. Primera; si surge un pivote "cero", las ecuaciones deben reordenarse. Esta modificación está incluida en el programa. Segunda; normalmente se lleva a cabo un reordenamiento previo de términos para asegurarse que números de magnitud similar se restan uno de otro para los cálculos de la computadora. Sean siempre exactos. En este texto no se profundizará en esos detalles.

16.3 ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES

Las ecuaciones algebraicas no lineales se llaman de *orden enésimo* o ecuaciones polinomiales de orden n, donde la cantidad desconocida aparece elevada a

```
C       PROGRAMA DE ELIMINACION DE GAUSS
C       ESTE PROGRAMA ESTA ESCRITO EN LENGUAJE FORTRAN IV Y SE HA CORRIDO EN
C       UNA CALCULADORA XDS9300.
C       ESTE PROGRAMA RESUELVE HASTA 99 ECUACIONES ALGEBRAICAS SIMULTANEAS.
C       *    *    *    *    * notación *    *    *    *    *
C       N = NUMERO DE ECUACIONES
C       A = COEFICIENTES
C       B = MIEMBRO DERECHO DE LA ECUACION
        DIMENSIONAR A ( 99,99 ), B( 99 ), X ( 99 )
C       LEER N, A Y B
C       LOS COEFICIENTES SE LEEN EN COLUMNAS.
        LEER ( 105,999 ) N
    999 FORMATO ( 12 )
        LEER ( 105,998 ) ( ( A ( I, J ), I = 1, N ), J = 1, N ), ( B ( I ), I = 1, N )
    998 FORMATO ( 8F10.0 )
        M = N - 1
        EFECTUAR 10 I = 1, M
C       PROBAR PIVOTE CERO Y REORDENAR RENGLONES SI EXISTE PIVOTE CERO
        SI ( A ( I, I ) ) 98, 97 98
     97 EFECTUAR  40  JJ =  I, M
        JI = JJ + 1
        SI ( A ( JI, I ) ) 96, 40, 96
     40 CONTINUAR
     96 EFECTUAR 50 KJ = I, N
        MANTENER 1 = A ( I, KJ )
        A ( I, KJ ) = A ( JI, KJ )
     50 A ( JI, KJ ) = MANTENER 1
        MANTENER 2 = B ( I )
        B ( I ) = B ( JI )
        B ( JI ) = MANTENER 2
C       CONVERSION DE ECUACIONES A LA FORMA TRIANGULAR
     98 KI = I + 1
        EFECTUAR 80 J = KI, N
        RELACION  A ( J, I ) / A ( I, I )
        A ( J, I ) = 0.0
        EFECTUAR 20 L = KI, N
     20 A ( J, L ) = A ( J, L )-RELACION * A ( I, L )
     80 B ( J ) = B ( J )-RELACION * B ( I )
        EFECTUAR 70 IK = KI, N
     70 A ( I, IK ) = A ( I, IK ) / A ( I, I )
        B ( I ) = B (I ) / A ( I, I )
        A ( I, I ) = 1.
     10 CONTINUAR
C       RESOLUCION DE X ( I ) POR RETROSUSTITUCION
        X ( N ) = B ( N ) / A ( N, N )
        J = M
     99 II = J + 1
        TOTAL = 0.0
        EFECTUAR 30 L = II, N
     30 TOTAL = TOTAL + A ( J, L ) * X ( L )
        X ( J ) = B ( J )-TOTAL
        J = J — I
        SI ( J. llega 0 ) IR A 99
C       ESCRIBIR RESULTADOS
        EFECTUAR 60 J = 1, N
     60 ESCRIBIR ( 108,997 ) J, X ( J )
    997 FORMATO ( 6H X (, 12, 3H =, ELL.5
        SALIR LLAMAR A LA SALIDA
        TERMINAR
C       DATOS PARA EL PROBLEMA DE PRUEBA
        2.0     4.0    -1.0    3.0    -1.0    2.0    5.0    3.0
        2.0     9.0    11.0   -1.0
```

FIGURA 16.1 Programa en Fortran IV para resolver *N* ecuaciones algebraicas lineales, utilizando el método de eliminación de Gauss.

diferentes potencias hasta la enésima potencia. La ecuación 16.1 es de tercer orden, o una ecuación cúbica. Una de las propiedades importantes de las ecuaciones de enésimo orden es que tienen exactamente n soluciones, o raíces. Por ejemplo, la ecuación 16.1. se satisface con cada uno de los tres valores $x = -1.0, -0.616, +1.62$. Las ecuaciones que no son polinomios, se denominan a menudo trascendentales y pueden tener cualquier número de raíces. Por ejemplo, la ecuación sen $x = 0$ tiene un número infinito de raíces, $x = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \ldots$. En general, para las ecuaciones polinomiales cuadráticas, cúbicas y algunas cuárticas puede calcularse una solución empleando una fórmula exacta. En los otros casos deben utilizarse procedimientos para realizar cálculos aproximados.

Obviamente, graficando la función puede obtenerse una solución a una ecuación no lineal con una incógnita. Sin embargo, esto no produce raíces precisas en forma eficiente, y en particular, no se generaliza al caso de muchas ecuaciones. Por consiguiente aquí se estudiarán técnicas analíticas.

Las soluciones a las ecuaciones no lineales se obtienen mediante un procedimiento por tanteos, o *iterativos*. En una solución iterativa se calcula la raíz de la ecuación y se utiliza algún procedimiento sistemático para calcular una nueva estimación (mejor), para la cantidad en la cual no se satisface la ecuación, continuando el proceso hasta que el error en la solución queda dentro de una diferencia o tolerancia especificada. El procedimiento iterativo más simple es la *sustitución directa*, aquí se escribe la ecuación en la forma:

$$x = g(x) \tag{16.6}$$

Por ejemplo, la ecuación 16.1 se escribiría como:

$$x = \tfrac{1}{2}[x^3 - 1]$$

Si la enésima estimación de la solución se representa como x_n, entonces la estimación $n + 1^{\circ}$ se calcula a partir de:

$$x_{n+1} = g(x_n) \tag{16.7}$$

Para resolver la ecuación 16.1 se escribe:

$$x_{n+1} = \tfrac{1}{2}[x_n{}^3 - 1]$$

Si se hace una primera estimación como $x_0 = 0$, entonces se tiene:

$$x_1 = \tfrac{1}{2}[0^3 - 1] = -0.500$$
$$x_2 = \tfrac{1}{2}[-0.500^3 - 1] = -0.562$$
$$x_3 = \tfrac{1}{2}[-0.562^3 - 1] = -0.589$$

Continuando el proceso, se obtiene la secuencia de aproximación de $x_4, x_5, x_6, \ldots$, como -0.602, -0.609, -0.613, -0.615, $-0.616, \ldots$. Es evidente que la convergencia se obtiene en la raíz $x = -0.616$.

Conviene examinar este procedimiento gráficamente. x y $g(x) = [x^3 - 1]/2$ se grafican en función de x en las mismas coordenadas en la figura 16.2. Las soluciones $x = -1$, $x = -0.616$, y $x = 1.62$ son las intersecciones de las dos curvas. La solución iterativa puede deducirse de la secuencia de flechas. Inicialmente, para $x_0 = 0, g(x_0) = -1/2$. Siguiendo la recta $x = x$ (la línea de 45°) puede leerse el

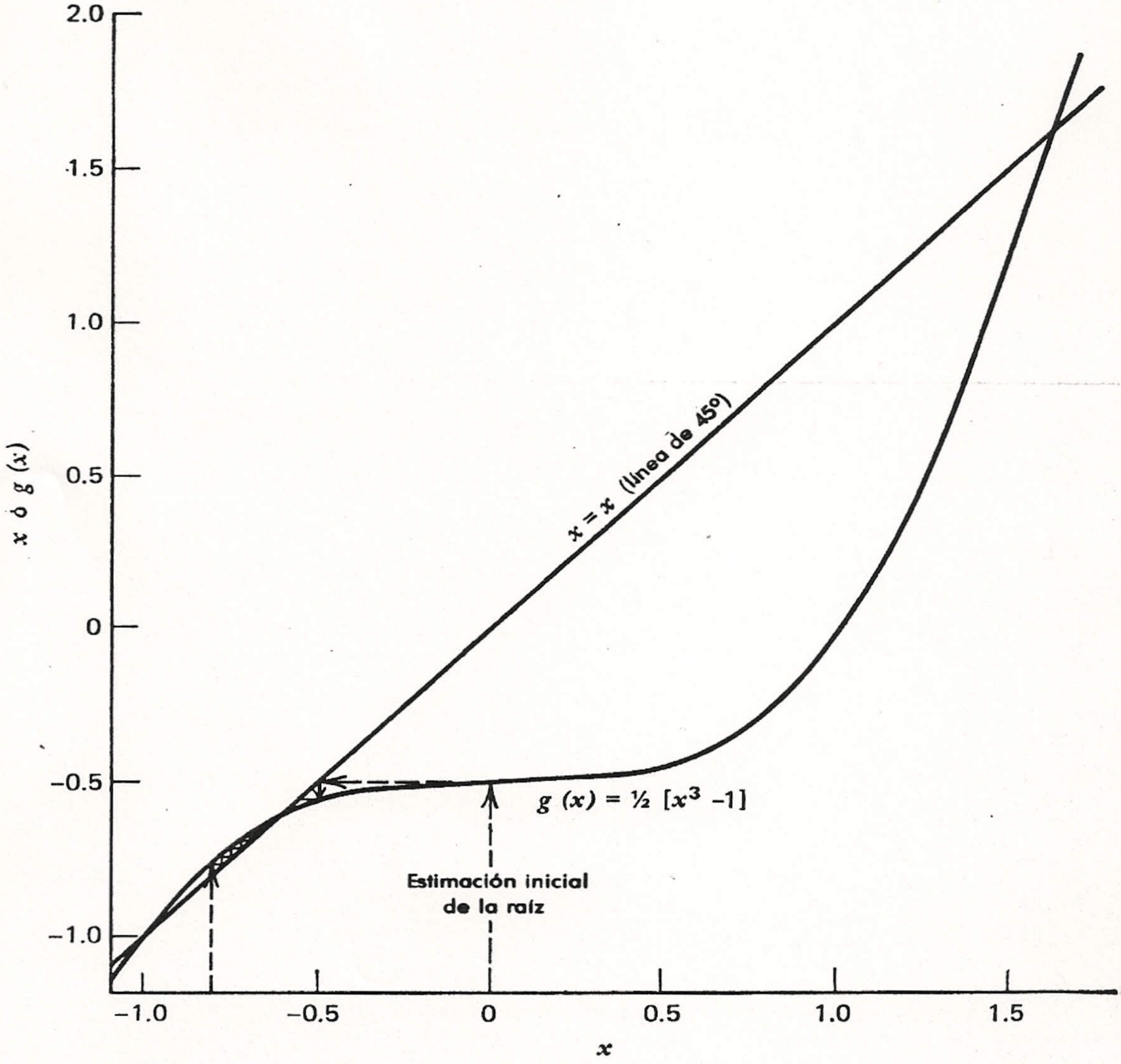

FIGURA 16.2 Representación gráfica de la solución de la ecuación 16.1, utilizando el método de sustitución directa. Ambas estimaciones iniciales muestran la convergencia a la raíz de $x = -0.616$.

siguiente valor de $g(x)$ de la gráfica de $g(x)$ al mismo valor de x. Volviendo a la línea de 45° se obtiene el siguiente valor, y así sucesivamente, y está claro cómo se presenta la convergencia. Note que si se principia a la izquierda de la raíz, la convergencia ocurrirá en la misma forma.

Este último punto merece mayor atención, ya que está claro que no importa, qué tan cerca se empiece de la raíz en $x = -1$ nunca puede convergerse a ella por este método, como se muestra gráficamente en la figura 16.3. Un resultado similar es válido a $x = +1.62$. La figura 16.4 muestra otras formas posibles de convergencia y divergencia de las iteraciones para las diferentes funciones $g(x)$. Puede demostrarse que la convergencia a una raíz ocurrirá solamente si $|dg/dx| < 1$ tanto en la raíz como en la región alrededor de la raíz que incluye a x_0. Este criterio se viola en el ejemplo en las raíces -1 y 1.62.

Algunas veces, es necesario emplear un artificio para poner la ecuación en la forma de la ecuación 16.6. Por ejemplo:

$$x^2 - 2 = 0$$

no tiene la forma requerida, pero la ecuación equivalente:

$$x^2 - 2 - \beta x + \beta x = 0$$

puede escribirse

$$x_{n+1} = \frac{1}{\beta}\,[2 + \beta x_n - x_n{}^2]$$

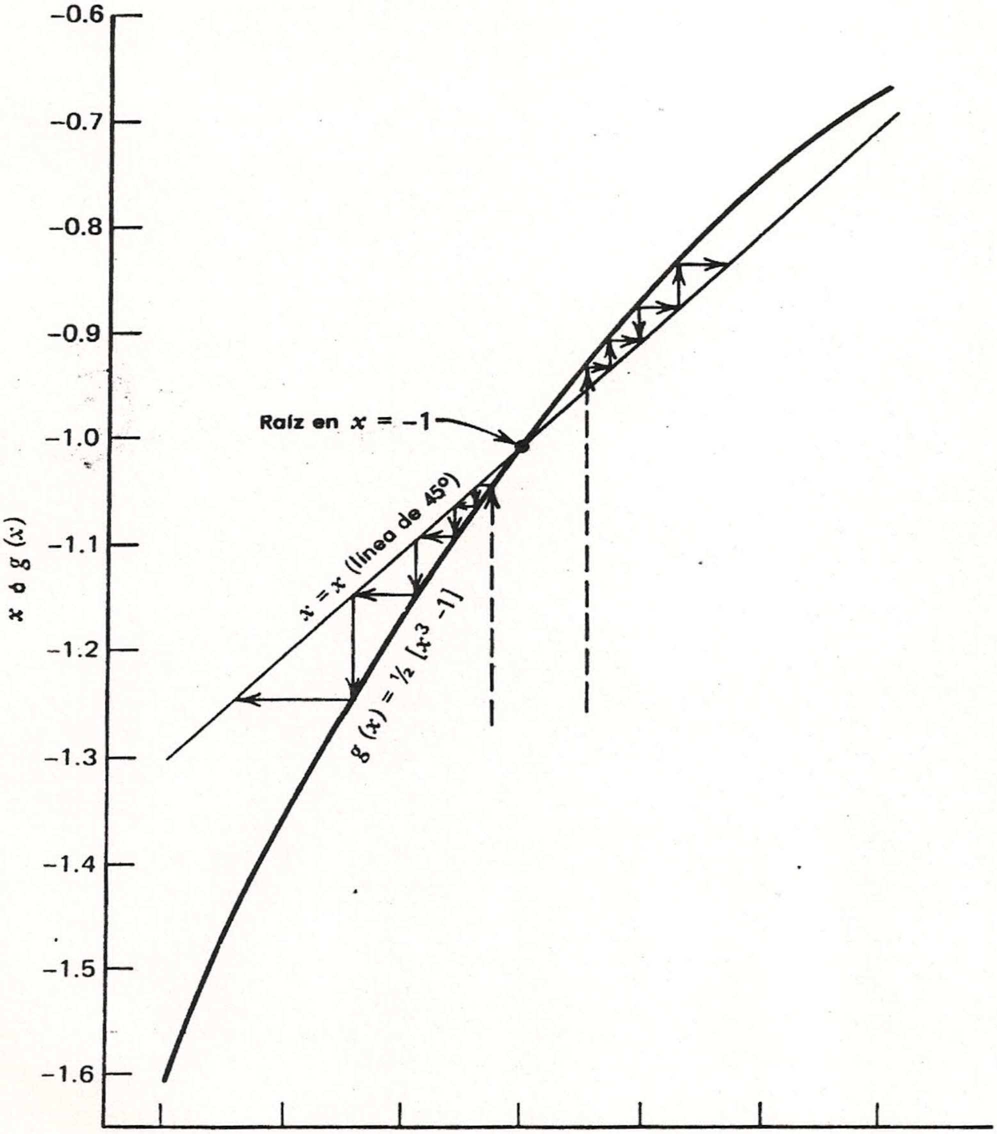

FIGURA 16.3 Representación gráfica de la resolución de la ecuación 16.1 en la vecindad de la raíz a $x = -1$ utilizando el método de sustitución directa.

Si se considera $x_0 = 1$, entonces el criterio de convergencia requiere que $\beta > 1$. Haciendo $\beta = 2$, se obtiene la secuencia 1, 1.5, 1.375, 1.429, ... que se aproxima a la raíz 1.414 en forma oscilatoria.

Existen modificaciones más complicadas de la sustitución directa con mejores propiedades de convergencia, pero aquí no se examinarán. El método requiere poca manipulación y cálculo, pero existe la posibilidad bastante grande de que no se encuentre una raíz, aun con una buena estimación de la solución; éste es el precio de la simplificación.

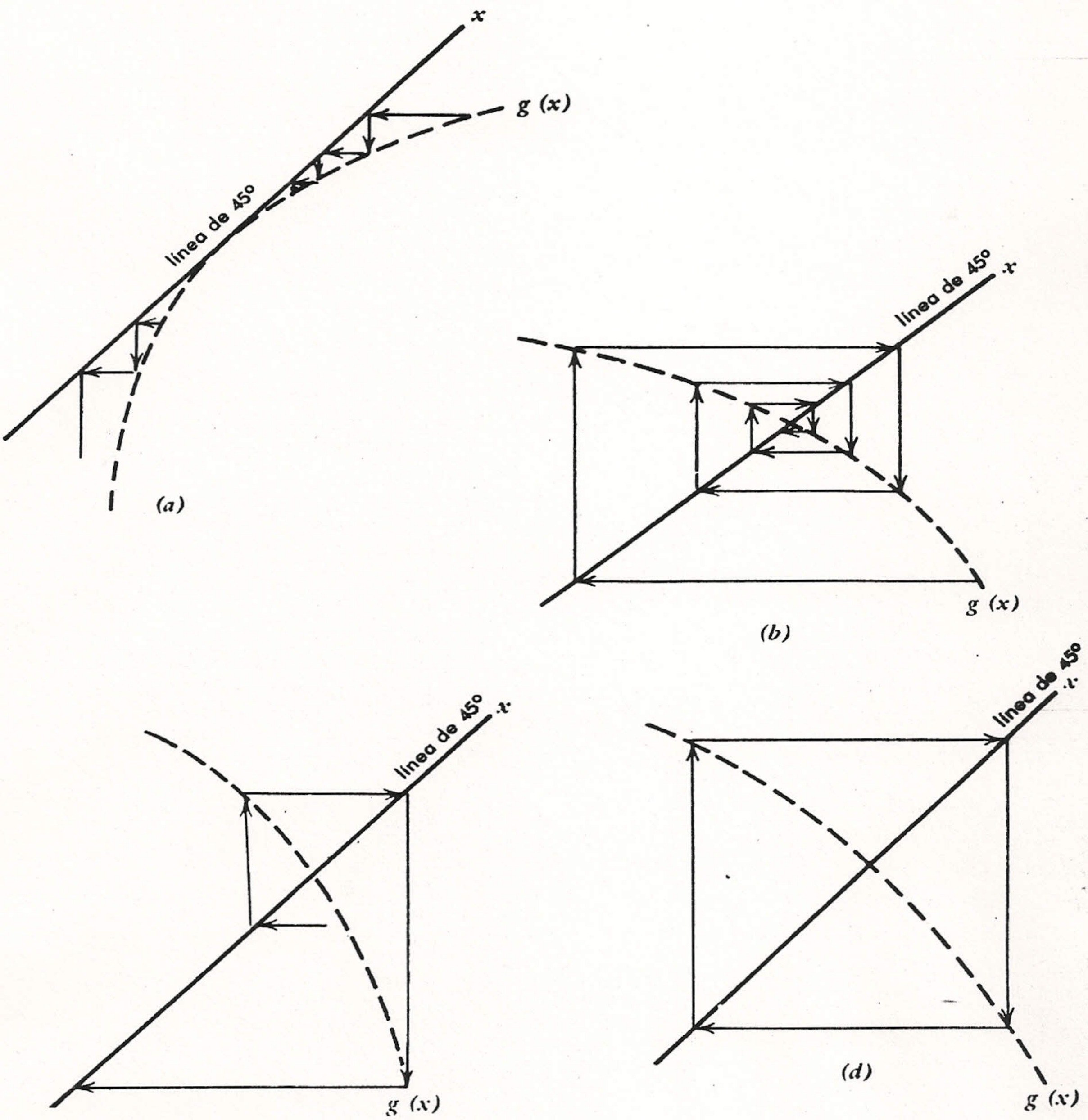

FIGURA 16.4 Formas de convergencia para el método de sustitución directa. (*a*) Convergencia de un lado, divergencia del otro. (*b*) Convergencia oscilatoria. (*c*) Divergencia oscilatoria. (*d*) Ciclos.

La extensión a varias ecuaciones no lineales es obvia. Si se tienen dos ecuaciones lineales en las variables x y y se escriben en la forma:

$$x = g(x, y) \qquad y = h(x, y) \tag{16.8}$$

Entonces, las iteraciones se llevan a cabo con las ecuaciones:

$$x_{n+1} = g(x_n, y_n) \qquad y_{n+1} = h(x_n, y_n) \tag{16.9}$$

Puede obtenerse una convergencia más rápida, utilizando la formulación alterna que utiliza el nuevo valor de x para calcular y:

$$x_{n+1} = g(x_n, y_n) \qquad y_{n+1} = h(x_{n+1}, y_n) \tag{16.10}$$

Ejemplo 16.1

Las ecuaciones para la temperatura y la concentración del efluente en una reacción de primer orden, en un reactor tipo tanque agitado adiabático se derivan en la sección 12.9 como:

$$qc_{Af} - qc_A - Vk_0e^{-E/RT}c_A = 0$$

$$\rho q\underline{c}_pT_f - \rho q\underline{c}_pT + Vk_0e^{-E/RT}[-\Delta \underline{H}_R]c_A = 0$$

Se utilizan los siguientes valores numéricos:

$$q = 100 \text{ pies}^3/\text{hr} \quad c_{Af} = 0.5 \text{ moles/pie}^3 \quad V = 30 \text{ pie}^3$$

$$k_0 = 10^9 \text{ min}^{-1} \quad E = 1.85 \times 10^4 \text{ cal/g-mol}$$

$$R = 1.987 \text{ cal/mol } ^\circ\text{K} \quad \rho = 62.4 \text{ lb}_m/\text{pie}^3$$

$$\underline{c}_p = 1.0 \text{ BTU/lb}_m\,^\circ\text{F} = 1.8 \text{ BTU/lb}_m{}^\circ\text{k} \quad T_f = 100^\circ\text{F} = 311^\circ\text{K}$$

$$\Delta\underline{H}_R = -3.8 \times 10^4 \text{ BTU/lb-mol}$$

Representando c_A por c las ecuaciones se transforman en:

$$1.667c + 3 \times 10^{10}e^{-9310/T}c - 0.8335 = 0 \tag{16.11a}$$

$$1.872 \times 10^2T - 11.4 \times 10^{14}e^{-9310/T}c - 5.823 \times 10^4 = 0 \tag{16.11b}$$

o, en la forma de la ecuación 16.8:

$$c = 0.5 - 1.8 \times 10^{10}e^{-9310/T}c$$

$$T = 3.11 \times 10^2 + 6.09 \times 10^{12}e^{-9310/T}c$$

La fórmula de iteración, ecuación 16.10, es entonces:

$$c_{n+1} = 0.5 - 1.8 \times 10^{10}e^{-9310/T_n}c_n$$

$$T_{n+1} = 3.11 \times 10^2 + 6.09 \times 10^{12}e^{-9310/T_n}c_{n+1}$$

De las estimaciones iniciales $c_0 = 0.20$, $T_0 = 200^\circ$ F $= 366.7^\circ$K, se obtiene la siguiente secuencia de resultados:

$n =$ 0	1	2	3	4
$c_n =$ 0.20	0.4661	0.4991	0.4988	0.4991
$T_n =$ 366.7	337.7	314.2	311.4	311.3

Los resultados $c = 0.499$, $T = 311.4$,que corresponde esencialmente al caso en que no hay reacción, se obtienen de las estimaciones iniciales. Sin embargo, estas ecuaciones no lineales también tienen raíces en $c = 0.2568$, $T = 393.4$ y $c = 0.0080$, $T = 477.5$. Estas raíces no pueden encontrarse por sustitución directa. De hecho, puede demostrarse que la convergencia solamente obtiene las raíces que satisfacen $T < 316.23$.

En este estudio debe demostrarse que aunque el problema es un ejemplo excelente para demostrar la solución de dos ecuaciones no lineales con dos incógnitas, su estructura particular es tal, que puede convertirse en una sola ecuación para T y calcularse como una ecuación compleja con una incógnita.

16.4 ITERACION NEWTON - RAPHSON

El método *Newton–Raphson* es un método iterativo basado en el cálculo que se utiliza para resolver ecuaciones algebraicas no lineales que siempre convergen de una estimación inicial, y que convergen mucho más rápidamente que la sustitución directa. Sin embargo, se requiere mayor esfuerzo para obtener la solución.

La ecuación algebraica se representará en la forma:

$$f(x) = 0 \tag{16.12}$$

Por ejemplo, en la ecuación 16.1 $f(x) = -x^3 + 2x + 1$. Se tiene una estimación x_n de la raíz, y se supone que x_{n+1} es la raíz verdadera. Entonces:

$$f(x_{n+1}) = 0$$

Pero si x_n y x_{n+1} están muy cerca una de otra puede expandirse $f(x_{n+1})$ en una serie de Taylor alrededor de x_n y escribir:

$$f(x_{n+1}) = f(x_n) + f'(x_n)[x_{n+1} - x_n] + \cdots = 0$$

y, despreciando los términos cuadráticos en la serie de Taylor, pueden calcularse x_{n+1}:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \tag{16.13}$$

Ejemplo 16.2

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

$$f'(x) = -3x^2 + 2$$

La fórmula de iteración, es entonces:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{-x_n{}^3 + 2x_n + 1}{-3x_n{}^2 + 2} = \frac{2x_n{}^3 + 1}{3x_n{}^3 - 2}$$

Para diversos valores iniciales la secuencia del cálculo es como sigue

x_0	x_1	x_2	x_3
0	−0.50	−0.60	−0.616
−0.80	−0.50	−0.60	−0.616
−0.85	−1.105	−1.02	−1.00
+3.0	+2.20	+1.78	+1.62

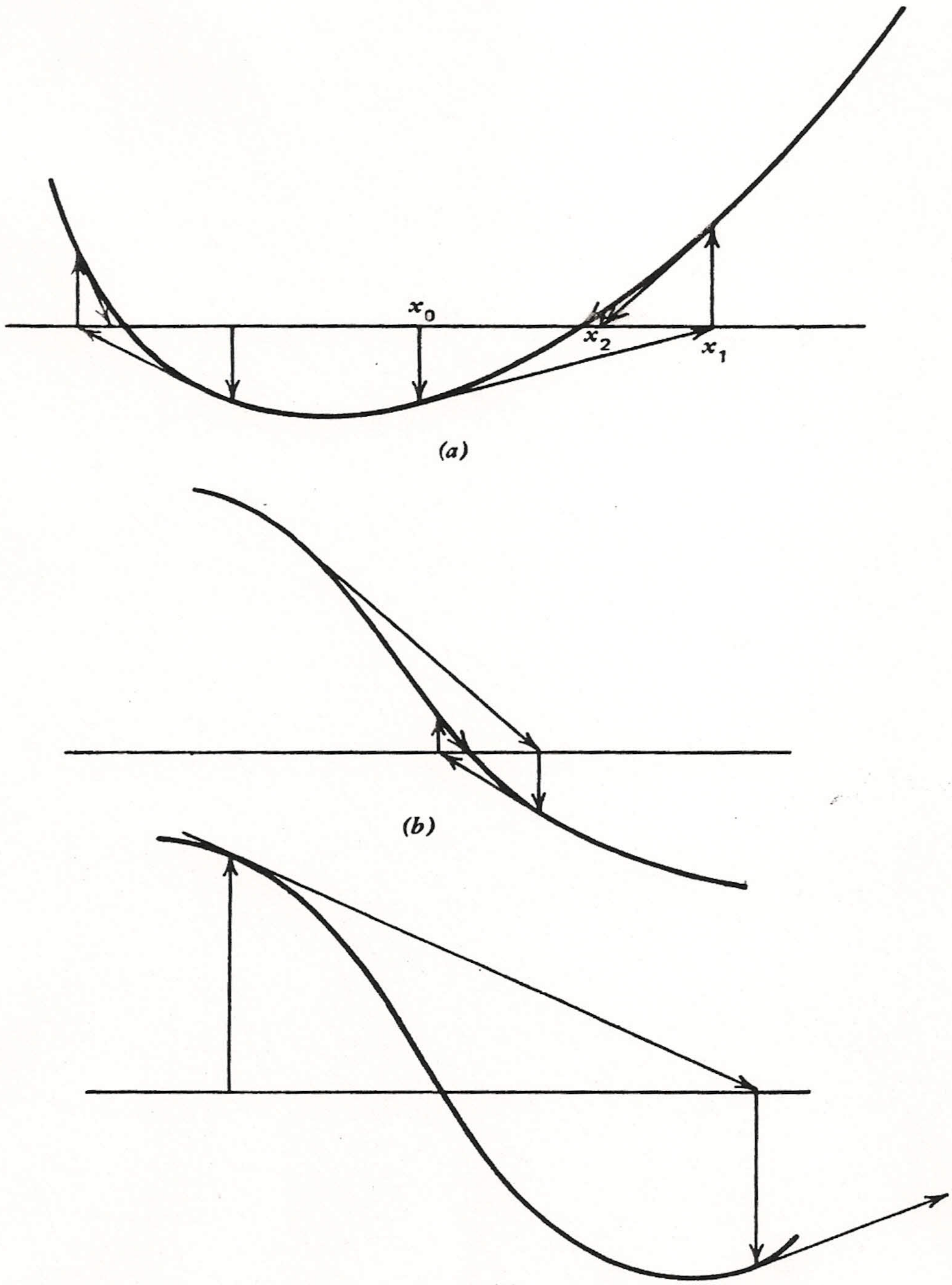

FIGURA 16.5 Formas de convergencia del método Newton-Raphson. (*a*) Convergencia a las diferentes raíces. (*b*) Convergencia oscilatoria. (*c*) Divergencia.

Es obvio que, dependiendo del valor inicial, puede obtenerse una convergencia rápida a cada una de las tres raíces.

La iteración Newton-Raphson es equivalente a aproximar la función por su línea tangente en la estimación de la raíz. En la figura 16.5 se muestran los tipos de comportamiento que deben esperarse. Se ve que, por lo general, la convergencia ocurre, siempre y cuando no exista ningún máximo o mínimo en la función, entre la iteración y la raíz. La figura 16.6 es un programa en Fortran IV para resolver los problemas de iteración por el método Newton Raphson, utilizando la función particular del ejemplo anterior.

```
C       PROGRAMA NEWTON RAPHSON
C       ESTE PROGRAMA ESTA ESCRITO EN LENGUAJE FORTRAN IV Y SE HA CORRIDO EN
C       UNA CALCULADORA XDS 9300.
C       LEER EL VALOR INICIAL DE X. CRITERIO DE CONVERGENCIA Y NUMERO MAXIMO
C       DE ITERACIONES.
        LEER ( 105,999 ) X, EPS, N
    999 FORMATO ( 2F10.0, I5 )
C       INICIAR CONTADOR DE ITERACION
        I = 1
C       LOS VALORES DE LAS FUNCIONES Y SU PRIMERA DERIVADA SE OBTIENEN DE
C       SUBPROGRAMAS DE FUNCIONES.
     20 XN = X —Y ( X ) / DYDX ( X )
        ESCRIBIR ( 108, 998 ) XN
    998 FORMATO ( E12.5 )
C       PRUEBA DE CONVERGENCIA
        SI ( ABS ( XN —X ). LE. EPS. O. I. LLEGA A N ) IR A 10
        I = I + 1
C       ACTUALIZAR VALOR DE X
        X = XN
        IR A 20
     10 LLAMAR A LA SALIDA
        TERMINAR
        FUNCION Y ( X )
C       INSERTAR FUNCION DE INTERES EN LA SIGUIENTE TARJETA
        Y= —X ** 3 + 2 * X + 1.
        REGRESAR
        TERMINAR
        FUNCION DYDX ( X )
C       INSERTAR LA DERIVADA DE LA FUNCION EN LA SIGUIENTE TARJETA
        DYDX = —3. * X * X + 2.
        REGRESAR
        TERMINAR
C       DATOS PARA EL PROBLEMA DE PRUEBA
        3.0              00001              50
```

FIGURA 16.6 Programa en Fortran IV para resolver una ecuación algebraica no lineal, utilizando el método de Newton- Raphson.

La extensión de la iteración Newton - Raphson a más de una ecuación no lineal de más de una incógnita, requiere del uso de una versión de variables múltiples del teorema de Taylor que no se ha desarrollado. Es suficiente notar que el procedimiento es equivalente a la aproximación de una superficie N-dimensional por su hiperplano tangente en $N - 1$ dimensiones. Para dos ecuaciones con dos incógnitas:

$$f(x, y) = 0 \qquad g(x, y) = 0 \tag{16.14}$$

La expansión para los iterados x_{n+1}, y_{n+1} alrededor de x_n, y_n es:

$$f(x_{n+1}, y_{n+1}) = f(x_n, y_n) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n)[x_{n+1} - x_n]$$

$$+ \frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n)[y_{n+1} - y_n] + \cdots$$

$$g(x_{n+1}, y_{n+1}) = g(x_n, y_n) + \frac{\partial g}{\partial x}(x_n, y_n)[x_{n+1} - x_n]$$

$$+ \frac{\partial g}{\partial y}(x_n, y_n)[y_{n+1} - y_n] + \cdots$$

y las nuevas estimaciones x_{n+1}, y_{n+1} se encuentran como soluciones a las ecuaciones *lineales* dobles:

$$\left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n)\right]x_{n+1} + \left[\frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n)\right]y_{n+1}$$

$$= -f(x_n, y_n) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n)x_n + \frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n)y_n \tag{16.15a}$$

$$\left[\frac{\partial g}{\partial x}(x_n, y_n)\right]x_{n+1} + \left[\frac{\partial g}{\partial y}(x_n, y_n)\right]y_{n+1}$$

$$= -g(x_n, y_n) + \frac{\partial g}{\partial x}(x_n, y_n)x_n + \frac{\partial g}{\partial y}(x_n, y_n)y_n \tag{16.15b}$$

Ejemplo 16.3

Las ecuaciones 16.11 se escriben como:

$$f(c, T) = 1.667c + 3 \times 10^{10}e^{-9310/T}c - 0.8335 = 0$$

$$g(c, T) = 1.872 \times 10^2 T - 11.4 \times 10^{14}e^{-9310/T}c$$

$$-5.823 \times 10^4 = 0$$

Entonces las derivadas parciales requeridas son:

$$\frac{\partial f}{\partial c}(c_n, T_n) = 1.667 + 3 \times 10^{10}e^{-9310/T_n}$$

$$\frac{\partial f}{\partial T}(c_n, T_n) = \frac{9310}{T_n^2} \times 3 \times 10^{10}e^{-9310/T_n}c_n$$

$$\frac{\partial g}{\partial c}(c_n, T_n) = -11.4 \times 10^{14}e^{-9310/T_n}$$

$$\frac{\partial g}{\partial T}(c_n, T_n) = 1.872 \times 10^2 - \frac{9310}{T_n^2} \times 11.4 \times 10^{14}e^{9310/T_n}c_n$$

Las ecuaciones 16.15 se resuelven sustituyendo x y y por c y T, respectivamente. En la tabla 16.1 se muestra la convergencia de las iteraciones a partir de varias estimaciones iniciales. Es evidente, que las tres soluciones pueden obtenerse rápidamente y la solución particular depende de la estimación inicial.

TABLA 16.1 Convergencia de las iteraciones para la concentración y la temperatura en un RTTAFC a partir de varios valores iniciales, utilizando el método de Newton-Raphson.

$n =$	0	1	2	3	4	5	6	7
$c_n =$	0.3	0.5296	0.4993	0.4991				
$T_n =$	350.0	301.0	311.3	311.4				
$c_n =$	0.3	0.2568						
$T_n =$	388.0	393.4						
$c_n =$	0.260	0.2518	0.2566	0.2568				
$T_n =$	400.0	395.1	393.4	393.4				
$c_n =$	0.4	−0.0738	−0.0336	−0.0069	0.0054	0.0079	0.0080	
$T_n =$	500.00	505.2	491.6	482.6	478.4	477.6	477.5	
$c_n =$	0.001	0.0042	0.0078	0.0080				
$T_n =$	500.0	478.9	477.6	477.5				
$c_n =$	0.05	−0.1548	−0.0974	−0.0513	−0.0180	0.0011	0.0074	0.0080
$T_n =$	450.0	532.6	513.2	497.6	486.3	479.9	477.8	477.5
$c_n =$	0.023	0.0074	0.0053	0.0079	0.0080			
$T_n =$	450.0	482.8	478.5	477.6	477.5			