



Lej. 41

**UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE QUIMICA**

**COMPARACION DE TECNICAS DE RESOLUCION
DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS POR METODOS
NUMERICOS Y SU APLICACION A REACTORES QUIMICOS HOMOGENEOS**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
PRESENTA
ARMANDO MANUEL HERNANDEZ LOYOLA

MEXICO, D. F.

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

1988



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.

I N D I C E

PROLOGO	1
1. INTRODUCCION A LOS METODOS NUMERICOS	3
2. TECNICAS DE RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS POR METODOS NUMERICOS	9
2.1 Introducci3n	9
2.2 Soluci3n de las ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden	12
2.3 M3todo de Euler	18
2.4 M3todos de Runge-Kutta	20
2.5 Error de truncamiento, estabilidad y control de la longitud del paso en los algoritmos de Runge-Kutta	29
2.6 Sistemas de ecuaciones diferenciales	33
2.7 M3todos de paso m3ltiple	36
2.8 F3rmulas abiertas de integraci3n	38
2.9 F3rmulas cerradas de integraci3n	44
2.10 M3todos predictor - corrector	51
2.11 Error de truncamiento, estabilidad y control de la longitud del paso en los algoritmos de paso m3ltiple	57
2.12 Otras f3rmulas de integraci3n	65

3. APLICACIONES A LOS BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA EN REAC TORES QUIMICOS HOMOGENEOS	71
3.1 Introducción	71
3.2 Ejemplos	73
3.3 Explicación a los programas	125
4. RESULTADOS OBTENIDOS	127
5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	134
APENDICE A. EJEMPLO NUMERICO DEL METODO DE RUNGE-KUTTA DE - CUARTO ORDEN	138
BIBLIOGRAFIA	141

PROLOGO

Esta tesis tiene como fin primordial hacer una comparación de las técnicas más importantes y representativas para la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden que se obtienen en el cálculo de reactores químicos homogéneos. Por tanto, adicionalmente se realizarán los programas en microcomputadora de los cálculos necesarios para resolver dichos reactores.

Para realizar adecuadamente la comparación, se efectuará un análisis de los resultados obtenidos, así como de la memoria consumida por la máquina computadora y finalmente del tiempo de proceso necesario para realizar los cálculos numéricos. De esta manera se obtendrán conclusiones que ayudarán a escoger el tipo de método numérico más adecuado para cada caso de reactor.

El trabajo se efectuará en una microcomputadora marca ATARI modelo 600 XL la cual tiene una capacidad de memoria de 16 kbytes. Esta máquina se seleccionó, por un lado, porque se tenía disponibilidad de ella, y por otro lado, porque el lenguaje BASIC es sencillo y fácilmente adaptable a otras marcas. Además su costo es bajo, lo cual significa que es más accesible a la mayoría de los usuarios de máquinas computadoras.

En suma, el presente trabajo persigue, por un lado, realizar una comparación de métodos numéricos para la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden mediante el cálculo de reactores químicos homogéneos y así seleccionar

para cada caso el método más eficiente en precisión, memoria - de computadora y tiempo de proceso, y por otro lado, efectuar dichos programas los cuales serán de utilidad académica.

Los métodos numéricos que se utilizarán no son los únicos existentes ni suponen ser los más eficientes, sin embargo, se seleccionarán de acuerdo a que sean los más representativos de los existentes.

Para hacer posible esta tarea, se dará en primer lugar una introducción a los métodos numéricos, después se analizarán los correspondientes a la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden. Más adelante, se utilizarán los casos de reactores químicos homogéneos en los que intervienen este tipo de ecuaciones y mediante la realización de los programas de computadora, se obtendrán los resultados con diferentes tamaños de paso (incrementos) y por último se compararán los resultados, se analizarán los errores de truncamiento y redondeo y se darán conclusiones y recomendaciones con el fin de conocer que tipo de método es más conveniente para cada caso de reactor.

Al final se presentará un apéndice el cual incluye un ejemplo numérico de la aplicación del método de Runge-Kutta de cuarto orden.

CAPITULO 1

INTRODUCCION A LOS METODOS NUMERICOS

El objetivo de los métodos numéricos es proporcionar técnicas útiles para la resolución aproximada a modelos matemáticos, los cuales usualmente simulan situaciones de la vida real. Con frecuencia estos enunciados matemáticos no se pueden resolver por métodos analíticos, o en algunos casos es posible que existan soluciones analíticas, pero de tal forma que no sean convenientes para su interpretación numérica directa. En el primer caso, es necesario obtener alguna aproximación satisfactoria de modo que sea analizable y pueda resolverse.

La computadora es una herramienta útil en la solución de problemas, aunque es necesario mencionar que solamente ejecuta una serie de instrucciones y no "resuelve problemas" por sí sola. No se le puede preguntar ¿Cómo se resuelve una ecuación?, ¿Qué método usar?, ¿Cómo se diseña un edificio?, etc. Se necesita especificar una serie de instrucciones para la solución de estos problemas. En otras palabras, la computadora ofrece una ayuda muy valiosa proporcionando resultados cuantitativos para explorar diferentes alternativas, lo que permite seleccionar aquellas que sean mejores.

La computadora es la culminación de dispositivos de cálculo como el ábaco, regla de cálculo, tablas, nomogramas, calculadoras de escritorio, etc.

Obsérvese sin embargo, que con todos los dispositivos -

antes mencionados no se cambia esencialmente la manera de proceder para resolver un problema.

La computadora corresponde al grupo de dispositivos automáticos y requiere un enfoque completamente diferente para la resolución de problemas. Antes de efectuar cualquier cálculo se tiene que especificar en su totalidad el proceso de solución -- del problema.

Los desarrollos más importantes en el campo de las computadoras han tenido lugar en los últimos 35 años. El desarrollo histórico de estas máquinas se inicia con las primeras computadoras mecánicas que fueron inventadas por Pascal y Leibnitz aunque se ha aceptado que el principio de las computadoras modernas se inició con la máquina analítica de Babbage en 1833. Hollerith patentó en 1889 las tarjetas perforadas que se usaron en la mayoría de los sistemas.

La primera computadora digital totalmente electrónica fue la desarrollada por Eckert y Mauchly en la Universidad de Pensylvania en 1946 y se denominó Computadora Automática e Integrador Numérico Eléctrico, utilizando bulbos en su mayor parte, lo que representó un adelanto con respecto a la computadora Mark I de Aiken, construida en la Universidad de Harvard en 1944 y que hacía uso de relevadores electromecánicos en lugar de bulbos. Las computadoras actuales son posibles gracias al desarrollo de dispositivos de memoria y de que las instrucciones también se pueden almacenar, de manera que controlan automáticamente la operación de la máquina. La idea del programa -

almacenado se basa en las investigaciones realizadas por el Dr. J. Neumann.

En el proceso de solución de un problema por medio de una computadora se requieren los siguientes pasos:

Especificación del problema. Con esto se indica que se debe identificar perfectamente el problema y sus limitaciones, - las variables que intervienen y los resultados deseados.

Análisis. Es la formulación de la solución del problema, - denominada también algoritmo, de manera que se tenga una serie de pasos aritméticos que resuelvan el problema y que sean susceptibles de ejecutarse en la computadora. Esto implica el conocimiento de los campos de las matemáticas relacionados con el problema y la capacidad de expresar la solución en términos de operaciones aritméticas adecuadas para la computadora.

Programación. Este paso consiste en traducir el método de análisis o algoritmo de solución, expresándolo como una serie detallada de operaciones.

La programación se considera dividida en dos partes: - en la primera la sucesión de operaciones se presenta en forma gráfica en un diagrama de bloques o diagrama de flujo, que permite dar una idea gráfica precisa de lo que se desea hacer. En el diagrama de bloques, ya se enuncian operaciones que pueden ser más detalladas. Por el contrario, el diagrama de flujo se define como la representación gráfica que busca una traducción directa al lenguaje de programación de la máquina.

El diagrama de bloques es útil en cuanto a la concepción global de un problema del cual puede derivarse el diagrama

ma de flujo, que permite la codificación de instrucciones que la computadora puede ejecutar. La complejidad del diagrama de flujo dependerá de la complejidad del problema y el detalle incluido. Sin embargo deberá ser posible para alguien diferente al programador seguir el flujo de información del diagrama. Esta es una efectiva ayuda para el programador, quien debe traducir sus funciones principales dentro del programa, y, al mismo tiempo, es un enlace de comunicación con otros quienes esperan entender lo que realiza el programa. En la segunda parte, que se denomina codificación, el diagrama anterior se traduce a un lenguaje de programación accesible a la máquina.

Verificación. Es la prueba exhaustiva del programa para eliminar todos los errores que tenga, de manera que efectúe todo lo que se desea. Los resultados de prueba se comparan con soluciones conocidas de problemas ya resueltos.

Documentación. Consiste en preparar un instructivo del programa, de manera que cualquier otra persona pueda conocer y utilizar el programa. Un programa documentado permite posteriormente su revisión con el objeto de efectuarle mejoras o cambios al mismo, ya sea por la persona que desarrolló el programa o por otra persona.

Producción. Es la última etapa en la que sólo se proporcionan datos de entrada del programa, obteniéndose las soluciones correspondientes. En general se pueden introducir varios grupos de datos referentes a distintas condiciones del problema o problemas, produciéndose las respuestas correspondientes sin que sea necesaria la intervención del operador entre los distintos grupos de datos.

De lo expuesto anteriormente se puede concluir que es necesario un conocimiento del problema y de los campos de las matemáticas relacionados con él, que es precisamente el objeto de los métodos numéricos para computadoras.

La adecuada selección del método de análisis es muy importante en la solución de problemas recurriendo al uso de computadoras.

Las técnicas numéricas no dan resultados exactos en el sentido matemático. Puesto que la mayoría de los cálculos numéricos son inexactos, el concepto de error es una característica importante. El error que se asocia a un valor aproximado se define como:

$$\text{Valor real} = \text{Valor aproximado} \pm \text{Error}$$

Las cuatro causas de errores son las siguientes:

a. Errores ilegítimos, los cuales son el resultado de equivocaciones humanas, mecánicas o eléctricas las cuales son impredecibles.

b. Errores de redondeo, los cuales son la consecuencia de utilizar un número especificado como m dígitos correctos para aproximarse a un número que requiere más de m dígitos para su especificación correcta, por ejemplo, al aproximarse al número irracional $\sqrt{2}$ mediante 1.414. Esos errores se encuentran presentes con frecuencia en los datos experimentales en cuyo caso se les puede denominar errores inherentes, debido ya sea al empujamiento o al hecho de que la computadora dicta el número de dígitos.

gitos. Esos errores pueden resultar especialmente perjudiciales en campos tales como la inversión de matrices o la resolución numérica de ecuaciones diferenciales parciales donde el número de operaciones algebraicas es extremadamente grande.

c. Errores de truncamiento, los cuales corresponden al caso de calcular por ejemplo $\sin x$, $\cos x$, e^x , etc., usando series. Estas series tienen un número infinito de elementos, pero evidentemente para calcular su valor sólo se puede considerar un número finito de ellos. Es el caso de constantes que no pueden representarse exactamente, como por ejemplo, los números π y e , o fracciones como $1/3$, $2/3$, etc.

d. Errores heredados, los cuales se presentan debido a errores en etapas previas del algoritmo de computación.

CAPITULO 2
TECNICAS DE RESOLUCION DE ECUACIONES
DIFERENCIALES ORDINARIAS POR
METODOS NUMERICOS

2.1 Introducción.

El comportamiento de muchos procesos físicos, particularmente los dependientes del tiempo (transitorios) pueden representarse por medio de ecuaciones diferenciales ordinarias. Los métodos de resolución de estas ecuaciones son por tanto de gran importancia para científicos e ingenieros. Aunque se conoce la solución analítica de muchas ecuaciones diferenciales importantes, un número todavía mayor de ellas, no pueden ser resueltas analíticamente. Afortunadamente pueden en general encontrarse la solución numérica de estas últimas. El presente capítulo describe los procedimientos más importantes de cálculo numérico de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Los algoritmos numéricos más comunes para la solución de una ecuación diferencial ordinaria de primer orden con la condición inicial $y(x_0)$ se basan en uno de los dos métodos siguientes:

1. Utilización directa o indirecta del desarrollo de Taylor de la función objeto o solución $y(x)$.
2. Utilización de fórmulas abiertas o cerradas de integración.

Los numerosos procedimientos existentes pueden clasificarse de una forma aproximada en dos grupos, los llamados de paso sencillo y de paso múltiple. Los métodos de paso sencillo calculan el valor y_{i+1} a partir de la ecuación diferencial dada y de información únicamente en x_i , es decir, del valor y_i , no necesitando iterar la solución. Una solución en serie de Taylor proporciona un método fundamental de este tipo. Las técnicas prácticas utilizadas de las cuales hay un gran número, incluyen los métodos de Runge-Kutta. Tienen la seria desventaja de que es difícil estimar el error. Los métodos de paso múltiple requieren además valores de y_i y/o de f_i en otros (en general varios) puntos x_i fuera del subintervalo de integración considerado, $[x_i, x_{i+1}]$. En algunos casos requieren iteración para llegar a un valor suficientemente preciso. La mayoría de los métodos de este tipo se conocen como predictor-corrector.

Una desventaja de los métodos de paso múltiple es que en general, al comienzo de la aplicación del método se necesitan más valores de y_i o f_i de los conocidos. Normalmente se conoce una condición inicial, por ejemplo $y(x_0)$, siendo desconocidos los valores siguientes $y(x_1)$, $y(x_2)$, etc. Para comenzar debe utilizarse otro método (un método de paso sencillo). Otra desventaja que aparece en los métodos de paso múltiple es la dificultad de cambiar el paso h una vez que ha comenzado el proceso de cálculo. Por otro lado, como el cambio en la longitud de h en un método de paso sencillo es equivalente al comienzo del proceso, dicho cambio no crea mayores dificultades. Los métodos de paso múltiple requieren mucho menos cálculos para la obten--

ción de una solución de exactitud comparable. Al desarrollar los métodos numéricos de cálculo aparecerán claramente ventajas y desventajas de cada grupo de métodos.

Ecuaciones diferenciales de orden N. Sea la ecuación diferencial ordinaria de orden n la siguiente:

$$F(x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2y}{dx^2}, \frac{d^3y}{dx^3}, \dots, \frac{d^ny}{dx^n}) = 0 \quad (2.1)$$

Toda ecuación del tipo (2.1) se denomina de orden n por que la derivada de mayor orden que aparece en ella es de orden n , y ordinaria porque sólo aparecen derivadas totales (no aparecen derivadas parciales, o, lo que es lo mismo sólo hay una variable independiente x). Toda función $y(x)$ que satisfaga esta ecuación, siendo al menos n veces diferenciable es una solución de la ecuación. Para obtener una solución única de la ecuación (en general existen muchas funciones $y(x)$ que satisfagan (2.1)) es necesaria información adicional, es decir, valores de $y(x)$ y/o sus derivadas en algunos puntos definidos por sus valores de x . Para una ecuación de orden n , n condiciones como las citadas son en general suficientes para determinar una solución única de $y(x)$. Si se especifican todas las n condiciones para el mismo valor de x (por ejemplo, x_0), el problema se denomina problema de valores iniciales. Si en las condiciones aparece más de un valor de x , el problema se denomina de valores de contorno.

Toda ecuación diferencial de orden n puede ser escrita como un sistema de n ecuaciones de primer orden definiendo $n-1$

nuevas variables. Considérese por ejemplo la ecuación de segundo orden

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - p^2) y = 0 \quad (2.2)$$

siendo p una constante. Definiendo una nueva variable $z = dy/dx$ la ecuación de segundo orden puede escribirse como el sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} - z &= 0 \\ x^2 \frac{dz}{dx} + xz + (x^2 - p^2) y &= 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

Dado que la mayoría de las ecuaciones de orden mayor que 1 (o un sistema de tales ecuaciones) puede escribirse de esta manera, se estudiará solamente la solución numérica de las ecuaciones diferenciales de primer orden.

2.2 Solución de las ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden.

Una ecuación de primer orden es, por definición, de la forma

$$F(x, y, \frac{dy}{dx}) = 0$$

o lo que es lo mismo,

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (2.4)$$

Se desea calcular una solución $y(x)$ que satisfaga simultáneamente (2.4) y una condición inicial determinada. En general es imposible obtener la solución analítica de $y(x)$. Por el contrario, se divide el intervalo $[a, b]$ de la variable independiente x en que se desea la solución en subintervalos o pasos. El verdadero valor de la solución $y(x)$ se aproxima en $n+1$ valores equidistantes de x , (x_0, x_1, \dots, x_n) , de forma que h , la longitud del subintervalo o paso, viene dada por

$$h = \frac{b - a}{n}$$

y

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, \dots, n \quad (2.5)$$

De esta forma la solución se obtendrá tabulada para $n+1$ valores discretos de x (ver figura 2.1). Esta tabla de valores así obtenida contiene los valores calculados de una aproximación particular a la solución de la ecuación.

Sea $y(x_i)$ el valor de la solución exacta $y(x)$ en el punto base x_i , y sea al mismo tiempo y_i el valor de la aproximación calculada en el mismo punto, de forma que

$$y_i \approx y(x_i) \quad (2.6)$$

El valor exacto de la derivada dy/dx en los puntos base será aproximado por el valor $f(x_i, y_i)$, o en forma abreviada f_i , de forma que

$$f_i = f(x_i, y_i) \approx f(x_i, y(x_i)) \quad (2.7)$$

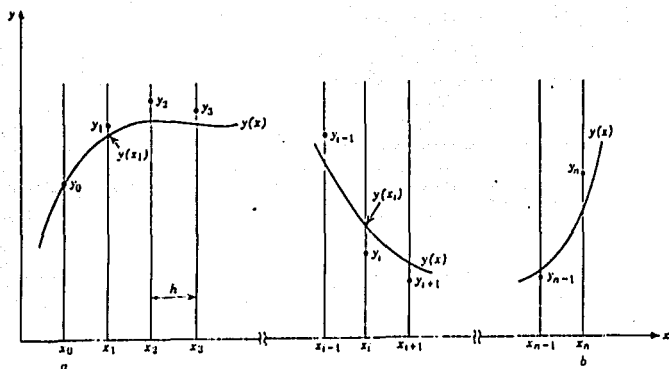


Figura 2.1 Solución numérica de las ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden.

Si se supone que los cálculos numéricos necesarios pueden realizarse sin ningún error de redondeo, la diferencia entre el valor calculado y_i y el valor exacto $y(x_i)$ es el llamado error de discretización o de truncamiento:

$$e_i = y_i - y(x_i) \quad (2.8)$$

El error de truncamiento que aparece en cada uno de los pasos al integrar numéricamente una ecuación diferencial suele llamarse error de truncamiento local. Este error queda determinado únicamente por el método de resolución numérico elegido, es decir, por la naturaleza de las aproximaciones que componen dicho método; este tipo de error es totalmente independiente de las características del equipo de cálculo.

Un tipo de error esencialmente diferente resulta de las características de la calculadora. En la práctica, los ordenadores tienen una memoria finita y por lo tanto un tamaño finito para los números con que trabajan (los equipos de cómputo científicos tienen normalmente una longitud de palabra fija, es decir, el número de dígitos almacenados y retenidos para cualquier valor calculado es fijo, normalmente de 7 a 12 dígitos significativos). Por lo tanto, cualquier número irracional, o en general, cualquier número con más dígitos significativos que los que pueden ser almacenados por la máquina, que aparezca en una serie de cálculos, debe ser aproximado por un valor "redondeado". El error correspondiente se denomina error de redondeo, y para cada método numérico queda determinado por las características del equipo de cómputo con el que se trabaja, por el orden de --

las operaciones de máquina utilizado al realizar los algoritmos, etc. Normalmente puede establecerse una cota superior del error de truncamiento para un método determinado pero por otra parte el error de redondeo es extremadamente complejo y muy difícil de predecir. Sin embargo, debido precisamente a esta impredecibilidad, los analistas numéricos han logrado establecer una teoría probabilística bastante satisfactoria del error de redondeo por medio de la hipótesis de que el error obtenido en un subintervalo al integrar una ecuación diferencial es una variable aleatoria. En lo que sigue sólo se estudiarán con detalle los errores de truncamiento, es decir, los inherentes a los cálculos numéricos.

Método del desarrollo de Taylor. Un método de aproximar la solución de la ecuación (2.4) numéricamente, consiste en expresar la solución $y(x)$ a partir de un punto inicial x_0 por medio del desarrollo de Taylor:

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hf(x_0, y(x_0)) + \frac{h^2}{2!} f'(x_0, y(x_0)) + \frac{h^3}{3!} f''(x_0, y(x_0)) + \dots \quad (2.9)$$

En esta ecuación $f'(x, y(x))$ indica $(d/dx) f(x, y(x))$, $f''(x, y(x))$ indica $(d^2/dx^2) f(x, y(x))$, etc. Si como condición inicial se conoce $y(x_0)$, puede calcularse $f(x_0, y(x_0))$ de la ecuación diferencial (2.4)

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

Para calcular las derivadas de (2.9) de órdenes mayores debe diferenciarse $f(x, y)$ teniendo en cuenta que f es función de x y y :

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} \quad (2.10)$$

El método de paso de un valor de x al siguiente, es decir, de x_0 a x_0+h , se deduce del desarrollo de $y(x)$ en x_0 . De forma análoga pueden deducirse algoritmos para pasar de x_i a $x_{i+1} = x_i+h$ por medio también del desarrollo de Taylor de $y(x)$ en x_i :

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i + h) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + \\ &\frac{h^2 f''(x_i, y(x_i))}{2!} + \frac{h^3 f'''(x_i, y(x_i))}{3!} + \frac{h^4 f^{(4)}(x_i, y(x_i))}{4!} + \\ &\dots + \frac{h^n f^{(n-1)}(x_i, y(x_i))}{n!} + \frac{h^{n+1} f^{(n)}(\xi, y(\xi))}{(n+1)!}, \\ &\xi \text{ en } (x_i, x_{i+1}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

Los algoritmos obtenidos al despreciar el último término del miembro derecho de (2.11) y sustituir en el miembro izquierdo de $y(x_{i+1})$ por y_{i+1} se llaman de orden h^n . Su error correspondiente es de orden h^{n+1} . El error e_t de truncamiento local introducido por una aplicación simple queda por lo tanto acotado por el valor

$$|e_t| \leq \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} M$$

donde

$$M \geq |f^{(n)}(n, y(n))| \max_{n \text{ en } (x_i, x_{i+1})} \quad (2.12)$$

Desgraciadamente, la diferenciación de $f(x, y)$ es en general enormemente complicada. Excepto en el caso más sencillo,

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + O(h^2) \quad (2.13)$$

el desarrollo directo de Taylor de (2.11) no suele utilizarse para resolver ecuaciones diferenciales de primer orden. La expresión indica "términos de orden ()".

Dado que en general el único valor conocido de $y(x_i)$ es $y(x_0)$ (suponiendo que la condición inicial carece de errores), el valor de $y(x_i)$ en (2.13) debe sustituirse por y_i . En este caso el algoritmo toma la forma

$$y_1 = y(x_0) + hf(x_0, y(x_0)) \quad (2.14a)$$

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) = y_i + hf_i \quad i \geq 1 \quad (2.14b)$$

y se denomina método de Euler.

2.3 Método de Euler.

Es el método más sencillo aunque sus limitaciones en la exactitud de la solución no lo hacen aconsejable en la gran parte de los problemas prácticos. La fórmula (2.14a) tiene una sencilla interpretación geométrica. La solución en el intervalo (x_0, x_1) se supone ser la tangente a $y(x)$ en x_0 (ver figura 2.2). Al aplicar sucesivamente el método de Euler a intervalos sucesivos, la solución numérica resulta ser un polígono cuyos lados -

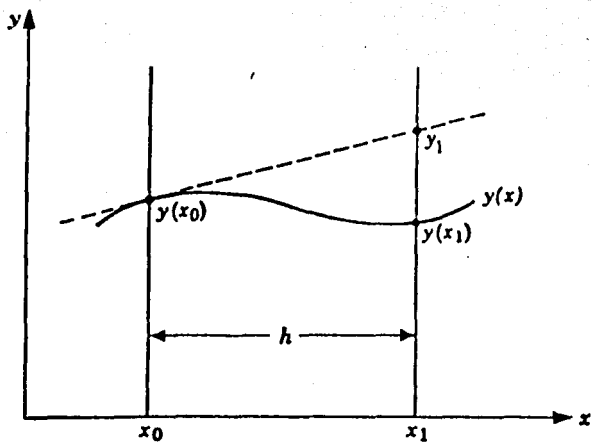


Figura 2.2 Método de Euler.

tienen por pendientes los valores f_i , $i = 0, 1, 2, \dots, n-1$

2.4 Métodos de Runge-Kutta.

La solución de una ecuación diferencial por el desarrollo directo de Taylor de la función objeto no es en general un método práctico si se requieren derivadas de orden mayor que 1. Las siguientes derivadas se complican demasiado excepto en los casos más sencillos. Por ello no es posible obtener un algoritmo sencillo, análogo al método de Euler, a partir del desarrollo de Taylor en cuanto sean precisos términos de error de órdenes elevados.

Afortunadamente es posible deducir algoritmos de paso-sencillo que incluyen sólo cálculos de derivadas de primer orden, pero que a su vez producen resultados equivalentes en exactitud a las fórmulas de Taylor de orden superior. Estos algoritmos son los llamados Métodos de Runge-Kutta. Las aproximaciones de segundo, tercer y cuarto orden (es decir, aproximaciones con exactitud equivalente al desarrollo de Taylor de $y(x)$ que retenga términos en h^2 , h^3 y h^4 respectivamente) requieren el cálculo de $f(x, y)$ en dos, tres y cuatro puntos respectivamente, de x en el intervalo $x_i \leq x \leq x_{i+1}$. Los métodos de orden m , siendo m mayor de cuatro, exigen cálculos de las derivadas en más de m puntos.

Todos los métodos de Runge-Kutta tienen algoritmos de la forma

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(x_i, y_i, h) \quad (2.15)$$

En esta expresión, ϕ , llamada función incremento, es sencillamente una aproximación de $f(x, y)$ en el intervalo $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ convenientemente elegida. Como la deducción de las fórmulas de alto orden exige una gran cantidad de álgebra, se desarrolla a continuación en detalle sólo la más sencilla, el algoritmo de segundo orden. La deducción de otras fórmulas es análoga.

Sea ϕ una media ponderada de dos valores k_1 y k_2 de la derivada en el intervalo $x_i \leq x \leq x_{i+1}$, es decir,

$$\phi = ak_1 + bk_2 \quad (2.16)$$

El correspondiente algoritmo de Runge-Kutta es

$$y_{i+1} = y_i + h(ak_1 + bk_2) \quad (2.17)$$

y

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + ph, y_i + qhf(x_i, y_i))$$

$$k_2 = f(x_i + ph, y_i + qhk_1) \quad (2.18)$$

siendo p y q unas constantes cuyo valor será calculado más adelante.

Desarrollando en primer lugar k_2 en serie de Taylor de dos variables *, despreciando los términos cuyo exponente h es mayor que uno:

$$\begin{aligned} k_2 &= f(x_i + ph, y_i + qhf(x_i, y_i)) \\ k_2 &= f(x_i, y_i) + phf_x(x_i, y_i) \\ &\quad + qhf(x_i, y_i) f_y(x_i, y_i) + O(h^2) \end{aligned} \quad (2.19)$$

De las expresiones (2.18) y (2.19) resulta (2.17)

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h[af(x_i, y_i) + bf(x_i, y_i)] \\ &\quad + h^2 [bpf_x(x_i, y_i) + bqf(x_i, y_i) f_y(x_i, y_i)] \\ &\quad + O(h^3) \end{aligned} \quad (2.20)$$

A continuación se desarrolla la función objeto $y(x)$ sobre x_i por medio de la serie de Taylor (2.11):

* Los primeros términos del desarrollo de Taylor de dos variables son:

$$\begin{aligned} f(x+r, y+s) &= f(x, y) + rf_x(x, y) + sf_y(x, y) + \\ &\quad r^2 f_{xx}(x, y)/2 + rsf_{xy}(x, y) + s^2 f_{yy}(x, y)/2 \\ &\quad + O[(|r| + |s|)^3] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 y(x_i+h) = y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) \\
 &+ \frac{h^2}{2!} f'(x_i, y(x_i)) + \frac{h^3}{3!} f''(\xi, y(\xi)) \\
 &\xi \text{ en } (x_i, x_{i+1}) \qquad (2.21)
 \end{aligned}$$

Utilizando la regla (2.10) de diferenciación de funciones implícitas la derivada $f'(x_i, y(x_i))$ viene dada por

$$\begin{aligned}
 f'(x_i, y(x_i)) &= f_x(x_i, y(x_i)) \\
 &+ f_y(x_i, y(x_i)) f(x_i, y(x_i))
 \end{aligned}$$

Igualando finalmente potencias de h en (2.20) y (2.21):

Potencia de h	Desarrollo de $y(x)$	Algoritmo de Runge-Kutta
0	$y(x_i)$	y_i
1	$f(x_i, y(x_i))$	$(a+b) f(x_i, y_i)$
2	$1/2[f_x(x_i, y(x_i)) + f_y(x_i, y(x_i)) f(x_i, y(x_i))]$	$[bp f_x(x_i, y_i) + bq f_y(x_i, y_i) f(x_i, y_i)]$

Suponiendo $y_i = y(x_i)$, e igualando los coeficientes de h^2 se obtendrá para todas las funciones $f(x, y)$ que cumplan -- las condiciones necesarias de diferenciabilidad, $a+b = 1$, y -- $bp = 1/2$. Por tanto

$$\begin{aligned}
 a &= 1 - b \\
 p &= q = \frac{1}{2b} \qquad (2.22)
 \end{aligned}$$

El sistema de tres ecuaciones anterior tiene cuatro incógnitas y, por tanto es indeterminado. Hay una variable, por ejemplo b, que puede escogerse arbitrariamente. Los valores -- que suelen tomarse son $b = 1/2$ y $b = 1$.

Caso $b = 1/2$, $a = 1/2$, $p = 1$, $q = 1$. La ecuación (2.17) resulta

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_i+h, y_i + hf(x_i, y_i))] \quad (2.23)$$

que puede escribirse también en la forma

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \bar{y}_{i+1})] \quad (2.24)$$

donde

$$\bar{y}_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) \quad (2.25)$$

Este algoritmo de paso sencillo (2.24) y (2.25) se conoce con el nombre de Método de Euler Mejorado, o Método de Heun, y su interpretación geométrica aparece en la figura 2.3a

En esencia consiste en la aplicación dos veces sucesivas del método de Euler. En primer lugar se utiliza la ecuación (2.25) para predecir \bar{y}_{i+1} , una estimación previa de y_{i+1} . Es decir, \bar{y}_{i+1} es la ordenada en $x=x_{i+1}$ de la recta ① que pasa por (x_i, y_i) con pendiente $f(x_i, y_i) = k_1$. A continuación se mejora la estimación, y_{i+1} , por medio de la ecuación (2.24); la pendiente de la recta ② utilizada en este caso es la media ponderada de las aproximaciones de f en ambos extremos del in-

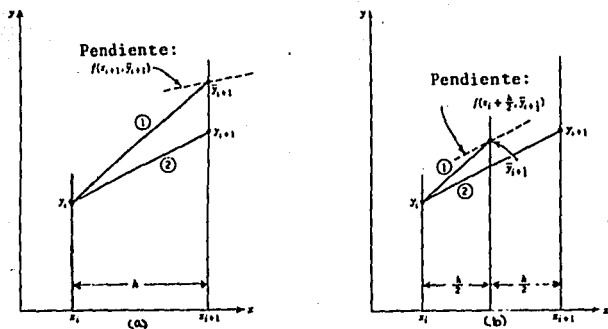


Figura 2.3 Métodos de Runge-Kutta de segundo orden.

intervalo. Obsérvese que como $y(x_{i+1})$ es desconocido, el verdadero valor de la derivada en x_{i+1} , $f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))$, se aproxima por el valor $f(x_{i+1}, \bar{y}_{i+1})$.

El algoritmo de Euler de (2.25) puede interpretarse como una ecuación predictora de $\bar{y}_{i+1}^{(1)}$ (primera aproximación de y_{i+1}) mientras que (2.24) pueda considerarse como una ecuación correctora que produce una mejor estimación de y_{i+1} . La ecuación (2.24) puede utilizarse iterativamente para obtener una sucesión de valores corregidos de y_{i+1} , $\bar{y}_{i+1}^{(2)}$, $\bar{y}_{i+1}^{(3)}$, ..., $\bar{y}_{i+1}^{(m)}$. En este caso, el par de ecuaciones (2.25) y (2.24) resulta en el más sencillo de los llamados Métodos Predictor-Corrector.

Caso $b = 1$, $a = 0$, $p = 1/2$, $q = 1/2$. La ecuación (2.17) resulta

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i + \frac{h}{2}, \bar{y}_{i+1/2}) \quad (2.26)$$

donde

$$\bar{y}_{i+1/2} = y_i + \frac{h}{2} f(x_i, y_i) \quad (2.27)$$

El algoritmo de paso sencillo de (2.26) y (2.27) se conoce con el nombre de Método Mejorado del Polígono o Método de Euler Modificado, y se ilustra en la figura 2.3b. En este caso se utiliza de nuevo dos veces sucesivas el Método de Euler. Primero se obtiene de (2.27) una aproximación $\bar{y}_{i+1/2}$ en el punto medio $x_i + h/2$. A continuación (2.26) calcula el valor de $f(x, y)$ para $x = x_i + h/2$, $y = \bar{y}_{i+1/2}$, y utiliza este valor medio de la derivada para la totalidad del intervalo.

Los métodos de Runge-Kutta de orden mayor se deducen de forma análoga. Por ejemplo, la función incremento para el método de tercer orden es

$$\phi = ak_1 + bk_2 + ck_3,$$

siendo k_1 , k_2 y k_3 aproximaciones a la derivada en varios puntos del intervalo de integración $[x_i, x_{i+1}]$. En este caso se tiene

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + ph, y_i + phk_1),$$

$$k_3 = f(x_i + rh, y_i + shk_2 + (r-s)hk_1)$$

Los algoritmos de Runge-Kutta de tercer orden vienen dados por

$$y_{i+1} = y_i + h(ak_1 + bk_2 + ck_3) \quad (2.28)$$

El cálculo de las constantes a, b, c, p, r y s se realizan desarrollando en primer lugar k_2 y k_3 sobre (x_i, y_i) en serie de Taylor como función de dos variables. A continuación se desarrolla la función objeto $y(x)$ en serie de Taylor como anteriormente (2.11), y se igualan los coeficientes de las potencias de h hasta h^3 en las fórmulas (2.28) y (2.11) para obtener la fórmula con error de truncamiento local de orden h^4 . Los detalles son esencialmente los mismos que en el desarrollo de los métodos de segundo orden.

Aparecen de nuevo menos ecuaciones que incógnitas:

$$a + b + c = 1$$

$$bp + cr = 1/2$$

$$bp^2 + cr^2 = 1/3$$

$$cps = 1/6$$

Dos de las constantes a , b , p , r y s son arbitrarias. Para un conjunto de valores elegido por Kutta, el método de tercer orden es:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3)$$

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + 1/2 h, y_i + 1/2 hk_1)$$

$$k_3 = f(x_i + h, y_i + 2hk_2 - hk_1) \quad (2.29)$$

Todas las fórmulas de cuarto orden son de la forma

$$y_{i+1} = y_i + h(ak_1 + bk_2 + ck_3 + dk_4) \quad (2.30)$$

donde k_1 , k_2 , k_3 y k_4 son valores aproximados de la derivada - calculados en el intervalo $x_i < x < x_{i+1}$. Se utilizan distintos algoritmos de cuarto orden. Se atribuye a Kutta el siguiente:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$\begin{aligned}
 k_2 &= f(x_i + 1/2 h, y_i + 1/2 h k_1) \\
 k_3 &= f(x_i + 1/2 h, y_i + 1/2 h k_2) \\
 k_4 &= f(x_i + h, y_i + h k_3)
 \end{aligned}
 \tag{2.31}$$

2.5 Error de truncamiento, estabilidad y control de la longitud del paso en los algoritmos de Runge-Kutta.

Los algoritmos de Runge-Kutta de orden m de la sección anterior han sido obtenidos al igualar (2.15) con el desarrollo en serie de la función solución $y(x)$ hasta los términos de orden h^m . El error de truncamiento local, e_τ será por tanto de la forma

$$e_\tau = K h^{m+1} + O(h^{m+2}), \tag{2.32}$$

donde K depende (en general de forma muy complicada) de $f(x, y)$ y sus derivadas parciales de orden mayor.

Para una elección razonable de la longitud del paso es necesario una estimación del error cometido en la integración de cada paso. Por una parte, el intervalo debe ser lo suficientemente pequeño para obtener la exactitud (si ello es posible); por otra parte, debe ser suficientemente grande como para poder reducir en lo posible los errores de redondeo (función del número de operaciones aritméticas realizadas), y para evitar un número excesivo de cálculos de derivadas. Esta última consideración es muy importante, especialmente si la función de la ecuación diferencial es complicada y cada cálculo del valor de la -

derivada en un punto exige un tiempo de cálculo sustancial. En los métodos de orden m descritos anteriormente, la derivada ha de calcularse m veces en cada paso de la integración.

Una forma de resolver el problema es suponer que los errores de truncamiento locales son de la forma Kh^{m+1} , con K constante, y que el error de truncamiento total que aparece de la integración representa prácticamente la variación en el error total para ese paso. En estas condiciones puede estimarse el error local de truncamiento integrando entre dos puntos, por ejemplo: x_n y x_{n+1} utilizando dos longitudes de paso distintas h_1 y h_2 para el cálculo de y_{n+1} ; sean $y_{n+1,1}$ y $y_{n+1,2}$ las soluciones correspondientes. Suponiendo ahora que la solución "exacta" es y_{n+1}^* , puede utilizarse la técnica de extrapolación de Richardson como sigue:^a

$$\begin{aligned} y_{n+1}^* - y_{n+1,1} &= Kh_1^{m+1} \frac{(x_{n+1} - x_n)}{h_1} \\ y_{n+1}^* - y_{n+1,2} &= Kh_2^{m+1} \frac{(x_{n+1} - x_n)}{h_2} \end{aligned} \quad (2.33)$$

Dividiendo la primera de estas ecuaciones por la segunda y despejando y_{n+1}^* se obtiene

$$y_{n+1}^* = \frac{y_{n+1,1} - y_{n+1,2} \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^m}{1 - \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^m} \quad (2.34)$$

^a En lo que sigue n indica un subíndice general, y no el punto ba sefinal como en (2.5)

Tomando $h_2 = h_1/2$, la expresión anterior resulta

$$y_{n+1}^* = \frac{y_{n+1,1} - 2^m y_{n+1,2}}{1 - 2^m} \quad (2.35)$$

y siendo $(x_{n+1} - x_n) = h_1$, las fórmulas (2.33) y (2.35) proporcionan una estimación del error de truncamiento local de la solución $y_{n+1,1}$ en la forma

$$e_\tau = Kh_1^{m+1} = \frac{2^m (y_{n+1,2} - y_{n+1,1})}{2^m - 1} \quad (3.36)$$

Para el método de Runge-Kutta de cuarto orden, $m=4$, y (2.36) resulta

$$e_\tau = Kh_1^5 = \frac{16}{15} (y_{n+1,2} - y_{n+1,1}) \quad (2.37)$$

Desgraciadamente, la utilización de (2.36) como procedimiento de control de la longitud del intervalo de integración en cada intervalo, hace que el número de operaciones a efectuar triplique aproximadamente al necesario para un sólo valor de la longitud, h_1 . Este procedimiento de control puede utilizarse menos frecuentemente, por ejemplo cada k pasos.

Otro criterio es el sugerido por Collatz, aplicable al método de (2.31). Consiste en el cálculo del cociente $\{(k_3 - k_2) / (k_2 - k_1)\}$ tras cada paso de integración. Si el valor obtenido es grande (mayor que unas centenas), debe reducirse el paso. Evidentemente esto sólomente es una gafa muy cualitativa, pero -

tiene la ventaja de que el aumento de operaciones que supone es despreciable.

La determinación de una cota para el error propagado o acumulado en los algoritmos de Runge-Kutta es muy difícil. Las cotas que aparecen en la literatura son muy conservadoras; por otra parte, los parámetros necesarios para estimarla raramente son conocidos. En general, si el error de truncamiento local de un método de paso sencillo es $O(h^{m+1})$, el acumulado será $O(h^m)$, es decir, la reducción en el orden de error es similar a la observada en el método de Euler.

Otro criterio de elección de un algoritmo para la solución de una ecuación diferencial con unas condiciones iniciales dadas es su estabilidad. El término estabilidad es algo ambiguo, y en la literatura aparece con diversos adjetivos (inherente, parcial, relativa, fuerte, débil, absoluta, etc.) En general, se dice que una solución es inestable si los errores introducidos en los cálculos en un momento determinado (por ejemplo, de condiciones iniciales erróneas, errores de truncamiento locales o errores de redondeo) se propagan en los cálculos subsiguientes sin que exista una cota máxima de su valor.

Algunas ecuaciones con determinadas condiciones iniciales no pueden resolverse por ningún método de integración de pasos sucesivos sin que aparezca inestabilidad.

La inestabilidad inherente se asocia a la ecuación particular que se resuelve y a la condición inicial especificada,

pero no depende en absoluto del algoritmo particular que se utilice para resolverla. Otra forma de inestabilidad, la llamada inestabilidad parcial depende también de la ecuación en cuestión y de la condición inicial, pero así mismo del método de paso sencillo que se utilice para la solución: esta inestabilidad puede aparecer aunque la ecuación no sea inestable inherente.

2.6 Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Considérese a continuación la solución del siguiente sistema de n ecuaciones diferenciales de primer orden simultáneas, cuyas variables dependientes son y_1, y_2, \dots, y_n :

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dx} &= f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dx} &= f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ \frac{dy_n}{dx} &= f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{aligned} \quad (2.38)$$

y cuyas condiciones iniciales, dadas en un mismo punto (x_0) son

$$\begin{aligned} y_1(x_0) &= y_{1,0} \\ y_2(x_0) &= y_{2,0} \\ &\vdots \\ y_n(x_0) &= y_{n,0} \end{aligned} \quad (2.39)$$

La solución de este sistema, al menos en principio, no ofrece más dificultades que la de una ecuación de primer orden. El algoritmo seleccionado se aplica paralelamente a cada una de las n ecuaciones en cada paso.

Dado que una ecuación de orden elevado

$$\frac{d^m y}{dx^m} = F\left(x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2 y}{dx^2}, \dots, \frac{d^{m-1} y}{dx^{m-1}}\right) \quad (2.40)$$

con condiciones iniciales apropiadas

$$y(x_0), \frac{dy(x_0)}{dx}, \dots, \frac{d^{m-1} y(x_0)}{dx^{m-1}}$$

puede siempre ser escrita como un sistema de ecuaciones de primer orden de la forma (2.38) (ver por ejemplo (2.2), (2.3)), - los métodos numéricos desarrollados en este capítulo pueden -- también ser aplicados a la solución de ecuaciones diferenciales de orden elevado con condiciones iniciales. Los problemas de valores iniciales formados por ecuaciones de diferentes órdenes pueden también reducirse a la forma (2.38) en la mayoría de los casos. Dependiendo de la forma de interdependencia de las ecuaciones diferenciales algunas de las derivadas de (2.38) pueden ser función de otras, es decir

$$\frac{dy_j}{dx} = f(x, y_1, y_2, \dots, y_n, f_1, f_2, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_n)$$

Si pueden ordenarse las ecuaciones de forma que, para-

todo valor de j , $dy_j/dx = f_j(x, y_1, y_2, \dots, y_n, f_1, f_2, \dots, f_{j-1})$, - siempre podrán aplicarse los esquemas de integración de las - secciones precedentes. Si la ordenación en tal forma resulta im posible, puede calcularse la derivada particular (dy_j/dx) que- no puede ordenarse por medio de la expresión:

$$\frac{dy_j}{dx} = f_j(x, y_1, y_2, \dots, y_n, f_1, f_2, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}^*, \dots, f_n^*)$$

en la que las derivadas con asterisco deben ya ser conocidas, o su valor supuesto, en x_0 . A partir de este punto puede en ge neral utilizarse los valores calculados más recientes.

Para los esquemas de alto orden de Runge-Kutta de sis- temas de ecuaciones diferenciales es prácticamente imposible - establecer análisis de errores. Los mecanismos de control de - la longitud del paso y las consideraciones sobre estabilidad - desarrolladas en la sección anterior se aplican al caso de sis- temas de ecuaciones sin cambios apreciables. En la práctica se resuelven las ecuaciones en muchos casos para diferentes valo- res de h y se observa el comportamiento de las soluciones con- respecto a la convergencia y a la estabilidad.

2.7 Métodos de paso múltiple.

Los métodos de paso sencillo de las secciones anteriores han aproximado la solución de la ecuación de primer orden

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

con la condición inicial $y_0 = y(x_0)$. La solución numérica ha consistido en la aplicación del Método de Euler (2.14) para la integración sobre una serie de intervalos, obteniéndose sucesivamente los valores,

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f_0 dx, \\ y_2 &= y_1 + \int_{x_1}^{x_2} f_1 dx, \\ &\vdots \\ y_{i+1} &= y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f_i dx, \end{aligned} \quad (2.41)$$

Para una integración sobre $k+1$ intervalos que terminen en x_{i+1} , esto puede escribirse en la forma

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) dx \quad (2.42)$$

siendo $\psi_i(x)$ una función salto con ordenadas $f_j = f(x_j, y_j)$ en los intervalos semiabiertos $[x_j, x_{j+1})$, $j=i-k, \dots, i$. La integral de (2.42) puede interpretarse como el área comprendida entre los límites x_{i-k} y x_{i+1} que se indica en la figura 2.4.

Parece claro por lo tanto, que la sustitución de la fun

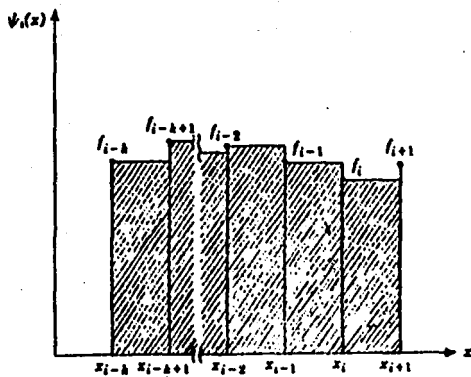


Figura 2.4 Integración de paso múltiple.

ción $\phi_i(x)$ de (2.42) por un polinomio interpolante $\phi(x)$ que - pase por los puntos (x_j, f_j) , siendo j próximo a i , pueda llevar a algoritmos más exactos.

El polinomio interpolante se determina por medio de valores de la derivada $f(x_j, y_j)$. El número necesario de valores de f_j depende de : a) el orden deseado del polinomio interpolante, y b) la disponibilidad de los valores de f_j . Suponiendo que la integración ha avanzado hasta el punto base x_i , se conocen todos los valores de f_j para $0 \leq j < i$. En general f_{i+1} será desconocido, dado que f es función de x y y , y el valor de y_{i+1} no ha sido calculado todavía. Todos los métodos corrientes de paso múltiple se describen por la ecuación

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} \phi(x) dx \quad (2.43)$$

donde $\phi(x) = \sum_{j=0}^r a_j x^j$. En esta ecuación r es el orden del polinomio interpolante.

2.8 Fórmulas abiertas de integración.

Como las x_j son equidistantes y los valores $f_i, f_{i-1}, f_{i-2}, \dots, f_{i-r}$ son conocidos, $\phi(x)$ viene dado en su forma más sencilla por la fórmula de interpolación de Newton basada en - las diferencias finitas regresivas de x_i ,

$$\begin{aligned} \phi(x_i + ah) &= f_i + a \nabla f_i + a(a+1) \frac{\nabla^2 f_i}{2!} \\ &+ a(a+1)(a+2) \frac{\nabla^3 f_i}{3!} + \dots + \end{aligned}$$

$$+ a(a+1)(a+2) \dots (a+r-1) \frac{\nabla^r f_i}{r!}$$

donde $f_i = f(x_i, y_i)$, $y_{i+1} = y_i + ah$, es decir, $a = (x_{i+1} - x_i) / h$. Para los valores de los puntos base x_{i-p} , a toma valores enteros $-p$. Como $dx = h da$, la integral de (2.43) resulta, en función de la variable a ,

$$\int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} \phi(x) dx = h \int_{-k}^1 \phi(x_i + ah) da =$$

$$h \int_{-k}^1 \left[f_i + a \nabla f_i + a(a+1) \frac{\nabla^2 f_i}{2!} \right.$$

$$+ a(a+1)(a+2) \frac{\nabla^3 f_i}{3!} + \dots + a(a+1)(a+2) \dots$$

$$\left. (a+r-1) \frac{\nabla^r f_i}{r!} \right] da \quad (2.44)$$

Es decir,

$$\int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} \phi(x) dx = h \left[a f_i + \frac{a^2}{2} \nabla f_i + a^2 \left(\frac{a}{3} + \frac{1}{2} \right) \frac{\nabla^2 f_i}{2!} \right.$$

$$+ a^2 \left(\frac{a^2}{4} + a + 1 \right) \frac{\nabla^3 f_i}{3!} + a^2 \left(\frac{a^3}{5} + \frac{3a^2}{2} + \frac{11a}{3} + 3 \right)$$

$$\left. \frac{\nabla^4 f_i}{4!} + \dots \right]_{-k}^1 \quad (2.45)$$

Para $k=0, 1, 2$ y 3 , la ecuación (2.45) lleva los siguientes algoritmos:

$k=0$

$$y_{i+1} = y_i + h \left(f_i + \frac{1}{2} \nabla f_i + \frac{5}{12} \nabla^2 f_i + \frac{3}{8} \nabla^3 f_i \right)$$

$$+ \frac{251}{720} \nabla^4 f_i + \dots) \quad (2.46a)$$

k=1

$$y_{i+1} = y_{i-1} + h(2f_i + 0\nabla f_i + \frac{1}{3} \nabla^2 f_i + \frac{1}{3} \nabla^3 f_i + \frac{29}{90} \nabla^4 f_i + \dots) \quad (2.46b)$$

k=2

$$y_{i+1} = y_{i-2} + h(3f_i - \frac{3}{2} \nabla f_i + \frac{3}{4} \nabla^2 f_i + \frac{3}{8} \nabla^3 f_i + \frac{27}{80} \nabla^4 f_i + \dots) \quad (2.46c)$$

k=3

$$y_{i+1} = y_{i-3} + h(4f_i - 4\nabla f_i + \frac{8}{3} \nabla^2 f_i + 0\nabla^3 f_i + \frac{14}{45} \nabla^4 f_i + \dots) \quad (2.46d)$$

Como indica el área rayada de la figura 2.5, la ecuación (2.46a) es la integración aproximada de cualquier función adecuada $\psi(x)$ que pase por los puntos $(x_{i-r}, f_{i-r}), (x_{i-r+1}, f_{i-r+1}), \dots, (x_{i-1}, f_{i-1}), (x_i, f_i)$. El intervalo de integración es evidentemente $[x_i, x_{i+1}]$. La ecuación (2.46b) evalúa los mismos puntos, pero el intervalo de integración es $[x_{i-1}, x_{i+1}]$. Para las restantes ecuaciones de (2.46) son válidas observaciones similares. Toda la información necesaria, es decir, $y_i, f(x_i, y_i), y_{i-1}, f(x_{i-1}, y_{i-1}) \dots$ etc., es conoci-

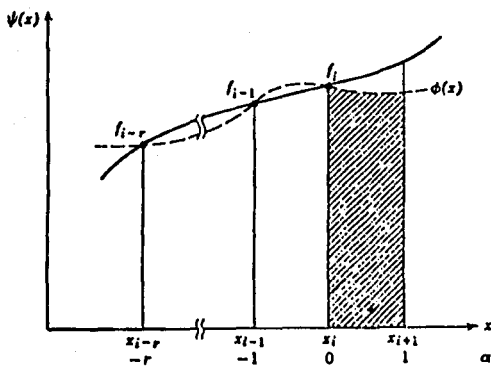


Figura 2.5 Integración abierta de paso múltiple.

da, ya que supone que la integración ha llegado ya a x_i .

Obsérvese que para valores impares de k , el coeficiente de la k -ésima diferencia regresiva es cero. Por este motivo las fórmulas de este tipo más corrientemente utilizadas son para valores impares de k , reteniendo solamente $k+1$ términos (es decir, $r=k$). El término $(k+1)$ -ésimo es nulo en estos casos, de forma que el polinomio interpolante es en realidad de grado $r-1$ en lugar de grado r como sería de esperar. Por supuesto puede retenerse cualquier número de términos. En los casos en que la fórmula termina con el término $r+1$, es decir, cuando el último término incluye el factor $v^r f_i / r!$, el error es

$$h^{r+2} \int_{-k}^1 \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\dots(\alpha+r)}{(r+1)!} \psi^{(r+1)}(\xi) d\alpha$$

$$x_{i-k} < \xi < x_{i+1} \quad (2.47)$$

Las fórmulas abiertas más importantes de (2.46) son:

$k=0, r=3$

$$y_{i+1} = y_i + h\left(f_i + \frac{1}{2} v f_i + \frac{5}{12} v^2 f_i + \frac{3}{8} v^3 f_i\right)$$

$$R = \frac{251}{720} h^5 f^{(4)}(\xi) \quad (2.48a)$$

$k=1, r=1$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + h(2f_i + 0v f_i)$$

$$R = \frac{1}{3} h^3 f^{(2)}(\xi) \quad (2.48b)$$

$k=3, r=3$

$$y_{i+1} = y_{i-3} + h(4f_i - 4v f_i + \frac{8}{3} v^2 f_i + 0v^3 f_i)$$

$$R = \frac{14}{45} h^5 f^{(4)} (\xi) \quad (2.48c)$$

$k=5, r=5$

$$y_{i+1} = y_{i-5} + h(6f_i - 12v f_i + 15v^2 f_i - 9v^3 f_i + \frac{33}{10} v^4 f_i + 0v^5 f_i)$$

$$R = \frac{41}{140} h^7 f^{(6)} (\xi). \quad (2.48d)$$

En todos los casos ξ está comprendido entre el menor y el mayor valor de los x_j que aparecen en la fórmula. Los términos de error R de las ecuaciones (2.48) calculados de (2.47), son los errores locales de truncamiento para una aplicación de la fórmula, suponiendo que $\psi(x) = f(x, y)$, y que $y_j = y(x_j)$ y $f_j = f(x_j, y(x_j))$ para los valores de j incluidos en las fórmulas. Sin embargo estos términos son solamente aproximados, ya que los valores de y_j y f_j , excepto para y_0 y f_0 , han sido calculados numéricamente y por ello son en general inexactos.

En función de los valores de las derivadas f_j , en lugar de sus diferencias regresivas, las fórmulas abiertas resultan:

$k=0, r=3$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3})$$

$$R = O(h^5) \quad (2.49a)$$

k=1, r=1

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf_i$$

$$R = O(h^3) \quad (2.49b)$$

k=3, r=3

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3} (2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2})$$

$$R = O(h^5) \quad (2.49c)$$

k=5, r=5

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3h}{10} (11f_i - 14f_{i-1} + 26f_{i-2}$$

$$- 14f_{i-3} + 11f_{i-4})$$

$$R = O(h^7) \quad (2.49d)$$

Todas estas fórmulas incluyen la utilización del polinomio interpolante que pasa por los puntos conocidos (x_j, f_j) ($j = i, i-1, i-2, \dots, i-r$). Por ello el polinomio interpola sobre el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ ya que la integración cubre el intervalo total $[x_{i-k}, x_{i+1}]$. La situación para el caso $k=3, r=3$ se esquematiza en la figura 2.6.

2.9 Fórmulas cerradas de integración.

De la expresión general del método de paso múltiple --
(2.43)

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

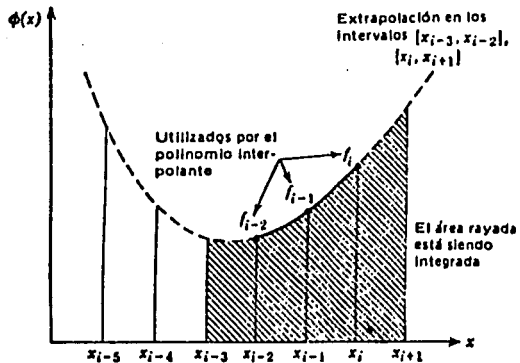


Figura 2.6 Integración abierta para el caso $k=3$, $r=3$

(ec. 2.49c)

puede deducirse de forma análoga un conjunto de fórmulas cerradas de integración, siendo $\phi(x)$ el polinomio interpolante que se ajusta no sólo a los valores calculados previamente, f_i , f_{i-1} , f_{i-2} , sino también a los valores desconocidos f_{i+1} . Como en el caso anterior, el cambio de variables $x = x_i + ah$ resulta

$$y_{i+1} = y_{i-k} + h \int_{-k}^1 \phi(x_i + ah) da \quad (2.50)$$

Sin embargo, $\phi(x_i + ah)$ se expresa ahora en función de la diferencia regresiva con base en x_{i+1} en lugar de x_i [ver (2.44) para comparación]:

$$\begin{aligned} y_{i+1} = & y_{i-k} + h \int_{-k}^1 \left[f_{i+1} + (\alpha-1) \nabla f_{i+1} + \frac{(\alpha-1)\alpha}{2!} \nabla^2 f_{i+1} \right. \\ & + \frac{(\alpha-1)(\alpha)(\alpha+1)}{3!} \nabla^3 f_{i+1} \\ & \left. + \dots \frac{(\alpha-1)(\alpha)(\alpha+1)\dots(\alpha+r-2)}{r!} \nabla^r f_{i+1} \right] da \end{aligned} \quad (2.51)$$

o bien

$$\begin{aligned} y_{i+1} = & y_{i-k} + h \left[\alpha f_{i+1} + \alpha \left(\frac{\alpha}{2} - 1 \right) \nabla f_{i+1} \right. \\ & + \frac{\alpha^2 \left(\frac{\alpha}{3} - \frac{1}{2} \right)}{2!} \nabla^2 f_{i+1} + \frac{\alpha^2 \left(\frac{\alpha^2}{4} - \frac{1}{2} \right)}{3!} \nabla^3 f_{i+1} \\ & \left. + \frac{\left(\frac{\alpha^5}{5} + \frac{\alpha^4}{2} - \frac{\alpha^3}{3} - \alpha^2 \right)}{4!} \nabla^4 f_{i+1} + \dots \right]_{-k}^1 \end{aligned} \quad (2.52)$$

Para $k=0, 1, 3$ y 5 , la ecuación (2.52) lleva a las siguientes fórmulas:

$k=0$

$$y_{i+1} = y_i + h \left(f_{i+1} - \frac{1}{2} \nabla f_{i+1} - \frac{1}{12} \nabla^2 f_{i+1} - \frac{1}{24} \nabla^3 f_{i+1} - \frac{19}{720} \nabla^4 f_{i+1} + \dots \right) \quad (2.53a)$$

$k=1$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + h \left(2f_{i+1} - 2\nabla f_{i+1} + \frac{1}{3} \nabla^2 f_{i+1} + 0\nabla^3 f_{i+1} - \frac{1}{90} \nabla^4 f_{i+1} + \dots \right) \quad (2.53b)$$

$k=3$

$$y_{i+1} = y_{i-3} + h \left(4f_{i+1} - 8\nabla f_{i+1} + \frac{20}{3} \nabla^2 f_{i+1} - \frac{8}{3} \nabla^3 f_{i+1} + \frac{14}{45} \nabla^4 f_{i+1} + 0\nabla^5 f_{i+1} + \dots \right) \quad (2.53c)$$

$k=5$

$$y_{i+1} = y_{i-5} + h \left(6f_{i+1} - 18\nabla f_{i+1} + 27\nabla^2 f_{i+1} - 24\nabla^3 f_{i+1} + \frac{123}{10} \nabla^4 f_{i+1} - \frac{33}{10} \nabla^5 f_{i+1} + \dots \right) \quad (2.53d)$$

En estas fórmulas la expresión del error de truncamiento tras el término que contiene la diferencia de orden r es

$$h^{r+2} \int_{-k}^1 \frac{(a-1)(a)(a+1)(a+2)\dots(a+r-1)}{(r+1)!} \psi^{(r+1)}(\xi) da$$

$$x_{i-k} < \xi < x_{i+1} \quad (2.54)$$

Si k es impar el coeficiente de $\psi^{k+2} f_{i+1}$ se anula. Por esto las fórmulas utilizadas más frecuentemente son las de k impar, con $r = k+2$. Tres de las más importantes de estas fórmulas cerradas son:

$k=0, r=0$

$$y_{i+1} = y_i + h \left(f_{i+1} - \frac{1}{2} \psi f_{i+1} - \frac{1}{12} \psi^2 f_{i+1} - \frac{1}{24} \psi^3 f_{i+1} \right)$$

$$R = -\frac{19}{720} h^5 f^{(4)}(\xi) \quad (2.55a)$$

$k=1, r=3$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + h \left(2f_{i+1} - 2\psi f_{i+1} + \frac{1}{3} \psi^2 f_{i+1} + 0\psi^3 f_{i+1} \right)$$

$$R = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi) \quad (2.55b)$$

$k=3, r=5$

$$y_{i+1} = y_{i-3} + h \left(4f_{i+1} - 8\psi f_{i+1} + \frac{20}{3} \psi^2 f_{i+1} - \frac{8}{3} \psi^3 f_{i+1} + \frac{14}{45} \psi^4 f_{i+1} \right)$$

$$R = -\frac{8}{945} h^7 f^{(6)}(\xi) \quad (2.55c)$$

Los términos de error R calculados por (2.54) son los errores locales de truncamiento para una aplicación de las fórmulas de integración, en el supuesto de que $\psi(x) = f(x, y)$ y que $y = y(x_j)$ y $f_j = f(x_j, y(x_j))$ para los valores correspondientes de j . En cada caso ξ está comprendido entre el mayor y el menor de los valores de x_j que aparecen en la fórmula.

En función de los valores de las derivadas f_j en lugar de las diferencias regresivas, las fórmulas resultan:

$$k=0, r=3$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2})$$

$$R = O(h^5) \quad (2.56a)$$

$$k=1, r=3$$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} (f_{i+1} + 4f_i + f_{i-1})$$

$$R = O(h^5) \quad (2.56b)$$

$$k=3, r=5$$

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2h}{45} (7f_{i+1} + 32f_i + 12f_{i-1} + 32f_{i-2} + 7f_{i-3})$$

$$R = O(h^7) \quad (2.56c)$$

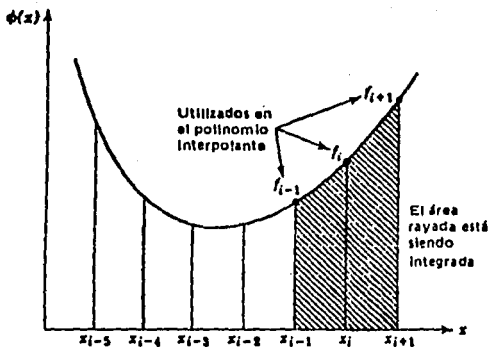


Figura 2.7 Integración cerrada para el caso $k=1$, $r=3$

(cc. 2.56b)

2.10 Métodos Predictor-Corrector

Suponiendo que se conozcan los valores iniciales necesarios (en general se utiliza un Método de Runge-Kutta de paso sencillo para calcular las soluciones aproximadas y_1, y_2, \dots , cercanas al valor inicial), las fórmulas abiertas de integración de (2.49) son algoritmos eficaces para la solución paso a paso de las ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden. Por ejemplo, para resolver la ecuación

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

dada la condición inicial $y(x_0)$, puede utilizarse uno de los métodos de Runge-Kutta de cuarto orden de la sección 2.4 para calcular $y_1, y_2, y_3(yf_1, f_2, f_3)$. La ecuación (2.49d) puede utilizarse para, comenzando con $i=3$, ir generando en forma explícita los valores sucesivos y_4, y_5, \dots, y_n . Es preferible un método de Runge-Kutta de cuarto orden para crear los valores iniciales para (2.49c) ya que su error local de truncamiento es de orden h^5 , igual que para (2.49c).

La fórmula (2.56b) es una fórmula de integración cerrada con error de orden h^5 . En este caso puede utilizarse un método de Runge-Kutta de cuarto orden para calcular $y_1(yf_1)$. A continuación puede utilizarse la ecuación (2.56b) comenzando con $i=1$, para calcular los valores y_2, y_3, \dots, y_n . Desgraciadamente no puede utilizarse (2.56b) para calcular y_{i+1} directamente ya que $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$ en general es desconocido.

Un método de solución consiste en resolver (2.56) por sustituciones sucesivas. Siendo $y_{i+1,j}$ la aproximación sucesiva j de la solución de (2.56b), la relación de recurrencia viene dada por

$$y_{i+1,j+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [f(x_{i+1}, y_{i+1,j}) + 4f_i + f_{i-1}]$$

$$j = 0, 1, \dots \quad (2.57)$$

Por tanto, el procedimiento para la solución de (2.57) consiste en suponer un valor para $y_{i+1,0}$, calcular $f(x_{i+1}, y_{i+1,0})$, deducir $y_{i+1,1}$ de (2.57) calcular de nuevo $f(x_{i+1}, y_{i+1,1})$, deducir $y_{i+1,2}$ de (2.57), etc. Este proceso continúa hasta que la sucesión $y_{i+1,0}, y_{i+1,1}, y_{i+1,2}$ parezca converger, es decir hasta que $y_{i+1,j+1}$ difiera de $y_{i+1,j}$ en un valor aceptable suficientemente pequeño.

El método de paso múltiple cerrado de (2.56b) es más complicado que el abierto de (2.49c) a causa de los cálculos iterativos (2.57) necesarios en cada paso del algoritmo. Sin embargo la fórmula abierta no suele utilizarse a menudo por sí sola para la generación de la sucesión de valores y_4, y_5, \dots, y_n . Se prefiere el método cerrado porque su error de truncamiento local es considerablemente menor que para el método abierto, aunque ambas fórmulas sean del mismo orden. Esto puede verse fácilmente comparando los términos de error de (2.48c) y (2.55b):

Error de la fórmula abierta (2.49c)

$$\frac{14}{45} h^5 f^{(4)}(\xi) \quad \xi \text{ en } (x_{i-3}, x_{i+1}) \quad (2.58)$$

Error de la fórmula cerrada (2.56b)

$$-\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\bar{\xi}) \quad \bar{\xi} \text{ en } (x_{i-1}, x_{i+1}) \quad (2.59)$$

Estos términos del error son aplicables estrictamente al caso en que $y_i = y(x_i)$, $y_{i-1} = y(x_{i-1})$, ..., y $f_i = f(x_i, y(x_i))$. $f_{i-1} = f(x_{i-1}, y(x_{i-1}))$, en la mayor parte de los casos reales estas cantidades habrán sido calculadas numéricamente. Por tanto (2.58) y (2.59) deben tomarse únicamente como aproximaciones. Suponiendo que $f^{(4)}(\xi) = f^{(4)}(\bar{\xi})$, una hipótesis razonable para un valor de h suficientemente pequeño, la fórmula (2.56b) es mucho más aproximada que la (2.49c).

La comparación entre otros métodos abiertos y cerrados de orden análogo, por ejemplo, (2.49a) y (2.56a) o (2.49d) y (2.56c) indica que las fórmulas cerradas son en general considerablemente más exactas que las abiertas. Este resultado no es sorprendente, ya que las últimas implican una extrapolación del polinomio $\phi(x)$ de la ecuación (2.43) en el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$, mientras que las cerradas implican interpolación.

Los métodos cerrados pueden utilizarse por sí solos para calcular aproximaciones a la solución de ecuaciones diferenciales, suponiendo que los valores iniciales necesarios están

disponibles (o puedan calcularse por un método inicial de paso sencillo). Como cada interacción de una fórmula cerrada requiere (por ejemplo (2.57)) el cálculo de la derivada $f(x_{i+1}, y_{i+1,j})$ es importante que la convergencia sea muy rápida. El número de iteraciones necesario para alcanzarla depende de varios factores; los dos sobre los que el programador tiene más control -- son la hipótesis inicial, $y_{i+1,0}$ y la longitud de paso h .

En la práctica se encuentra que si son necesarios más de una o dos iteraciones para convergencia, los métodos de paso múltiple no pueden competir con los de paso sencillo de las secciones anteriores. Por ejemplo, los métodos de Runge-Kutta de cuarto orden requieren de cuatro cálculos de la derivada en cada paso, con las ventajas de que solamente se necesitan valores iniciales en un punto, y que la longitud de paso puede ajustarse en cada paso sin gran dificultad. Por otra parte el método de cuarto orden de (2.57) tiene la desventaja de que no puede comenzar por sí solo, ya que antes de que pueda aplicarse -- por primera vez se necesitan los valores de la solución en x_0 y x_1 ; además, los cambios de longitud de paso resultan bastante complicados. La ventaja principal de (2.57) es que con tan sólo dos evaluaciones de la derivada por paso, $f(x_{i+1}, y_{i+1,0})$ y $f(x_{i+1}, y_{i+1,1})$, proporciona soluciones de exactitud comparable a la de un método de Runge-Kutta de cuarto orden.

Por fortuna ya se conocen algoritmos muy eficaces para la estimación de $y_{i+1,0}$, las fórmulas abiertas de la sección 2.8. El procedimiento más utilizado es la elección de una fórmula abierta y otra cerrada cuyos errores de truncamiento ten-

gan órdenes comparables. La fórmula abierta se utiliza para predecir el valor de $y_{i+1,0}$ y la cerrada para corregir esta estimación por medio de una serie de cálculos iterativos similares a los de (2.57). La fórmula abierta se llama comunmente predictor y la cerrada corrector; los algoritmos que utilizan en la forma anterior fórmulas abiertas y cerradas se llaman Métodos - Corrector-Predictor. Tres de los más corrientemente utilizados son los Métodos de Milne de cuarto y sexto orden, y el de cuarto orden Adams modificado, también llamado Método de Adams-Moulton, que utilizan predictores y correctores ya desarrollados en las secciones anteriores.

Método de Milne de cuarto orden.

Predictor:

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3} (2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2})$$

$$R = O(h^5) \quad (2.49c)$$

Corrector:

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} (f_{i+1} + 4f_i + f_{i-1})$$

$$R = O(h^5) \quad (2.56b)$$

Método de Milne de sexto orden.

Predictor:

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3h}{10} (11f_i - 14f_{i-1} + 26f_{i-2} - 14f_{i-3} + 11f_{i-4})$$

$$R = O(h^7) \quad (2.49d)$$

Corrector:

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2h}{45} (7f_{i+1} + 32f_i + 12f_{i-1} + 32f_{i-2} + 7f_{i-3})$$

$$R = O(h^7) \quad (2.56c)$$

Adams modificado o Método de Adams-Moulton.

Predictor:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3})$$

$$R = O(h^5) \quad (2.49a)$$

Corrector:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2})$$

$$R = O(h^5) \quad (2.56a)$$

También se utilizan otros varios métodos predictor-corrector. A continuación se incluye la relación de los nombres comúnmente aceptados para los métodos de integración que utilizan las fórmulas abiertas y cerradas.

Nombre del Método	Proceso operativo
Adams o Adams-Bashforth	Utilización de predictor <u>ú</u> nicamente.
Moulton	Utilización iterativa de <u>co</u> rrector únicamente.
Adams modificado	Utilización de predictor <u>se</u> guido de utilización itera- tiva del corrector $k=0$ en - ambas ecuaciones.
Milne	Utilización del predictor - seguida de utilización ite- rativa del corrector $k \neq 0$ <u>pa</u> ra ambas ecuaciones.

2.11 Error de truncamiento. Estabilidad y control de la longi- tud del paso en los algoritmos de paso múltiple.

Una de las ventajas de los métodos predictor-corrector de la sección anterior es el que pueda estimarse y corregirse el error local de truncamiento, suponiendo que las expresiones de los errores por ejemplo, (2.58) y (2.59) son aplicables. El método se comprenderá mejor con un ejemplo. Se considera el mé
todo de Milne de cuarto orden de (2.49c) y (2.56b). Dada la e-
cuación diferencial $dy/dx = f(x, y)$ una longitud determinada -
del paso h y valores iniciales para $y_0, y_1, y_2, y_3, f_0, f_1, f_2$
y f_3 (en general se da y_0 , y los valores de y_1, y_2 y y_3 se cal

culan por medio de un método de Runge-Kutta de cuarto orden), - el algoritmo procede paso a paso de la siguiente manera, para $i = 3, 4, 5, \dots$, (siendo $x_i = x_0 + ih$):

1. Calcula $y_{i+1,0}$ por medio del predictor (2.49c)

$$y_{i+1,0} = y_{i-3} + \frac{4}{3} h (2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}) \quad (2.60)$$

2. Calcula $f(x_{i+1}, y_{i+1,0})$, y a continuación resuelve el corrector (2.56b) iterativamente utilizando (2.57)

$$y_{i+1,j+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [f(x_{i+1}, y_{i+1,j}) + 4f_i + f_{i-1}]$$

$$j = 0, 1, \dots$$

la iteración en j continúa hasta que se cumpla el criterio de convergencia especificado, por ejemplo,

$$\left| \frac{y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}}{y_{i+1,j+1}} \right| < \epsilon \quad (2.61)$$

donde ϵ es un determinado número muy pequeño. Si (2.61) no converge y deben interrumpirse los cálculos; debe disminuirse la longitud de paso y proseguir en la forma que se indica más adelante. Como la eficiencia del método exige que (2.57) converja muy rápidamente, h debe ser suficientemente pequeño para que el criterio de convergencia (2.61) se cumpla en una o como máximo en dos iteraciones. Obsérvese que la derivada $f(x_{i+1}, y_{i+1,j})$ debe evaluarse una vez por cada valor de j .

3. Sea k el número de iteraciones necesario para la solución de (2.57). Entonces, en el algoritmo predictor-corrector más común, y_{i+1} se iguala a $y_{i+1,k}$, y se calcula f_{i+1} por medio del nuevo valor y_{i+1} . En general se requieren $k+1$ evaluaciones de $f(x_{i+1}, y_{i+1})$ para cada paso, k para satisfacer el criterio de convergencia (2.61), y una para calcular $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1,k})$ para su utilización en los cálculos siguientes. A continuación se incrementa en una unidad, y se repiten los pasos 1, 2 y 3 para el siguiente paso de la integración.

4. El error local de truncamiento utilizando el método de Milne para la integración sobre el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ puede estimarse suponiendo que son aplicables las expresiones de los errores (2.58) y (2.59). De hecho son aplicables únicamente cuando y_{i-3} , y_{i-1} , f_{i-2} , f_{i-1} , y f_i en (2.60) y (2.57) son valores exactos, lo que en la mayoría de los casos ocurre. Sin embargo, si estos valores fueran conocidos con exactitud y no se introdujeran errores de redondeo, podría escribirse

$$y(x_{i+1}) - y_{i+1,0} = \frac{14}{45} h^5 f^{(4)}(\xi) \quad (2.62)$$

ξ en (x_{i-3}, x_{i+1})

$$y(x_{i+1}) - y_{i+1,k} = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\bar{\xi}) \quad (2.63)$$

$\bar{\xi}$ en (x_{i-1}, x_{i+1})

Suponiendo que $f^{(4)}(\xi)$ es aproximadamente igual a $f^{(4)}(\bar{\xi})$ suposición razonable ya que h es por hipótesis pequeño y dividiendo (2.62) por (2.63) se obtiene

$$y(x_{i+1}) \doteq \frac{1}{29} (28y_{i+1,k} + y_{i+1,0}) \quad (2.64)$$

El valor aproximado estimado del error de truncamiento local e_t para la ecuación correctora resulta por tanto

$$e_t = \frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\bar{\xi}) \doteq \frac{1}{29} (y_{i+1,k} - y_{i+1,0}) \quad (2.65)$$

5. En una modificación del Método de Milne de cuarto orden arriba descrito, se utiliza la ecuación (2.64) para modificar la solución $y_{i+1,k}$ de la ecuación correctora; la solución aproximada en x_{i+1} se calcula por la expresión

$$y_{i+1} = \frac{1}{29} (28y_{i+1,k} + y_{i+1,0}) \quad (2.66)$$

Esta ecuación puede escribirse en la forma

$$y_{i+1} = y_{i+1,0} + \frac{28}{29} (y_{i+1,k} - y_{i+1,0}) \doteq y_{i+1,0} + 28e_t \quad (2.67)$$

Suponiendo que el error de truncamiento local varía lentamente de paso a paso, de forma que e_t para el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ es aproximadamente igual al del intervalo $[x_{i-1}, x_i]$ puede modificarse el valor de $y_{i+1,0}$ calculado por el predictor

(2.60) para obtener un valor inicial más exacto para la solución iterativa de (2.57). Sea $y_{i+1,0}^*$ este valor mejorado de $y_{i+1,0}$. Dado que e_t para el intervalo $[x_{i-1}, x_i]$ es según (2.65), aproximadamente $(y_{i,k} - y_{i,0})/29$, $y_{i+1,0}$ puede estimarse a partir de (2.67) como sigue

$$y_{i+1,0}^* = y_{i+1,0} + \frac{28}{29} (y_{i,k} - y_{i,0}) \quad (2.68)$$

La utilización de $y_{i+1,0}^*$ en lugar de $y_{i+1,0}$ como valor inicial de (2.57) no altera el valor resultante de $y_{i+1,k}$, y por tanto es válido el análisis precedente. En la mayoría de los casos $y_{i+1,0}^*$ es un valor más aproximado que el $y_{i+1,0}$ de (2.60) y el único efecto de (2.68) es la aceleración de la convergencia de la solución iterativa de (2.57), y también posiblemente la reducción del número de evaluaciones necesarias de la derivada.

Un método similar puede utilizarse para otros algoritmos predictor-corrector de la sección 2.10. Evidentemente es mucho más sencillo calcular una estimación del error local de truncamiento para los métodos de paso múltiple que para los métodos de Runge-Kutta.

El control de la longitud del paso es otro asunto totalmente diferente. El valor de h debe ser suficientemente pequeño para satisfacer el criterio de convergencia de la ecuación correctora, preferiblemente lo suficientemente pequeño para garantizar la convergencia en una o dos iteraciones, y también sufi-

cientemente pequeño para satisfacer cualquier restricción en el modelo del error local de truncamiento por ejemplo (2.65). Por otra parte debe ser suficientemente grande para que los errores de redondeo y el número de evaluaciones necesarias de la derivada sean pequeños. Esta última consideración es especialmente importante si la función derivada es complicada y cada evaluación requiere una cantidad sustancial de tiempo de cálculo. La ventaja principal de los métodos de paso múltiple, es decir, el requerir menos evaluaciones de la derivada por paso que los métodos de paso sencillo de exactitud comparable, se pierde al elegir la longitud del paso menor que la estrictamente necesaria.

Por fortuna, relaciones tales como (2.61) y (2.65) proporcionan información suficiente para determinar cuándo debe aumentarse o disminuirse el valor de h . Sin embargo, el mecanismo para llevar a cabo estas modificaciones no es demasiado sencillo. La principal dificultad es que al cambiar la longitud del paso no serán en general disponibles los valores iniciales necesarios para las fórmulas predictor y corrector.

Supóngase que la integración ha alcanzado sin dificultad el punto x_i utilizando un valor h_i , y que la integración sobre el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ tiene problemas de convergencia de la fórmula corrector (por ejemplo, si se necesitan más de una o dos iteraciones) o lleva a un error de truncamiento mayor que el admisible. En este caso un método de solución podría ser el disminuir h en un cierto valor, y recomenzar la integra-

ción en x_i con el nuevo valor de longitud de intervalo h_2 . Para un valor arbitrario de h_2 , prácticamente la única forma de continuar es la utilización de un método de paso sencillo para el cálculo de los valores iniciales necesarios y_{i+1} , y_{i+2} , ..., etc., para la subsiguiente utilización del método de paso múltiple para seguir la integración. Si el error de truncamiento estimado es mucho menor que el exigido y el corrector necesita una o dos iteraciones para convergencia puede utilizarse un método similar excepto que en este caso el nuevo valor h_2 es mayor que h_1 .

Escogiendo como nuevo valor de longitud del paso, h_2 el doble del anterior, $2h_1$, el cambio es relativamente sencillo si se ha conservado un número suficiente de valores "viejos" - - y_{i-1} , y_{i-2} , ..., y f_{i-1} , f_{i-2} , Solamente es necesario un cambio de subíndices de forma que el antiguo y_{i-3} se convierta en el nuevo y_{i-2} , el antiguo y_{i-5} en el nuevo y_{i-3} , etc.

Tomando h_2 como $h_1/2$, algunos pero no todos los valores de la solución y la derivada estarán disponibles. El antiguo y_{i-1} se convierte en el nuevo y_{i-2} , el antiguo y_{i-2} , en el nuevo y_{i-4} , etc. y no estarán calculados ciertos valores de y_{i-1} , y_{i-3} , etc. Una solución es el utilizar un método de paso sencillo para calcular y_{i-1} comenzando con el nuevo y_{i-2} , y calcular y_{i-3} comenzando con el nuevo y_{i-4} ; otra solución, es el interpolar en los valores nuevos disponibles y_i , y_{i-2} , y_{i-4} , ..., los valores necesarios no disponibles y_{i-1} , y_{i-3} ,

En la práctica se cambia el valor de h al doble o a la

mitad de su valor, como se ha descrito. Evidentemente los cambios frecuentes de la longitud del intervalo anularán la principal ventaja de los métodos de paso múltiple, es decir, su rapidez de cálculo.

Al comienzo de los años 50, cuando fueron utilizados los equipos de cómputo por primera vez para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias, los investigadores descubrieron que para algunas ecuaciones ciertos métodos de paso múltiple llevaban errores totales mucho mayores que los esperados a partir de los errores locales de truncamiento (utilizando en dichos estudios ecuaciones cuya solución analítica era conocida). Se descubrió también que la disminución de la longitud del paso repercutía a menudo en un aumento del error, incluso en casos en que se sabía que los errores de redondeo eran insignificantes. En algunos casos la solución numérica no guardaba prácticamente ninguna relación con la solución exacta de la ecuación a resolver. Análisis posteriores han demostrado que algunos métodos de paso múltiple exhiben, bajo ciertas condiciones, grandes inestabilidades que hacen carecer de todo sentido a la correspondiente solución numérica. Estas inestabilidades aparecen incluso en casos en que la ecuación es inherentemente estable y en general no pueden eliminarse por medio del ajuste de la longitud del paso (por tanto la inestabilidad no puede ser una inestabilidad parcial).

Los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias -- (ver sección 2.6) pueden resolverse tanto por métodos de paso sencillo como múltiple.

2.12 Otras fórmulas de integración.

Hamming ha estudiado un grupo general de fórmulas correctoras de la forma

$$\begin{aligned}
 y_{i+1} = & a_0 y_i + a_1 y_{i-1} + a_2 y_{i-2} \\
 & + h(b_{-1} f_{i+1} + b_0 f_i + b_1 f_{i-1} + b_2 f_{i-2}) \\
 & + O(h^5)
 \end{aligned} \tag{2.69}$$

que incluye los correctores de los métodos predictor-corrector de Milne de cuarto orden y de Adams-Moulton. Cinco de las siete constantes de (2.69) pueden eliminarse haciendo que la fórmula sea exacta para polinomios de grado cuarto o menor, es decir, para las funciones $y(x) = 1, x, x^2, x^3, x^4$. Este procedimiento suele denominarse método de los coeficientes indeterminados, y de él se deducen las siguientes relaciones entre las constantes, tomando a_1 y a_2 como parámetros:

$$\begin{aligned}
 a_0 &= 1 - a_1 - a_2 \\
 a_1 &= a_1 \\
 a_2 &= a_2 \\
 b_{-1} &= \frac{1}{24} (9 - a_1) \\
 b_0 &= \frac{1}{24} (19 + 13a_1 + 8a_2) \\
 b_1 &= \frac{1}{24} (-5 + 13a_1 + 32a_2) \\
 b_2 &= \frac{1}{24} (1 - a_1 + 8a_2)
 \end{aligned} \tag{2.70}$$

La deducción de la expresión del término de error para (2.69) en caso de que $y(x)$ no sea un polinomio de grado 4 o menor es bastante complicada y no se expondrá.

Hamming ha estudiado las características de la estabilidad de (2.69), y seleccionado los parámetros a_1 y a_2 de forma que se consiga una estabilidad mucho mayor que la del método del corrector de Milne; como contrapartida aumenta algo de la magnitud del error de truncamiento. La forma de (2.69) seleccionada por Hamming que tiene mejores características de estabilidad y exactitud es

$$y_{i+1} = \frac{9}{8} y_i - \frac{1}{8} y_{i-2} + \frac{3}{8} h(f_{i+1} + 2f_i - f_{i-1}) \quad (2.71)$$

Suponiendo que y_i , y_{i-2} , f_i y f_{i-1} se conocen exactamente, el error local de truncamiento de (2.71) es

$$e_t = \frac{1}{40} h^5 f^{(4)}(\xi) \quad (2.72)$$

ξ en (x_{i-2}, x_{i+1})

El corrector de Hamming puede utilizarse con cualquier predictor adecuado. El llamado Método Predictor-Corrector de Hamming utiliza el predictor de cuarto orden de Milne; suele utilizarse la técnica anteriormente descrita para el caso del método de cuarto orden de Milne, para modificar los valores de la solución dados por el predictor y el corrector. El algoritmo completo es:

1. Debe disponerse de los valores iniciales de $y_0, y_1, y_2, y_3, f_0, f_1, f_2$ y f_3 . En general la única condición conocida será y , y se utilizará un método de Runge-Kutta de cuarto orden para obtener y_1, y_2 y y_3 . Las derivadas f_0, f_1, f_2 y f_3 pueden obtenerse de la ecuación diferencial $dy/dx = f(x, y)$. A continuación se repetirán los pasos 2 a 6 para $i = 3, 4, \dots$

2. La solución del predictor $y_{i+1,0}$ se calcula por medio del predictor de Milne de cuarto orden, como en (2.60),

$$y_{i+1,0} = y_{i-3} + \frac{4}{3} h(2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2})$$

3. El valor dado del predictor se modifica, suponiendo que el error de truncamiento local no cambia excesivamente en intervalos sucesivos, obteniéndose

$$y_{i+1,0}^h = y_{i+1,0} + \frac{112}{121} (y_{i,k} - y_{i,0}) \quad (2.73)$$

Esta modificación es análoga a la de (2.68) para el método de Milne. Para el caso $i=3$ no se realiza este paso, ya que no estarán definidos los valores de los elementos del miembro derecho de (2.73). En dicha ecuación $y_{i,k}$ es la solución de la ecuación correctora (2.74) precedente.

4. La ecuación correctora de Hamming (2.71) se resuelve iterativamente por medio del algoritmo de sustituciones sucesivas siguientes:

$$y_{i+1,j+1} = \frac{1}{8} (9y_i - y_{i-2} + 3h[f(x_{i+1}, y_{i+1,j}) + 2f_i - f_{i-1}])$$

$$j = 0, 1, \dots, k-1 \quad (2.74)$$

El valor inicial de $y_{i+1,j}$ en el miembro derecho es el valor $y_{i+1,0}^*$ del paso 3. En teoría se continúa la iteración hasta que se satisfaga un determinado criterio de convergencia [ver por ejemplo (2.61)]. En la práctica se aplica solamente una vez el corrector, se elige la longitud de paso de forma que la convergencia quede garantizada en sólo una iteración.

5. A continuación se utilizan $y_{i+1,k}$ del paso 4 y $y_{i+1,0}$ del paso 2 para estimar el error de truncamiento e_t para la ecuación correctora por medio de

$$e_t \approx \frac{9}{121} (y_{i+1,k} - y_{i+1,0}) \quad (2.75)$$

que se deduce directamente de los errores del predictor (2.62) y corrector (2.72) respectivamente, por un análisis similar al indicado para el método de Milne.

6. El valor final de la solución y_{i+1} se calcula a continuación por

$$y_{i+1} = y_{i+1,k} - \frac{9}{121} (y_{i+1,k} - y_{i+1,0}) \quad (2.76)$$

que es análoga a la ecuación (2.66) para el método de Milne. Se calcula la derivada f_{i+1} para este valor final. Si el error

local de truncamiento está dentro de los límites de aceptación, se avanza el contador una unidad y se repiten los pasos 2 a 6 - para el intervalo de integración siguiente. Si el error deducido en (2.75) es superior al admisible se ajusta la longitud de paso y se continúa el proceso de integración.

Este método de cuarto orden de Hamming es hoy día uno de los métodos de paso múltiple más populares.

Para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden existen muchos otros algoritmos de paso sencillo y múltiple. Milne y Henrici han realizado unos estudios particularmente completos de los métodos de paso múltiple.

Más recientemente Butcher ha desarrollado varios métodos de paso sencillo de órdenes cinco a siete. Gear y Butcher han desarrollado también algunos métodos modificados de paso múltiple de orden cuatro a siete que tienen algunas de las características de los métodos de paso sencillo (la derivada se evalúa en el interior del intervalo de integración) y de paso múltiple (se utiliza información obtenido en intervalos precedentes). Waters ha comparado varios de estos métodos con los algoritmos más corrientemente utilizados (método de Runge-Kutta de cuarto orden, etc.) desde el punto de vista de exactitud y tiempo de cálculo. Resuelve un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para el que la evaluación de las derivadas exige un tiempo de cálculo relativamente pequeño.

Para la integración directa de ecuaciones de orden igual o mayor que dos existe así mismo una gran variedad de métodos de paso sencillo o múltiple; las ecuaciones de orden elevado no necesitan ser reducidas a otras de primer orden para calcular la solución numérica. Henrici ha señalado que las soluciones obtenidas por estos métodos directos no son más exactas que las dadas por la reducción de la ecuación a un sistema de ecuaciones de primer orden y la solución correspondiente de dicho sistema. Sin embargo, las ecuaciones de formas especiales (por ejemplo, las ecuaciones diferenciales de segundo orden que no contienen términos en derivada de primer orden), pueden resolverse directamente con algún ahorro de tiempo de cálculo.

CAPITULO 3
APLICACIONES A LOS BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA
EN REACTORES QUIMICOS HOMOGENEOS

3.1 Introducción.

En el siguiente capítulo se aplicarán tres de los métodos más representativos para la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden a los diversos casos de reactores químicos homogéneos en los cuales, debido a la naturaleza de los balances de materia y en algunos casos de energía (casos no isotérmicos) dan por resultado tales ecuaciones. En algunas ocasiones estas ecuaciones pueden resolverse analíticamente, sin embargo en otras, se obtienen ecuaciones complejas difíciles o imposibles de resolver por métodos analíticos. En estos casos se recurre al uso de métodos numéricos.

Los métodos que se aplicarán serán los siguientes:
Método de Runge-Kutta de cuarto orden, método de Adams Moulton de cuarto orden y método de Milne de sexto orden.

Como se pudo observar en el capítulo anterior, el método de Runge-Kutta de cuarto orden es uno de los más representativos de los métodos de un sólo paso y además, el error que se obtiene es pequeño. El método de Adams Moulton de cuarto orden es un método multipaso del tipo predictor-corrector, el cual se obtiene mediante la combinación de fórmulas de integración abiertas y cerradas; el error que se obtiene, es del mismo orden

que el de Runge-Kutta de cuarto orden, por lo que mediante la comparación de ambos se podrán obtener conclusiones muy interesantes. Por último, el método de Milne de sexto orden es si milar al anterior sin embargo, el orden de error que se obtie ne es mayor, lo que implica ser un método más preciso.

En los últimos dos casos, los cuales tienen fórmulas - del tipo predictor-corrector no se iterará el corrector debido a que de esta manera se podrá realizar una mejor comparación - con el método de Runge-Kutta, ya que de otra manera, implicará un número de iteraciones tal, que originaría un mayor tiempo - de procesamiento y por tanto obtendríamos mejores resultados, - pero a la vez no tendríamos un buen patrón de comparación de - lo que es el método en sí, osea de sus ecuaciones.

En los métodos multipaso se utilizará el método de Runge-Kutta de cuarto orden para obtener los valores iniciales -- que se requieren para poder "arrancar" el método.

En cada problema considerado, se utilizarán los tres mé todos y se resolverán con varios tamaños de paso para poder ana lizar su efecto. Para cada caso se obtendrán los resultados numéricos, la memoria utilizada y el tiempo de proceso en minutos, segundos y centésimas de segundo. En base a estos resultados se podrán analizar los errores de truncamiento y redondeo.

El alcance de este trabajo es únicamente de obtener los resultados numéricos, por lo que sólomente se tomarán de los e jemplos utilizados las ecuaciones diferenciales finales a resol

ver y no se hará ningún cálculo adicional ni deducciones para obtener tales ecuaciones, ni el desarrollo del problema o gráficas e incluso, en caso de ser necesario se modificará el problema para ilustrar sólo el cálculo de un determinado reactor.

3.2 Ejemplos.

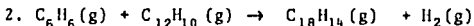
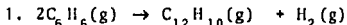
Los diferentes casos en los que se encontró que se podrían resolver ecuaciones diferenciales no analíticamente sino sólo por métodos numéricos son:

- a. Reactor tubular isotérmico
- b. Reactor tubular no isotérmico, no adiabático
- c. Reactor tubular no isotérmico, adiabático
- d. Reactor semicontínuo con corriente de alimentación pero no de producto isotérmico
- e. Reactor por lotes no isotérmico, adiabático
- f. Reactor por lotes no isotérmico, no adiabático.

a. REACTOR TUBULAR ISOTERMICO

Ejemplo 4.6 Smith

En un análisis de los datos de Kassell para la deshidrogenación en fase de vapor del benceno en un reactor continuo homogéneo, Hougen y Watson reportaron las reacciones



y las siguientes ecuaciones de velocidad:

$$r_1 = 14.96 * 10^6 e^{-15 \cdot 200/T} \left(p_B^2 - \frac{p_D p_H}{K_1} \right)$$

moles lb de benceno que
reaccionó / (hr) (pie³)

$$r_2 = 8.67 * 10^6 e^{-15 \cdot 200/T} \left(p_B p_D - \frac{p_T p_H}{K_2} \right)$$

moles lb de trifenilo o di-
fenilo que reaccionó / (hr)(pie³)

donde p_B = presión parcial del benceno, atm.

p_D = presión parcial del difenilo, atm.

p_T = presión parcial del trifenilo, atm.

p_H = presión parcial del hidrógeno, atm.

T = temperatura, °K

K_1, K_2 = constantes de equilibrio para las dos reacciones en términos de presiones parciales.

Los datos sobre los que están basadas las ecuaciones de velocidad se obtuvieron a una presión total de 1 atm y a tempe-

raturas de 1265 y 1400 °F, en un tubo de 0.5 plg y 3 pies de largo.

Se propone diseñar un reactor tubular que opere a una presión de 1 atm y a 1400 °F. Determine la conversión total del benceno a di y trifenilo como función de el cociente del volumen del reactor y la velocidad de alimentación. Suponga que el reactor será operado isotérmicamente y que no habrá otras reacciones importantes.

Ecuaciones diferenciales involucradas.

$$\frac{dX_1}{d(V/F)} = 6.23 \left[(1-X_1-X_2)^2 \frac{(1/2X_1-X_2)(1/2X_1+X_2)}{0.312} \right] = F_1$$

$$\frac{dX_2}{d(V/F)} = 3.61 \left[(1-X_1-X_2)(1/2X_1-X_2) - \frac{X_2(1/2X_1+X_2)}{0.480} \right] = F_2$$

Algoritmos.

* Método de Runge-Kutta de cuarto orden

$$X_{1\ i+1} = X_{1\ i} + \frac{H}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad ; \quad H = D(V/F)$$

$$X_{2\ i+1} = X_{2\ i} + \frac{H}{6} (M_1 + 2M_2 + 2M_3 + M_4)$$

$$K_1 = F_1 (X_{1\ i}, X_{2\ i})$$

$$K_2 = F_1 \left(X_{1\ i} + \frac{K_1}{2} H, X_{2\ i} + \frac{M_1}{2} H \right)$$

$$K_3 = F_1 \left(X_{1\ i} + \frac{K_2}{2} H, X_{2\ i} + \frac{M_2}{2} H \right)$$

$$K_4 = F_1 (X_{1\ i} + K_3 H, X_{2\ i} + M_3 H)$$

$$M1 = F2 (X1_i, X2_i)$$

$$M2 = F2 (X1_i + \frac{K1}{2} H, X2_i + \frac{M1}{2} H)$$

$$M3 = F2 (X1_i + \frac{K2}{2} H, X2_i + \frac{M2}{2} H)$$

$$M4 = F2 (X1_i + \frac{K3}{2} H, X2_i + \frac{M3}{2} H)$$

* Método de Adams Moulton de cuarto orden

Predictor:

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{24} (55F1_i - 59F1_{i-1} + 37F1_{i-2} - 9F1_{i-3})$$

$$X2_{i+1} = X2_i + \frac{H}{24} (55F2_i - 59F2_{i-1} + 37F2_{i-2} - 9F2_{i-3})$$

Corrector:

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{24} (9F1_{i+1} + 19F1_i - 5F1_{i-1} + F1_{i-2})$$

$$X2_{i+1} = X2_i + \frac{H}{24} (9F2_{i+1} + 19F2_i - 5F2_{i-1} + F2_{i-2})$$

* Método de Milne de sexto orden

Predictor:

$$X1_{i+1} = X1_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F1_i - 14F1_{i-1} + 26F1_{i-2} - 14F1_{i-3} + 11F1_{i-4})$$

$$X2_{i+1} = X2_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F2_i - 14F2_{i-1} + 26F2_{i-2} - 14F2_{i-3} + 11F2_{i-4})$$

Corrector:

$$X1_{i+1} = X1_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F1_{i+1} + 32F1_i + 12F1_{i-1} + 32F1_{i-2} + 7F1_{i-3})$$

$$X2_{i+1} = X2_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F2_{i+1} + 32F2_i + 12F2_{i-1} + 32F2_{i-2} + 7F2_{i-3})$$

A continuación se presentan los tres programas, donde:

X1(0) = Conversión inicial de benceno.

X2(0) = Conversión inicial de difenilo.

V/F(0) = Cociente del volumen del reactor y la velocidad de alimentación ft³hr/lb mol

D(V/F) = Incremento de V/F

X1(F) = Conversión final de benceno (equilibrio)

X2(F) = Conversión final de difenilo (equilibrio)

Este problema se resolverá utilizando los siguientes

datos:

X1(0) = 0

X2(0) = 0

V/F = 0

D(V/F) = H = 0.1, 0.01, 0.005, 0.0005 y 0.00001

```

90 REM REACTOR TUBULAR ISOTERMICO
100 REM METODO DE RUNGE KUTTA DE CUARTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 4.6 SMITH
120 DIM K(4)
130 DIM M(4)
200 PRINT "X1(0),X2(0),V/F(0),D(V/F),X1(F),X2
(F) "
210 INPUT X1,X2,VF,H,C1,C2
215 POKE 18,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
225 PRINT "VF", "X1", "X2"
230 PRINT
235 PRINT VF,X1,X2
240 PRINT
245 X3=X1
250 X4=X2
255 FOR I=1 TO 4
260 GOSUB 1000
265 K(I)=VF
270 M(I)=VF
275 X3=X3+0.5*K(I)*H
280 X4=X4+0.5*M(I)*H
285 NEXT I
290 X3=X1+K(3)*H
295 X4=X2+M(3)*H
300 GOSUB 1000
305 F(4)=VF
310 F(3)=VF
315 X1=X1+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/6
320 X2=X2+H*(M(1)+2*M(2)+2*M(3)+M(4))/6
325 X3=(INT(X1*100000))/100000
330 X4=(INT(X2*100000))/100000
335 VFE=VF+H
340 PRINT VF,X3,X4
345 IF X1V=C1 OR X2V=C2 THEN GOTO 3000
350 GOTO 260
1000 F1=6.29*((1-X3-X4)^2-(0.5*X3-X4)*(0.5*X3
+X4))/0.912
1100 F2=6.81*((1-X3-X4)*(0.5*X3-X4)-X4*(0.5*X
3+X4))/0.48
12000 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";
C;" : ";0;"D:"GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;" : ";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " : ";0;"E:"GOTO 4100
4000 PRINT " : ";E
4100 END

```

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

```

90 REM REACTOR TUBULAR ISOTERMICO
100 REM METODO DE ADAMS MOULTON DE CUARTO ORDE
N
110 REM EJEMPLO 4.6 SMITH
120 DIM K(4)
130 DIM H(4)
140 DIM X1(4)
150 DIM X2(4)
160 DIM F1(4)
170 DIM F2(4)
1800 PRINT "X1(0),X2(0),V/F(0),D(V/F),X1(F),X2(
F) ="
210 INPUT X1,X2,VF,H,C1,C2
220 POKE 18,0:POKE 19,0:POKE 20,0
2200 PRINT
230 PRINT "V/F","X1","X2"
240 PRINT
250 PRINT VF,X1,X2
260 X1(0)=X1
270 X2(0)=X2
280 FOR J=0 TO 2
290 X4=X1(J)
300 X4=X2(J)
310 FOR H=1 TO 3
320 GOSUB 1000
330 K(H)=F1
340 I(H)=F2
350 X4=X1(J)+0.5*K(H)*H
360 X4=X2(J)+0.5*I(H)*H
370 NEXT H
380 X4=X1(J)+K(3)*H
390 X4=X2(J)+I(3)*H
400 GOSUB 1000
410 I(4)=F1
420 I(4)=F2
430 VF=VF+H
440 X1(J+1)=X1(J)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/
6
450 X2(J+1)=X2(J)+H*(I(1)+2*I(2)+2*I(3)+I(4))/
6
460 X1(4)=X1(J+1)
470 X2(4)=X2(J+1)
480 GOSUB 2000
490 PRINT VF,X4
500 IF X1(J+1)>=C1 OR X2(J+1)>=C2 THEN GOTO 30
510
520 F1(J)=K(1)
530 F2(J)=I(1)
540 PRINT
550 NEXT J
560 X4=X1(3)
570 X4=X2(3)
580 GOSUB 1000
590 F1(3)=F1
600 F2(3)=F2
610 X1(4)=X1(3)+H*(55*F1(3)-59*F1(2)+37*F1(1)-
9*F1(0))/24
620 X2(4)=X2(3)+H*(55*F2(3)-59*F2(2)+37*F2(1)-
9*F2(0))/24

```

```

7740 X3=X1(4)
7750 X4=X2(4)
7760 GOSUB 1000
7770 F1(4)=F1
7780 F2(4)=F2
7790 X1(4)=X1(3)+H*(9*F1(4)+19*F1(3)-5*F1(2)+F1
(1))/24
8000 X2(4)=X2(3)+H*(9*F2(4)+19*F2(3)-5*F2(2)+F2
(1))/24
8100 GOSUB 2000
8200 VF=VF+H
8300 PRINT VF,X5,X6
8400 PRINT
8500 IF X1(4)>=C1 OR X2(4)>=C2 THEN GOTO 3000
8600 X3=X1(4)
8700 X4=X2(4)
8800 GOSUB 1000
8900 FOR J=1 TO 3
9000 X1(J)=X1(J+1)
9100 X2(J)=X2(J+1)
9200 F1(J)=F1(J+1)
9300 F2(J)=F2(J+1)
9400 NEXT J
9500 F1(3)=F1
9600 F2(3)=F2
9700 GOTO 720
980 GOTO 720
1000 F1=5.29*((1-X3-X4)^2-(0.5*X3-X4)*(0.5*X3+
X4))/0.212)
1100 F2=5.51*((1-X3-X4)*(0.5*X3-X4)-X4*(0.5*X3
+X4))/0.248)
1200 RETURN
2000 X5=(INT(X1(4)*100000))/100000
2100 X6=(INT(X2(4)*100000))/100000
2200 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
;" : 0";D;:GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " : "; "0";E;GOTO 4100
4000 PRINT " : ";E
4100 END

```

```

90 REM REACTOR TUBULAR ISOTERMICO
100 REM METODO DE MILNE DE SEXTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 4.6 SMITH
120 DIM K(4)
130 DIM I(4)
140 DIM X1(6)
150 DIM X2(6)
160 DIM F1(6)
170 DIM F2(6)
200 PRINT "X1(0), X2(0), U/F(0), D(U/F), X1(F), X2(
F) = "
210 INPUT X1, X2, UF, H, C1, C2
215 POKE 19, 0: POKE 19, 0: POKE 20, 0
220 PRINT
230 PRINT "U/F", "X1", "X2"
240 PRINT
250 PRINT UF, X1, X2
260 PRINT
270 X1(0) = X1
280 X2(0) = X2
290 FOR J = 0 TO 4
300 X3 = X1(J)
310 X4 = X2(J)
320 FOR I = 1 TO 3
330 GOSUB 1000
340 K(I) = F1
350 I(I) = F2
360 X3 = X1(J) + 0.5 * K(I) * H
370 X4 = X2(J) + 0.5 * I(I) * H
380 NEXT I
390 X3 = X1(J) + K(3) * H
400 X4 = X2(J) + I(3) * H
410 GOSUB 1000
420 F1(4) = F1
430 F2(4) = F2
440 UF = UF + H
450 X1(J+1) = X1(J) + H * (K(1) + 2 * K(2) + 2 * K(3) + K(4)) /
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99

```

```

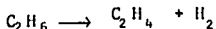
7750 X4=X1(6)
7760 GOTO 7700
7770 F1(6)=F1
7780 F2(6)=F2
7790 X1(6)=X1(2)+N*I*(7*F1(6)+32*F1(5)+12*F1(4)
+32*F1(3)+7*F1(2))/45
8000 X2(6)=X2(2)+N*I*(7*F2(6)+32*F2(5)+12*F2(4)
+32*F2(3)+7*F2(2))/45
810 GOSUB 2000
820 SRFVF+H
830 PRINT VF,X5,X6
840 PRINT
850 IF F1(6)>=C1 OR F2(6)>=C2 THEN GOTO 3000
860 X4=X1(6)
870 X4=X2(6)
880 GOSUB 1000
900 FOR J=0 TO 9
910 X1(J)=X1(J+1)
920 X2(J)=X2(J+1)
930 F1(J)=F1(J+1)
940 F2(J)=F2(J+1)
950 NEXT J
960 F1(9)=F1
970 F2(9)=F2
980 GOTO 720
1000 T1=4.29*((1-X3-X4)^2-(0.5*X3-X4)*(0.5*X3+
X4)/0.12)
1100 T2=0.61*((1-X3-X4)*(0.5*X3-X4)-X4*(0.5*X3
+X4)/0.48)
1200 RETURN
2000 X5=(INT(X1(6)*100000))/100000
2100 X6=(INT(X2(6)*100000))/100000
2200 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
;" : ";D;" : ";E;GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;" : ";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " : ";E;GOTO 4100
4000 PRINT " : ";E
4100 END

```

b. REACTOR TUBULAR NO ISOTERMICO, NO ADIABATICO

Ejemplo 6.2 Carnahan

La pirólisis del etano en el intervalo de temperaturas 1200 a 1700 °F queda representada en esencia por la siguiente-reacción química irreversible y de primer orden



Etano \longrightarrow Etileno + Hidrógeno

En un tubo de acero de diámetro interior 4.026 pulgadas se introduce etano con un caudal de 1800 lb/hora y a una temperatura de 1200 °F. El horno suministra calor al tubo a razón de 5000 BTU/hora pie² (de superficie interior del tubo). Se supone - que éste no contiene obstrucciones internas (p.ej.: catalíticas), y que pueden despreciarse las caídas de presión a lo largo del-eje; la presión media de los gases en el interior puede tomarse igual a 30 lb/pulg². Suponiendo control de caudal en el tubo, - escribbase un programa que calcule la longitud necesaria para pro-ducir descomposición del 75 por ciento del etano en etileno e - -higrógeno.

En la siguiente tabla se indican las propiedades termo-dinámicas necesarias (calores teóricos de formación, ΔH_f , capa-cidades caloríficas dependientes de la temperatura, c_p), y la - información cinética (constante k de la reacción anterior, fun-ción de la temperatura), y las constantes físicas necesarias.

Datos de la reacción de pirólisis del etano*.

	ΔH_f a 298 °K (cal/g mol)	c_p (cal/g mol °K)
C_2H_6 (gas)	-20236	$3.75 + 35.7 \times 10^{-3} T - 10.12 \times 10^{-6} T^2$
C_2H_4 (gas)	12496	$5.25 + 24.2 \times 10^{-3} T - 6.88 \times 10^{-6} T^2$
H_2 (gas)	0	$7.00 - 0.385 \times 10^{-3} T + 0.6 \times 10^{-6} T^2$

Cte de reacción: $k = 5.764 \times 10^{16} e^{-41,310/T} (\text{seg})^{-1}$

Pesos atómicos: C = 12, H = 1

Cte. de los gases: R = 10.73 lb/pulg² pie³ / lb mol °R

*T = Temperatura en °K(Kelvin)

Ecuaciones diferenciales involucradas.

$$\frac{dX_1}{dL} = \frac{(2.8493 \times 10^{20} e^{-41310/TK} (1-X_3))}{(1+X_3) T^4} = F1$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{87.8337 - DH \left(\frac{dX_1}{dL} \right)}{CP} = F2$$

donde:

$$DH = 1.8 (32732 + 8.5 (Tk - 298) - 5.942 \times 10^{-3} (Tk^2 - 88804) + 1.28 \times 10^{-6} (Tk^3 - 26463592))$$

$$CP = (1-X_3) (3.75 + 35.7 \times 10^{-3} Tk - 10.12 \times 10^{-6} Tk^2) + X_3 (12.25 + 23.815 \times 10^{-3} Tk - 6.28 \times 10^{-6} Tk^2)$$

Algoritmos.

* Método de Runge-Kutta de cuarto orden

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{6} (K1 + 2K2 + 2K3 + K4) \quad ; H=\Delta L$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{6} (M1 + 2M2 + 2M3 + M4)$$

$$K1 = F1 (X1_i, T_i)$$

$$K2 = F1 (X1_i + \frac{K1}{2} H, T_i + \frac{M1}{2} H)$$

$$K3 = F1 (X1_i + \frac{K2}{2} H, T_i + \frac{M2}{2} H)$$

$$K4 = F1 (X1_i + K3H, T_i + M3H)$$

$$M1 = F2 (X1_i, T_i)$$

$$M2 = F2 (X1_i + \frac{K1}{2} H, T_i + \frac{M1}{2} H)$$

$$M3 = F2 (X1_i + \frac{K2}{2} H, T_i + \frac{M2}{2} H)$$

$$M4 = F2 (X1_i + K3H, T_i + M3H)$$

* Método de Adams Moulton de cuarto orden

Predictor:

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{24} (55F1_i - 59F1_{i-1} + 37F1_{i-2} - 9F1_{i-3})$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{24} (55F2_i - 59F2_{i-1} + 37F2_{i-2} - 9F2_{i-3})$$

Corrector:

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{24} (9F1_{i+1} + 19F1_i - 5F1_{i-1} + F1_{i-2})$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{24} (9F2_{i+1} + 19F2_i - 5F2_{i-1} + F2_{i-2})$$

* Método de Milne de sexto orden.

Predictor:

$$X1_{i+1} = X1_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F1_i - 14F1_{i-1} + 26F1_{i-2} - 14F1_{i-3} + 11F1_{i-4})$$

$$T_{i+1} = T_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F2_i - 14F2_{i-1} + 26F2_{i-2} - 14F2_{i-3} + 11F2_{i-4})$$

Corrector:

$$X1_{i+1} = X1_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F1_{i+1} + 32F1_i + 12F1_{i-1} + 32F1_{i-2} + 7F1_{i-3})$$

$$T_{i+1} = T_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F2_{i+1} + 32F2_i + 12F2_{i-1} + 32F2_{i-2} + 7F2_{i-3})$$

A continuación se presentan los tres programas, donde:

X(0) = Conversión inicial de etano

T(0) = Temperatura inicial (°F)

L(0) = Longitud inicial del reactor (ft)

DL = Incremento de longitud del reactor (ft)

XF = Conversión final de etano.

Este problema se resolverá utilizando los siguientes

datos:

x(0) = 0

T(0) = 1200

L(0) = 0

DL = H = 100, 10, 5, 1 y 0.05

```

90 REM REACTOR TUBULAR NO ISOTERMICO NO ADIABATICO
100 REM METODO DE RUNGE KUTTA DE CUARTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 6.2 CARRAHAN
120 DIM N(4)
130 DIM H(4)
140 PRINT "X(0),T(0),L(0),DL,XF"
150 INPUT X1,TF,L,H,C1
160 POKE 18,0:POKE 19,0:POKE 20,0
170 PRINT
180 PRINT "L","X","T"
190 PRINT
200 PRINT+460
210 PRINT L,X1,TF
220 PRINT
230 X=X1
240 T=TF+460
250 FOR I=1 TO 3
260 GOSUB 1000
270 K(I)=F1
280 H(I)=F2
290 X=X1+0.5*K(I)*H
300 T=T+0.5*H(I)*H
310 K(I)=F1
320 T=T+K(I)*H
330 H(I)=F2
340 GOSUB 1000
350 K(I)=F1
360 H(I)=F2
370 X=X1+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/4
380 T=T+H*(H(1)+2*H(2)+2*H(3)+H(4))/4
390 X5=(INT(X1*1000000))/100000
400 T5=(INT(TF*100000))/100000
410 L=L*H
420 PRINT L,X5,T5
430 IF X1>C1 THEN GOTO 3000
440 GOTO 260
1000 T=TF+1.0
1100 F1=F2.6493E+16*SO*EXP(-41810/TK)*(1-X3)/(1+X3)*T44
1200 F2=F1.3273E+0.001*(TK-299)-5.942E-03*(TK-2999)+1.239E-06*(TK-29-26463572)
1300 C1=(1-X3)*X(3.75+0.0357*TK-1.012E-05*TK^2)+X3*(12.135+0.023815*TK-6.28E-06*TK^2)
1400 F1=(F1-F2)*H/CP
1500 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF B<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;"10";D:GOTO 3500
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;" ";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";"0";E:GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```

```

90 REM REACTOR TUBULAR NO ISOTERMICO NO ADTABA
100 REM METODO DE ADAMS MOULTON DE CUARTO ORDE
N
110 REM EILINDEO L.D. CARRAHAN
120 DIM M(4)
130 DIM N(4)
140 DIM X1(4)
150 DIM T(4)
160 DIM F1(4)
170 DIM F2(4)
200 PRINT "X(0), T(0), L(0), DL, RF"
210 INPUT X1, TF, L, H, CI
215 POKE 19,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "L", "X", "T"
240 PRINT
245 T=TF+460
250 PRINT L, X1, TF
260 PRINT
270 N1(0)=N1
280 T(0)=T
290 FOR T=0 TO 2
310 X=X1(0)
320 T4=T(0)
330 FOR I=1 TO 3
340 GOSUB 1000
350 X(I)=X1
360 M(I)=F080 N(I)=F2
370 X=X1(I)+0.5XX(I)*H
380 T4=T(I)+0.5XX(I)*H
390 NEXT I
400 X=X1(I)+H*(3)*H
410 T4=T(I)+H*(3)*H
420 GOSUB 1000
430 X(I)=F1
440 M(I)=F2
450 L=L+H
460 X1(I+1)=X1(I)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/6
470 T(I+1)=T(I)+H*(M(1)+2*M(2)+2*M(3)+M(4))/6
480 X1(4)=X1(3+1)
490 T(4)=T(3+1)
500 GOSUB 2000
510 PRINT L, X5, T6
520 IF X1(3+1) >= 01 THEN GOTO 3300
530 F1(0)=K(1)
540 F2(0)=M(1)
550 PRINT
560 NEXT J
570 X=X1(3)
580 T4=T(3)
590 GOSUB 1000
600 F1(3)=F1
610 F2(3)=F2
620 X1(4)=X1(3)+H*(55*X1(3)-59*X1(2)+37*X1(1)-9*X1(0))/24
630 T4=T(3)+H*(55*X2(3)-59*X2(2)+37*X2(1)-9*X2(0))/24
640 X=X1(4)

```

```

750 T=AT(4)
760 GOSUB 1000
770 F1(4)=F1
780 F2(4)=F2
790 X1(4)=X1(3)+HX(9*F1(4)+19*F1(3)-5*F1(2)+F1
(1))/24
800 Y(4)=Y(3)+HY(9*F2(4)+19*F2(3)-5*F2(2)+F2(1
))/24
810 GOSUB 2000
820 L=L+H
830 PRINT L,X5,T2
840 PRINT
850 IF X1(4)>=C1 THEN GOTO 3000
860 YB=X1(4)
870 T=AT(4)
880 GOSUB 1000
890 FOR J=0 TO 5
900 X1(J)=X1(J+1)
910 Y(0)=Y(J+1)
920 F1(J)=F1(J+1)
930 F2(J)=F2(J+1)
940 NEXT J
950 F1(0)=F1
960 F2(0)=F2
970 GOTO 720
1000 TK=TA/1.2
1100 F1=2.9473E+16*30*EXP(-41310/TK)*(1-X3)/((
1+X3)*T4)
1200 DH=F1.8*(32702+3.5*(TK-2798)-5.942E-03*(TK
2-26904)+1.22E-06*(TK^3-264833592))
1300 C1=(1-X3)*(3.75+0.0657*TK-1.012E-05*TK^2)
1400 F2=(87.2937-DH*F1)/C1
1500 RETURN
2000 T=AT(4)-420
2100 X5=(INT(X1(4)*100000))/100000
2200 T2=(INT(T*100000))/100000
2300 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
";";D;GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";";E;GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```

```

90 REM REACTOR TUBULAR NO ISOTERMICO NO ADIABA
TICO
100 REM METODO DE MILNE DE SEXTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 6.2 CARNAHAN
120 DIM M(4)
130 DIM X1(6)
140 DIM T(6)
150 DIM F1(6)
160 DIM F2(6)
170 PRINT "X(0),T(0),L(0),DL,XF"
210 INPUT X1,T,L,DL,C1
215 POKE 19,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "L","X","T"
240 PRINT
245 T=TF+460
250 PRINT L,X1,TF
260 PRINT
270 X1(0)=X1
280 T(0)=T
300 FOR J=0 TO 4
310 X3=X1(J)
320 T4=T(J)
350 FOR I=1 TO 3
360 GOSUB 1000
370 K(I)=F1
380 H(I)=F2
390 X3=X1(J)+0.5*K(I)*H
400 T4=T(J)+0.5*H*(I)*H
410 NEXT I
420 X3=X1(J)+K(3)*H
430 T4=T(J)+H*(3)*H
440 GOSUB 1000
450 K(4)=F1
460 H(4)=F2
470 L=L+H
480 X1(J+1)=X1(J)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/6
490 T(J+1)=T(J)+H*(M(1)+2*M(2)+2*M(3)+M(4))/6
500 X1(6)=X1(J+1)
510 T(6)=T(J+1)
520 GOSUB 2000
530 PRINT L,X5,T6
540 IF X1(J+1)=C1 THEN GOTO 3000
510 F1(J)=K(1)
520 F2(J)=H(1)
530 PRINT
540 NEXT J
570 X3=X1(5)
580 T4=T(5)
590 GOSUB 1000
700 F1(5)=F1
710 F2(5)=F2
720 X1(6)=X1(0)+3*H*(11*F1(5)-14*F1(4)+26*F1(3)-
14*F1(2)+11*F1(1))/10
730 T(6)=T(0)+3*H*(11*F2(5)-14*F2(4)+26*F2(3)-
14*F2(2)+11*F2(1))/10
740 X3=X1(6)
750 T4=T(6)

```

```

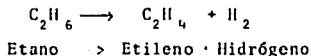
750 GOSUB 1000
760 F1(A)=F1
770 F2(B)=F2
780 X1(B)=X1(2)+2*H*(7*F1(6)+32*F1(5)+12*F1(4)
+3*F1(3)+7*F1(2))/45
790 T(6)=T(2)+2*H*(7*F2(6)+32*F2(5)+12*F2(4)+
3*F2(3)+7*F2(2))/45
800 GOSUB 2000
810 L=L+H
820 PRINT L,X5,T5
830 PRINT
840 IF X1(6)>=0.1 THEN GOTO 3000
850 X3=X1(6)
860 T4=T(6)
870 GOSUB 1000
880 FOR J=0 TO 5
890 X1(J)=X1(J+1)
900 T(J)=T(J+1)
910 F1(J)=F1(J+1)
920 F2(J)=F2(J+1)
930 NEXT J
940 F1(5)=F1
950 F2(5)=F2
960 GOTO 720
1000 TK=T4/1.8
1100 F1=2.9499E+16*30*EXP(-41910/TK)*(1-X3)/(
1+X3)*T4)
1200 CP=1.8*(32732+8.5*(TK-2000)-0.742E-09*(TK
2-38804)+1.28E-06*(TK^3-28468592))
1300 CP=(1-X3)*(0.75+0.0357*TK-1.012E-05*TK^2)
+X3*(12.25+0.023915*TK-6.28E-06*TK^2)
1400 F2=(97.8937-DH*X1)/C
1500 RETURN
2000 T5=T(6)-460
2100 M5=(INT(X1(6)*100000))/10000
2200 T6=(INT(TF*100000))/100000
2300 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
";0";D;:GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";0";C;GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```

c. REACTOR TUBULAR NO ISOTERMICO, ADIABATICO

Ejemplo 6.2 Carnahan. (Suponiendo que no se suministra calor al tubo)

La pirólisis del etano en el intervalo de temperaturas 1200 a 1700 °F queda representada en esencia por la siguiente-reacción química irreversible y de primer orden



En un tubo de acero de diámetro interior 4.026 pulgadas se introduce etano con un caudal de 1800 lb/hora y a una temperatura de 1200 °F. Se supone que el tubo no contiene obstrucciones internas y que pueden desprejarse las caídas de presión a lo largo del eje; la presión media de los gases en el interior puede tomarse igual a 30 lb/pulg². Suponiendo control de caudal en el tubo, escríbase un programa que calcule la longitud necesaria para producir descomposición del 75 por ciento del etano en etileno e hidrógeno.

Ecuaciones diferenciales involucradas.

$$\frac{dX1}{dL} = \frac{(2.8493 \times 10^{-20} e^{-41310/TK} (1-X3))}{(1+X3) T4} = F1$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{-DH \left(\frac{dX}{dL} \right)}{CP} = F2$$

donde:

$$DH = 1.8 (32732 + 8.5 (TK-298) - 5.942 \times 10^{-3} (TK^2 - 88804) + 1.28 \times 10^{-6} (TK^3 - 26463592))$$

$$CP = (1-X3) (3.75 + 35.7 \times 10^{-3} TK - 10.12 \times 10^{-6} TK^2) + X3 (12.25 + 23.815 \times 10^{-3} TK - 6.28 \times 10^{-6} TK^2)$$

Algoritmos.

* Método de Runge-Kutta de cuarto orden

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{6} (K1 + 2K2 + 2K3 + K4) \quad ; H = \Delta L$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{6} (M1 + 2M2 + 2M3 + M4)$$

$$K1 = F1(X1_i, T_i)$$

$$K2 = F1\left(X1_i + \frac{K1}{2}, T_i + \frac{M1}{2}\right) H$$

$$K3 = F1\left(X1_i + \frac{K2}{2}, T_i + \frac{M2}{2}\right) H$$

$$K4 = F1(X1_i + K3H, T_i + M3H)$$

$$M1 = F2(X1_i, T_i)$$

$$M2 = F2\left(X1_i + \frac{K1}{2}, T_i + \frac{M1}{2}\right) H$$

$$M3 = F2 \left(X1_i + \frac{K2}{2} H, T_i + \frac{M2}{2} H \right)$$

$$M4 = F2 \left(X1_i + K3H, T_i + M3H \right)$$

* Método de Adams Moulton de cuarto orden.

Predictor:

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{24} (55F1_i - 59F1_{i-1} + 37F1_{i-2} - 9F1_{i-3})$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{24} (55F2_i - 59F2_{i-1} + 37F2_{i-2} - 9F2_{i-3})$$

Corrector:

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{24} (9F1_{i+1} + 19F1_i - 5F1_{i-1} + F1_{i-2})$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{24} (9F2_{i+1} + 19F2_i - 5F2_{i-1} + F2_{i-2})$$

* Método de Milne de sexto orden

Predictor:

$$X1_{i+1} = X1_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F1_i - 14F1_{i-1} + 26F1_{i-2} - 14F1_{i-3} + 11F1_{i-4})$$

$$T_{i+1} = T_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F2_i - 14F2_{i-1} + 26F2_{i-2} - 14F2_{i-3} + 11F2_{i-4})$$

Corrector:

$$X1_{i+1} = X1_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F1_{i+1} + 32F1_i + 12F1_{i-1} + 32F1_{i-2} + 7F1_{i-3})$$

$$T_{i+1} = T_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F2_{i+1} + 32F2_i + 12F2_{i-1} + 32F2_{i-2} + 7F2_{i-3})$$

A continuación se presentan los tres programas, donde:

X(0) = Conversión inicial del etano.

T(0) = Temperatura inicial (°F).

L(0) = Longitud inicial del reactor (ft).

DL = Incremento de longitud del reactor (ft).

XF = Conversión final de etano.

Este problema se resolverá utilizando los siguientes

datos:

X(0) = 0

T(0) = 0

L(0) = 0

DL = H = 10, 5, 1, 0.5 y 0.01.

```

90 REM REACTOR TUBULAR NO ISOTERMICO ADIABATIC
91
100 REM METODO DE RUNGE KUTTA DE CUARTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 6.2 CARNAHAN
120 DIM K(4)
130 DIM M(4)
2000 PRINT "X(O),T(O),L(O),DL,XF"
210 INPUT X1,TF,L,H,C1
215 POKE 13,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "L", "X", "T"
240 PRINT
245 T=TF+460
250 PRINT L,X1,TF
3000 X3=X1
310 T4=TF+460
350 FOR I=1 TO 3
360 GOSUB 1000
370 K(I)=F1
380 F(I)=F2
390 X3=X1+0.5*M(I)*H
400 T4=T+0.5*M(I)*H
410 NEXT I
420 X3=X1+K(3)*H
430 T4=T+M(3)*H
440 GOSUB 1000
450 K(4)=F1
460 F(4)=F2
470 X1=X1+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/6
480 T=T+H*(F(1)+2*M(2)+2*M(3)+M(4))/6
490 X5=(INT(X1*100000))/100000
500 T5=T-460
510 T6=(INT(TF*100000))/100000
520 L5=L+H
530 PRINT L,X5,T5
540 IF X1>=C1 THEN GOTO 3000
550 GOTO 260
1000 TRM=T4/1.8
1100 F1=(2.8473E+16*30*EXP(-41310/TK))*(1-X3)/((1+X3)*T4)
1200 DHE=1.8*(32732+6.5*(TK-298)-5.942E-03*(TK^2-88804)+1.28E-06*(TK^3-26463572))
1300 CF=(1-X3)*(9.75+0.0357*TK-1.012E-05*TK^2)+X3*(12.25+0.023815*TK-6.20E-06*TK^2)
1400 F2=(-DHE*F1)/CF
1500 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;"0";D:GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;" ":"D;
3900 IF E<10 THEN PRINT ":";"0";E:GOTO 4100
4000 PRINT ":";"E
4100 END

```

```

90 REM REACTOR TUBULAR NO ISOTERMICO ADIABATIC
91
100 REM METODO DE ADAMS MOULTON DE CUARTO ORDE
110
120 REM EJEMPLO 6.2 CARNAHAN
130 DIM K(4)
140 DIM M(4)
150 DIM X1(4)
160 DIM T(4)
170 DIM F1(4)
180 DIM F2(4)
190 PRINT "X(0),T(0),L(0),DL,XF"
200 INPUT X1,TF,L,H,C1
210 POKE 18,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "L","X","T"
240 PRINT
250 PRINT L,X1,TF
260 PRINT L,X1,TF
270 X1(0)=X1
280 T(0)=T
290 FOR J=0 TO 2
300 X3=X1(J)
310 T4=T(J)
320 FOR I=1 TO 3
330 GOSUB 1000
340 K(I)=F1
350 M(I)=F2
360 X3=X1(J)+0.5*K(I)*H
370 T4=T(J)+0.5*M(I)*H
380 NEXT I
390 X3=X1(J)+F(3)*H
400 T4=T(J)+M(3)*H
410 GOSUB 1000
420 K(4)=F1
430 M(4)=F2
440 L=L+H
450 X1(J+1)=X1(J)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/
460
470 T(J+1)=T(J)+H*(M(1)+2*M(2)+2*M(3)+M(4))/
480
490 X1(4)=X1(J+1)
500 T(4)=T(J+1)
510 GOSUB 2000
520 PRINT L,X5,T5
530 IF X1(J+1)>=C1 THEN GOTO 3000
540 F1(J)=K(1)
550 F2(J)=M(1)
560 PRINT
570 NEXT J
580 X3=X1(3)
590 T4=T(3)
600 GOSUB 1000
610 F1(3)=F1
620 F2(3)=F2
630 X1(4)=X1(3)+H*(55*F1(3)-59*F1(2)+37*F1(1)-
640 7*F1(0))/24
650 T4=T(3)+H*(55*F2(3)-59*F2(2)+37*F2(1)-7*F2
660 (0))/24
670 X3=X1(4)

```

```

750 T4=T(4)
760 GOSUB 1000
770 F1(4)=F1
780 F2(4)=F2
790 X1(4)=X1(3)+H*(9*F1(4)+19*F1(3)-5*F1(2)+F1
(1))/24
800 T(4)=T(3)+H*(9*F2(4)+19*F2(3)-5*F2(2)+F2(1
))/24
810 GOSUB 2000
820 L=L+H
830 PRINT L, X5, T6
840 PRINT
850 IF X1(4)>=C1 THEN GOTO 3000
860 X3=X1(4)
870 T4=T(4)
880 GOSUB 1000
900 FOR J=0 TO 3
910 X1(J)=X1(J+1)
920 T(J)=T(J+1)
930 F1(J)=F1(J+1)
940 F2(J)=F2(J+1)
950 NEXT J
960 F1(3)=F1
970 F2(3)=F2
980 GOTO 720
1000 TK=T4/1.8
1100 F1=2.6493E+16*30*EXP(-41310/TK)*(1-X3)/((
1+X3)*T4)
1200 DH=1.8*(32732+8.5*(TK-298)-5.942E-03*(TK^
2-28804)+1.28E-04*(TK^3-264463592))
1300 CP=(1-X3)*(3.75+0.0357*TK-1.012E-05*TK^2)
+X3*(12.25+0.023815*TK-6.28E-06*TK^2)
1400 F2=(-DH*F1)/CP
1500 RETURN
2000 TF=T(4)-460
2100 X5=(INT(X1(4)*100000))/100000
2200 T6=(INT(TF*100000))/100000
2300 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
";0";D;GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";0";E;GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```

```

90 REM REACTOR TUBULAR NO ISOTERMICO ADIABATIC
0
100 REM METODO DE MILNE DE SEXTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 6.2 CARNAHAN
120 DIM K(4)
130 DIM M(4)
140 DIM X1(6)
150 DIM T(6)
160 DIM F1(6)
170 DIM F2(6)
200 PRINT "X(0),T(0),L(0),DL,XF"
210 INPUT X1,TF,L,H,C1
215 POKE 18,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "L","X","T"
240 PRINT
245 T=TF+460
250 PRINT L,X1,TF
260 PRINT
270 X1(0)=X1
280 T(0)=T
300 FOR J=0 TO 4
310 X3=X1(J)
320 T4=T(J)
350 FOR I=1 TO 3
360 GOSUB 1000
370 K(I)=F1
380 M(I)=F2
390 X3=X1(J)+0.5*K(I)*H
400 T4=T(J)+0.5*M(I)*H
410 NEXT I
420 X3=X1(J)+K(3)*H
430 T4=T(J)+M(3)*H
440 GOSUB 1000
450 K(4)=F1
460 M(4)=F2
470 L=L+H
480 X1(J+1)=X1(J)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/
6
490 T(J+1)=T(J)+H*(M(1)+2*M(2)+2*M(3)+M(4))/6
500 X1(6)=X1(J+1)
510 T(6)=T(J+1)
520 GOSUB 2000
550 PRINT L,X5,T6
600 IF X1(J+1)>=C1 THEN GOTO 3000
610 F1(J)=K(3)
620 F2(J)=M(3)
630 PRINT
640 NEXT J
670 X3=X1(5)
680 T4=T(5)
690 GOSUB 1000
710 F1(5)=F1
710 F2(5)=F2
720 X1(6)=X1(0)+3*H*(11*F1(5)-14*F1(4)+26*F1(3)
-14*F1(2)+11*F1(1))/10
730 T(6)=T(0)+3*H*(11*F2(5)-14*F2(4)+26*F2(3)-
14*F2(2)+11*F2(1))/10
740 X3=X1(6)
750 T4=T(6)

```

```

740 GOSUB 1000
770 F1(6)=FF1
780 F2(6)=FF2
790 X1(6)=X1(2)+2*H*(7*F1(6)+32*F1(5)+12*F1(4)
+32*F1(3)+7*F1(2))/45
800 T(6)=T(2)+2*H*(7*F2(6)+32*F2(5)+12*F2(4)+3
2*F2(3)+7*F2(2))/45
810 GOSUB 2000
820 L=L+H
830 PRINT L, X5, T6
840 PRINT
850 IF X1(6) >= C1 THEN GOTO 3000
860 X3=X1(6)
870 T4=T(6)
880 GOSUB 1000
900 FOR J=0 TO 5
910 X1(J)=X1(J+1)
920 T(J)=T(J+1)
930 F1(J)=F1(J+1)
940 F2(J)=F2(J+1)
950 NEXT J
960 F1(5)=F1
970 F2(5)=F2
980 GOTO 720
1000 TK=T4/1.8
1100 F1=2.0499E+14*30*EXP(-41310/TK)*(1-X3)/((
1+X3)*T4)
1200 DH=1.0*(32732+3.5*(TK-278)-5.942E-03*(TK^
3-88804)+1.28E-06*(TK^3-26463592))
1300 CP=(1-X3)*(3.75+0.0357*TK-1.012E-05*TK^2)
+X3*(12.25+0.023815*TK-6.28E-06*TK^2)
1400 F2=(-DH*F1)/CP
1500 RETURN
2000 TF=T(6)-460
2100 X5=(INT(X1(6)*100000))/100000
2200 T6=(INT(TF*100000))/100000
2300 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
";";0";D;GOTO 3700
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";";0";E;GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

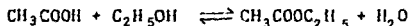
```


d. REACTOR SEMICONTINUO CON CORRIENTE DE ALIMENTACION PERO NO DE PRODUCTO, ISOTERMICO.

Ejemplo 4.13 Smith

La esterificación del ácido acético con alcohol etílico se lleva a cabo en un reactor semicontinuo de tanque con agitación a temperatura constante de 100 °C. El alcohol se añade al reactor, inicialmente, como una carga de 400 lb de alcohol etílico puro (C₂H₅OH). Luego se agrega una solución acuosa de ácido acético a una velocidad de 3.92 lb/min durante 120 min. La solución contiene 42.6% de ácido en peso. Suponga que la densidad es constante e igual a la del agua.

La reacción es reversible, y las velocidades específicas son las siguientes:



$$k = 4.76 \times 10^{-4} \text{ l}t/(\text{mol g}) (\text{min})$$

$$k' = 1.63 \times 10^{-4} \text{ l}t/(\text{mol g}) (\text{min})$$

Calcule la conversión de ácido acético a éster, como función del tiempo, desde 0 min hasta que se ha añadido la última cantidad de ácido (120 min)

Ecuaciones diferenciales involucradas.

$$\frac{dX_1}{dT} = \frac{35.9(21.3 \times 10^{-5} (1-X_1)(8.68-0.0278 X_1 T))}{6.69 + 0.0655 T}$$

$$- \frac{7.13 \times 10^{-5} T X_1 (0.125 + 0.0278 X_1)}{6.69 + 0.0655 T} - \frac{X_1}{T}$$

Algoritmos.

* Método de Runge-Kutta de cuarto orden

$$X1_i = X1_{i-1} + \frac{H}{6} (K1 + 2K2 + 2K3 + K4) = F1 ; H=\Delta T$$

$$K1 = F1 (T_i + X1_i)$$

$$K2 = F1 (T_i + \frac{H}{2}, X1_i + \frac{HK1}{2})$$

$$K3 = F1 (T_i + \frac{H}{2}, X1_i + \frac{HK2}{2})$$

$$K4 = F1 (T_i + H, X1_i + HK3)$$

* Método de Adams Moulton de cuarto orden.

Predictor:

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{24} (55F1_i - 59F1_{i-1} + 37F1_{i-2} - 9F1_{i-3})$$

Corrector:

$$X1_{i+1} = X1_i + \frac{H}{24} (9F1_{i+1} + 19F1_i - 5F1_{i-1} + F1_{i-2})$$

* Método de Milne de sexto orden

Predictor:

$$X1_{i+1} = X1_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F1_i - 14F1_{i-1} + 26F1_{i-2} - 14F1_{i-3} + 11F1_{i-4})$$

Corrector:

$$X1_{i+1} = X1_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F1_{i+1} + 32F1_i + 12F1_{i-1} + 32F1_{i-2} + 7F1_{i-3})$$

A continuación se presentan los tres programas, donde:

$X(0)$ = Conversión inicial de ácido acético

$T(0)$ = Tiempo inicial (min)

DT = Incremento de tiempo (min)

$T(F)$ = Tiempo final (min)

Este problema se resolverá utilizando los siguientes

datos:

$X(0) = 0$

$T(0) = 0$

$DT = H = 10, 5, 1, 0.1$ y 0.001

```

90 REM REACTOR SEMICONTINUO CON CORRIENTE DE A
LIMENTACION PERO NO DE PRODUCTO
100 REM METODO DE RUNGE KUTTA CUARTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 4.13 SMITH
120 DIM K(4)
200 PRINT "X(0),T(0),DT,T(F)"
210 INPUT X1,T,H,TF
215 POKE 18,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "T","X"
240 PRINT
250 PRINT T,X
260 PRINT
270 IF T=0 THEN T=1E-10
300 X3=X1
310 T4=T
350 FOR I=1 TO 3
360 GOSUB 1000
370 K(1)=F1
390 X3=X1+0.5*K(I)*H
400 T4=T+H/2
410 NEXT I
420 X3=X1+K(3)*H
430 T4=T+H
440 GOSUB 1000
450 K(4)=F1
470 X1=X1+HX*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/6
490 X5=(INT(X1*100000))/100000
510 T=T+H
550 PRINT T,X5
600 IF T>=TF THEN GOTO 3000
650 GOTO 260
1000 F1=35.9*(2.13E-04*(1-X3)*(8.48-0.0278*X3*
T4)-7.13E-05*T4*X3*(0.125+0.0278*X3))/(6.69+0.
0655*T4)-X3/T4
1100 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((D-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
1";10";D";GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";"0";E;GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```

```

90 REM REACTOR SEMICONTINUO CON CORRIENTE DE A
LIMENTACION PERO NO DE PRODUCTO ISOTERMICO
100 REM METODO DE ADAMS MOULTON DE CUARTO ORDE
N
110 REM EJEMPLO 4.13 SMITH
120 DIM K(4)
140 DIM X1(3)
140 DIM F1(4)
200 PRINT "X(0), T(0), DT, T(F)"
210 INPUT X1, T, H, TF
215 POKE 18, 0: POKE 19, 0: POKE 20, 0
220 POKE 18, 0
230 PRINT "T", "X"
240 PRINT
250 PRINT T, X
255 IF T=0 THEN T=1E-10
260 PRINT
270 X1(0)=X1
280 FOR J=0 TO N
290 X2=X1(J)
300 T4=T
310 FOR I=1 TO 4
320 GOSUB 1000
330 F(I)=F1
340 X2=X1(J)+0.5*K(I)*H
400 T4=T+H/2
410 NEXT I
420 X2=X1(J)+K(3)*H
430 T4=T+H
440 GOSUB 1000
450 K(4)=F1
460 T=T+H
480 X1(J+1)=X1(J)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/
6
500 X1(4)=X1(J+1)
520 X5=(INT(X1(4)*100000))/100000
530 PRINT T, X5
600 IF T>=TF THEN GOTO 3000
610 F1(J)=K(1)
620 PRINT
640 NEXT J
670 X2=X1(3)
680 T4=T
690 GOSUB 1000
700 F1(3)=F1
720 X1(4)=X1(3)+H*(55*F1(3)-59*F1(2)+37*F1(1)-
9*K(F1(0)))/24
740 X2=X1(4)
750 T4=T+H
760 GOSUB 1000
770 F1(4)=F1
790 X1(4)=X1(3)+H*(9*X1(4)+17*F1(3)-5*F1(2)+F1
(1))/24
810 X5=(INT(X1(4)*100000))/100000
820 T=T+H
830 PRINT T, X5
840 PRINT
850 IF T>=TF THEN GOTO 3000
860 X2=X1(4)
880 GOSUB 1000

```

```

900 FOR I=0 TO 3
910 X1=T4*X1(I+1)
920 F1(3)=F1(I+1)
950 NEXT I
960 F1(3)=F1
980 GOTO 320
1000 F1=35.9*(2.13E-04*(1-X3)*(0.68-0.0278*X3*
T4)-7.13E-05*T4*X3*(0.125+0.0278*X3))/(0.69+0.
0655*T4)-X3/T4
1100 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*25536
3100 B=A/3200
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((D-C)*20-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
;" "D;" "E;GOTO 3700
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;" "D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " "E;GOTO 4100
4000 PRINT " "E
4100 END

```

```

90 PEM REACTOR SEMICONTINUO CON CORRIENTE DE A
LIMENTACION PERO NO DE PRODUCTO ISOTERMICO
100 PEM METODO DE MILNE DE SEXTO ORDEN
110 PEM EJEMPLO 4.13 SMITH
120 DIM K(4)
140 DIM X1(6)
160 DIM F1(6)
200 PRINT ":(G),T(G),DT,T(F)"
210 INPUT X1,T,H,TF
215 POKE 19,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "T","X"
240 PRINT
250 PRINT T,X
270 IF T=0 THEN T=1E-10
280 PRINT
290 X1(0)=X1
300 FOR J=0 TO 4
310 X0=X1(J)
320 T=H
350 FOR I=1 TO 5
360 GOSUB 1000
370 X1(I)=F1
380 X0=X1(J)+0.5*XK(I)*H
400 T=H+H/2
410 NEXT I
420 X0=X1(J)+X1(5)*XH
430 T=H+H
440 GOSUB 1000
450 F1(0)=F1
470 T=H+H
480 X1(J+1)=X1(J)+HX*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/
5
500 X1(6)=X1(J+1)
520 X5=(INT(X1(6)*100000))/100000
530 PRINT T,X5
600 IF T=TF THEN GOTO 3000
610 F1(1)=X1(1)
620 PRINT
640 NEXT J
670 X0=X1(5)
680 T=H
690 GOSUB 1000
700 F1(2)=F1
720 X1(6)=X1(0)+3*HX*(11*X1(5)-14*X1(4)+26*X1(3)
)-14*X1(2)+(11*X1(1))/10
740 X0=X1(6)
750 T=H+H
760 GOSUB 1000
770 F1(3)=F1
790 X1(6)=X1(2)+2*HX*(7*X1(6)+32*X1(5)+12*X1(4)
)+32*X1(3)+7*X1(2))/45
810 X5=(INT(X1(6)*100000))/100000
820 T=TF
830 PRINT T,X5
840 PRINT
850 IF T=TF THEN GOTO 3000
860 X0=X1(6)
890 GOSUB 1000
900 FOR J=0 TO 5

```

```

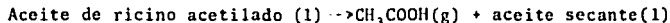
910 R1(J)=X1(J+1)
920 F1(J)=F1(J+1)
930 NEXT J
940 F1(5)=F1
950 GOTO 720
1000 F1=25.7*(2.13E-04*(1-X3)*(8.69+0.0276*X3*
T4)-7.13E-05*T4*X3*(0.125+0.0276*X3))/(8.69+0.
0455*X4)-X3/T4
1100 RETURN
2000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3800
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((D-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
;" :0";D;GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;":";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT ":"; "0";E;GOTO 4100
4000 PRINT ":";E
4100 END

```


e. REACTOR POR LOTES NO ISOTERMICO, ADIABATICO.

Ejemplo 5.1 Smith

En un estudio de la producción de aceites secantes por medio de la descomposición de aceite de ricino acetilado, Grummitt y Fleming correlacionaron los datos de descomposición en base a una reacción de primer orden representada como



$$r = kC$$

donde r es la velocidad de descomposición, en gramos de ácido acético producido por minuto por mililitro, y C es la concentración de ácido acético, en gramos por mililitro, equivalente al aceite de ricino acetilado. Los datos obtenidos en el intervalo de temperatura de 295° a 340°C indicaban una energía de activación de 44500 cal/mol g, en concordancia con la siguiente expresión para la constante de velocidad específica de la reacción, k :

$$\ln k = \frac{-44\,500}{R_g T} + 35.2$$

donde T está en grados Kelvin.

Si un reactor por lotes contiene inicialmente 500 lb de aceite de ricino acetilado a 340 °C (densidad 0.90) y la operación es adiabática, obtener la conversión (fracción de aceite acetilado que se descompone) y la temperatura en función del tiempo. Se estima que el efecto calorífico endotérmico de esta reacción es 15 000 cal/mol g de vapor de ácido acético. El aceite acetilado que se carga al reactor contiene 0.156 g del equivalente de ácido acético por gramo de aceite, esto es, la descompo

sición total de 1 g del aceite produciría 0.156 g de ácido acético. Suponga que el calor específico de la mezcla reaccionante líquida es constante e igual a 0.6 Btu/(lb) (°F). Suponga también que el vapor de ácido acético que se forma sale del reactor a la temperatura de la mezcla reaccionante.

Ecuación diferencial involucrada.

$$\frac{dT_1}{dX_1} = \left(\frac{1}{(1-X_1) e^{(35.2 - 44500 / (1.98(613 - 65(1))))}} \right) = F_1$$

Algoritmos.

* Método de Runge-Kutta.

$$T_{1,i+1} = T_{1,i} + \frac{H}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad ; H = \Delta X$$

$$K_1 = (X_1)$$

$$K_2 = (X_1 + H/2)$$

$$K_3 = (X_1 + H/2)$$

$$K_4 = (X_1 + H)$$

* Método de Adams Moulton de cuarto orden.

Predictor:

$$T_{1,i+1} = T_{1,i} + \frac{H}{24} (55F_{1,i} - 59F_{1,i-1} + 37F_{1,i-2} - 9F_{1,i-3})$$

Corrector:

$$T_{1,i+1} = T_{1,i} + \frac{H}{24} (9F_{1,i+1} + 19F_{1,i} - 5F_{1,i-1} + F_{1,i-2})$$

* Método de Milne de sexto orden.

Predictor:

$$TI_{i+1} = TI_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F1_i - 14F1_{i-1} + 26F1_{i-2} - 14F1_{i-3} + 11F1_{i-4})$$

Corrector:

$$TI_{i+1} = TI_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F1_{i+1} + 32F1_i + 12F1_{i-1} + 32F1_{i-2} + 7F1_{i-3})$$

A continuación se presentan los tres programas, donde:

X(0) = Conversión inicial de aceite de ricino acetilado

TI(0) = Tiempo inicial (min)

T(0) = Temperatura inicial (°K)

DX = Incremento de conversión de aceite de ricino acetilado.

X(F) = Conversión final de aceite de ricino acetilado

Este problema se resolverá utilizando los siguientes

datos:

X(0) = 0

TI(0) = 0

T(0) = 613

DX = H = 0.1, 0.01, 0.005, 0.001 y 0.000005

```

90 REM REACTOR POR LOTES NO ISOTERMICO ADIABAT
100
100 REM METODO DE RUNGE KUTTA DE CUARTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 5.1 SMITH (CASO ADIABATICO)
120 DIM K(4)
200 PRINT "X(0),TI(0),T(0),DX,X(F)"
210 INPUT X1,TI,T,H,XF
215 POKE 18,0:POKE 19,C:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "X","TI","T"
240 PRINT
250 PRINT X1, TI, T
2550 PRINT
3000 X3=X1
350 FOR I=1 TO 3
360 GOSUB 1000
370 K(I)=F1
390 X3=X1+H/2
410 NEXT I
420 X3=X1+H
430 GOSUB 1000
430 K(4)=F1
470 TI=TI+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/6
480 X1=X1+H
490 T=T+19.65*X1
500 TIR=(INT(TI*100000))/100000
530 TR=(INT(T*100000))/100000
550 PRINT X1, TIR, TR
560 IF X1>=XF THEN GOTO 3000
580 GOTO 240
1000 F1=(1/((1-X3)*EXP(35.2-44500/(1.96*(613-6
5*X3))))))
1100 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
I";0";D;:GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";DI
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";0";E;GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```

```

90 REM REACTOR POR LOTES NO ISOTERMICO ADIABAT
100 PEM METODO DE ADAMS MOULTON DE CUARTO ORDE
110 REM EJEMPLO 5.1 SMITH (CASO ADIABATICO)
120 DIM K(4)
140 DIM TI(4)
140 DIM F1(4)
200 PRINT "X(0),TI(0),T(0),DX,X(F)"
210 INPUT X1,TI,T,H,XF
215 POKE 18,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "X","TI","T"
240 PRINT
250 PRINT X1,TI,T
260 PRINT
300 FOR J=0 TO 2
320 X3=X1
330 TI(0)=TI
350 FOR I=1 TO 3
360 GOSUB 1000
370 K(1)=F1
400 X3=X1+H/2
410 NEXT I
430 X3=X1+H
440 GOSUB 1000
450 K(4)=F1
470 X1=X1+H
480 TI(J+1)=TI(J)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/
6
490 T=613-65*X1
500 TI(4)=TI(J+1)
520 TIR=(INT(TI(4)*100000))/100000
530 TR=(INT(T*100000))/100000
550 PRINT X1,TIR,TR
600 IF X1>XF THEN GOTO 3000
610 F1(J)=K(1)
630 PRINT
640 NEXT J
680 X3=X1
690 GOSUB 1000
700 F1(3)=F1
720 TI(4)=TI(3)+H*(55*F1(3)-59*F1(2)+37*F1(1)-
9*F1(0))/24
750 X3=X1+H
760 GOSUB 1000
770 F1(4)=F1
780 X1=X1+H
790 TI(4)=TI(3)+H*(9*F1(4)+19*F1(3)-5*F1(2)+F1
(1))/24
800 T=613-65*X1
810 TIR=(INT(TI(4)*100000))/100000
820 TR=(INT(T*100000))/100000
830 PRINT X1,TIR,TR
840 PRINT
850 IF X1>XF THEN GOTO 3000
860 GOSUB 1000
900 FOR J=0 TO 3
910 TI(J)=TI(J+1)
930 F1(J)=F1(J+1)

```

```
900 NEXT J
920 F1(B)=F1
930 GOTO 720
1000 F1=(1/((1-X3)*EXP(35.2-44500/(1.98*(613-6
5*X3))))
1100 RETURN
3000 AB=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT((B-C)*60-D)*100
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
;" ";D;" ";E;GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;" ";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";E;GOTO 4100
4000 PRINT " ";E
4100 END
```

```

90 REM REACTOR POR LOTES NO ISOTERMICO ADIABAT
100
110 PEM METODO DE MILNE DE SEXTO ORDEN
120 REM EJEMPLO 5.1 SMITH (CARGO ADIABATICO)
130 DIM K(4)
140 DIM TI(6)
150 DIM F1(6)
200 PRINT "X(0),TI(0),T(0),DK,X(F)"
210 INPUT X1, TI, T, H, XF
315 POKE 16,0:POKE 17,0:POKE 20,0
320 PRINT
330 PRINT "X", "TI", "T"
340 PRINT
350 PRINT X1, TI, T
360 PRINT
370 FOR J=0 TO 4
380 X2=X1
390 TI(0)=TI
400 FOR I=1 TO 3
410 GOSUB 1000
420 K(I)=F1
430 X2=X1+H/2
440 NEXT I
450 X2=X1+H
460 GOSUB 1000
470 K(4)=F1
480 X1=X1+H
490 TI(J+1)=TI(J)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/
5
490 T=T+612-.65*X1
500 TI(6)=TI(J+1)
510 TIR=(INT(TI(6)*100000))/100000
520 TR=(INT(TX100000))/100000
530 PRINT X1, TIR, TR
540 IF X1>XF THEN GOTO 3000
550 F1(J)=K(1)
560 PRINT
570 NEXT J
580 X2=X1
590 GOSUB 1000
600 F1(5)=F1
610 TI(5)=TI(0)+3*H*(11*F1(5)-14*F1(4)+26*F1(3)
620 -14*F1(2)+11*F1(1))/10
630 X2=X1+H
640 GOSUB 1000
650 F1(6)=F1
660 X1=X1+H
670 TJ(6)=TI(2)+2*H*(7*F1(6)+32*F1(5)+12*F1(4)
680 +32*F1(3)+7*F1(2))/45
690 T=T+612-.65*X1
700 TIR=(INT(TI(6)*100000))/100000
710 TR=(INT(TX100000))/100000
720 PRINT X1, TIR, TR
730 PRINT
740 IF X1>XF THEN GOTO 3000
750 GOSUB 1000
760 FOR J=0 TO 5
770 TI(J)=F1(J+1)
780 F1(J)=F1(J+1)
790 NEXT J

```

```
560 F1(5)=F1
590 GOTO 720
1000 F1=(1/((1-X3)*EXP(35.2-44500/(1.98*(613-6
5*X2)))));
1100 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
1";0";D;GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";D;
3900 IF D<10 THEN PRINT ";";0";E;GOTO 4100
4000 PRINT ";";E
4100 END
```


f. REACTOR POR LOTES NO ISOTERMICO, NO ADIABATICO.

Se repite el problema anterior suponiendo que en lugar de operarse adiabáticamente, se añade al reactor un flujo constante de energía de 3000 Btu/min.

Ecuaciones diferenciales involucradas.

$$\frac{dT}{dX1} = \left(\frac{1}{(1-X1) e^{35.2 - 44500 / (1.98 T)}} \right) = F1$$

$$\frac{dT}{dX1} = 0.00185 \times 3000 \times \left(\frac{dT}{dX1} \right) - 65 = F2$$

Algoritmos.

* Método de Runge-Kutta

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{6} (K1 + 2K2 + 2K3 + K4) \quad ; H=\Delta X$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{6} (M1 + 2M2 + 2M3 + M4)$$

$$K1 = (X1_i, T_i)$$

$$K2 = (X1_i + \frac{H}{2}, T_i + \frac{M1}{2} H)$$

$$K3 = (X1_i + \frac{H}{2}, T_i + \frac{M2}{2} H)$$

$$K4 = (X1_i + H, T_i + M3H)$$

$$M1 = (X1_i, T_i)$$

$$M2 = (X1_i + \frac{H}{2}, T_i + \frac{M1}{2} H)$$

$$M3 = (X1_i + \frac{H}{2}, T_i + \frac{M2}{2} H)$$

$$M4 = (X1_i + H, T_i + M3H)$$

* Método de Adams Moulton de cuarto orden.

Predictor:

$$TI_{i+1} = TI_i + \frac{H}{24} (55F1_i - 59F1_{i-1} + 37F1_{i-2} - 9F1_{i-3})$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{24} (55F2_i - 59F2_{i-1} + 37F2_{i-2} - 9F2_{i-3})$$

Corrector:

$$TI_{i+1} = TI_i + \frac{H}{24} (9F1_{i+1} + 19F1_i - 5F1_{i-1} + F1_{i-2})$$

$$T_{i+1} = T_i + \frac{H}{24} (9F2_{i+1} + 19F2_i - 5F2_{i-1} + F2_{i-2})$$

* Método de Milne de sexto orden.

Predictor:

$$TI_{i+1} = TI_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F1_i - 14F1_{i-1} + 26F1_{i-2} - 14F1_{i-3} + 11F1_{i-4})$$

$$T_{i+1} = T_{i-5} + \frac{3H}{10} (11F2_i - 14F2_{i-1} + 26F2_{i-2} - 14F2_{i-3} + 11F2_{i-4})$$

Corrector:

$$TI_{i+1} = TI_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F1_{i+1} + 32F1_i + 12F1_{i-1} + 32F1_{i-2} + 7F1_{i-3})$$

$$T_{i+1} = T_{i-3} + \frac{2H}{45} (7F2_{i+1} + 32F2_i + 12F2_{i-1} + 32F2_{i-2} + 7F2_{i-3})$$

A continuación se presentan los tres programas, donde:

$X(0)$ = Conversión inicial de aceite de ricino acetilado.

$TI(0)$ = Tiempo inicial (min)

$T(0)$ = Temperatura inicial ($^{\circ}K$)

DX = Incremento de conversión de aceite de ricino acetilado.

$X(F)$ = Conversión final de aceite de ricino acetilado.

Este problema se resolverá utilizando los siguientes

datos:

$X(0) = 0$

$TI(0) = 0$

$T(0) = 613$

$DX = H = 0.1, 0.01, 0.005, 0.001$ y 0.00001

```

90 REM REACTOR POR LOTES NO ISOTERMICO NO ADIA
BATICCO
100 REM METODO DE RUNGE KUTTA DE CUARTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 5.1 SMITH (CASO NO ADIABATICO)
120 DIM K(4)
130 DIM M(4)
200 PRINT "X(0),TI(0),T(0),DX,XF"
210 INPUT X, TI, T, H, XF
215 POKE 19,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "X", "TI", "T"
240 PRINT
250 PRINT X, TI, T
260 PRINT
300 X=X+X
310 T=T+T
350 FOR I=1 TO 3
360 GOSUB 1000
370 M(1)=F1
380 M(2)=F2
390 X=X+M(1)*H
400 T=T+M(2)*H
410 GOTO 1
420 X=X+H
430 T=T+M(3)*H
440 GOSUB 1000
450 M(3)=F1
460 M(4)=F2
470 TI=TI+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/6
480 T=T+H*(M(1)+2*M(2)+2*M(3)+M(4))/6
490 X5=(INT(TI*100000))/10000
510 T5=(INT(TX*100000))/10000
520 X=X+H
550 PRINT X, X5, T5
600 IF X=X5 THEN GOTO 3000
650 GOTO 260
1000 F1=(1/(1-X3))*EXP(35.2-44500/(1.98*T4))
1100 F2=1.05E-03*X3000XF1-65
1200 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/3600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT(((D-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
1"10";D;GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";"0";E;GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```

```

90  REM REACTOR POR LOTES NO ISOTERMICO NO ADIA
BATICO
100  PEM METODO DE ADAMS HOULTON DE CUARTO ORDE
N
110  PEM EJEMPLO 5.1 SMITH (CASO NO ADIABATICO)
120  DIM K(4)
130  DIM H(4)
140  DIM TI(4)
150  DIM T(4)
160  DIM F1(4)
170  DIM F2(4)
200  PRINT "X(O),TI(O),T(O),DX,XF"
210  INPUT X, TI, T, H, XF
215  POKE 19,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220  PRINT
230  PRINT "X", "TI", "T"
240  PRINT
250  PRINT X, TI, T
260  PRINT
270  T(O)=T
280  X(O)=X
290  TI(O)=TI
300  FOR J=0 TO 2
310  T4=T(J)
320  FOR I=1 TO 3
330  GOSUB 1000
340  K(I)=F1
350  H(I)=F2
360  X3=X+H
370  T4=T(J)+0.5*H(I)*H
380  NEXT I
390  X3=X+H
400  T4=T(J)+0.5*H(I)*H
410  NEXT I
420  X3=X+H
430  T4=T(J)+H(I)*H
440  GOSUB 1000
450  K(4)=F1
460  H(4)=F2
470  X3=X+H
480  T1(J+1)=T1(J)+H*(K(1)+N*K(2)+N*K(3)+K(4))/
4
490  T(J+1)=T(J)+H*(H(1)+2*H(2)+2*H(3)+H(4))/6
500  TI(4)=TI(J+1)
510  T(4)=T(J+1)
520  GOSUB 2000
530  PRINT X, X5, T6
540  IF X>XF THEN GOTO 3000
550  F1(J)=K(1)
560  F2(J)=H(1)
570  PRINT
580  NEXT J
590  T4=T(3)
600  GOSUB 1000
610  F1(3)=F1
620  F2(3)=F2
630  TI(4)=TI(3)+H*(55*KF1(3)-59*F1(2)+37*F1(1)-
640  7*F1(0))/24
650  T(4)=T(3)+H*(55*F2(3)-59*F2(2)+37*F2(1)-7*
660  F2(0))/24
670  X3=X+T
680  T4=T(4)
690  GOSUB 1000

```

```

770 F1(4)=F1
780 F2(4)=F2
790 T1(4)=T1(3)+H*(9*F1(4)+19*F1(3)-5*F1(2)+F1
(1))/24
800 T(4)=T(3)+H*(9*F2(4)+19*F2(3)-5*F2(2)+F2(1
))/24
810 GOSUB 3000
820 X=PI*H
830 PRINT X,X5,T4
840 PRINT
850 IF X>=XF THEN GOTO 3000
860 T4=T(4)
870 GOSUB 1000
880 FOR J=0 TO 9
890 T1(J)=T1(J+1)
900 T(J)=T(J+1)
910 F1(J)=F1(J+1)
920 F2(J)=F2(J+1)
930 NEXT J
940 F1(9)=F1
950 F2(9)=F2
960 GOTO 320
1000 F1=(1/((1-X3)*EXP(35.2-44500/(1.98*T4))))
1100 F2=1.35E-03*30000*F1-.65
1200 RETURN
2000 Y5=(INT(T1(4)*100000))/100000
2100 T45=(INT(T(4)*100000))/100000
2200 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(19)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/2600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*60)
3400 E=INT((B-C)*60-D)*100
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
;" ";D;:GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;":";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";"0";E;:GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```

```

90 REM REACTOR FOR LOTES NO ISOTERMICO NO ADIA
BATICO
100 REM METODO DE MILNE DE SEXTO ORDEN
110 REM EJEMPLO 5.1 SMITH (CASO NO ADIABATICO)
120 DIM K(4)
130 DIM H(4)
140 DIM TI(6)
150 DIM T(6)
160 DIM F1(6)
170 DIM F2(6)
200 PRINT "X(0),TI(0),T(0),DX,XF"
210 INPUT X, TI, T, H, XF
215 POKE 19,0:POKE 19,0:POKE 20,0
220 PRINT
230 PRINT "X", "TI", "T"
240 PRINT
250 PRINT X, TI, T
260 PRINT
270 T(0)=T
280 X=XF
290 TI(0)=TI
300 FOR J=0 TO 4
310 T4=T(J)
320 FOR I=1 TO 6
330 GOSUB 1000
340 K(I)=F1
350 M(I)=F2
360 X=X+0.5*XH
370 T4=T(J)+0.5*K(I)*H
380 NEXT I
390 X=X+H
400 T4=T(J)+H*(S)*H
410 GOSUB 1000
420 K(4)=F1
430 M(4)=F2
440 X=X+H
450 TI(J+1)=TI(J)+H*(K(1)+2*K(2)+2*K(3)+K(4))/
6
460 T(J+1)=T(J)+H*(M(1)+2*M(2)+2*M(3)+M(4))/6
470 TI(6)=TI(J+1)
480 T(6)=T(J+1)
490 GOSUB 2000
500 PRINT X, X5, T6
510 IF X=XF THEN GOTO 3000
520 F1(J)=K(1)
530 F2(J)=M(1)
540 PRINT
550 NEXT J
560 T4=T(5)
570 GOSUB 1000
580 F1(5)=F1
590 F2(5)=F2
600 TI(6)=TI(0)+3*H*(11*F1(5)-14*F1(4)+26*F1(3)
)-14*F1(2)+11*F1(1))/10
610 T(6)=T(0)+3*H*(11*F2(5)-14*F2(4)+26*F2(3)-
14*F2(2)+11*F2(1))/10
620 X=X+H
630 T4=T(6)
640 GOSUB 1000
650 F1(6)=F1

```

```

780 F0(4)=F0
790 T1(6)=T1(2)+2*X1*(7*F1(6)+32*F1(5)+12*F1(4)
+30*F1(3)+7*F1(2))/45
800 T(6)=T(2)+2*(F1(6)+F0(4))/45
810 GOSUB 2000
820 X=X+H
830 PRINT X,X5,T6
840 PRINT
850 IF X>=XF THEN GOTO 3000
870 T4=T(6)
880 GOSUB 1000
890 FOR J=0 TO 5
910 T1(J)=T1(J+1)
920 T(J)=T(J+1)
930 F1(J)=F1(J+1)
940 F2(J)=F2(J+1)
950 NEXT J
960 F1(5)=F1
970 F2(5)=F2
980 GOTO 720
1000 F1=(1/((1-X9)*EXP(35.2-44500/(1.98*T4))))
1100 F2=1.05E-03*5000*F1-.65
1200 RETURN
2000 N5=(INT(T1(6)*100000))/10000
2100 T5=(INT(T(6)*100000))/10000
2200 RETURN
3000 A=PEEK(20)+PEEK(17)*256+PEEK(18)*65536
3100 B=A/25600
3200 C=INT(B)
3300 D=INT((B-C)*40)
3400 E=INT(((B-C)*60-D)*100)
3500 PRINT
3600 PRINT
3700 IF D<10 THEN PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C
1":10" ;D;GOTO 3900
3800 PRINT "TIEMPO DE PROCESO ";C;";";D;
3900 IF E<10 THEN PRINT " ";";"0";E;GOTO 4100
4000 PRINT " ";";E
4100 END

```


3.3 Explicación de los programas.

Todos los programas están estructurados de la misma manera, por lo que la mayor parte de las instrucciones coinciden en sus respectivas líneas de programa.

Existen unas líneas especiales en los programas, los cuales son la 215, 3000, 3100, 3200, 3300, 3400, 3500, 3600, 3700, 3800, 3900, 4000 y 4100. Estas utilizan localidades de memoria en las cuales debido a la frecuencia del voltaje (60Hz) se puede obtener un reloj de tiempo real, el cual "arranca" al echarse a andar el programa y que al terminar este, marca el tiempo que tardó en efectuarse.

Las demás líneas de los programas son sencillas y no realizan ninguna instrucción especial.

Los programas comienzan con la lectura de los datos y posteriormente realizan los cálculos necesarios. Finalmente imprimen los resultados en pantalla, (si se desea que se presenten en impresora basta con cambiar todas las instrucciones que contengan PRINT a LPRINT).

Para obtener la memoria utilizada en cada programa basta con seguir los siguientes pasos:

1. Antes de meter el programa:

```
A = FRE (0)
```

```
PRINT FRE (0)
```

El valor que se obtiene es la memoria disponible (13317 es el caso de la ATARI 600 XL)

2. Una vez que se introdujo el programa y antes de utilizarlo:

```
A = FRE (0)
```

```
PRINT FRE (0)
```

El valor que se obtiene nuevamente, es la memoria disponible. La diferencia entre el valor de paso 1 y el obtenido en éste nos dá la memoria utilizada por el programa.

CAPITULO 4

RESULTADOS OBTENIDOS

En este capítulo se presentan en forma tabular, los resultados obtenidos para cada uno de los casos considerados, así como la cantidad de memoria consumida por cada uno de los programas realizados.

- a. Reactor tubular isotérmico.
- b. Reactor tubular no isotermico, no adiabático.
- c. Reactor tubular no isotérmico, adiabático.
- d. Reactor semicontinuo con corriente de alimentación pero no de producto isotérmico.
- e. Reactor por lotes no isotérmico, adiabático.
- f. Reactor por lotes no isotérmico, no adiabático.

a. Reactor tubular isotérmico.

METODO	TAMANO DE PASO = $H = 0.1, 0.01, 0.005, 0.0005$ y 0.00001							
	V/F	X1	X2	Tiempo Proceso *	V/F	X1	X2	Tiempo Proceso *
$H = 0.1$				$H = 0.01$				
Runge-Kutta	0.5	0.49647	0.08270	0:08:63	0.44	0.49603	0.07972	1:16:24
Adams Moulton	0.4	0.51653	0.07387	0:06:63	0.44	0.49603	0.07972	0:56:16
Milne	0.5	0.49647	0.08270	0:09:23	0.44	0.49603	0.07972	1:02:10
$H = 0.005$				$H = 0.0005$				
Runge-Kutta	0.44	0.49603	0.07972	2:32:43	0.4385	0.496	0.07962	25:20:03
Adams Moulton	0.44	0.49603	0.07972	1:50:85	0.4385	0.496	0.07962	18:12:21
Milne	0.44	0.49603	0.07972	2:02:10	0.4385	0.496	0.07962	19:57:00
$H = 0.00001$								
Runge -Kutta	0.43845	0.496	0.07962	1265:22:51				
Adams Moulton	0.43845	0.496	0.07962	910:52:76				
Milne	0.43844	0.496	0.07962	994:51:54				

Memoria utilizada por cada programn (Bytes):

Runge-Kutta 1,474; Adams Moulton 2,807; Milne 2,906

* min:seg:cent. de seg.

b. Reactor tubular no isotérmico, no adiabático

METODO

TAMARO DE PASO = H = 100, 10, 5, 1 y 0.05

	L	X	T	Tiempo Proceso *	L	X	T	Tiempo Proceso *
H = 100								
Runge-Kutta	300	3.19962	-4189.89655	0:16:16	630	0.75947	1476.44885	5:34:28
Adams Moulton	300	3.19962	-4189.89655	0:16:50	630	0.75910	1477.39079	3:17:38
Milne	300	3.19962	-4189.89655	0:16:50	630	0.75891	1477.57503	3:29:83
H = 5								
Runge-Kutta	625	0.75310	1475.02441	11:03:01	623	0.75056	1474.46250	55:04:78
Adams Moulton	625	0.75296	1475.49183	6:25:58	623	0.75053	1474.55617	31:28:95
Milne	625	0.75310	1475.02511	6:44:73	623	0.75053	1474.51330	32:52:96
H = 0.05								
Runge-Kutta	622.60	0.75004	1474.3498	1101:29:78				
Adams Moulton	622.60	0.75004	1474.3545	628:19:41				
Milne	622.05	0.75002	1472.8192	652:43:69				

Memoria utilizada por cada programa (Bytes):

Runge-Kutta 1,729; Adams Moulton 2,954; Milne 3,078

*min:seg:cent. de seg.

c. Ractor tubular no isotérmico, adiabático.

METODO

TAMANO DE PASO = H = 10, 5, 1, 0.5 y 0.01

	L	X	T	Tiempo proceso *	L	X	T	Tiempo proceso *
	H = 10				H = 5			
Runge-Kutta	120	0.10134	1290.81229	1:05:01	135	0.10005	1291.58094	2:25:88
Adams Moulton	110	0.10051	1292.62796	0:41:01	135	0.10067	1290.31231	1:30:30
Milne	60	0.10173	1290.91819	0:30:48	130	0.10026	1291.18314	1:34:36
	H = 1				H = 0.5			
Runge-Kutta	137	0.10010	1291.18572	12:19:03	136.5	0.10003	1291.34136	24:32:94
Adams Moulton	135	0.10002	1291.41436	7:00:75	135.5	0.10001	1291.43525	13:58:80
Milne	137	0.10010	1291.20098	7:27:64	136.5	0.10003	1291.34260	14:42:94
	H = 0.01							
Runge-Kutta	136.25	0.1	1291.42274	1224:27:56				
Adams Moulton	136.22	0.1	1291.42711	696:37:14				
Milne	136.25	0.1	1291.42017	724:53:73				

Memoria utilizada por cada programa (Bytes):

Runge-Kutta 1,719; Adams Moulton 2,944; Milne 3,068

* min:seg:cent. de seg.

d. Reactor semicontinuo con corriente de alimentación, pero no de producto isotérmico.

METODO	TAMANO DE PASO = H = 10, 5, 1, 0.1 y 0.001						
	T	X	Tiempo Proceso *	T	X	Tiempo Proceso *	
		H = 10			H = 5		
Runge-Kutta	120	0.23801	0:08:18	120	0.23804	0:16:39	
Adams Moulton	120	0.23838	0:06:90	120	0.23810	0:13:20	
Milne	120	0.23805	0:07:68	120	0.23804	0:14:81	
		H = 1			H = 0.1		
Runge-Kutta	120	0.23804	1:21:78	120	0.23804	13:40:66	
Adams Moulton	120	0.23804	1:03:45	120	0.23804	10:31:93	
Milne	120	0.23804	1:11:40	120	0.23804	11:49:26	
		H = 0.001					
Runge-Kutta	120	0.23804	1382:35:83				
Adams Moulton	120	0.23804	1059:44:23				
Milne	120	0.23804	1188:27:34				

Memoria utilizada por cada programa Bytes):

Runge-Kutta 1,260; Adams Moulton 2,040; Milne 2,109

* min:seg:cent. de seg.

e. Reactor por lotes no isotérmico, adiabático.

METODO

TAMANO DE PASO = $H = 0.1, 0.01, 0.005, 0.001$ y 0.000005

	X	TI	T	Tiempo Proceso *	X	TI	T	Tiempo Proceso *	
		$H = 0.1$					$H = 0.01$		
Runge-Kutta	0.5	10.86721	580.5	0:04:51	0.5	10.86640	580.5	0:44:13	
Adams Moulton	0.5	10.85305	580.5	0:04:09	0.5	10.86641	580.5	0:34:35	
Milne	0.5	10.86721	580.5	0:04:69	0.5	10.86640	580.5	0:37:68	
		$H = 0.005$					$H = 0.001$		
Runge-Kutta	0.5	10.86664	580.5	1:28:78	0.5	10.86664	580.5	7:23:40	
Adams Moulton	0.5	10.86664	580.5	1:08:26	0.5	10.86664	580.5	5:38:76	
Milne	0.5	10.86664	580.5	1:14:76	0.5	10.86664	580.5	6:10:98	
		$H = 0.000005$							
Runge-Kutta	0.5	10.86666	580.5	1507:31:48					
Adams Moulton	0.5	10.86666	580.5	1148:35:28					
Milne	0.5	10.86662	580.5	1254:09:90					

Memoria utilizada por cada programa (Bytes):

Runge-Kutta 1,275; Adams Moulton 2,024; Milne 2,093

* min:seg:cent. de seg.

f. Reactor por lotes no isotérmico, no adiabático.

METODO	TAMARO DE PASO = H = 0.1, 0.01, 0.005, 0.001 y 0.00001							
	X	TI	T	Tiempo Proceso *	X	TI	T	Tiempo Proceso *
	H = 0.1				H = 0.01			
Runge-Kutta	0.5	4.47500	605.33626	0:05:21	0.5	4.47452	605.33364	0:50:66
Adams Moulton	0.5	4.47567	605.34001	0:05:08	0.5	4.47452	605.33364	0:45:18
Milne	0.5	4.47500	605.33626	0:05:64	0.5	4.47452	605.33364	0:51:03
	H = 0.005				H = 0.001			
Runge-Kutta	0.5	4.47452	605.33364	1:41:58	0.5	4.47450	605.33367	8:27:56
Adams Moulton	0.5	4.47452	605.33364	1:30:00	0.5	4.47450	605.33367	7:27:19
Milne	0.5	4.47520	605.33364	1:41:74	0.5	4.47452	605.33364	8:27:30
	H = 0.00001							
Runge-Kutta	0.5	4.47230	605.33623	850:14:64				
Adams Moulton	0.5	4.47230	605.33623	746:45:91				
Milne	0.5	4.47397	605.33429	846:48:15				

Memoria utilizada por cada programa (Bytes):

Runge-Kutta 1,445; Adams Moulton 2,647; Milne 2,778

* min:seg;cent. de seg.

CAPITULO 5

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Como se planteó dentro de los objetivos de esta tesis, se compararán tres parámetros fundamentales los cuales son:

- a. Precisión de los resultados numéricos
- b. Memoria consumida por los programas
- c. Tiempo de proceso

En todos los casos se puede observar que al disminuir el tamaño de paso se obtienen resultados más precisos ya que el error por truncamiento se hace muy pequeño. Por otro lado, aún cuando se utilizaron incrementos muy pequeños, no se observó error por redondeo.

Al utilizar tamaños de paso grandes, se observó en algunos casos inestabilidad de los métodos predictor-corrector, esto debido a que los valores de arranque que se utilizan, generados por el método de Runge-Kutta, son imprecisos. La precisión es el punto más importante a considerar cuando se escoge un método numérico.

Es muy importante resaltar el hecho de que cualquier lección, finalmente se hará en base a la complejidad de las ecuaciones diferenciales implicadas, las que nos moverán cada uno de los parámetros implicados (tiempo de proceso, memoria utilizada y precisión de resultados), por lo que para cada caso en particular se deberán analizar las ecuaciones diferenciales

implicadas y tomar la decisión de cuál será el método más adecuado a aplicar. Por lo tanto, para cada uno de los casos de reactores considerados en esta tesis, es posible que el método que haya resultado más conveniente en el ejemplo presentado sea normalmente el más adecuado, sin embargo, para la naturaleza de las ecuaciones diferenciales que den por resultado los balances de materia y energía (casos no isotérmicos) y de la velocidad de reacción, es posible que algún otro método resulte más apropiado de modo que no se debe considerar una ley el hecho de que equis método resulte el más adecuado para cierto tipo de reactor.

A continuación, se analizará cada uno de los casos estudiados en esta tesis para obtener cuál es el método más adecuado.

Antes de continuar, es importante comentar el hecho de que adicionalmente a los métodos utilizados, se realizaron "corridos" sólo con el predictor de Milne de sexto orden dando -- problemas debido básicamente al error de truncamiento, lo que provocó desviación de la solución introduciendo ligeras perturbaciones que dieron origen a una pequeña inestabilidad la cual se eliminó con la parte correctora del algoritmo.

a. Reactor tubular isotérmico.

En este caso, el método más adecuado es el de Runge-Kutta ya que se obtienen resultados rápidamente, bastante precisos y con poco esfuerzo de programación.

b. Reactor tubular no isotérmico, no adiabático.

En base a los resultados obtenidos, se puede observar que para obtener resultados precisos es necesario un tamaño de paso muy pequeño por lo que son preferibles los métodos predictor-corrector, ya que aunque exigen programas más grandes el tiempo de proceso es mucho menor y los resultados más precisos.

El método de Adams Moulton nos da resultados satisfactorios y exige menos memoria y tiempo de proceso por lo que resulta ser el más adecuado.

c. Reactor tubular no isotérmico, adiabático.

Para este ejemplo se concluye que el método más adecuado fué el de Milne de sexto orden ya que con él se obtuvieron resultados bastante precisos (más que para el método de Adams-Moulton) y el tiempo de proceso resulta ser bajo con respecto al método de Runge-Kutta y ligeramente más alto que el de Adams Moulton; adicionalmente, la memoria consumida por el método seleccionado es ligeramente mayor a este último.

d. Reactor semicontínuo con corriente de alimentación pero no de producto isotérmico.

Como se puede observar en los resultados obtenidos, el método más adecuado es el de Runge-Kutta ya que requiere un bajo tiempo de proceso, escasa memoria y sus resultados son muy precisos aún con tamaños de paso relativamente grandes.

e. Reactor por lotes no isotérmico, adiabático.

Al igual que en el caso anterior, el método de Runge-Kutta resulta ser el más adecuado ya que aún a tamaños de paso relativamente grandes, es bastante preciso, requiere una baja-cantidad de memoria y el tiempo de proceso es pequeño.

f. Reactor por lotes no isotérmico, no adiabático.

Como en el caso adiabático, el método de Runge-Kutta - ofrece las mayores ventajas, tales como precisión, bajo consumo de memoria y un tiempo de proceso muy corto.

En base a lo expuesto, se puede concluir que el método más recomendable en la gran mayoría de los casos es el método de Runge-Kutta ya que por un lado, es un método sencillo de un sólo paso que arroja resultados suficientemente correctos, requiere un bajo consumo de memoria y el tiempo de proceso es bajo, y por otro lado, es bastante estable además de que sus errores por truncamiento y redondeo son pequeños.

Por último, es necesario hacer énfasis en el hecho de - que la selección de un cierto tipo de método debe de efectuarse en base a las expresiones de las ecuaciones diferenciales involucradas.

APENDICE A

EJEMPLO NUMERICO DEL METODO DE RUNGE - KUTTA DE CUARTO ORDEN.

En este apéndice se muestra un ejemplo numérico de la utilización del método de Runge-Kutta de cuarto orden.

Las ecuaciones utilizadas son las (2.31)

Ejemplo: Utilizar el método de cuarto orden de Runge-Kutta con intervalo constante $h=0.1$ para calcular una solución aproximada del problema de valor inicial

$$y' = y + x = f(x, y); \quad y(0) = 1$$

en el intervalo $[0, 1]$.

El primer valor se obtiene de la siguiente forma:

$$i=0$$

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = f(x_0, y_0) = 0 + 1$$

$$k_2 = f(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{hk_1}{2}) = (0 + \frac{0.1}{2}) + (1 + \frac{(0.1 \times 1)}{2}) = 1.1$$

$$k_3 = f(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{hk_2}{2}) = (0 + \frac{0.1}{2}) + (1 + \frac{(0.1 \times 1.1)}{2}) = 1.105$$

$$k_4 = f(x_0 + h, y_0 + hk_3) = (0 + 0.1) + (1 + 0.1 \times 1.105) = 1.2105$$

$$y_1 = 1 + 0.1 \left(\frac{1 + 2 \times 1.1 + 2 \times 1.105 + 1.2105}{6} \right) = 1.110341$$

Para el siguiente intervalo se tiene:

$$i=1$$

$$y_2 = y_1 + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = f(x_1, y_1) = (0.1) + 1.110341 = 1.21034$$

$$k_2 = f\left(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{hk_1}{2}\right) = \left(0.1 + \frac{0.1}{2}\right) + \left(1.110341 + \frac{0.1(1.210341)}{2}\right) =$$

$$= 1.320858$$

$$k_3 = f\left(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{hk_2}{2}\right) = \left(0.1 + \frac{0.1}{2}\right) + \left(1.110341 + \frac{0.1(1.320858)}{2}\right) =$$

$$= 1.32638$$

$$k_4 = f(x_1 + h, y_1 + hk_3) = (0.1 + 0.1) + (1.110341 + 0.1(1.32638)) =$$

$$= 1.44298$$

$$y_2 = y_1 + h \left(\frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6} \right) =$$

$$= 1.110341 + 0.1 \frac{(1.21034 + 2 \times 1.32086 + 2 \times 1.32638 + 1.44298)}{6}$$

$$= 1.24280$$

Los siguientes valores se obtienen de la misma manera. Los resultados se muestran en la tabla A.

Tabla A. Solución de cuarto orden de Runge-Kutta de 1a ecuación $y' = y+x$ con $h=0.1$

i	x_i	y_i	k_1	k_2	k_3	k_4	$h(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6$
0	0.0	1.0	1.0	1.1	1.105	1.2105	0.110341
1	0.1	1.11034	1.21034	1.32086	1.32638	1.44298	0.132463
2	0.2	1.24280	1.44280	1.56494	1.57105	1.69991	0.156911
3	0.3	1.39971	1.69971	1.83470	1.84145	1.98386	0.183931
4	0.4	1.58364	1.98364	2.13283	2.14028	2.29767	0.213792
5	0.5	1.79744	2.29744	2.46231	2.47055	2.64449	0.246794
6	0.6	2.04423	2.64423	2.82644	2.83555	3.02778	0.283266
7	0.7	2.32750	3.02750	3.22887	3.23894	3.45139	0.323574
8	0.8	2.65107	3.45107	3.67362	3.68475	3.91954	0.368122
9	0.9	3.01919	3.91919	4.16515	4.17745	4.43694	0.417355
10	1.0	3.43655					

BIBLIOGRAFIA

- CARNAHAN, LUTHER, WILKES, "Applied Numerical Methods", Primera Edición, Wiley, E.U.A., 1969.
- FORSYTHE, KEENAN, ORGANICK, STENBERG, "Lenguajes de Diagramas de Flujo", Primera Edición, Limusa, México, 1982.
- HEILBORN, J., "Programas para Ciencia e Ingeniería", Edición - para APPLE II, Primera Edición, Osborne / Mc Graw Hill, - España, 1982.
- LAPIDUS, L., "Digital Computation for Chemical Engineers", Primera Edición, Mc Graw Hill Series in Chemical Engineering E.U.A., 1962.
- LUTHE, OLIVERA, SCHUTZ, "Métodos Numéricos", Primera Edición, - Limusa, México, 1982.
- Mc CRACKEN, D., "Métodos Numéricos y Programación Fortran", Primera Edición, Limusa, México, 1982.
- RAINVILLE, E., "Ecuaciones Diferenciales", Quinta Edición, Inter americana, México, 1977.
- ROBERTS, C., "Ecuaciones Diferenciales Ordinarias - Un Enfoque - al Cálculo Numérico", Primera Edición, PHI, Colombia, 1980.

SCHEID, F., "Análisis Numérico", Primera Edición, Mc Graw Hill,
México, 1972

SMITH, J., "Ingeniería de la Cinética Química", Segunda Edición
C.E.C.S.A., México, 1980.

TAYLOR, J., "Atari 400/800 Discoguia", Primera Edición, Osborne/
Mc Graw Hill, España, 1984.

Atari Computer 600 XL, Primera Edición, Atari Inc., Hong
Kong, 1983.

Atari Basic, Primera Edición, Atari Inc., Hong Kong, 1983.

The Atari 1010 Program Recorder, Primera Edición, Atari -
Inc., Japón, 1982.