

RKPrime. Solucionador de ecuaciones diferenciales por métodos de Runge-Kutta

Yesid Puerto Laytón
Universidad Nacional de Colombia

Ha sido un largo período de tiempo desde que publiqué mi primer programa para la serie HP-48 (**RKPro**). El programa que presento a continuación permite resolver (numéricamente) un problema de valor inicial de hasta cinco ecuaciones diferenciales ordinarias (acopladas o no) empleando los métodos de Runge-Kutta de 1^{er} orden (Euler), 2^{do} orden (Heun, Punto Medio y Ralston), 3^{er} y 4^{to} orden. El problema de valor inicial a resolver (denominado **sistema**) se ajusta al siguiente esquema general

$$\frac{dy_1}{dt} = f_1(x, y_1, y_2, y_3, y_4, y_5), \quad y_1(x_0) = y_{10}$$

$$\frac{dy_2}{dt} = f_2(x, y_1, y_2, y_3, y_4, y_5), \quad y_2(x_0) = y_{20}$$

$$\frac{dy_3}{dt} = f_3(x, y_1, y_2, y_3, y_4, y_5), \quad y_3(x_0) = y_{30}$$

$$\frac{dy_4}{dt} = f_4(x, y_1, y_2, y_3, y_4, y_5), \quad y_4(x_0) = y_{40}$$

$$\frac{dy_5}{dt} = f_5(x, y_1, y_2, y_3, y_4, y_5), \quad y_5(x_0) = y_{50}$$

Los pasos para la instalación, así como para el uso del programa, se muestran a continuación.

1. Instalación.

Basta con arrastrar el archivo **RKPrime.hpprgm** hacia la calculadora en la que se desea instalar y cuyo ícono se encuentra en la parte superior izquierda de la ventana del programa **HP Connectivity Kit**. El programa queda automáticamente instalado y puede accerse a el mediante la combinación dada por:



2. Inicio del programa.

Una vez en el menú de programas, se resalta el programa denominado **RKPrime** y se ejecuta con el comando (softkey) **Run**; de este modo, se despliega la información mostrada en la figura 1.

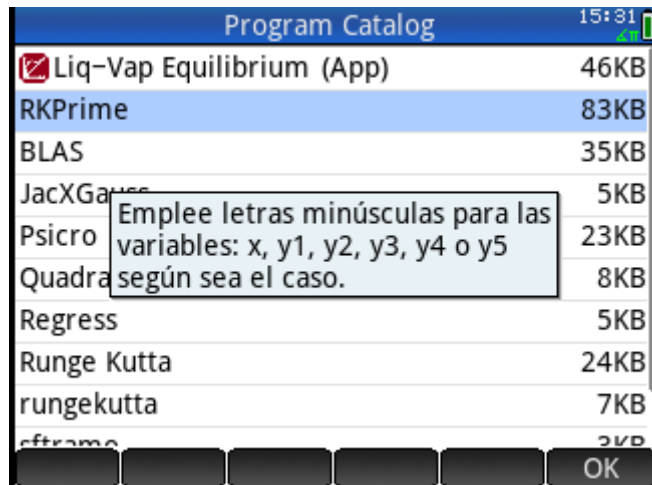


Figura 1. Codificación de las variables

El mensaje indica que la variable independiente debe denominarse con la variable x mientras que las variables independientes deben nombrarse con las variables y_1, y_2, \dots, y_5 de acuerdo a la dimensión del problema a resolver. A manera de ejemplo, si se desea resolver el sistema dado por:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= 2x + 3y - 7 + t, & x(0) &= 1 \\ \frac{dy}{dt} &= -x - 2y + 5 - t, & y(0) &= 0\end{aligned}$$

Este sistema debe reescribirse como se indica a continuación:

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dt} &= 2y_1 + 3y_2 - 7 + x, & y_1(0) &= 1 \\ \frac{dy_2}{dt} &= -y_1 - 2y_2 + 5 - x, & y_2(0) &= 0\end{aligned}$$

3. Ejecución del programa.

Al aceptar dicho mensaje mediante el comando (softkey) **OK** se despliega el menú de opciones mostrado en la figura 2

Cada opción que se muestra indica el orden del método a emplear, esto es: Dado el siguiente problema de valor inicial

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad x_0 \leq x \leq x_N$$

Se divide $[x_0, x_N]$ en N subintervalos de tamaño uniforme $h = \frac{x_N - x_0}{N}$. A partir del valor inicial y_0 , los sucesivos valores y_{i+1} (para $i = 0, 1, 2, \dots, N - 1$), dependen del método empleado y las fórmulas predictoras se enuncian a continuación:

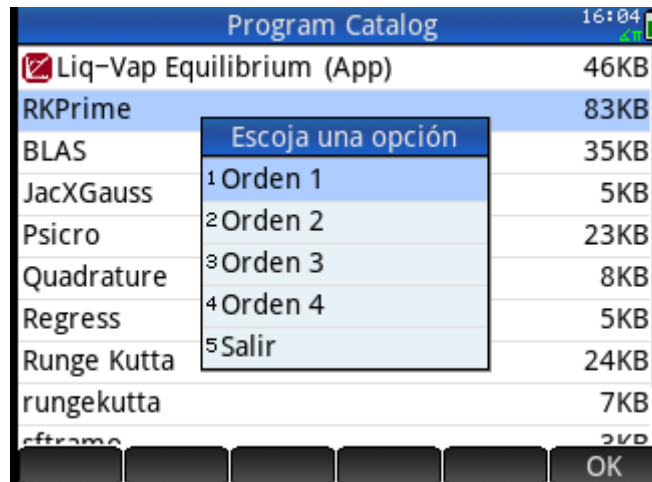


Figura 2. Métodos de Runge-Kutta

- **Orden 1 (Euler)**

Fórmula predictora: $y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$

- **Orden 2**

Fórmula predictora: $y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2)$
 $k_1 = h \cdot f(x_i, y_i)$
 $k_2 = h \cdot f(x_i + p_1 \cdot h, y_i + q_1 \cdot h)$

Así, para los diversos métodos de segundo orden expuestos en el programa, se tiene

Heun: $a_1 = \frac{1}{2}$ $a_2 = \frac{1}{2}$ $p_1 = 1$ $q_1 = 1$

Punto Medio: $a_1 = 0$ $a_2 = 1$ $p_1 = \frac{1}{2}$ $q_1 = \frac{1}{2}$

Ralston: $a_1 = \frac{1}{3}$ $a_2 = \frac{2}{3}$ $p_1 = \frac{3}{4}$ $q_1 = \frac{3}{4}$

- **Orden 3**

Fórmula predictora: $y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6} \cdot (k_1 + 4k_2 + k_3)$
 $k_1 = h \cdot f(x_i, y_i)$
 $k_2 = h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_1\right)$
 $k_3 = h \cdot f(x_i + h, y_i - k_1 + 2k_2)$

- **Orden 4**

Fórmula predictora: $y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6} \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
 $k_1 = h \cdot f(x_i, y_i)$
 $k_2 = h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_1\right)$
 $k_3 = h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_2\right)$
 $k_4 = h \cdot f(x_i + h, y_i + k_3)$

Una vez seleccionado el método, se despliega un menú que permite al usuario escoger el número de ecuaciones diferenciales ordinarias, determinado por la cantidad de variables dependientes (V.D.), que conforman el sistema

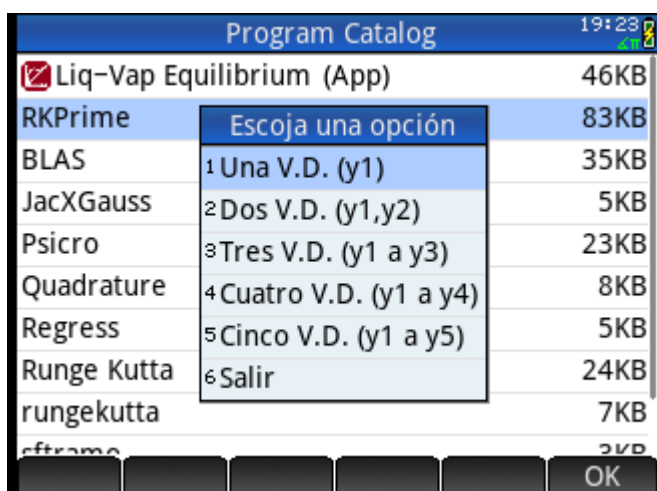


Figura 3. Dimensión del sistema a resolver

Suponga, a manera de ejemplo, que se plantea el sistema

$$\frac{dy_1}{dt} = 2y_1 + 3y_2 - 7 + x, \quad y_1(0) = 1$$

$$\frac{dy_2}{dt} = -y_1 - 2y_2 + 5 - x, \quad y_2(0) = 0$$

empleando el método de Runge-Kutta de 4^{to} orden. Para ello, se selecciona el orden a emplear así como la cantidad de variables dependientes (dos en este caso). A continuación, se despliega un formulario, tal y como lo muestra la figura 4, en el que debe introducirse toda la información de entrada del problema

Funciones y condiciones iniciales

f1: y1(x0):

f2: y2(x0):

x0: h:

Ingrese función 1: dy1/dx=f1

Edit Cancel

Figura 4. Menú de ingreso de datos

Es evidente entonces que $f_1 = 2y_1 + 3y_2 - 7 + x$ y $f_2 = -y_1 - 2y_2 + 5 - x$. Si se desean calcular los valores $y_1(1)$ y $y_2(1)$ empleando $N = 10$ subintervalos, es necesario un tamaño de paso $h = \frac{1-0}{10} = 0.1$. Una vez introducidas las expresiones para f_1 y f_2 así como las condiciones iniciales estipuladas, debe tenerse una pantalla idéntica a la mostrada en la figura 5

Funciones y condiciones iniciales 21:08

f1: 2*y1+3*y2-... y1(x0): 1

f2: -y1-2*y2+5-x y2(x0): 0

x0: 0 h: 0.1

Ingrese función 1: dy1/dx=f1

Edit Cancel OK

Figura 5. Datos de entrada al programa

Presionando **OK** se muestra un cuadro de texto en donde se especifica el número de iteraciones, una por cada subintervalo y donde el valor por defecto es 10; sin embargo, este valor es susceptible de ser modificado.

Número de iteraciones 21:15

j: 10

Ingrese número de iteraciones

Edit Cancel OK

Figura 6. Número de iteraciones.

Presionando **OK**, se muestran los valores de la variable independiente x_n así como los de las variables dependientes y_{1n} e y_{2n} para $n = 0, 1, 2, \dots, N$ (figura 7)

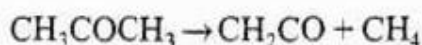
Runge-Kutta Orden 4				21:25
	xn	y1n	y2n	
1	0	1	0	
2	0.1	0.5140125	0.3808167	
3	0.2	5.2185E-2	0.7264122	
4	0.3	-0.391105	1.0412463	
5	0.4	-0.821295	1.3294708	
6	0.5	-1.243692	1.5949711	
7	0.6	-1.663523	1.8414053	
8	0.7	-2.085992	2.0722405	
9	0.8	-2.516328	2.2907880	
10	0.9	-2.959837	2.5002357	
0				
Edit More Go To Go → Cancel OK				

Figura 7. Resultados finales

Como ejemplo práctico de aplicación, se usará el programa para encontrar los perfiles de conversión y temperatura en un reactor PFR adiabático. El problema es tomado del libro de Fogler y se enuncia a continuación.

Example 8-5 Production of Acetic Anhydride

Jeffreys,⁴ in a treatment of the design of an acetic anhydride manufacturing faci states that one of the key steps is the vapor-phase cracking of acetone to ketene methane:



He states further that this reaction is first-order with respect to acetone and that specific reaction rate can be expressed by

$$\ln k = 34.34 - \frac{34,222}{T} \quad (\text{E8-})$$

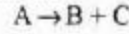
where k is in reciprocal seconds and T is in kelvin. In this design it is desired to f 7850 kg of acetone per hour to a tubular reactor. The reactor consists of a bank 1000 1-inch schedule 40 tubes. We will consider three cases:

Figura 8. Ejemplo de aplicación

Los casos a considerar son: operación adiabática, operación con intercambio de calor con un fluido isotérmico y operación con intercambio de calor con un fluido no isotérmico. Se escoge, para efectos de este documento, el primero de aquellos pues cuenta con solución y permite contrastar los resultados obtenidos con el programa **RKPrime**. La temperatura de entrada de la alimentación

es 1035 K y la operación del reactor se asume isobárica a 162 kPa. Los balances molares y energéticos son los mostrados en las figuras 9 y 10

Let $A = \text{CH}_3\text{COCH}_3$, $B = \text{CH}_2\text{CO}$, and $C = \text{CH}_4$. Rewriting the reaction symbolically gives us



1. **Mole Balance:**
$$\frac{dX}{dV} = -\frac{r_A}{F_{A0}} \quad (\text{E8-5.2})$$

2. **Rate Law:**
$$-r_A = kC_A \quad (\text{E8-5.3})$$

3. **Stoichiometry** (gas-phase reaction with no pressure drop):

$$C_A = \frac{C_{A0}(1-X)T_0}{(1+\epsilon X)T} \quad (\text{E8-5.4})$$

$$\epsilon = y_{A0}\delta = 1(1+1-1) = 1$$

4. **Combining yields**

$$-r_A = \frac{kC_{A0}(1-X)T_0}{1+X} \frac{1}{T} \quad (\text{E8-5.5})$$

$$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}} = \frac{k}{v_0} \left(\frac{1-X}{1+X} \right) \frac{T_0}{T} \quad (\text{E8-5.6})$$

To solve this differential equation, it is first necessary to use the energy balance to determine T as a function of X .

Figura 9. Balances molares

CASE 1. ADIABATIC OPERATION

For no work done on the system, $\dot{W}_s = 0$, and adiabatic operation, $\dot{Q} = 0$ (i.e., $U = 0$), Equation (8-36) becomes

$$\frac{dT}{dV} = \frac{(-r_A) \{ -[\Delta H_{Rx}^\circ(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)] \}}{F_{A0}(\sum \Theta_i C_{p_i} + X \Delta C_p)} \quad (\text{E8-5.7})$$

Because only A enters,

$$\sum \Theta_i C_{p_i} = C_{p_A}$$

and Equation (E8-5.7) becomes

$$\frac{dT}{dV} = \frac{(-r_A) \{ -[\Delta H_{Rx}^\circ(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)] \}}{F_{A0}(C_{p_A} + X \Delta C_p)} \quad (\text{E8-5.8})$$

Figura 10. Balance energético

Los parámetros de los balances molares y energéticos están dados en la figura 11

6. Calculation of Mole Balance Parameters on a Per Tube Basis:

$$F_{A0} = \frac{7,850 \text{ kg/h}}{58 \text{ g/mol}} \times \frac{1}{1,000 \text{ Tubes}} = 0.135 \text{ kmol/h} = 0.0376 \text{ mol/s}$$

$$C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT} = \frac{162 \text{ kPa}}{8.31 \frac{\text{kPa} \cdot \text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{K}} (1035 \text{ K})} = 0.0188 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} = 18.8 \text{ mol/m}^3$$

$$v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = 2.037 \text{ dm}^3/\text{s} \quad V = \frac{5 \text{ m}^3}{1000 \text{ tubes}} = 5 \text{ dm}^3$$

7. Calculation of Energy Balance Parameters:

a. $\Delta H_{Rx}^\circ(T_R)$: At 298 K, the standard heats of formation are

$$H_{Rx}^\circ(T_R)_{\text{acetone}} = -216.67 \text{ kJ/mol}$$

$$H_{Rx}^\circ(T_R)_{\text{ketene}} = -61.09 \text{ kJ/mol}$$

$$H_{Rx}^\circ(T_R)_{\text{methane}} = -74.81 \text{ kJ/mol}$$

$$\begin{aligned} \Delta H_{Rx}^\circ(T_R) &= H_B^\circ(T_R) + H_C^\circ(T_R) - H_A^\circ(T_R) \\ &= (-61.09) + (-74.81) - (-216.67) \text{ kJ/mol} \\ &= 80.77 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

b. ΔC_p : The mean heat capacities are:

$$\text{CH}_3\text{COCH}_3: C_{p_A} = 163 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$\text{CH}_2\text{CO}: C_{p_B} = 83 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$\text{CH}_4: C_{p_C} = 71 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$\Delta C_p = C_{p_B} + C_{p_C} - C_{p_A} = (83 + 71 - 163) \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$\Delta C_p = -9 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

Figura 11. Propiedades físicas y parámetros del modelo

La sustitución de los valores numéricos en las ecuaciones diferenciales que gobiernan el tanto la conversión como la temperatura en el reactor genera las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dV} &= \left(1.757 \cdot e^{34222 \cdot \left(\frac{1}{1035} - \frac{1}{T} \right)} \right) \cdot \left(\frac{1-X}{1+X} \right) \cdot \left(\frac{1035}{T} \right) \\ \frac{dT}{dV} &= \left(1.757 \cdot e^{34222 \cdot \left(\frac{1}{1035} - \frac{1}{T} \right)} \right) \cdot \left(\frac{1-X}{1+X} \right) \cdot \left(\frac{1035}{T} \right) \cdot \left(\frac{9T - 83452}{163 - 9x} \right) \end{aligned}$$

Sujetas a las condiciones $X(0) = 0$ y $T(0) = 1035$. Este problema será resuelto empleando el método de Runge-Kutta 4^{to} orden. Dado que el parámetro V está dado en dm^3 , se empleará un tamaño de paso $h = 0.02$, correspondiente a 200 subintervalos.

Una vez codificadas las variables ($V \rightarrow x, X \rightarrow y_1, T \rightarrow y_2$), se escriben las ecuaciones diferenciales en la plantilla correspondiente junto con sus condiciones iniciales para así obtener una pantalla idéntica a la mostrada en la figura 12

Funciones y condiciones iniciales 13:33

f1: 1.757*e^(34... y1(x0): 0

f2: 1.757*e^(34... y2(x0): 1 035

x0: 0 h: 0.02

Ingrese función 1: dy1/dx=f1

Edit Cancel OK

Figura 12. Montaje del modelo

Runge-Kutta Orden 4 13:36

	xn	y1n	y2n
1	0	0	1 035
2	0.02	2.7813E-2	1 022.3307
3	0.04	4.6815E-2	1 013.6523
4	0.06	6.1203E-2	1 007.0688
5	0.08	7.2756E-2	1 001.7754
6	0.1	8.2390E-2	997.35542
7	0.12	9.0644E-2	993.56549
8	0.14	9.7855E-2	990.25109
9	0.16	0.1042536	987.30812
10	0.18	0.1100004	984.66311

Edit More Go To Go → Cancel OK

Figura 13. Resultados del programa

Con el fin de visualizar de manera gráfica los resultados, así como para establecer una comparación con los resultados mostrados en el libro de texto, pueden copiarse estos valores y llevarse a la aplicación de estadística en dos variables la cual permite representarlos apropiadamente (previo escalamiento) en una sola gráfica.

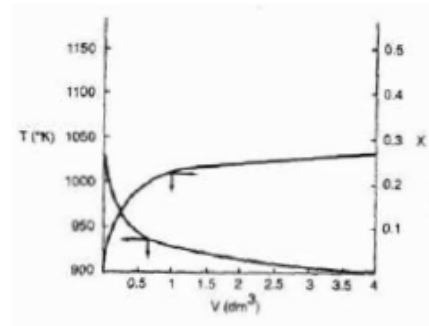
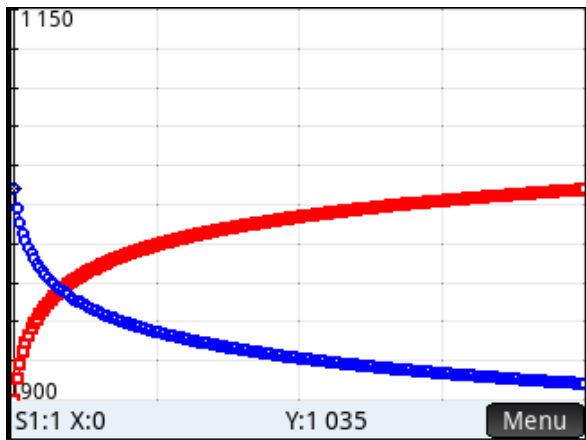


Figura 14. Comparación resultados RKPrime (izquierda) y libro de texto (derecha)

Bibliografía

Fogler, H.S., "Elements of Chemical Reaction Engineering", Prentice Hall, N.J., 1999.

Zill, D.G., "Ecuaciones diferenciales con aplicaciones", Grupo Editorial Iberoamérica, 1997.