

2. MÉTODOS ABIERTOS

En contraste con los métodos cerrados descritos anteriormente, estos métodos son basados en fórmulas que requieren uno o dos valores iniciales de x , los cuales no necesariamente encierran la raíz. Por tanto, algunas veces estos métodos divergen o se alejan del valor real de la raíz a medida que los cálculos progresan. Sin embargo, cuando los métodos abiertos convergen, lo hacen más rápidamente que los métodos cerrados.

2.1. Método de Newton-Raphson

La Fig. 3 muestra la interpretación gráfica del método de Newton-Raphson, donde una tangente a la función, $f'(x_i)$, se extrapola hacia el eje de las x para proveer un estimado de la raíz al punto x_{i+1} . Luego, la primera derivada al punto x_i , es equivalente a la pendiente:

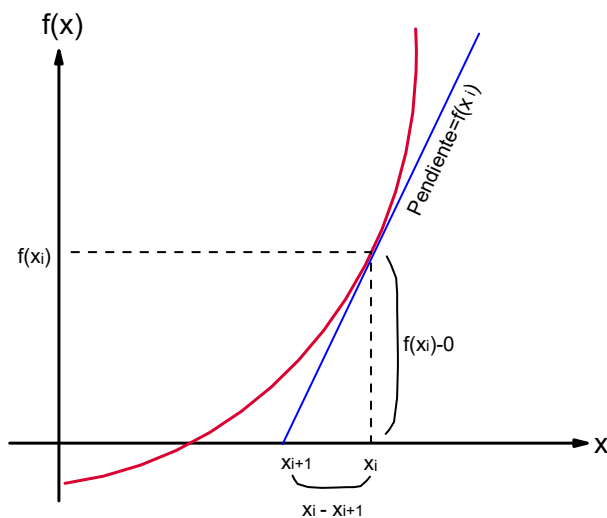


Fig. 3. Esquematización del método de Newton-Raphson

$$f'(x) = \frac{f(x) - 0}{x_i - x_{i+1}} \quad (3)$$

Se puede arreglar la Ec. 3 para encontrar un estimado de la raíz en el punto x_{i+1} .

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (4)$$

Esta ecuación es llamada la fórmula de Newton-Raphson.

Algoritmo Newton-Raphson

INICIO

INICIALE X_i . 'Puede ser $X_i = 0$

REPITA

CALCULE

$$X_{i+1} = X_i - \frac{f(X_i)}{f'(X_i)} \quad , \quad f'(X_i) \text{ es la derivada de } f(X_i)$$

$$\text{CALCULE} \quad |\varepsilon_{\text{aprox}}| = \left| \frac{X_{i+1} - X_i}{X_{i+1}} \right| * 100\%$$

HAGA

$$X_i = X_{i+1}$$

HASTA $|\varepsilon_{\text{aprox}}| < \varepsilon_t$.

FIN

Ejemplo 3: Encontrar el volumen molar de un gas

La ecuación de Van der Waals, fue presentada en 1873 como un perfeccionamiento semiteórico de la ecuación de gas ideal $pV = nRT$, donde p es la presión absoluta, V es el volumen, n es el numero de moles, R es la constante universal de los gases y T es la temperatura absoluta. La ecuación de estado de van der Waals esta dada por:

$$\left(P + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT$$

donde $v = V/n$ es el volumen molar y a y b son constantes empíricas que dependen del gas en particular. La constante b es la corrección por el volumen ocupado por las moléculas, y el término a/v^2 es una corrección que toma en cuenta las fuerzas de atracción intermolecular. Como podría esperarse en el caso de una ecuación generalizada, las constantes a y b se evalúan a partir del comportamiento general de los gases. En particular estas constantes se evalúan observando que la isoterma crítica pasa por un punto de inflexión en el punto crítico, y que la pendiente es cero en ese punto.

Determinar el volumen molar (v) para el alcohol etílico obteniendo la raíz de la ecuación $f(v) = 0$ aplicando el método de Newton Raphson con una aproximación inicial de 1 hasta que el error aproximado este por debajo del error de tolerancia para 4 cifras significativas.

Para generar la función $f(v)$ se utiliza la ecuación de Van der Waals con los siguientes parámetros:
Para el alcohol etílico ($a = 12.02$ $b = 0.08407$), temperatura $T = 350K$, $p = 1.7 \text{ atm}$,
 $R = 0.082054 \text{ L.atm} / \text{mol.K}$

La ecuación de Van der Waals puede describirse de la siguiente manera:

$$f(v) = Pv - Pb + \frac{a}{v} - \frac{ab}{v^2} - RT = 0$$

Su primera derivada es:

$$f'(v) = P - \frac{a}{v^2} + \frac{2ab}{v^3}$$

y, su segunda derivada es:

$$f''(v) = \frac{2a}{v^3} - \frac{6ab}{v^4}$$

El volumen molal (v) para el alcohol etílico con 4 cifras significativas es 16.55255.

v_i	v	$f(v_i)$	$f'(v_i)$	$v_{i_presente}$	v_{i_previo}	error %
1	-0.30883	-16.1523404	-12.341	-0.30883	1	423.8016
-0.30883	-1.72508	-	-	-1.72508	-0.30883	82.09754
-1.72508	-21.8243	-	-	-21.8243	-1.72508	92.0956
-21.8243	17.88775	-	-	17.88775	-21.8243	222.0067
17.88775	16.55438	2.216158185	1.662081	16.55438	17.88775	8.054445
16.55438	16.55255	0.00303433	1.655694	16.55255	16.55438	0.011072
16.55255	16.55255	-1.6241E-06	1.655684	16.55255	16.55255	5.93E-06

2.2 Método de la Secante

La implementación del método de Newton-Raphson requiere determinar la derivada de la función; ésta, en muchos casos, es extremadamente difícil de evaluar. Por tanto, este método, aproximada la derivada utilizando las diferencias finitas divididas como se muestra en la Fig. 4.

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i}$$

Esta aproximación se reemplaza en la Ec. 4 para obtener la fórmula iterativa para el método de la secante.

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)} \quad (5)$$

El método de la secante es más eficiente, particularmente cuando f es una función en la que se invierte mucho tiempo al evaluarla. Este método está relacionado con el método de la falsa posición, ya que ambos se basan en la fórmula de interpolación lineal (el primero utiliza extrapolación mientras que el segundo utiliza interpolación). Este método utiliza dos aproximaciones iniciales X_{i-1} y X_i . Por cada iteración se encuentra un nuevo valor para X_{i+1} y se actualizan los valores de X_{i-1} y X_i para la siguiente iteración así:

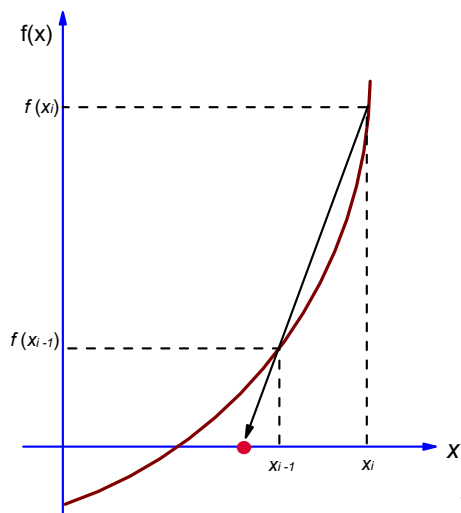


Fig. 4. Interpretación gráfica del método de la secante

$$X_{i-1} = X_i$$

$$X_i = X_{i+1}$$

Algoritmo Secante**INICIO**INICIALE X_{i-1} y X_i .**REPITA**

CALCULE

$$X_{i+1} = X_i - \frac{f(X_i)(X_{i-1} - X_i)}{f(X_{i-1}) - f(X_i)}$$

CALCULE

$$|\varepsilon_{\text{aprox}}| = \left| \frac{X_{i+1} - X_i}{X_{i+1}} \right| * 100\%$$

HAGA

$$X_{i-1} = X_i$$

$$X_i = X_{i+1}$$

HASTA $|\varepsilon_{\text{aprox}}| < \varepsilon_t$.**FIN****Ejemplo 4: Encontrar la fracción molar (x) del H_2O**

En un proceso de Ingeniería Química, el vapor de agua (H_2O) es calentado a temperaturas suficientemente altas hasta que una cantidad significativa del agua se disocia, o divide en partes, para formar oxígeno (O_2) e hidrógeno (H_2): $H_2O \rightleftharpoons H_2 + 1/2 O_2$

Si se asume que esta es la única reacción generada, la fracción molar (x) de H_2O que se disocia puede ser representada por: $k_p = \frac{x}{1-x} \sqrt{\frac{2p_t}{2+x}}$ donde k_p es la constante de equilibrio de la reacción y p_t es la presión total de la mezcla.

Utilice el método de la secante para encontrar la fracción molar (x) de H_2O sabiendo que $f(x) = 0$ con valores iniciales $x_{i-1} = 0.02$ y $x_i = 0.04$, si $p_t = 2$ y $k_p = 0.04568$. Itere hasta que el error aproximado sea menor que el error de tolerancia para 5 cifras significativas.

Reemplazando y haciendo $f(x)=0$, se tiene:

$$f(x) = 0.04568 = \frac{x}{1-x} \sqrt{\frac{2 \cdot 2}{2+x}} = 0 \quad \text{de donde: } f(x) = \frac{x}{1-x} \sqrt{\frac{4}{2+x}} - 0.04568$$

Los resultados para 5 cifras significativas indican que la fracción molar (x) es 0.031528.

x_{i-1}	x_i	$x_{i+1} = x_r$	$x_{i+1} = x_r$	x_i	error %
0.02	0.04	0.03145	0.03145	0.04	27.18485
0.04	0.03145	0.031527	0.031527	0.03145	0.244414
0.031450288	0.031527	0.031528	0.031528	0.031527	0.001663
0.031527345	0.031528	0.031528	0.031528	0.031528	1.03E-07