

MÈTODES DE CONVERGÈNCIA ACCELERADA EN LA RESOLUCIÓ  
DE SISTEMES D'EQUACIONS NO-LINEALS. APLICACIONS A  
L'ENGINYERIA QUÍMICA

Lluís C. PUIGJANER

Es revisen mètodes clàssics de resolució d'equacions no-lineals. L'adveniment dels computadors digitals ha divulgat aquests mètodes clàssics, però també ha obligat a modificar-los i a cercar noves tècniques per a millorar-ne la convergència. En aquest treball s'ha realitzat un estudi comparatiu dels mètodes de convergència accelerada més significatius, i es proposa el de Wegstein modificat com el més ràpid i insensible a les condicions operatives del sistema. El mètode proposat ha estat introduït en un simulador de processos químics amb resultats plenament satisfactoris. Finalment es mostren exemples indicatius dels avantatges que ofereix aquest nou mètode.

### 1. INTRODUCCIÓ

La resolució de sistemes d'equacions no-lineals ha assolit recentment una importància pràctica considerable, i ha esdevingut així un tema d'interès creixent en el camp de les ciències aplicades. A això hi ha contribuït en gran manera l'aparició del computador digital com a eina de treball accessible a grups no especialitzats en sistemes digitals. Un dels sectors que va acollir amb entusiasme aquesta innovació fou l'enginyeria química de disseny. La simulació digital fou adoptada com a tècnica de disseny per part d'importants grups de treball als centres d'enginyeria química més representatius. Cal remarcar respecte a això, l'extraordinària contribució de l'enginyer químic al desenvolupament de mètodes numèrics eficients per a la resolució de sistemes d'equacions no-lineals /13, 16, 18, 23, 24, 32, 34, 35, 36, 41 i 42/.

Hom pot dir que el mètode de substitucions successives i el de Newton-Raphson, eren pràcticament els únics utilitzats en la resolució numèrica dels sistemes d'equacions no-lineals, abans de l'arribada del computador. Però quan aquest es fa accessible, sorgeix un esforç decidit per a desenvolupar mètodes de solució més eficients que es poden categoritzar de la forma següent:

a) desenvolupament de tècniques generals per

a la resolució d'equacions algèbriques -- no-lineals;

b) desenvolupament de tècniques per a tractar separatament els aspectes lineals i no-lineals del problema.

Dins de la primera categoria cal citar abans que ningú Wolfe /45/, que fou el primer a mostrar com el mètode de la secant podia ser generalitzat per a resoldre sistemes multidimensionals d'equacions no-lineals. D'aleshores ençà aquest mètode ha sigut redescobert i modificat /3, 17, 36 i 46/. S'han fet aplicacions d'aquest mètode i se n'han proposat refinaments de càlcul /1, 28, 43 i 47/. Tornheim /40/ presenta una bona discussió sobre la convergència de tècniques generals iteratives, valent-se de múltiples iteracions anteriors, i entre elles, inclou el mètode de la secant. La millora decisiva d'aquest mètode de correspon tanmateix a Robinson /33/, i és implementada en algorismes de càlcul per Dulley i Pitteway /9/.

Ha estat desenvolupada una altra classe de mètodes que no requereix l'avaluació de la matriu jacobiana de derivades parcials. Són els mètodes anomenats quasi-Newton, que han estat tractats extensivament /1, 6 i 35/ i d'una manera unificada per Zeleznik /47/. D'altra banda, Marquardt /19/ proposà la solució del sistema d'equacions cercant el mínim no constret d'una funció escalar suma --

- L.C. Puigjaner de la Càtedra de Tecnologia Química General, E.T.S.E.I.B. (U.P.B.). Diagonal, 647. Barcelona 28  
- Article rebut el Maig del 1979.

quadràtica del sistema de funcions original. Aquest estudi dóna pas a mètodes especialitzats amb acceleració de la convergència /7, 14 i 15/. Més recentment /21/, han sigut aplicats amb èxit aquests tipus de mètodes al cas de simulacions complexes. La segona categoria esmentada es refereix a aquells mètodes que aprofiten els avantatges d'una linealització. En enginyeria química hom troba sovint models de processos químics que malgrat ser de naturalesa no-lineals, tenen aquest caràcter no-lineal que afecta només uns pocs elements del sistema. Si les variables que es comporten no-linealment poden ser determinades, aleshores la resta de variables desconegudes pot ser avaluat resolent un sistema d'equacions lineals.

Fou Nagiev /23/ qui primer presentà un model matemàtic unificat per al balanç de matèria en processos químics complexos amb recirculació múltiple. Per a obtenir un conjunt d'equacions lineals, introdueix les fraccions de recirculació com a coeficients del sistema d'equacions. Vela /41 i 42/ introduiria més tard el concepte de "fracció separadora" per a resoldre el problema de recirculació d'una forma analítica. La "fracció separadora" queda definida com la relació entre el flux molar d'un component en el corrent de sortida, i el mateix en el corrent d'entrada. Posteriorment estén el mateix concepte per a avaluar les fraccions separadores en el cas d'altres operacions bàsiques com absorció, destil·lació, i orejada. Naphtali /24/ realitzà per primer cop la simulació d'un sistema complex utilitzant la idea de Nagiev, tot aconseguint una reducció substancial de la mida del sistema no-lineal a resoldre. Nishimura i Yagi /26/ defineixen cada corrent en termes vectorials; d'aquesta fàcil la relació escalar de Vela que donava lloc a constants escalars en el seu balanç de matèria, dóna ara lloc a coeficients de les equacions lineals que són matrius quadrades.

En aquest treball es presenten els mètodes significatius utilitzats actualment, partint del mètode clàssic de Newton. Dels dos grups esmentats, presentem un mètode de la secant modificat com al més representatiu dels anomenats quasi-Newton. Els mètodes del Valor Propi Dominant i el de Wegstein que s'indica rà pertanyen al grup SOR (Successive Over-Relaxation). La introducció d'un factor accele-

rador apropiat fa que el mètode de Wegstein així modificat sigui el més ràpid i pràcticament insensible a les condicions operatives del sistema, segons mostrarem. La incorporació del mètode indicat al simulador SIMES, de disseny propi /31/, ha donat resultats excel·lents en el cas dels complexos sistemes d'equacions no-lineals a que dóna lloc la simulació de processos químics en estat estacionari /30/.

## 2. MÈTODES QUASI-NEWTON

La més gran part dels mètodes numèrics de resolució de sistemes d'equacions no-lineals, consisteixen normalment a suposar una solució aproximada  $\underline{x}^{(k)}$  per a obtenir una aproximació millor  $\underline{x}^{(k+1)}$  a la solució desitjada, mitjançant un procés iteratiu que podem representar per:

$$\underline{x}^{(k+1)} = F\left\{\underline{x}^{(k)}\right\} \quad (1)$$

La metodologia bàsicament consisteix en:

- 1r. Escollir una estimació inicial  $\underline{x}^{(0)}$  de la solució desitjada de l'equació  $f(\underline{x})=0$
- 2n. Aplicar l'equació (1) per a obtenir una solució millor.
- 3r. Acabar el procés iteratiu quan s'hagi assolit la convergència.

La diferència entre procediments numèrics alternatius rau en la selecció de la regla iterativa (1).

### 2.1 Mètode de la Secant Generalitzat

El mètode de la Secant Generalitzat utilitza una regla de formació de la forma:

$$\underline{x}^{(k+1)} = F\left\{\underline{x}^{(k)}, \underline{x}^{(k-1)}, \dots, \underline{x}^{(k-n)}\right\} \quad (2)$$

és a dir, utilitza les  $n+1$  aproximacions anteriors de la solució desitjada, per a generar una estimació millor.

L'estratègia del mètode de la secant suposa l'existència de  $n+1$  aproximacions  $\underline{x}^{(k)}, \dots, \underline{x}^{(k-n)}$  i els vectors corresponents  $f^{(k)}$ ,

...,  $f^{(k-n)}$  dels valors de la funció. Basta -  
llavors obtenir  $n+1$  factors ponderatius  $\pi_0,$   
...,  $\pi_n$  tals que

$$\pi_0 f^{(k)} + \pi_1 f^{(k-1)} + \dots + \pi_n f^{(k-n)} = 0 \quad (3)$$

$$\pi_0 + \pi_1 + \dots + \pi_n = 1 \quad (4)$$

cosa que suposa la resolució d'un sistema de  
 $n+1$  equacions lineals simultànies. Si defi--  
nim la matriu  $A^{(k+1)},$  (abreujadament,  $A$ )

$$A = \begin{bmatrix} f_1^{(k)} & f_1^{(k-1)} & \dots & f_1^{(k-n)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ f_n^{(k)} & f_n^{(k-1)} & \dots & f_n^{(k-n)} \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (5)$$

i el vector

$$\pi = (\pi_0, \dots, \pi_n)^t,$$

aleshores el sistema d'equacions (3 i 4) pot  
expresar-se de la forma següent:

$$A \pi = (0, 0, \dots, 1)^t$$

o bé

$$\pi = A^{-1} (0, 0, \dots, 1)^t \quad (6)$$

i per consegüent la nova aproximació a la so--  
lució serà

$$\underline{x}^{(k+1)} = \sum_{i=0}^n \pi_i \underline{x}^{(k-i)} \quad (7)$$

al qual correspondrà un valor funcional --

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

El problema es presenta al moment d'escollir  
un criteri de rebuig d'una de les aproxima--  
cions anteriors que serà substituïda per (7).  
El criteri més senzill consisteix a descar--  
tar arbitràriament l'aproximació més antiga.  
D'altra banda Wolfe /45/, proposa un criteri  
més complex però més satisfactori, el qual --  
hem utilitzat amb major eficàcia mercès a --  
les modificacions que seran indicades més en  
davant.

Si definim la funció

$$\phi^{(j)} \equiv \sum_{i=1}^n |f_i(\underline{x}^{(k-j)})|^2, \quad (j=0, \dots, n) \quad (8)$$

seran descartats els valors  $\underline{x}^{(k-r)}$  i  $\underline{f}^{(k-r)}$   
corresponents al major valor de  $\phi$  com aque--  
lla aproximació més allunyada de la solució.

L'eficiència del mètode rau en el càlcul de  
les successives inversions de la matriu --  
 $(A^{-1})^{k+1}$  a cada nova aproximació. La utilit--  
zació del mètode de la Secant Generalitzada  
queda summament abreujada tenint en compte --  
el que es proposa tot seguit.

Sigui

$$\underline{p} \equiv [f_1^{(k+1)}, \dots, f_n^{(k+1)}, 1]^t \quad (9)$$

la nova columna que reemplaçarà la columna  $r$   
de  $A^{(k)}$  per a generar la nova  $A^{(k+1)}$ . Defi--  
nim

$$q \triangleq (A^{-1})^{(k)} \underline{p} \quad (10)$$

aleshores els elements de  $(A^{-1})^{(k+1)}$  es po--  
den calcular:

$$(A^{-1})_{rj}^{(k+1)} = (A^{-1})_{rj}^{(k)} / q_{ri} \quad (j=1, \dots, k+1) \quad (11)$$

$$(A^{-1})_{ij}^{(k+1)} = (A^{-1})_{ij}^{(k)} - (A^{-1})_{rj}^{(k)} (q_i / q_r) \\ i \neq r \quad (j=1, \dots, k+1)$$

Cal remarcar que el mètode de la Secant Gene--  
ralitzada pot incórrer en problemes de con--  
vergència quan alguna de les equacions és li--  
neal. Així pot ser, per exemple, en el cas --  
indicat a la Fig. 1, el qual queda definit --  
pel senzill sistema d'equacions:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 1 & f_1(x_1, x_2) \\ x_1^2 + x_2^2 &= 1 & f_2(x_1, x_2) \end{aligned} \quad (12)$$

Si les aproximacions inicials són

$$\begin{aligned} x_1^{(1)} &= 0 & x_2^{(1)} &= 0 \\ x_1^{(2)} &= 1 & x_2^{(2)} &= 1 \\ x_1^{(3)} &= 2 & x_2^{(3)} &= 0 \end{aligned}$$

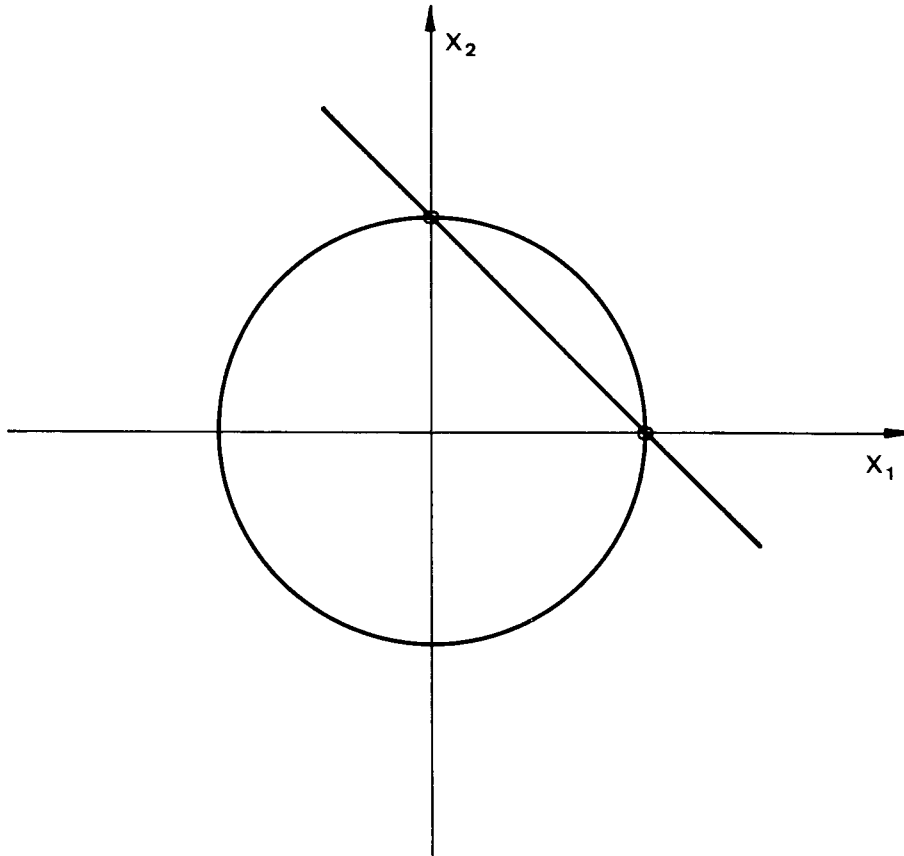


Fig. 1.  
Exemple utilitzat com a test al mètode de la Secant.

després de sis iteracions, la matriu A resulta ser

$$A = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.375 & -1.5 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

que és clarament singular i per tant, el procés iteratiu no pot continuar. Els valors de les tres darreres iteracions són

$$\underline{x}^{(4)} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.75 \\ 0.75 \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^{(6)} = \begin{bmatrix} 1.5 \\ -0.5 \end{bmatrix}$$

que cauen sobre la línia que passa per la solució buscada

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

i correspon a

$$f_1(x_1, x_2) = 0.$$

Això s'esdevé per a qualsevol grup d'aproximacions inicials escollit, i és degut, repetim, al caràcter lineal de  $f_1$ . Tot i amb això, aquesta dificultat queda salvada pel tractament digital del procés de càlcul, el qual introdueix sempre un cert arrodoniment que pertorba lleugerament les successives solucions, i aconsegueix que la matriu A no sigui declarada singular, permetent així que progressi el procés de convergència. Un criteri d'error adient permet de superar en la major part dels casos el problema indicat de güt a les raons esmentades anteriorment.

## 2.2 Mètode de Broyden

El mètode quasi-Newton de solució de sistemes d'equacions no-lineals més popular entre

els enginyers químics, és el mètode de Broyden /6/. Dos coneguts simuladors: CAPES i -- CHES, utilitzen aquest mètode de convergència accelerada que indiquem tot seguit /21/.

La utilitat d'aquest mètode està basada en -- la similitud que hi ha entre un sistema de -- recirculació i un sistema d'equacions no-li -- neals. El problema plantejat per un sistema de recirculació, s'expressa per l'equació

$$\underline{f}(\underline{s}) = \underline{r} - \underline{s} = 0 \quad (13)$$

on  $\underline{s}$  conté els valors estimats de les varia -- bles d'estat en el corrent de recirculació, i  $\underline{r}$  expressa els valors calculats per a les dites variables. Una millor aproximació per a  $\underline{s}$  segons aquest mètode serà

$$\underline{s}^{(k+1)} = \underline{s}^{(k)} + t^{(k)} H^{(k)} \underline{f}(\underline{s}^{(k)}) \quad (14)$$

on  $t$  és un factor d'esmortiment i  $H$  és una -- aproximació a la matriu jacobiana inversa -- canviada de signe  $J$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial s_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial s_n} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \frac{\partial f_n}{\partial s_1} & & \frac{\partial f_n}{\partial s_n} \end{bmatrix} \underline{s} = \underline{s}^{(k)} \quad (15)$$

El procés iteratiu comença usualment amb ma -- triu identitat per a  $H$  i el valor  $t=1$ . A ca -- da iteració subsegüent, la matriu  $H$  és modi -- ficada així:

$$H^{(k+1)} = H^{(k)} - \left( t^{(k)} \underline{p}^{(k)} + H^{(k)} \underline{y}^{(k)} \right) \underline{z}^t H^{(k)} / \underline{z}^t H^{(k)} \underline{y}^{(k)} \quad (16)$$

on

$$\underline{y}^{(k)} = \underline{f}(\underline{s}^{(k+1)}) - \underline{f}(\underline{s}^{(k)})$$

$$\underline{p}^{(k)} = \underline{s}^{(k+1)} - \underline{s}^{(k)}$$

i  $\underline{z}^t$  és un valor arbitrari. Broyden /6/ es -- cull per a  $\underline{z}^t$  el valor:

$$\underline{z}^t = \underline{p}^t$$

QÜESTIÓ - v.3, n22 (juny 1979)

Els inconvenients del mètode de Broyden són -- la seva complexitat de càlcul i la memòria -- necessària per a emmagatzemar  $H$ , la qual pot arribar a ser prohibitiva. Hi ha altres va -- llers possibles per a  $\underline{z}^t$  /13/. Més recentment s'han proposat solucions més eficients d'a -- quest mètode /20/ que es basen en l'existència d'una funció  $G$  tal que

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

només si

$$|\underline{J}(x)| = 0$$

cosa que implica que el sistema de funcions definit per (13) no forma un conjunt indepen -- dent. D'aquesta manera una aproximació numè -- rica de caràcter singular al jacobiana, ocasi -- onarà la no convergència de l'algorisme d'in -- versió en el procés d'inicialització, inter -- rompent el mecanisme de càlcul a aquest ni -- vell. El problema subjacent està en el fet -- que l'ocurrència del caràcter singular de -- l'aproximació del jacobiana, no implica neces -- sàriament que el problema plantejat sigui -- per si mateix un problema sense solució ffsi -- ca.

### 3. MÈTODES SOR

Els mètodes que pertanyen a aquesta catego -- ria són nombrosos i han sigut revisats recent -- ment /13/. No tots tanmateix són adequats -- quan la complexitat del sistema d'equacions no-lineals a resoldre augmenta considerable -- ment. Altres vegades succeeix que no són -- realment eficients per a sistemes de recircu -- lació complexos. Dos d'ells han estat espe -- cialment estudiats: el mètode del valor pro -- pi dominant (DEM), i el de Wegstein, als -- quals dedicarem la nostra atenció.

La fórmula iterativa generalitzada per a -- aquest grup de mètodes ve donada per

$$\underline{x}^{(k+1)} = \Omega \underline{x}^{(k)} + (I-\Omega) \underline{F}(\underline{x}^{(k)}) \quad (17)$$

que en el cas de dues dimensions seria:

$$\underline{x}^{(n+1)} = q \underline{x}^{(n)} + (1-q) \underline{F}(\underline{x}^{(n)}) \quad (18)$$

on  $q$  és el factor accelerador de la conver --

gència. Quan  $q=0$  l'expressió anterior queda reduïda al mètode de substitucions successives. Però quan

$0 < q < 1$  estabilització de la convergència per "esmoreïment".

$q < 0$  convergència accelerada per extrapolació

mentre que per a valors  $q \geq 1$ , la formulació anterior manca de significat. La dificultat essencial consisteix a trobar la metodologia adient per a obtenir un valor de  $q$  òptim. -- Kliesch obté un valor  $q=-0.75$  amb resultats satisfactoris en estudis de recirculació -- d'un procés de síntesi d'amoníac /15/. Rubin determina experimentalment el valor de  $q=0.50$  per al cas de reactors ideals en diverses -- condicions de treball. Però és sens dubte el mètode de Wegstein acotat i les modificacions que indicarem tot seguit, el que es comporta millor en situacions de màxima inestabilitat.

### 3.1 Mètode de Wegstein

Segons Wegstein, el valor inicial de  $q$  es pot obtenir a partir de les dues primeres -- aproximacions

$$\begin{aligned} x^{(n-1)} &, F\{x^{(n-1)}\} \\ x^{(n)} &, F\{x^{(n)}\} \end{aligned}$$

trobant el factor de Wegstein

$$w = \frac{x^{(n)} - x^{(n-1)}}{F\{x^{(n)}\} - F\{x^{(n-1)}\}} \quad (19)$$

El factor accelerador  $q$  s'expressa per

$$q = \frac{1}{1-w} \quad (20)$$

Segons Wegstein, el valor de  $q$  tendeix a -- assolir un valor relativament estable al cap de poques iteracions, el qual valor implicarà un comportament diferent segons els casos tal com s'indica en el següent resum, en -- funció del valor de  $q$ :

$q \leq 0$	convergència monotònica
$0 \leq q < 0.5$	convergència oscil.lant
$0.5 \leq q < 1$	divergència oscil.lant
$1 \leq q$	divergència monotònica

Diversos simuladors de processos, com per -- exemple el CHESS /21/, utilitzen un mètode -- de Wegstein "acotat" que consisteix a assignar el valor fix  $q=0$  quan després de les iteracions inicials el valor de  $q$  es fa  $q>0$  o -- bé  $q<-10$ . Tanmateix, aquesta estratègia no -- resol el cas més generalitzat amb l'aplicació de simuladors "block oriented" /31/ en -- processos químics on les  $n$  variables d'estat estan relacionades entre si segons un sistema del tipus:

$$\begin{aligned} x_1 &= F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ x_n &= F_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (21)$$

En aquest cas tant Wegstein com un mètode de Wegstein acotat només es podrien aplicar a cada component per separat, menyspreant, per tant, els efectes d'iteració entre les diverses variables. L'estudi que segueix suposa -- una aplicació més rigurosa del mètode de -- Wegstein al cas multidimensional. Seguint la formulació general (17) la nova aproximació a la solució serà

$$\underline{x}^{(k+1)} = \Omega \underline{x}^{(k)} + |I-\Omega| F\{\underline{x}^{(k)}\} \quad (22)$$

on  $\Omega$  seria calculada a partir de  $\underline{x}^{(k)}$ ,  $\underline{x}^{(k-1)}$ , ...,  $\underline{x}^{(k-n)}$  i de  $F\{\underline{x}^{(k)}\}$ ,  $F\{\underline{x}^{(k-1)}\}$ , ...,  $F\{\underline{x}^{(k-n)}\}$  de forma semblant a la indicada en el cas del mètode de la secant generalitzat.

Sempre que existeixi una solució analítica -- per a

$$\underline{x} = F(\underline{x}) \approx A\underline{x} + \underline{b} \quad (23)$$

es pot demostrar que la solució seria del tipus

$$\underline{x}_s = (I-A)^{-1} \underline{b} \quad (24)$$

on

$$A = (\delta F) (\delta x)^{-1} \quad (25)$$

$$\underline{b} = \underline{F}^{(0)} - (\delta F) (\delta x)^{-1} \underline{x}^{(0)} \quad (26)$$

i  $\delta F$  i  $\delta x$  són matrius de les quals els components són per definició

$$\delta F_i^{(k)} \triangleq F_i^{(k)} - F_i^{(0)} \quad (27)$$

$$\delta x_i^{(k)} \triangleq x_i^{(k)} - x_i^{(0)} \quad (28)$$

La solució  $\underline{x}_s$  serà doncs

$$\underline{x}_s = (I-U)^{-1} |\underline{F}^{(0)} - U\underline{x}^{(0)}| \quad (29)$$

$$= Q\underline{x}^{(0)} + |I-Q| \underline{F}^{(0)}$$

on hem escollit

$$U = (\delta F) (\delta x)^{-1} \quad (30)$$

$$Q = -(I-U)^{-1} U \quad (31)$$

Cada iteració en el mètode de Wegstein generalitzat suposa doncs la aplicació de (22) on  $Q$  es calculat segons l'expressió (31) a partir del valor d' $U$  (30). La rapidesa de convergència del mètode de Wegstein resideix precisament en l'estratègia utilitzada per tal de que el valor de  $Q$  sigui tal que asequi

$$S(\underline{x}^{(k+1)}) < S(\underline{x}^{(k)})$$

on

$$S(\underline{x}) = \sum_{i=1}^n [F_i(\underline{x})]^2 \quad (32)$$

de tal forma que en cada iteració es minimitzi el valor de  $S(\underline{x})$  a partir d'un valor de  $\underline{x}$  que garanteixi una solució. Els detalls de l'algorisme utilitzat es troben en l'Apèndix I.

### 3.2 L'algorisme DEM

Com Wegstein, suposa que existeix una solució analítica al sistema (23) del tipus (24). Existirà una solució tal que

$$\underline{x}^{(n)} - \underline{x}_s = A^n |\underline{x}^{(0)} - \underline{x}_s|$$

Si els valors propis  $\lambda_i$  de  $A$  són tots ells diferents

$$\underline{x}^{(n)} - \underline{x}_s = c_1 \underline{z}_1 \lambda_1^n + c_2 \underline{z}_2 \lambda_2^n + \dots + c_n \underline{z}_n \lambda_n^n \quad (33)$$

Sigui

$$1 > \lambda_1 > \lambda_2 \dots > \lambda_n$$

Quan  $n \rightarrow \infty$ , els diversos termes de (33) són menyspreables llevat del primer

$$x_i^{(n)} - x_{is} = c_1 z_{i1} \lambda_1^n \quad i=1, \dots, n$$

$$x_i^{(n-1)} - x_{is} = c_1 z_{i1} \lambda_1^{n-1}$$

queda finalment

$$x_{is} = x_i^{(n-1)} + \frac{[x_i^{(n)} - x_i^{(n-1)}]}{1 - \lambda_1} \quad (34)$$

El mètode DEM suposa per consegüent una estimació de  $\lambda_1$  en cada iteració. Llavors si

$$|\lambda_1^{(n)}| / |\lambda_1^{(n-1)}| \approx 1 \quad (35)$$

la fórmula de convergència accelerada a aplicar és

$$x_i^{(n)} = x_i^{(n-1)} + \frac{\alpha [F(x_i^{(n-1)}) - x_i^{(n-1)}]}{1 - \lambda_1} \quad (36)$$

on s'ha introduït el factor d'estabilització  $\alpha$ . La convergència del mètode DEM depèn essencialment del factor d'estabilització. Un valor acceptable per a  $\alpha$  és 0.7 com indicarem més endavant en aquest estudi.

## 4. UTILITZACIÓ DELS MÈTODES D'ACCELERACIÓ DE CONVERGÈNCIA A L'ENGINYERIA QUÍMICA

En aquests darrers anys som espectadors d'un dramàtic increment en la utilització i la confiança dipositada en els simuladors com a nova eina de disseny del procés químic, tant per part de la indústria química com petroquímica. Els factors que han estimulat aquest creixement són, d'una banda la necessitat d'optimitzar el cost energètic del procés i

el problema del control de pol·lució. Tanmateix, la necessitat d'avaluar variades, i sovint, complexes alternatives del procés, deixa a l'enginyer de procés sense altra opció possible que la d'utilitzar models per a trobar, mitjançant una simulació digital, la -- "millor" solució dins dels recursos que disposa.

La situació actual del simulador de processos ha estat revisada recentment per diversos autors /10, 21, 44/. És una constatació general que el desenvolupament d'un simulador complet representa entre 20 i 60 homes-any i una inversió de més d'un milió de dòlars. Però només recentment s'ha fet evident el fet que aquest cost és solament el cim -- d'un iceberg. La simulació de processos és -- un àrea enormement dinàmica amb nous mètodes, dades i recursos de càlcul que se succeeixen regularment. Al mateix temps, el desenvolupament tecnològic industrial suposa un "challenge" continu a l'ús de simuladors en noves àrees d'aplicació. Com a resultat d'aquest estat de coses, el cost del desenvolupament constant, manteniment i expansió, promoció -- d'especialistes i tècnics capacitats al mateix temps per assessorar i servir de suport als usuaris, suposa una inversió encara més gran que la realitzada inicialment. A mesura que el simulador comprèn sistemes més complexos, sistemes de recirculació múltiple, optimització topològica de xarxes d'intercanviadors, etc., adquireix una més gran importància en el cost total el desenvolupament i -- utilització de nous mètodes de convergència que redueixin el temps total invertit en els procediments iteratius propis del simulador. Per esmentar un cas concret, la simulació -- d'una columna de destil·lació de 20 plats -- que l'any 1965 requeria 120 bucles d'iteració, mitjançant mètodes de convergència accelerada actualment no necessita més de 15 iteracions.

El cas típic d'aplicació dels anomenats -- "blocs de convergència" en simulació de processos, el constitueixen els problemes de recirculació. El problema de recirculació queda representat d'una manera general a la -- Fig. 2. Les variables d'estat del corrent -- "5" tenen d'ésser inicialitzades segons valors que creiem que són apropiats per a ésser sotmesos després a un procés iteratiu de càlcul

$$\begin{bmatrix} \text{Variables} \\ \text{del corrent} \\ \text{de} \\ \text{recirculació} \end{bmatrix}^{(k+1)} = F \begin{bmatrix} \text{Variables} \\ \text{del corrent} \\ \text{de} \\ \text{recirculació} \end{bmatrix}^{(k)}$$

que corresponen a la formulació matemàtica -- recurrent

$$x_i^{(k+1)} = F_i \left( x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)} \right)$$

Els mètodes de convergència accelerada utilitzats en simuladors de processos que han aparegut recentment utilitzen sofisticades -- tècniques d'extrapolació basades en modificacions dels mètodes clàssics de la Secant, -- Wegstein, Broyden y DEM indicades anteriorment. L'estratègia utilitzada per a tals mètodes suposa l'adequada acotació del valor -- de q a

$$x^{(n+1)} = qx^{(n)} + (1-q) F \left( x^{(n)} \right)$$

que porta a una situació de convergència accelerada per extrapolació quan  $q < 0$ , segons -- s'indica a la Fig. 3. És demostrat que els -- mètodes de convergència accelerada per extrapolació són més eficients però especialment sensibles a les condicions inicials. L'estudi que presentem a continuació mostra que el mètode de Wegstein modificat no és tan sols -- extraordinàriament ràpid sinó que és el que es mostra més insensible davant condicions -- variables dels paràmetres operatius del sistema.

#### 4.1 Estudi de convergència accelerada en la simulació d'una planta per a la producció de diclorur d'etilè

La simulació del procés de producció de diclorur d'etilè ha estat objecte d'un estudi recent /30/. Les condicions operatives del procés suposaven fixat:

- a) El corrent d'alimentació
- b) El grau de conversió en el reactor basat en l'etilè subministrat en l'alimentació.
- c) Composició desitjada en el corrent de separació.
- d) Condicions d'operació del fraccionador.



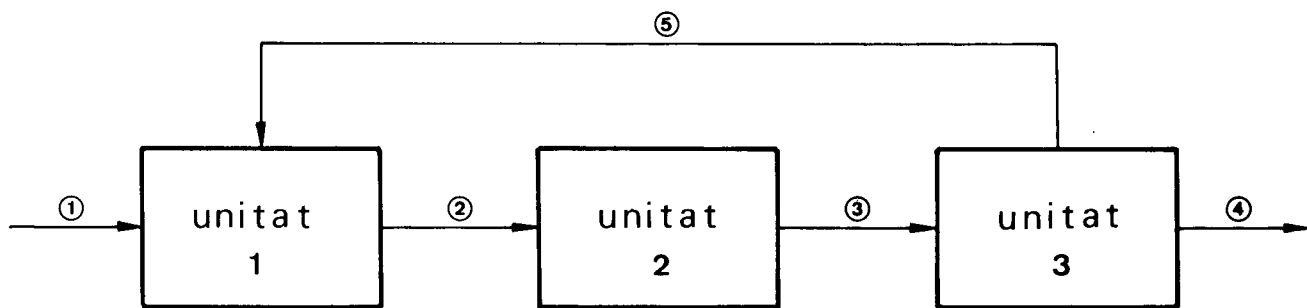


Fig. 2  
Esquema general d'un procés amb recirculació

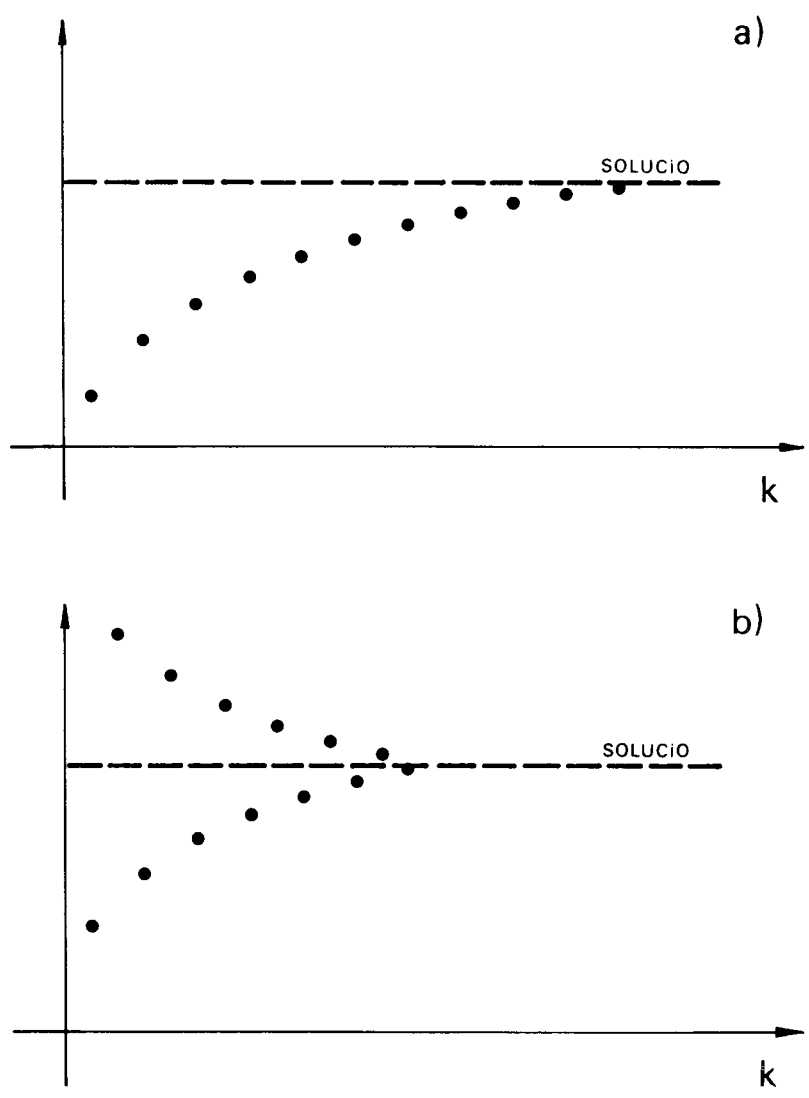


Fig. 6  
Convergència accelerada:  
a) mitjançant esmorteïment  
b) per extrapolació. A abscisses, k = nombre d'iteracions

L'estudi del sistema de recirculació del procés suposa la resolució d'un sistema de 35 equacions no lineals. Els quatre mètodes de convergència accelerada modificats en la forma que s'ha indicat anteriorment (Secant, -- Broyden, Wegstein, DEM), varen ésser utilitzats buscant els valors òptims dels paràmetres característics de cada mètode. Addicionalment, s'estudià l'efecte de tres nous paràmetres operatius sobre la convergència dels diversos mètodes:

1. Conversió fraccional en el reactor (CO).
2. Fracció de Clor que arriba al separador (FCL).
3. Variació de la fracció de Clor que és purgada en funció de les anteriors (FP).

De l'estudi inicial es varen obtenir com a valors òptims pels factors característics de cada mètode:

- Factor estabilitzador  
 $\alpha = 0.73$  (Mètode DEM)
- Factor accelerador  
 $\eta = -20$  (Mètode de Wegstein)

Al mètode de Broyden es va utilitzar la ma-

triu identitat per a inicialitzar H, seguint llavors la metodologia indicada. En el mètode de la secant es segueixen els criteris de càlcul indicats (Apartat 2.1).

La variació de la convergència sota l'efecte de les tres variables addicionals (CO, FCL i FP) es pot observar a les Figs. 4 i 5, on es representen el nombre d'iteracions N respecte FP, variant FCL entre 0.5 i 0.95; CO es féu oscil·lar entre 0.4 (en traç discontinu) i 0.9 (en traç continu). Sens dubte, el mètode de la secant és el més afectat per a la variació de les diferents condicions operatives del sistema i, amb igualtat de condicions, el que requereix un nombre més gran d'iteracions. El mètode de Broyden es comporta de manera semblant al DEM exceptuant el cas en què FCL=0.9, valor per al qual no aconseguix convergir satisfactòriament (convergència extremadament lenta: fora d'escala). Al contrari, el mètode de Wegstein mostra una convergència summament ràpida en tots els casos estudiats (el nombre total d'iteracions no excedeix de 4). D'altra banda, la raó de convergència es manté invariable en les diverses condicions operatives en què ha estat estudiat el procés. Aquest fet constitueix una característica associada al mètode de Wegs-

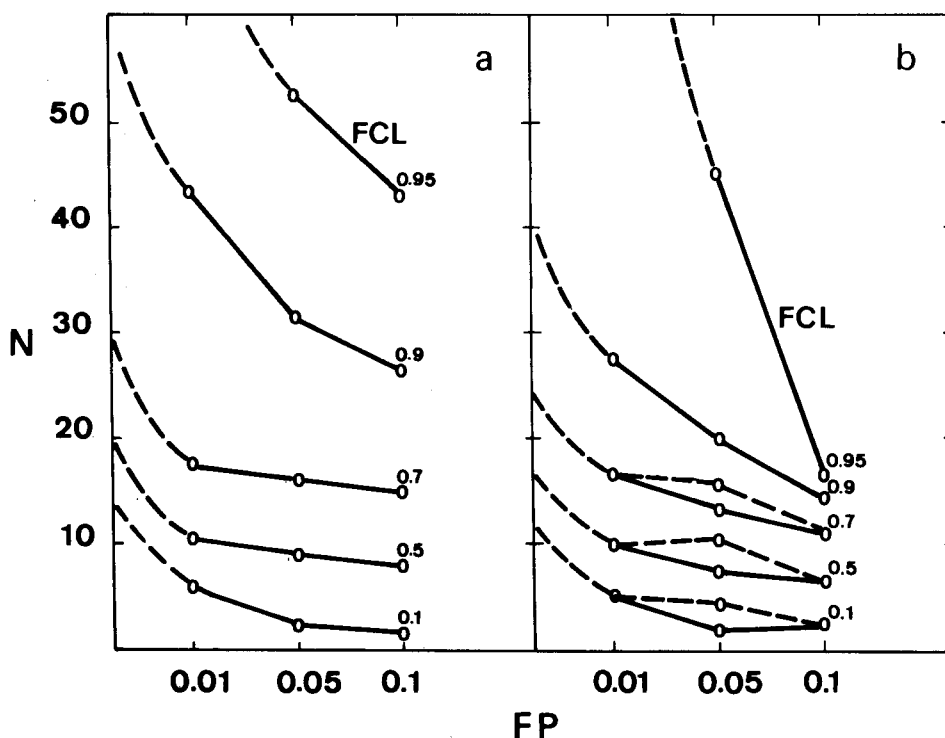


Fig. 4  
Estudi de la convergència  
a) Mètode de la Secant generalitzat  
b) Mètode de Broyden

tein proposat que ha estat comprovada en estudis diversos /31/. En aquest sentit, el mètode de Wegstein modificat sembla ésser actualment un dels més indicats per a la seva utilització en el camp de la simulació de processos. En la Taula 1 es poden observar els resultats obtinguts mitjançant Wegstein en l'estudi indicat sota les condicions més desfavorables.

### 5. CONCLUSIONS FINALS

L'estudi de mètodes de convergència accelera da veritablement eficaços és actualment un tema d'intensa investigació dins del camp de l'enginyeria de disseny, donada la seva importància com a blocs de convergència utilitzats en els simuladors de processos. D'una banda, la utilització de simuladors en el disseny i optimització de processos químics (indústria química bàsica i petroquímica), ha adquirit un caràcter d'universalitat i necessitat, tal com s'ha fet evident recentment en el "12th Symposium on Computer Applica--

tions in Chemical Engineering" (Montreux, -- April 8-11, 1979). Aquest caràcter obligatori ve de la mateixa essència d'un tipus d'indústria altament competitiva que exigeix un índex de renovació i d'optimització dels seus paràmetres operatius, energètics i, en definitiva, econòmics. D'altra banda, la complexitat tècnica dels dissenys actuals requereix l'assaig de solucions diverses per a adoptar una estratègia definitiva amb un cost d'inversió mínim.

L'estudi realitzat mostra palpablement la importància que adquireix la utilització d'un mètode o altre de convergència, quan el sistema en estudi requereix la solució de blocs d'equacions no lineals de grandària considerable. La simulació d'un procés de "tracking" que tradicionalment requeria més de 150 iteracions utilitzant mètodes de convergència convencionals (substitucions successives), s'ha reduït a 12-15 iteracions per bucle mitjançant l'ús de Wegstein modificat. En aquest sentit, el mètode proposat en aquest estudi, tenint en compte la seva sensibili--

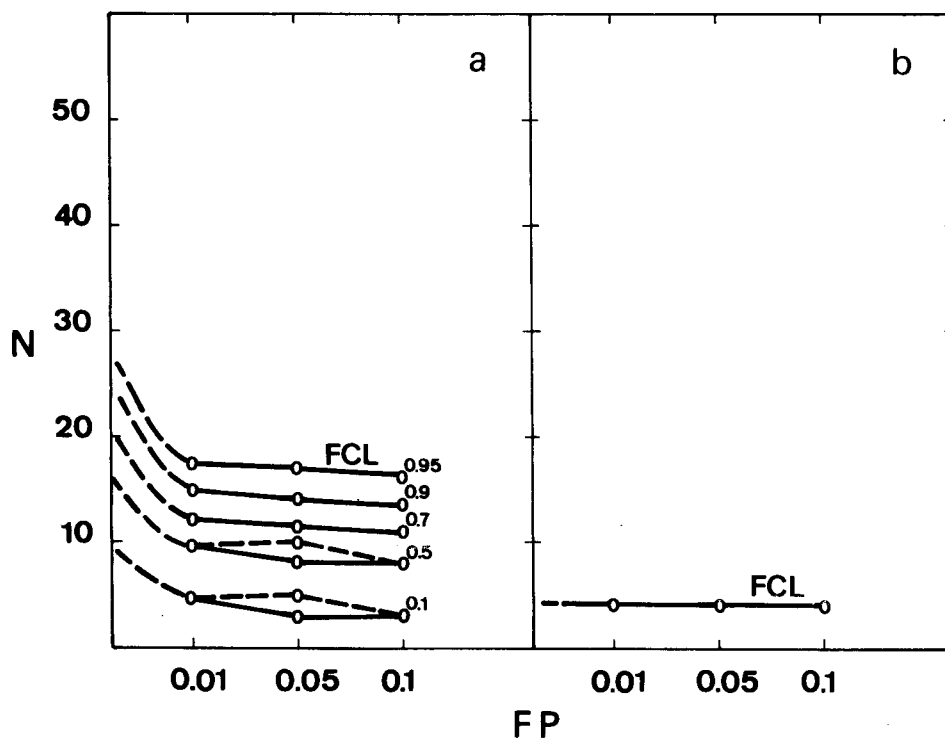


Fig. 5  
Estudi de la convergència  
a) Mètode DEM  
b) Mètode de Wegstein

Taula 1  
Resultat de la simulació del procés utilitzant Wegstein

ESTUDI DE CONVERGÈNCIA - (CAS 10)

Sumari dels paràmetres d'entrada

Conversió fraccional en el reactor	0.9000
Fracció de Clor a capçalera	0.5000
Fracció de Clor a purga	0.0100
Indicador de la tècnica de convergència	2.0000
Paràmetre accelerador segons tècnica	-20.0000

Solució pel mètode Wegstein modificat

Convergència després de 4 iteracions - Fluxos finals en els corrents que s'indiquen

	<u>Etilè</u>	<u>Clor</u>	<u>Diclorur</u>
Corrent 1	100.0000	100.	0.
Corrent 2	100.7659	273.3010	1.7565
Corrent 3	10.0765	182.6118	92.4457
Corrent 4	9.2705	0.1826	90.5967
Corrent 5	0.8061	182.4292	1.8489
Corrent 6	0.0403	9.1214	0.0924
Corrent 7	0.7659	173.3077	1.7564

-----  
Lb-mols d'Etilè en el corrent de recirculació a cada iteració

0.000	0.760	0.765*	0.765*
-------	-------	--------	--------

-----  
Lb-mols de Clor en el corrent de recirculació a cada iteració

0.000	4.490	79.517	173.305*
-------	-------	--------	----------

-----  
Lb-mols de Diclorur de Etilè al corrent de recirculació a cada iteració

0.000	1.709	1.756*	1.756*
-------	-------	--------	--------

-----  
Valor del paràmetre de convergència per a l'Etilè a cada iteració

0.0000	-0.0076	-0.0076	0.0000
--------	---------	---------	--------

-----  
Valor del paràmetre de convergència per al Clor a cada iteració

0.0000	-7.3786	-18.5996	-0.4828
--------	---------	----------	---------

-----  
Valor del paràmetre de convergència per al Diclorur d'Etilè a cada iteració

0.0000	-0.0273	-0.0215	0.0000
--------	---------	---------	--------

(\* denota valor que ha convergit)

tat davant de condicions operatives canviants, és especialment adequat per a la seva utilització en "simuladors per blocs" ja que pel caràcter flexible que aquests suposen, seran necessàriament emprats en el disseny de processos totalment diversos.

## 6. BIBLIOGRAFIA

- /1/ BARNES, J.G.P.: "An Algorithm for Solving Nonlinear Equations Based on the Secant Method". Computer J., 1965, v.8, pp. 66-72.
- /2/ BATSTONE, D.B., FENTON, G. i PRINCE, R. G.H.: "The Steady-State Digital Simulation of Chemical Plant of Arbitrary Configuration". Paper presented at IFAC Symp. of Digital Simulation of Continuous Processes, GYOR, Hungría. 1971.
- /3/ BITTNER, L.: "Mehrpunktverfahren zur -- Auflösung von Gleichungssystemen". Z. Angew. Math. Mech., 1963, v.43, pp. 111-126.
- /4/ BROWN, K.M. i CONTE, S.D.: "The Solution of Simultaneous Nonlinear Equations". -- Proc. 22nd Natl. Conf. ACM, 1967, pp. 111-114.
- /5/ BROWN, K.M.: "Solution of Simultaneous - Nonlinear Equations". Communications of the ACM (Algorithms), 1967, v.10 n.11, - pp. 728-729.
- /6/ BROYDEN, C.G.: "A Class of Methods for - Solving Nonlinear Simultaneous Equations". Math. of Computation, 1965, v.19, pp. -- 577-593.
- /7/ CAVETT, R.H.: "Application of Numerical Methods to the Convergence of Simulated Processes Involving Recycle Loops". Proc. Am. Petrol. Inst., 1963, v.43, Section - III, pp. 57-76.
- /8/ CROWE, C.M. i NISHIO, M.: "Convergence - Promotion in the Simulation of Chemical Processes - The General Dominant Eigenvalue Method". AIChE Journal, 1975, v.21, n.3, pp. 528-533.
- /9/ DULLEY, D.B. i PITTEWAY, M.L.: "Finding the Solution of N Functional Equations - in N Unknowns". Communications of the - ACM (Algorithms), 1967, v.10, n.11, pp. 726.
- /10/ EVANS, L.B. i SEIDER, W.D.: "The requirements of an Advanced Computing System". Chemical Engineering Progress, - 1976, v.72, pp. 80-83.
- /11/ GENNA, P.L. i MOTARD, R.L.: "Optimal Decomposition of Process Networks". Paper presented at 66th National Meeting of - the AIChE, Philadelphia, 1973.
- /12/ HACHMUTH, K.H.: "Industrial Viewpoints on Separation Processes". Chem. Eng. -- Progr., 1952, v.48, n.10, pp. 524-527.
- /13/ KEHAT, E. i SHACHAM, M.: "Chemical Process Simulation Programs - 3, Solution of Systems of Nonlinear Equations". Process Technol., 1973, v.18, n.4-5, pp.181.
- /14/ KLIESCH, H.C.: "A Study of Convergence Accelerator Algorithms Used in Steady-State Process Simulation". M.S. Thesis, Tulane Univ., New Orleans, La., 1966.
- /15/ KLIESCH, H.C.: "An Analysis of Steady-State Process Simulation: Formulation - and Convergence". Ph.D. Thesis, Tulane Univ., New Orleans, La., 1967.
- /16/ KOMATSU, S.: "Application of Linearization to Design of an Hydrodealkylation Plant". Ind. Eng. Chem., 1968, v.60, -- n.2, pp. 36-43.
- /17/ KUO, M.C.Y.: "Solution of Nonlinear -- Equations". IEEE Trans. Computers (Correspondence), 1968, v.C-17, pp. 897-98.
- /18/ MAEJIMA, T.: "Computer-Aided Chemical - Process Design". M.S. Thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, 1970.
- /19/ MARQUARDT, D.W.: "An Algorithm for Least - Squares Estimation of Nonlinear Parameters". J. Soc. Ind. Appl. Math., 1963, v.11, n.2, pp. 431-441.
- /20/ METCALFE, S.R. i PERKINS, J.D.: "Information flow in modular flowsheeting Systems". Trans. I. Chem. E., 1978, v.50,

pp. 210-218.

- /21/ MOTARD, R.L., SACHAM, M. i ROSEN, E.M.: "Steady State Chemical Process Simulation". AIChE Journal, 1975, v.21, pp. - 417-436.
- /22/ NAGIEV, M.F.: "The Theory of Recycle -- Processes in Chemical Engineering". The McMillan Company, New York, 1964.
- /23/ NAGIEV, M.F.: "Material Balance in Complex and Multi-stage Recycle Chemical - Processes". Chem. Eng. Progr. 1957, v. 53, pp. 297-303.
- /24/ NAPHTALI, L.M.: "Process Heat and Material Balances". Chem. Eng. Progr. 1964, v.60, n.9, pp.70-74.
- /25/ NISHIMURA, H., HIRAIZUMI, Y. i YAGI, S.: "Optimization of Process Network by the Linear Model Method". Kagaku Kogaku, Japan, 1967, v.31, n.2, pp.183-194.
- /26/ NISHIMURA, H. i YAGI, S.: "Kagaku Process Kogaku (Chemical Process Engineering)", Maruzen, Tokyo, Japan, 1969, pp. 84-158.
- /27/ ORBACH, O. i CROWE, C.M.: "Convergence Promotion in the Simulation of Chemical Processes with Recycle--the Dominant -- Eigenvalue Method". Can. J. Chem. Eng. 1971, v.49, pp.509.
- /28/ OGBUOBIRI, E.C.: "Comment on 'Solution of Nonlinear Equations'". IEEE Trans. - Computers, 1969, v.C-18, pp. 182-183.
- /29/ POWELL, M.J.D.: "A Method for Minimizing the Sum of Squares of Nonlinear Functions Without Calculating Derivatives". Computer J., 1965, v.7, pp.303-307.
- /30/ PUIGJANER, L.: "Simulación de un proceso Reactor-Flash. Aplicación al diseño y optimización de una planta de producción de Dicloruro de Etileno". Rev. Ingeniería Química, 1979, v.000, aceptado para publicación.
- /31/ PUIGJANER, L.: "Utilización de simuladores en el desarrollo e implantación de nuevos procesos". Actas del I Congreso
- Mediterráneo de Ingeniería Química, 1978, v.1, pp.702-721.
- /32/ RAVIEZ, A.E. i NORMAN, R.L.: "Heat and Mass Balancing on a Digital Computer". Chem. Eng. Progr., 1964, v.60, n.5, pp. 71-76.
- /33/ ROBINSON, S.M.: "Interpolative Solution of Systems of Nonlinear Equations". -- SIAM J. Numer. Anal., 1966, v.3, n.4, - pp. 650-658.
- /34/ ROSEN, E.M.: "A Machine Computation Method for Performing Material Balances". Chem. Eng. Progr., 1962, v.58, n.10, pp 69-73.
- /35/ ROSEN, E.M.: "A Review of Quasi-Newton Methods in Nonlinear Equation Solving - and Unconstrained Optimization". Proc. 21st National Conf. ACM, Washington, DC, 1966.
- /36/ RUBIN, D.I.: "Generalized Material Balance". Chem. Eng. Progr., Symposium Series, 1962, v.58, n.37, pp.54-61.
- /37/ SHACHAM, M. i MOTARD, R.L.: "Applications of the Theory of Linear Recycle Systems". Paper N. 8b, 78th National -- Meeting of the AIChE, Salt Lake City, - Agosto 1974.
- /38/ SPATH, H.: "The Damped Taylor's Series Method for Minimizing a Sum of Squares and for Solving Systems of Nonlinear -- Equations". Communications of the ACM - (Algorithms), 1967, v.10, n.11, pp.726-727.
- /39/ THOMSON, W.E.: "Comment on 'Solution of Nonlinear Equations'". IEEE Trans. Computers, 1969, v.C-18, pp.1138.
- /40/ TORNHEIM, L.: "Convergence of Multipoint Iterative Methods". J. Assoc. Comp.Mach. 1964, v.11, pp.21-220.
- /41/ VELA, M.A.: "Use Fractions for Recycle Balances: Part 1. Fractions Separated". Petrol Refiner, 1961, v.40, n.5, pp.247 250.
- /42/ VELA, M.A.: "Use Fractions for Recycle

Balances: Part 2. Types of Separations".  
Ibid, 1961, v.40, n.6, pp.189-192.

/43/ VICKERS, V.E.: "Comment on 'Solution of Nonlinear Equations'". IEEE Trans. Computers, (Correspondence), 1969, v.C-18, pp. 277.

/44/ WEISMANTEL, GINY, E.: "Smoothing Out -- Wrinkles in Computer-Aided Design". Chemical Engineering, 1978, v.85, pp.75-77.

/45/ WOLFE, P.: "The Secant Method for Simultaneous Nonlinear Equations". Communications of the ACM, 1959, v.2, pp.12-13.

/46/ WOLFE, P.: "Remarks on Taylo-Kuo Correspondence". IEEE Trans. Computers, (Correspondence), 1969, v.C-18, pp.1140.

/47/ ZELEZNIK, F.J.: "Quasi-Newton Methods for Nonlinear Equations". J. ACM, 1968, v.15, pp.265-271.

14. Valors obtinguts per Wegstein per a recirculació  $X(K,I) \leftarrow W\{XNOU(K,I)\}$

15. Tornar al pas 7.

16. Repetir els passos 7 al 11.

17. Sortida en cas de test correcte al pas 11.

#### 7. APÈNDIX 1. Esquema de l'Algorisme Wegstein modificat

##### - Inicialització

1. Inicialització de paràmetres operatius del procés.
2. Dades de la matriu S (Corrent d'alimentació).
3. Definició de Variables d'estudi, CO, FC, FCL.
4. Crida subrutina segons mètode (Wegstein).

##### - Mètode Wegstein

5. Inicialitzar  $q \leftarrow q_{\min}$
6. Inicialització dels components en el corrent de recirculació  $X(K,I)$ .
7. Crida subrutines de càlcul de les unitats del procés.
8. Càlcul de les variables d'estat de cada corrent.
9. Test de tolerància ( $T_{ab}$ ,  $T_{rel}$ ,  $T_{err}$ ) en els corrents  $S(K,N)$
10. Nou valor en el corrent de recirculació  $SNOU(K,I) \leftarrow X(K,I)$
11. Test de convergència  
$$\text{MIN} \left| \sum_{i=1}^N \{f_i(\underline{x})\}^2 \right| < \epsilon. \text{ Pas 17.}$$
12. Càlcul dels paràmetres de Wegstein  $W, Q$
13. Optimització de  $q$ ,  $q_{\min} < q < 0$ .

