Problema de aplicación Método Runge-Kutta

Materia:

Seminario de Solución de Problemas de Métodos Matemáticos III

Sección:

D11

Integrantes:

Ignacio David Vázquez Pérez 218292866

Joanna Nataly Araiza Abarca 214782907

Profesora:

María Elena Olivares Pérez

Fecha de entrega: 23 mayo 2020

Índice:

Introducción:

RUNGE-KUTTA

El método de Runge-Kutta no es sólo un único método, sino una importante familia de métodos iterativos, tanto implícitos como explícitos, para aproximar las soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias (E.D.O´s); estas técnicas fueron desarrolladas alrededor de 1900 por los matemáticos alemanes Carl David Tolmé Runge y Martin Wilhelm Kutta.

Runge-Kutta de cuarto orden

Definiendo un problema de valor inicial como:

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$$

Entonces el método RK4 para este problema está dado por la siguiente ecuación:

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

Dónde:

$$\begin{cases} k_1 &= f\left(x_i, y_i\right) \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1 h\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2 h\right) \\ k_4 &= f\left(x_i + h, y_i + k_3 h\right) \end{cases}$$

Así, el siguiente valor (y_{n+1}) es determinado por el presente valor (y_n) más el producto del tamaño del intervalo (h) por una pendiente estimada. La pendiente es un promedio ponderado de pendientes, donde es la pendiente al principio del intervalo, k2 es la pendiente en el punto medio del intervalo, usando k1 para determinar el valor de *y* en el punto $x_n + \frac{h}{2}$ usando el método de Euler, k3 es otra vez la pendiente del punto medio, pero ahora usando para determinar el valor de *y*; k4 es la pendiente al final del intervalo, con el valor de *y* determinado por . Promediando las cuatro pendientes, se le asigna mayor peso a las pendientes en el punto medio:

$$\text{pendiente} = \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}.$$

Marco Teórico:

La ingeniería química es una rama de la ingeniería que se encarga del estudio, diseño, manutención, evaluación, optimización, simulación, construcción y operación de todo tipo de elementos en la industria de procesos, que es aquella relacionada con la producción industrial de compuestos y productos cuya elaboración requiere de sofisticadas transformaciones físicas y químicas de la materia.

La ingeniería química también se enfoca al diseño de nuevos materiales y tecnologías, es una forma importante de investigación y de desarrollo. Además es líder en el campo ambiental, ya que contribuye al diseño de procesos ambientalmente amigables y procesos para la descontaminación del ambiente.

La ingeniería química se fundamenta en las ciencias básicas como matemática (álgebra lineal o superior, cálculo, ***ecuaciones diferenciales***, ***métodos numéricos***, ***matemática avanzada***), las ciencias básicas de la ingeniería química (termodinámica, fenómenos de transporte, cinética química), y disciplinas aplicadas tales como ingeniería de procesos, diseño de reactores, diseño de equipos para procesos químicos, y procesos de separación. También se van incorporando elementos de ciencias ambientales, biotecnología, ingeniería alimentaria e ingeniería de materiales .

Aplicaciones de la Quimica en la industria:

Las aplicaciones que puede realizar un ingeniero químico son diversas, por ejemplo:

- Estudios de factibilidad técnico-económica
- Especificación / diseño / control de equipos y procesos
- Construcción / montaje de equipos y plantas
- Control de producción / operación de plantas industriales
- Control de calidad de productos
- Compras y comercialización
- Ventas técnicas
- Control ambiental
- Investigación y desarrollo de productos y procesos
- Capacitación de recursos humanos.

Planteamiento del problema:

Concentración de sal en un tanque

Nosotros propusimos un problema en el cual determinamos la concentración salina en un tanque con agua, en donde se determinara los gramos de sal que hay por litro dentro del tanque cada 1.5 min minutos en un intervalo de 3 minutos.
Esto para tener más precisión con los datos a tratar, al final del intervalo determinar la concentración de sal en gramo por litro después de los 3 minutos transcurridos.

Problema:

Calcular la concentración de sal en un tanque en los diferentes puntos medios del intervalo que va de 0 minutos a 3 minutos, calculando la cantidad de gramos de sal por litro de agua en cada paso de tamaño 0.1875 minutos, teniendo al final de este intervalo la cantidad de sal que sigue concentrada en el tanque.
Para llevar a cabo este procedimiento, se dio con que la solución exacta de este problema está dada la por la ecuación diferencial ordinaria (EDO), $dy/dt = 37.5 - 3.5x$, cuando t = 3 minutos, dando esto como resultado:

$$10.715 g/L$$

La solución a nuestro problema es esta la cual es por forma analítica, nosotros para aproximarnos a esta solución con análisis numérico o de forma iterativa, utilizaremos como se ha mostrado anteriormente el método de Runge-Kutta de cuarto orden, lo que se podrá observar en el apartado de solución.

Step size, h	$x(3)$	E_t	$\lvert\epsilon_t\rvert\%$
3	14120	_14109	131680
1.5	11455	−11444	106800
0.75	25.559	−14.843	138.53
0.375	10.717	−0.0014969	0.013969
0.1875	10.715	−0.00031657	0.0029544

Solución:

```python
from math import e
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt

def F(x,y): #funcion
    F = np.zeros(1)
    F[0] = 37.5-3.5*y
    return F

#y(0) = 0
x = 0.0
y = np.array([50.0])

#valor de la iteracion
xStop = 3

#h
h = 0.1875

def integrate(F,x,y,xStop,h):
    def runge_kutta4(F,x,y,h):
        K0 = h*F(x,y)
        K1 = h*F(x + h/2.0, y + K0/2.0)
        K2 = h*F(x + h/2.0, y + K1/2.0)
        K3 = h*F(x + h, y + K2)
        return (K0 + 2.0*K1 + 2.0*K2 + K3)/6.0
    X = []
    Y = []
    X.append(x)
    Y.append(y)
    while x < xStop:
        h = min(h,xStop - x)
        y = y + runge_kutta4(F,x,y,h)
        x = x + h
        X.append(x)
        Y.append(y)
    return np.array(X),np.array(Y)

def printSol(X,Y):
    print("x","y[0.0]", sep="\t")
    for i in range(len(X)):
        print(np.round(X[i], 6), np.round(Y[i],6), sep='\t')

X,Y = integrate(F,x,y,xStop,h)
printSol(X,Y)

plt.plot (X,Y,color='black')
plt.axhline (10.71,0,10,color='red')
plt.plot(X,Y, label='Sal concentrada')
plt.xlabel('Tiempo en Minutos')
plt.ylabel('Cambio de la concentracion de Sal')
plt.title('Concentracion de Sal')
plt.legend(loc=1)
plt.text(0.5,20,'Sal')
plt.axis()
```

```
plt.grid()
plt.show()
```

```
x      y[0.0]
0.0    [50.]
0.1875 [31.131312]
0.375  [21.32514]
0.5625 [16.228812]
0.75   [13.580219]
0.9375 [12.203729]
1.125  [11.488358]
1.3125 [11.116576]
1.5    [10.923358]
1.6875 [10.822942]
1.875  [10.770755]
2.0625 [10.743633]
2.25   [10.729538]
2.4375 [10.722212]
2.625  [10.718405]
2.8125 [10.716427]
3.0    [10.715398]
```

Procedimiento explicado

Método Runge-Kutta de cuarto orden

El método Runge-Kutta de cuarto orden se obtiene de la serie Taylor en la misma línea que el método de segundo orden. Debido a que la derivación es bastante larga y no muy instructiva, la omitiremos. La forma final de la fórmula de integración nuevamente depende de la elección de los parámetros; es decir, no existe una fórmula única de cuarto orden de RungeKutta.

El método Runge-Kutta, que implica la siguiente secuencia de operaciones:

$$\mathbf{K}_0 = h\mathbf{F}(x, \mathbf{y})$$

$$\mathbf{K}_1 = h\mathbf{F}\left(x + \frac{h}{2}, \mathbf{y} + \frac{\mathbf{K}_0}{2}\right)$$

$$\mathbf{K}_2 = h\mathbf{F}\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{\mathbf{K}_1}{2}\right)$$

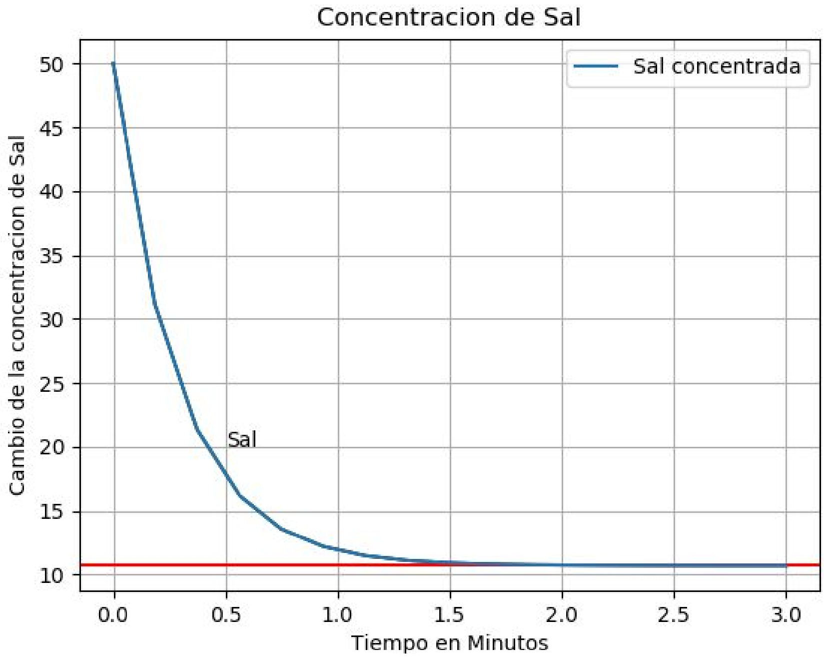
$$\mathbf{K}_3 = h\mathbf{F}(x + h, \mathbf{y} + \mathbf{K}_2)$$

$$\mathbf{y}(x + h) = \mathbf{y}(x) + \frac{1}{6}(\mathbf{K}_0 + 2\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + \mathbf{K}_3)$$

La función Integrar en este módulo implementa el método de pedido Runge-Kutta para el usuario que debe proporcionar integración con la función F (x, y) que define las ecuaciones diferenciales de primer orden y'=F(x,y).

Usamos el método de cuarto orden Runge-Kutta para integrar: y'= 37.5-3.5*x y(0)= 50 De x=0 a 3 en pasos de h=0.1875.

Estos parámetros se los enviamos a la función integrar. Adentro de esa función realiza la función runge_kutta4 para operar las K's divididas entre 6. A continuación realiza un ciclo hasta el x máximo donde se opera el valor h, se suma y(x)+1/6(k0+2k1+2k2+k3), y y(x+h). Esta función retorna los vectores de X y Y, tambien este codigo nos grafica la solucion exacta comparada con el cambio en la concentracion de sal en el tanque dentro del intervalo definido, que conseguimos con la iteraciones de este metodo en cada paso de la variable h, que es 0.1875.



Conclusiones:

El Método de Runge-Kutta es muy versátil a la hora de lidiar con ecuaciones diferenciales ordinarias, las cuales se pueden tornar muy complejas, y lo que hace este método es simplificar los cálculos a unas simples multiplicaciones, divisiones, sumas y restas, lo que son las 4 operaciones básicas, a la hora de llevar a cabo el procedimiento de la EDO dada, aunque nos dará una aproximación muy cercana al valor deseado, pero esto nos puede ayudar para conseguir una solución, muy cercana a la que tenemos en nuestro sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias dada por la solución exacta .

Referencia Bibliográfica:

- Scodelaro, Federico (28 de junio de 2006). «Actividades del ingeniero químico». IngenieriaQuimica.org. Consultado el 5 de mayo de 2014.
- Richard L. Burden, J. Douglas Faires (2001). 7, ed. Análisis Numérico. Cengage Learning Latin America. ISBN 9706861343.
- Ascher, Uri M.; Petzold, Linda Ruth (1998). Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations (en inglés) (1ª edición). Philadelphia (USA): SIAM. ISBN 0898714125.