

## TEMA 5:

# TRANSPORTE EN ESTADO ESTACIONARIO: RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS ODE-BVP

### 1. PROBLEMAS ODE-BVP: PRESENTACIÓN

### 2. CONDICIONES DE INTEGRACIÓN TIPO FRONTERA: TIPOS, SIGNIFICADO FÍSICO

### 3. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS ODE-BVP: MÉTODOS DE DISPARO

### 4. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS ODE-BVP: MÉTODOS DE DIFERENCIAS FINITAS

4.1. Aproximaciones por diferencias finitas a la primera y segunda derivada de una función

4.2. Aplicación general del método de diferencias finitas (problemas lineales de 2º orden)

4.3. Aplicación de las condiciones frontera en el método de diferencias finitas

4.3.1. Condiciones frontera constantes

4.3.2. Condiciones frontera aislantes

4.3.3. Condiciones frontera de transporte

4.4. ANEXO I: Algoritmo de Thomas para la resolución de sistemas tridiagonales

ANEXO II: programa y fichero de resultados del ejemplo 5.4.

### 5. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

Asignatura: Cálculo Avanzado de Procesos Químicos.  
Titulación: Ingeniería Química  
Curso: Cuarto  
Cuatrimestre: Primero

## 1. PROBLEMAS ODE-BVP: PRESENTACIÓN.

- Los problemas de valor frontera (BVP) están definidos mediante ecuaciones diferenciales que requieren la solución sujeta a condiciones de integración de tipo frontera.
- Una ecuación diferencial ordinaria de 2º orden puede expresarse de forma general:

$$f\left(\frac{d^2y}{dx^2}, \frac{dy}{dx}, y, x\right) = 0,$$

- Para especificar completamente este problema es necesario conocer DOS condiciones de integración. Si las condiciones se especifican en dos puntos diferentes del intervalo de integración el problema será del tipo BVP (si las dos condiciones se especifican en el mismo punto del intervalo el problema será IVP).
- Los problemas BVP se encuentran frecuentemente en la descripción matemática de sistemas ingenieriles. Ejemplos de BVP incluyen el análisis en **estado estacionario** de distribución de temperaturas, campos de potencial de flujo, difusión, distribuciones de corriente, etc. Para la mayoría de estos ejemplos la ecuación que gobierna el sistema se reduce a la ecuación de Laplace cuando las propiedades físicas del sistema, conductividad térmica, viscosidad, coeficientes de difusión, conductividad eléctrica, etc., se asumen constantes.
- Un tratamiento riguroso de este tipo de problemas ingenieriles obliga a utilizar las tres coordenadas espaciales que en función del sistema de coordenadas serán:
  - Coordenadas rectangulares:  $x, y, z$
  - Coordenadas cilíndricas:  $x, r, \varphi$
  - Coordenadas esféricas:  $r, \varphi, \phi$

Así, un problema de conducción de calor en estado estacionario multidimensional (coordenadas rectangulares) que pueda describirse por la ley de Fourier se escribe como:

$$k_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = f(x, y, z)$$

- Los sistemas multidimensionales presentan mayor grado de dificultad en su resolución que los unidimensionales. Por otro lado no es frecuente que las tres direcciones espaciales presenten la misma importancia en la distribución de una variable de interés. Así pues nos centraremos en este tema en la resolución de ecuaciones ODE-BVP en una dirección espacial.

Siguiendo con el ejemplo de conducción de calor descrito por la ley de Fourier, la expresión general para un sistema unidireccional se expresa de la forma:

$$\frac{1}{z^s} \frac{d}{dz} \left[ z^s k \frac{dT}{dz} \right] = g(z) \quad 0 < z < 1$$

donde :

k = conductividad térmica

g(z) = generación de calor (o sumidero)

s = factor geométrico : 0 para geometría rectangular, 1 para cilíndrica y 2 para esférica

por lo tanto, considerando la conductividad térmica constante, la expresión general se reduce a:

– geometría rectangular :  $s = 0 \Rightarrow k \frac{d^2 T}{dz^2} = g(z)$

– geometría cilíndrica :  $s = 1 \Rightarrow k \frac{d^2 T}{dz^2} + \frac{k}{z} \frac{dT}{dz} = g(z)$

– geometría esférica :  $s = 2 \Rightarrow k \frac{d^2 T}{dz^2} + \frac{2k}{z} \frac{dT}{dz} = g(z)$

- Para ciertas geometrías y para condiciones frontera ideales es posible encontrar una solución analítica. Los tipos de geometría considerados incluyen rectángulos, cilindros, conos y esferas mientras que las condiciones frontera se limitan a superficies con valor constante o superficies aislantes.

- La solución numérica de los problemas BVP se requiere cuando:
  1. La ecuación diferencial es de un tipo que no permite la solución analítica: p. ej. Ecuaciones no lineales, coeficientes variables, etc.).
  2. Las condiciones frontera no son ideales: p.ej. un aislante no perfecto.
  3. Las propiedades físicas del sistema cambian a lo largo del intervalo de integración. P. ej. Un sólido en el que la conductividad térmica cambia con la temperatura.
  
- La resolución numérica de un problema BVP aproxima el valor de la variable dependiente solamente en determinados puntos discretos (nodos) de la variable independiente.

## 2. CONDICIONES DE INTEGRACIÓN TIPO FRONTERA: TIPOS. SIGNIFICADO FÍSICO

Los problemas definidos por ecuaciones diferenciales ordinarias de condición frontera (ODE-BVP) se caracterizan porque las condiciones de integración están definidas en más de un punto del intervalo de integración (normalmente en los puntos inicial y final del mismo).

Una forma general de expresar las condiciones de integración de tipo frontera es:

$$\begin{aligned} a_0 y(a) - a_1 y'(a) &= \alpha \\ b_0 y(b) - b_1 y'(b) &= \beta \end{aligned}$$

donde:

-  $a_0, a_1, b_0, b_1, \alpha, \beta$  son constantes.

-  $y(a), y(b)$  son los valores de la variable dependiente en los puntos límites  $a$  y  $b$

-  $y'(a), y'(b)$  son los valores de la derivada primera de  $y$  en los puntos límite  $a$  y  $b$ .

En la expresión anterior:

i) si  $\begin{matrix} a_1 = 0 \\ b_1 = 0 \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} y(a) = \frac{\alpha}{a_0} = \text{cte.} \\ y(b) = \frac{\beta}{b_0} = \text{cte.} \end{matrix} \rightarrow$  condiciones frontera de valor constante.

ii) si  $\begin{matrix} a_0 = 0 \\ b_0 = 0 \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} y'(a) = \frac{\alpha}{a_1} = \text{cte.} \\ y'(b) = \frac{\beta}{b_1} = \text{cte.} \end{matrix} \rightarrow$  condiciones frontera aislantes ( $\text{cte}=0$ ) o de flujo constante ( $\text{cte}\neq 0$ )

iii) si  $\begin{matrix} a_0 \neq 0 \\ b_0 \neq 0 \\ a_1 \neq 0 \\ b_1 \neq 0 \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} a_0 y(a) - a_1 y'(a) = \alpha \\ b_0 y(b) - b_1 y'(b) = \beta \end{matrix} \rightarrow$  condiciones frontera de flujo o transporte

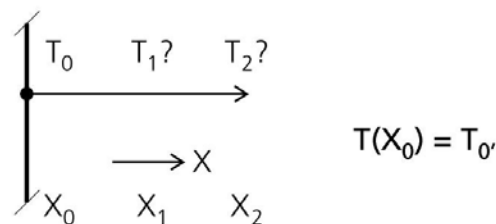
cada uno de estos tipos de condiciones frontera tiene un significado físico diferente:

a) **Condiciones frontera de valor constante:**

La variable dependiente tiene un valor fijo conocido en el punto frontera. Las condiciones frontera constantes no son muy habituales en problemas reales, se usan generalmente como aproximaciones de situaciones reales.

**Ejemplo 5.1.**

En la figura se muestra una pared metálica que limita en una superficie. En el punto de contacto ( $x_0$ ) se ha instalado un sensor que permite conocer la temperatura ( $T_0$ ). Es por tanto una condición límite constante en el punto  $x_0$ . En el resto de la pared no se conoce la temperatura.

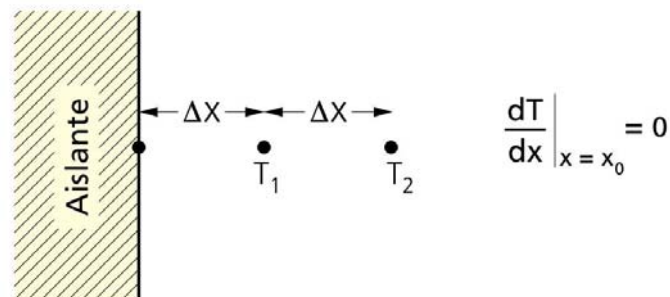


b) **Condiciones frontera tipo aislantes:**

Estas condiciones se utilizan para representar superficies que NO PERMITEN el TRANSPORTE de ciertas propiedades. Matemáticamente lo que estamos indicando con una condición aislante es que el flujo de la variable dependiente (propiedad de interés) en la dirección perpendicular a la superficie es nulo. Ejemplos representativos en Ingeniería Química constituyen los aislantes térmicos que impiden la transmisión de calor o las membranas selectivas que impiden el paso de ciertos compuestos.

**Ejemplo 5.2.**

En la figura se muestra una pared metálica que limita en una superficie aislante. En el punto de contacto NO se conoce  $T_0$  y será una incógnita más de nuestro problema. Lo que sí sabemos es que la pared aislante no permitirá que el calor de la pared metálica se transfiera, es decir, impone una restricción al flujo de la propiedad de interés, en este caso la temperatura. Matemáticamente:



c) Condiciones frontera de transporte

Las condiciones frontera de transporte expresan la ley que rige el transporte de la variable de interés en el punto de aplicación. En Ingeniería Química estas condiciones se utilizan cuando se puede describir el movimiento de una propiedad hacia una superficie mediante un coeficiente de transferencia de materia o calor.

Ejemplo 5.3.

En la figura se muestra una pared metálica en contacto con un baño de agua.

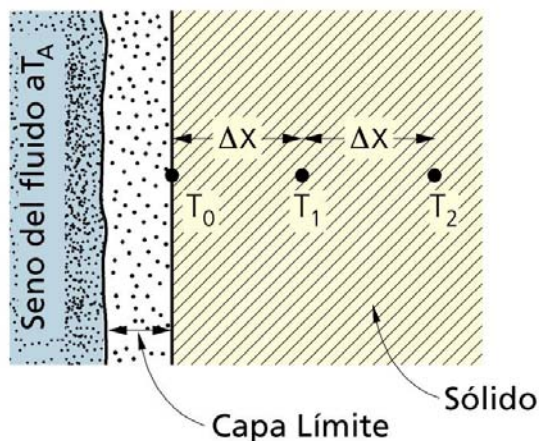
En un sistema como este la transferencia de calor entre la fase sólida y la líquida se explica a través de la existencia de una zona donde se concentran todas las resistencias la transferencia de energía, interfase o capa límite.

El transporte de calor (o materia) desde el seno de un líquido hasta una superficie sólida se puede describir mediante un coeficiente de transferencia de energía (o materia). Por ejemplo el flujo de energía desde la superficie hacia el fluido puede presentarse por:

$$q_s = h(T_0 - T_a), \text{ siendo}$$

$T_a =$  temperatura del fluido  
 $T_0 =$  temperatura en la superficie sólida  
 $h =$  coeficiente de transmisión de calor

Aplicando un balance de energía en la superficie del sólido podemos ver que el flujo de calor de la fase sólida a la líquida va a ser igual a la transmisión de calor por conducción dentro del sólido:



$$q_s = -k \frac{dT}{dx} \Big|_{x=x_0} = h(T_0 - T_a)$$

$$T_0 > T_a$$

[Reelaborado a partir de Riggs, 1994]

Comentario: como el flujo de calor es negativo en la dirección x, ambos términos en esta ecuación tienen signo positivo

### 3. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS ODE-BVP: MÉTODOS DE DISPARO

Los métodos de disparo pueden usarse para resolver problemas ODE-BVP en una dimensión convirtiendo el problema BVP en un problema IVP iterativo.

Se denominan métodos de disparo un conjunto de técnicas que resuelven problemas BVP mediante el uso conjunto de

- a) algoritmos propios de problemas IVP y
- b) algoritmos propios de resolución de ecuaciones algebraicas no lineales.

Los pasos a seguir para solucionar un problema ODE-BVP mediante un método de disparo son:

1. **TRANSFORMAR** la ecuación BVP en un sistema de ecuaciones IVP de primer orden utilizando el mismo método desarrollado para ecuaciones IVP de orden superior a uno.
2. **ESTIMAR** las condiciones iniciales que no están especificadas en la ecuación original (la ecuación BVP tendría una condición en el punto inicial de integración y otra en el punto final por lo tanto para integrar el sistema de 2 ecuaciones IVP será necesario estimar una condición inicial adicional).
3. Ahora se puede **INTEGRAR EL SISTEMA IVP** con cualquiera de los algoritmos vistos para ese fin.
4. La condición límite real en el punto final del intervalo de integración se **COMPARA** con la aproximación numérica alcanzada para esa variable en ese punto mediante el algoritmo IVP. Si la diferencia entre ambos valores es menor que el error permitido la integración se considera válida y se ha alcanzado la solución del problema.
5. Si la diferencia es mayor que el error permitido se vuelve a estimar una nueva condición inicial y se repite la integración del sistema IVP hasta que se alcance la convergencia exigida. Para el **PROCESO ITERATIVO** se puede usar cualquier algoritmo para resolución de ecuaciones no lineales (Newton, secante, etc.)



**Ejemplo 5.4:**

**Resolver el problema ODE-BVP:**  $\frac{d^2 y}{dx^2} + y \frac{dy}{dx} + 5 = 0$  con  $y(0) = 0$ ,  $y(1) = 1$  **mediante el método del disparo:**

Primer paso:

obtener un sistema IVP de primer orden para ello se crea las nuevas variables

$$y = z_1$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dz_1}{dx} = z_2$$

obteniéndose el sistema :

$$\begin{aligned} \frac{dz_1}{dx} &= z_2 & z_1(0) &= 0 \\ \frac{dz_2}{dx} &= -(z_1 * z_2) - 5 & z_2(0) &= ????? \end{aligned}$$

Segundo paso:

Estimar una condición inicial para la variable  $z_2$ , en este ejemplo se ha estimado  $z_2(0) = 1,0$

Tercer paso:

Integrar el sistema mediante un algoritmo IVP (p.e. RK) y comparar la aproximación obtenida para la variable  $y$  en el punto  $x=1$  con la condición límite  $y(1) = 1$ . Para ello se crea la función  $FV=y(1)-1$ . El objetivo será hacer cero dicha función, para ello se ha utilizado el método de la secante.

Se han utilizado los siguientes parámetros:

a) para la resolución del sistema IVP:

Algoritmo: Runge –Kutta de Orden 4

$x_0 = 0,0$

$x_{max} = 1,0$

Tamaño de paso: 0,1

b) Para el proceso iterativo de selección de  $z(0)$ :

Algoritmo: método de la secante:

$$dx = x_{i+1} - x_i = -F_i * (x_i - x_{i-1}) / (F_i - F_{i-1})$$

$$F = y(1) - 1.0$$

Primeros valores iterativos:  $x_1=1.0$ ;  $x_2=0.95$   
 Error máximo permitido:  $1.d-6$   
 Número máximo de iteraciones permitidas: 20.  
 Variación máxima en cada iteración:  $dx=2.0$

c) Programas y subrutinas:

1. programa principal: contiene los parámetros del problema, las llamadas a las subrutinas y las salidas de resultados
2. Subrutina secant: contiene el algoritmo del método de la secante.
3. Subrutina F: contiene la función de la que se quiere hallar el cero mediante el método de la secante.
4. Subrutina rkutta: contiene el algoritmo de Runge – Kutta de orden 4
5. Subrutina funct: contiene el sistema de ecuaciones IVP de 1ºorden a integrar mediante RK

d) Los programas y subrutinas así como los resultados se muestran en el Anexo II

**Tabla 5.1. Resultados del problema ejemplo 5.4. aplicando método de disparo.**

Iteración	Valor inicial y1	Valor inicial y2	Valor final y1	Valor final y2	Nuevo y2 inicial
1a	0,00 (dato)	1,00 (estimado)	<b>-1,69 (≠1,00)</b>	-5,43	0,950000
1b	0,00	0,95(estimado)	<b>-1,76(≠1,00)</b>	-5,60	2,000000
2	0,00	2,000000	<b>-0,54(≠1,00)</b>	-3,14	3,000000
3	0,00	3,000000	<b>0,31(≠1,00)</b>	-2,05	3,811051
4	0,00	3,811051	<b>0,86(≠1,00)</b>	-1,56	4,012601
5	0,00	4,012601	<b>0,98(≠1,00)</b>	-1,47	4,035532
6	0,00	4,035532	<b>0,99(≠1,00)</b>	-1,46	4,036043
7	0,00	4,036043	<b>0,999(≠1,00)</b>	-1,463	4,036044
8	0,00	4,036044	<b>1,000000</b>	-1,463	

La resolución del problema ha requerido integrar 9 veces el sistema IVP hasta alcanzar la convergencia exigida.

- Los métodos de disparo pueden ser aplicados a problemas BVP en una dimensión (y con algoritmos más complejos también a BVP de más dimensiones).
- Permiten utilizar algoritmos de orden de exactitud elevado para resolver el problema BVP. (en el ejemplo se ha obtenido una aproximación de 4º orden de exactitud).
- Cuando se usa un método del disparo tres son los factores que influyen en la exactitud final de la aproximación lograda:
  - el orden del método de integración,
  - el tamaño de paso del método de integración, y
  - el criterio de convergencia del método de resolución de la ecuación no lineal.
- Los factores (2) y (3) deben ser reducidos todo lo posible para proporcionar la exactitud deseada en la aproximación del problema BVP.
- Utilizar este método con problemas BVP en los que ninguna de las condiciones frontera tiene un valor constante presenta mayores dificultades.
- Así mismo, cuando este método se aplica a problemas BVP altamente no lineales debe tenerse sumo cuidado en la selección de la condición inicial desconocida (si el valor inicial supuesto está muy alejado del correcto la integración de las ODEs puede fallar por problemas de overflow, etc.).
- Se ha de tener en cuenta además que una ecuación puede tener más de una raíz (el método iterativo puede llegar a más de una solución), por lo tanto cuando se pretende resolver problemas de ingeniería química (o de cualquier otra área aplicada) no basta con alcanzar una solución matemáticamente correcta sino que se debe tener sentido físico.
- Hasta ahora sólo se han comentado los métodos de disparo que comienzan desde el punto inicial del intervalo de integración, sin embargo el método puede aplicarse en cualquier dirección. Este procedimiento se denomina bombardeo inverso.

## 4. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS ODE-BVP: MÉTODOS DE DIFERENCIAS FINITAS

### 4.1. APROXIMACIÓN POR DIFERENCIAS FINITAS A LA PRIMERA Y SEGUNDA DERIVADA DE UNA FUNCIÓN

A partir de las aproximaciones de Taylor de la forma:

$$y(x+h) = y_{i+1} = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} y^{iv}(\varepsilon) \quad x_i < \varepsilon < x_{i+1}$$

$$y(x-h) = y_{i-1} = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!} y''(x_i) - \frac{h^3}{3!} y'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} y^{iv}(\varepsilon) \quad x_{i-1} < \varepsilon < x_i$$

Se pueden obtener aproximaciones por cocientes de diferencias a la primera y segunda derivada de la función y de la forma:

#### Aproximaciones a la primera derivada:

$$\Rightarrow \text{diferencias hacia delante} : \frac{dy_i}{dx} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} + \mathcal{O}(x_{i+1} - x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) =$$

$$\text{Diferencias Adelante} := \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$\Rightarrow \text{diferencias hacia atrás} : \frac{dy_i}{dx} = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + \mathcal{O}(x_i - x_{i-1}) = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) =$$

$$\text{Diferencias Atras} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$\Rightarrow \text{diferencias centrales} : \frac{dy_i}{dx} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2(x_i - x_{i-1})} + \mathcal{O}\left(\frac{(x_i - x_{i-1})^2}{2}\right) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) =$$

$$\text{Diferencias Centrales} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

#### Aproximaciones a la segunda derivada:

$$\Rightarrow \text{diferencias centrales} : \frac{d^2 y_i}{dx^2} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(h^2) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

## 4.2. APLICACIÓN GENERAL DEL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS (PROBLEMAS LINEALES DE 2º ORDEN)

Dado un problema de la forma  $y'' = f(x, y, y')$  con las condiciones frontera  $a_0y(a) - a_1y'(a) = \alpha$   
 $b_0y(b) - b_1y'(b) = \beta$ , los pasos a seguir para obtener una solución mediante el método de diferencias finitas son:

- 1) **Discretizar el intervalo de integración:** escoger una serie de puntos (nodos) dentro del intervalo de integración  $[a, b]$  de la forma:  $a = x_0 < x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_{n+1} = b$  tales que se busque la solución en esos puntos.

Comentario:

La nomenclatura habitual en la mayoría de la bibliografía del tema (Davis, Riggs, etc.) es la que se ilustra en el ejemplo siguiente:

----- ----- ----- -----	
i=0	i=n+1
x=x <sub>0</sub>	x=x <sub>n+1</sub>
y=y <sub>0</sub>	y=y <sub>n+1</sub>

Posición	valor de i	valor de x <sub>i</sub>	valor de y <sub>i</sub>
Exterior inicial	0	x <sub>0</sub>	y <sub>0</sub>
Interior	1 - - - - n	x <sub>1</sub> -----x <sub>n</sub>	y <sub>1</sub> ---y <sub>n</sub>
Exterior final	n+1	x <sub>n+1</sub>	y <sub>n+1</sub>

Esta nomenclatura acarrea problemas a la hora utilizar ordenador, ya que la forma habitual de trabajo de cualquier lenguaje de programación es almacenar en un vector de longitud igual al numero de nodos los valores de las variables  $x(i)$ ,  $y(i)$  y en los vectores no existe la posición  $y(0)$  lo cual puede acarrear errores si no se tienen en cuenta estos detalles.

Otra nomenclatura admisible podría ser:

----- ----- ----- -----			
i=1	i=2	i=n-1	i=n
x=x <sub>1</sub>			x=x <sub>n</sub>
y=y <sub>1</sub>			y=y <sub>n</sub>

Posición	valor de i	valor de x <sub>i</sub>	valor de y <sub>i</sub>
Exterior inicial	1	x <sub>1</sub>	y <sub>1</sub>
Interior	2 - - - - n-1	x <sub>2</sub> -----x <sub>n-1</sub>	y <sub>2</sub> ---y <sub>n-1</sub>
Exterior final	n	x <sub>n</sub>	y <sub>n</sub>

Cualquiera de ellas puede usarse pero es muy importante SABER EN TODO MOMENTO CUAL DE ELLAS ESTAMOS USANDO PARA NO COMETER ERRORES EN LOS PUNTOS FRONTERA



3. **Aplicar las** restricciones impuestas por las **condiciones frontera** de cada problema. Este apartado lo veremos con detalle en la próxima sección.

### 4.3. APLICACIÓN DE LAS CONDICIONES FRONTERA EN EL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

#### 4.3.1. Condiciones frontera constantes:

Un problema sujeto a condiciones frontera constante implica que el valor de la variable  $y$  en los puntos inicial y final  $y_0$  e  $y_{n+1}$  (ó  $y_1$  e  $y_n$ ) son conocidos, luego eliminamos dos ecuaciones del sistema general

#### Ejemplo 5.6:

En el sistema general del ejemplo 5.5. si especificamos las condiciones  $y(0)=1$ ,  $y(1)=2$  el sistema de 6 ecuaciones presentado en dicho ejemplo se transforma en:

$$\begin{aligned}
 y(0) &= 1 && \text{para } i = 0 \\
 \frac{[y_2 - 2y_1 + 1]}{h^2} + p(x_1) \frac{[y_2 - 1]}{2h} + q(x_1)y_1 &= r(x_1) && \text{para } i = 1 \\
 \frac{[y_3 - 2y_2 + y_1]}{h^2} + p(x_2) \frac{[y_3 - y_1]}{2h} + q(x_2)y_2 &= r(x_2) && \text{para } i = 2 \\
 \frac{[y_4 - 2y_3 + y_2]}{h^2} + p(x_3) \frac{[y_4 - y_2]}{2h} + q(x_3)y_3 &= r(x_3) && \text{para } i = 3 \\
 \frac{[2 - 2y_4 + y_3]}{h^2} + p(x_4) \frac{[2 - y_3]}{2h} + q(x_4)y_4 &= r(x_4) && \text{para } i = 4 \\
 y(1) &= 2 && \text{para } i = 5
 \end{aligned}$$

En general un sistema una ecuación ODE-BVP con condiciones limite constantes discretizada en  $n$  ecuaciones se resolverá a través de un sistema de  $n-2$  ecuaciones algebraicas.

Si en la expresión general  $\frac{[y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}]}{h^2} + p(x_i) \frac{[y_{i+1} - y_{i-1}]}{2h} + q(x_i)y_i = r(x_i)$  agrupamos cada valor de  $y$ , podemos obtener la expresión:

$$\begin{aligned}
 & y_0 = \alpha && i = 0 \\
 & \left[ q(x_i) - \frac{2}{h^2} \right] y_i + \left[ p(x_i) + \frac{1}{h^2} \right] y_{i+1} = r(x_i) - \left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_i)}{2h} \right] \alpha && i = 1 \\
 & \left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_i)}{2h} \right] y_{i-1} + \left[ q(x_i) - \frac{2}{h^2} \right] y_i + \left[ p(x_i) + \frac{1}{h^2} \right] y_{i+1} = r(x_i) && i = 2 \dots n \\
 & \left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_i)}{2h} \right] y_{i-1} + \left[ q(x_i) - \frac{2}{h^2} \right] y_i = r(x_i) - \left[ \frac{p(x_i)}{2h} + \frac{1}{h^2} \right] \beta && i = n \\
 & y_{n+1} = \beta && i = n + 1
 \end{aligned}$$

que expresada en forma matricial:

$$A \cdot \bar{y} = \bar{r}, \text{ donde:}$$

$$\bar{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$$

$$\bar{r} = \left[ \frac{h^2}{2} r(x_1) - \left( \frac{1}{2} - \frac{p(x_1)h}{4} \right) \alpha, \frac{h^2}{2} r(x_2), \dots, \frac{h^2}{2} r(x_{n-1}), \frac{h^2}{2} r(x_n) - \left( \frac{1}{2} + \frac{p(x_n)h}{4} \right) \beta \right]^T$$

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_2 & c_2 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & b_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & b_n & a_n \end{bmatrix} \text{ siendo: } \begin{aligned} a_i &= \left[ q(x_i) \frac{h^2}{2} - 1 \right] \\ b_i &= \left[ \frac{1}{2} - \frac{p(x_i)h}{4} \right] \\ c_i &= \left[ \frac{p(x_i)h}{4} + \frac{1}{2} \right] \end{aligned}$$

La matriz A se denomina tridiagonal.

Esta forma especial permite una aplicación muy eficiente del procedimiento de eliminación gaussiano mediante el algoritmo de THOMAS.

COMENTARIO: Todos los problemas ODE-BVP pueden expresarse mediante un sistema matricial tridiagonal pero la forma de los coeficientes  $a_i, b_i, c_i, r_i$  depende del problema.



Ejemplo 5.7

Partiendo del sistema obtenido en el ejemplo 5.5. vamos a obtener una representación matricial tridiagonal del problema discretizando el intervalo de integración en 6 nodos de los cuales el primero (i=0) y el último (i=5) no corresponden a ecuaciones porque el valor de y es conocido por las condiciones frontera.

En el Ejemplo 5.5. habíamos obtenido un sistema de 4 ecuaciones de la forma:

$$\begin{aligned}
 y(0) &= 1 && \text{para } i = 0 \\
 \frac{[y_2 - 2y_1 + 1]}{h^2} + p(x_1) \frac{[y_2 - 1]}{2h} + q(x_1)y_1 &= r(x_1) && \text{para } i = 1 \\
 \frac{[y_3 - 2y_2 + y_1]}{h^2} + p(x_2) \frac{[y_3 - y_1]}{2h} + q(x_2)y_2 &= r(x_2) && \text{para } i = 2 \\
 \frac{[y_4 - 2y_3 + y_2]}{h^2} + p(x_3) \frac{[y_4 - y_2]}{2h} + q(x_3)y_3 &= r(x_3) && \text{para } i = 3 \\
 \frac{[2 - 2y_4 + y_3]}{h^2} + p(x_4) \frac{[2 - y_3]}{2h} + q(x_4)y_4 &= r(x_4) && \text{para } i = 4 \\
 y(1) &= 2 && \text{para } i = 5
 \end{aligned}$$

Agrupando los coeficientes correspondientes a cada valor de  $y_i$  obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \left[ q(x_1) - \frac{2}{h^2} \right] y_1 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_1)}{2h} \right] y_2 &= \left[ r(x_1) + \frac{p(x_1)}{2h} - \frac{1}{h^2} \right] && \text{para } i = 1 \\
 \left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_1)}{2h} \right] y_1 + \left[ q(x_2) - \frac{2}{h^2} \right] y_2 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_2)}{2h} \right] y_3 &= [r(x_2)] && \text{para } i = 2 \\
 \left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_2)}{2h} \right] y_2 + \left[ q(x_3) - \frac{2}{h^2} \right] y_3 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_3)}{2h} \right] y_4 &= [r(x_3)] && \text{para } i = 3 \\
 \left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_3)}{2h} \right] y_3 + \left[ q(x_4) - \frac{2}{h^2} \right] y_4 + &= \left[ r(x_4) - \frac{2}{h^2} - \frac{2p(x_4)}{2h} \right] && \text{para } i = 4
 \end{aligned}$$

si denominamos:

$$\begin{aligned}
 \left[ q(x_i) - \frac{1}{h^2} \right] &= a_i \\
 \left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_i)}{2h} \right] &= b_i \\
 \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_i)}{2h} \right] &= c_i \\
 [r(x_i)] &= r_i \\
 1 &= \alpha \\
 2 &= \beta
 \end{aligned}$$

podemos expresar:

$$\begin{bmatrix} a_1 & c_1 & 0 & 0 \\ b_2 & a_2 & c_2 & 0 \\ 0 & b_3 & a_3 & c_3 \\ 0 & 0 & b_4 & a_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 + \alpha \left( \frac{p(x_1)}{2h} - 1/h^2 \right) \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 - \beta \left( \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_4)}{2h} \right) \end{bmatrix} \quad \text{c. q. d.}$$

### 4.3.2. Condiciones frontera aislantes

Si en el problema presentado en el apartado 5.1. sustituimos una de las condiciones frontera constantes, por ejemplo la correspondiente al punto  $x_{n+1}$ , por una condición aislante el valor de la variable  $y$  en el punto final  $y_{n+1}$  (ó  $y_n$ ) es ahora desconocido.

Esto implica dos cambios importantes respecto al sistema de ecuaciones generado en el apartado anterior:

- En la ecuación correspondiente al nodo  $i=n$  tendremos tres variables:  $y_{n-1}$ ,  $y_n$ ,  $y_{n+1}$ , en vez de dos variables ( $y_{n-1}$ ,  $y_n$ )
- Debemos añadir una nueva ecuación al sistema general ya que  $y_{n+1}$  es desconocido. Esta nueva ecuación implicará a las variables  $y_n$ ,  $y_{n+1}$ ,  $y_{n+2}$ :

$$y_0 = \alpha \quad i = 0$$

$$b_i y_{i-1} + a_i y_i + c_i y_{i+1} = r(x_i) \quad i = 1, \dots, n+1$$

En el nodo  $i=n+1$  el punto  $y_{n+2}$  queda fuera del dominio del intervalo de integración, por lo tanto no tiene sentido físico y no puede incluirse en los cálculos del problema. Para resolver este problema se utiliza la denominada “*técnica de los límites ficticios*”:

La condición aislante en el punto  $i=n+1$  implica:  $\left. \frac{dy}{dx} \right|_{n+1} = 0$

Por otro lado la condición aislante es matemáticamente una derivada de primer orden de la variable  $y$  respecto a la variable  $x$  por lo tanto podemos aplicar diferencias centrales a la primera derivada den en ese punto:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{n+1} = \frac{y_{n+2} - y_n}{2h}$$

Igualando ambas expresiones:

$$\frac{y_{n+2} - y_n}{2h} = 0 \rightarrow \boxed{y_{n+2} = y_n}$$

Es decir, se ha conseguido expresar una variable que no existe en el sistema,  $y_{n+2}$ , en función de una variable que sí existe en el sistema,  $y_n$

**Ejemplo 5.8:**

Partiendo del sistema obtenido en el ejemplo 5.5. vamos a obtener una representación matricial tridiagonal del problema con condición frontera constante en  $x=0$ :  $y(0)=1$ , y condición aislante en  $x=1$ :  $\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=1} = 0$  discretizando el intervalo de integración en 6 nodos siendo el primero ( $i=0$ ) y el último ( $i=5$ ).

$$y_0 = \alpha = 1 \quad \text{para } i = 0$$

$$\left[ q(x_1) - \frac{2}{h^2} \right] y_1 + \left[ \frac{1}{2} + \frac{hp(x_1)}{4} \right] y_2 = \left[ r(x_1) + \frac{p(x_1)}{2h} - \frac{1}{h^2} \right] \quad \text{para } i = 1$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_2)}{2h} \right] y_1 + \left[ q(x_2) - \frac{2}{h^2} \right] y_2 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_2)}{2h} \right] y_3 = [r(x_2)] \quad \text{para } i = 2$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_3)}{2h} \right] y_2 + \left[ q(x_3) - \frac{2}{h^2} \right] y_3 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_3)}{2h} \right] y_4 = [r(x_3)] \quad \text{para } i = 3$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_4)}{2h} \right] y_3 + \left[ q(x_4) - \frac{2}{h^2} \right] y_4 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_4)}{2h} \right] y_5 = [r(x_4)] \quad \text{para } i = 4$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_5)}{2h} \right] y_4 + \left[ q(x_5) - \frac{2}{h^2} \right] y_5 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_5)}{2h} \right] y_6 = [r(x_5)] \quad \text{para } i = 5$$

En este sistema aparece la variable  $y_6$  que no existe en el intervalo de integración. Aplicando la condición aislante en el punto  $y_5$ :  $\left. \frac{dy}{dx} \right|_{i=5} = 0 = \frac{y_6 - y_4}{2h} \Rightarrow y_6 = y_4$ .

Sustituyendo  $y_6$  por  $y_4$  en la última ecuación del sistema:

$$\left[ \frac{2}{h^2} \right] * y_4 + \left[ q(x_5) - \frac{2}{h^2} \right] y_5 = [r(x_5)] \quad \text{para } i = 5, \text{ Por lo tanto en forma matricial:}$$

$$\begin{bmatrix} a_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_3 & c_3 & 0 \\ 0 & 0 & b_4 & a_4 & c_4 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{h^2} & a_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 + \alpha \left( \frac{p(x_1)}{2h} - 1/h^2 \right) \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ r_5 \end{bmatrix}$$

4.3.3. Condiciones frontera de transporte

Al igual que en el caso anterior cuando tenemos una o dos condiciones de flujo (puntos  $x_0$  e  $x_{n+1}$ ), los valores de la variable dependiente en esos puntos se desconocen por lo que debemos incluir las ecuaciones oportunas (una ó dos). Así mismo, al plantear las ecuaciones correspondientes a los puntos  $x_0$  e  $x_{n+1}$ , aparecerán dos variables nuevas,  $y_{-1}$ ,  $y_{n+2}$  que no tienen sentido físico dentro del intervalo de integración. La estrategia para trabajar con ellas es la misma que en el caso de condición aislante.

**Ejemplo 5.9.**

Partiendo del sistema obtenido en el ejemplo 5.5. vamos a obtener una representación matricial tridiagonal del problema con condición frontera de flujo en  $x=0$ :  $\left. \frac{dy}{dx} \right|_{i=0} = k(y_0 - y_A)$  siendo  $k$ ,  $y_a$  constantes, y

condición aislante en  $x=1$ :  $\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=1} = 0$ , discretizando el intervalo de integración en 6 nodos siendo el primero ( $i=0$ ) y el último ( $i=5$ ).

En este caso el sistema de ecuaciones será:

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_0)}{2h} \right] y_{-1} + \left[ q(x_0) - \frac{2}{h^2} \right] y_0 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_0)}{2h} \right] y_1 = [r(x_0)] \text{ para } i = 0$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_1)}{2h} \right] y_0 + \left[ q(x_1) - \frac{2}{h^2} \right] y_1 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_1)}{2h} \right] y_2 = [r(x_1)] \text{ para } i = 1$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_2)}{2h} \right] y_1 + \left[ q(x_2) - \frac{2}{h^2} \right] y_2 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_2)}{2h} \right] y_3 = [r(x_2)] \text{ para } i = 2$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_3)}{2h} \right] y_2 + \left[ q(x_3) - \frac{2}{h^2} \right] y_3 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_3)}{2h} \right] y_4 = [r(x_3)] \text{ para } i = 3$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_4)}{2h} \right] y_3 + \left[ q(x_4) - \frac{2}{h^2} \right] y_4 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_4)}{2h} \right] y_5 = [r(x_4)] \text{ para } i = 4$$

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_5)}{2h} \right] y_4 + \left[ q(x_5) - \frac{2}{h^2} \right] y_5 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_5)}{2h} \right] y_6 = [r(x_5)] \text{ para } i = 5$$

En este sistema aparecen dos variables que no pertenecen al intervalo de integración:  $y_{-1}$ ,  $y_6$ . La forma de sustituir  $y_6$  la hemos presentado en el ejemplo 5.8. Nos centraremos en la forma de sustituir  $y_{-1}$ :

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{i=0} = k(y_0 - y_A) = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} \Rightarrow y_{-1} = y_1 - 2hk(y_0 - y_A)$$

Sustituyendo en la primera ecuación del sistema ( $i=0$ ):

$$\left[ \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_0)}{2h} \right] (y_1 - 2hk y_0 + 2hky_A) + \left[ q(x_0) - \frac{2}{h^2} \right] y_0 + \left[ \frac{1}{h^2} + \frac{p(x_0)}{2h} \right] y_1 = [r(x_0)] \text{ para } i = 0 \text{ Reorganizando:}$$

$$\left[ \left( q(x_0) - \frac{2}{h^2} \right) + 2hk \left( -\frac{1}{h^2} + \frac{p(x_0)}{2h} \right) \right] y_0 + \left[ \frac{2}{h^2} \right] y_1 = \left[ r(x_0) + 2hky_A \left( -\frac{1}{h^2} + \frac{p(x_0)}{2h} \right) \right]$$

con lo que el sistema sigue siendo tridiagonal.

En resumen:

Un problema ODE-BVP de 2º orden lineal se transforma mediante discretización en n nodos y aplicación de diferencias finitas a la primera y segunda derivada en cada nodo en:

- a) Un sistema de **n-2 ecuaciones algebraicas lineales** con matriz de coeficientes **tridiagonal** si el problema inicial tenía dos condiciones frontera constantes.
- b) Un sistema de **n-1 ecuaciones algebraicas lineales** con matriz de coeficientes **tridiagonal** si el problema inicial tenía una condición aislante o de flujo.
- c) Un sistema de **n ecuaciones algebraicas lineales** con matriz de coeficientes **tridiagonal** si el problema inicial tenía dos condición de flujo y/o aislante.

La resolución práctica de un problema planteado por este método necesita de la utilización de subrutinas de resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas lineales: Gauss, Gauss-Seidel y en particular el método de Thomas que es una forma particular del método de eliminación gaussiana para sistemas con matriz de coeficientes tridiagonal.

**4.4. ANEXO I: Método de Thomas para la resolución de sistemas lineales de ecuaciones algebraicas con matriz de coeficientes tridiagonal.**

Un ejemplo de sistema lineal de ecuaciones algebraicas con matriz tridiagonal es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 2x_1 - x_2 &= 1 \\
 -x_1 + 2x_2 - x_3 &= 2 \\
 -x_2 + 2x_3 - x_4 &= 3 \\
 -x_3 + 2x_4 &= 4
 \end{aligned}$$

la matriz de coeficientes de este sistema es:

$$\begin{bmatrix}
 2 & -1 & 0 & 0 \\
 -1 & 2 & -1 & 0 \\
 0 & -1 & 2 & -1 \\
 0 & 0 & -1 & 2
 \end{bmatrix}$$

En ella todos los elementos excepto la diagonal principal y las inmediatamente superior e inferior son ceros. Este tipo de matriz también puede denominarse matriz de bandas con anchura de bandas de 3. El método de eliminación gaussiana puede aplicarse a un sistema de este tipo dando como resultado un algoritmo simplificado. Consideremos un sistema lineal de forma general:

$$\begin{aligned}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 &= b_1 \\
 a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2 \\
 a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 &= b_3 \\
 &\dots\dots\dots \\
 a_{n,n-1}x_{n-1} + a_{n,n}x_n &= b_n
 \end{aligned}$$

El sistema puede escribirse de forma más conveniente:

$$\begin{aligned}
 d_1x_1 + e_1x_2 &= b_1 \\
 c_2x_1 + d_2x_2 + e_2x_3 &= b_2 \\
 c_3x_2 + d_3x_3 + e_3x_4 &= b_3 \\
 &\dots\dots\dots \\
 c_nx_{n-1} + d_nx_n &= b_n
 \end{aligned}$$

donde  $c_i$ ,  $d_i$ ,  $e_i$  representan los coeficientes de  $x_{i-1}$ ,  $x_i$ ,  $x_{i+1}$  en la ecuación  $i$ . Mediante eliminación Gaussiana  $x_1$  puede ser eliminada del problema usando la primera ecuación para eliminar  $x_1$  de la segunda ecuación, Así mismo la segunda ecuación puede ser utilizada para eliminar  $x_2$  de la tercera ecuación. De esta forma cada ecuación se utiliza para eliminar una variable de una ecuación. Para un sistema de  $n$  ecuaciones lineales la solución viene dado por:

$$\begin{aligned}
 x_n &= \gamma_n \\
 dx_i &= \gamma_i - \frac{e_i x_{i+1}}{\beta_i}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1
 \end{aligned}$$

donde  $\gamma_i$  y  $\beta_i$  se determinan mediante las formulas recursivas :

$$\beta_1 = d_1, \quad \gamma_1 = \frac{b_1}{\beta_1}, \quad \beta_i = d_i - \frac{c_i e_{i-1}}{\beta_{i-1}}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n$$

$$\gamma_i = \frac{b_i - c_i \gamma_{i-1}}{\beta_i}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n$$

Los requerimientos de cálculo computacional de este método crecen linealmente con el número de ecuaciones del sistema mientras que los requerimientos de cálculo del método de Gauss crecen proporcionalmente al cubo del número de ecuaciones del sistema.

A continuación se muestra una subrutina en FORTRAN (Riggs, 1994) que resuelve un sistema de n ecuaciones lineales mediante el método de Thomas. Los argumentos N, C(I), D(I), E(I) y B(I) deben ser proporcionados por el usuario como argumentos de entrada. La subrutina proporciona el vector X(I) como solución del sistema. BETA(I) y GAM(I) deben ser dimensionados en el programa de llamada pero no se usan como argumentos de entrada ni salida.

```
C*****ABSTRACT *****
C  ESTA SUBROUTINA CALCULA LA SOLUCIÓN DE UN SISTEMA DE ECUACIONES LINEALES
C  CON MATRIZ DE COEFICIENTES TRIDIAGONAL USANDO EL METODOD DE THOMAS
C*****
```

**SUBROUTINE TM(N,C,D,E,B,X,BETA,GAM)**

---

```
c  IDENTIFICACIÓN DE ARGUMENTOS
c  N      = número de incógnitas
c  C(I)   = coeficiente de el término situado a la izquierda de la diagonal principal para la ecuación i.
c          Dimensionado por N (entrada)
c  D(I)   = coeficiente de el término de la diagonal principal para la ecuación i.
c          Dimensionado por N (entrada).
c  E(I)   = coeficiente de el término situado a la derecha de la diagonal
c          principal para la ecuación i. Dimensionado por N (entrada).
c  B(I)   = constante para la ecuación i. Dimensionado por N (entrada).
c  X(I)   = vector solución. Dimensionado por N (salida).
c  BETA(I)= vector interno usado por la subrutina TM. Dimensionado por N
c  GAM(I)= vector interno usado por la subrutina TM. Dimensionado por N
```

---

```
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION C(1),D(1),E(1),B(1),X(1),BETA(1),GAM(1)
BETA(1)=D(1)
GAM(1)=B(1)/BETA(1)
DO 10 I=2,N
BETA(I)=D(I)-C(I)*E(I-1)/BETA(I-1)
10 GAM(I)=(B(I)-C(I)*GAM(I-1))/BETA(I)
X(N)=GAM(N)
DO 20 I=2,N
J=N-I+1
20 X(J)=GAM(J)-E(J)*X(J+1)/BETA(J)
RETURN
END
```

\*\*\*\*\*

**ANEXO II: PROGRAMA Y RESULTADOS DEL EJEMPLO 5.  
Y''+Y\*Y'+5=0. METODO DISPARO**

PROGRAM SHOOTING METHOD

```

c*****
c DOCUMENTACION:
c -----
c Autora: Raquel Ibáñez
c Fecha: curso 2010-11
c Lenguaje: Fortran 77
c Asignatura: Cálculo Avanzado de Procesos Químicos. Tema 5.
c programa principal: shooting method (usuario)
c subrutinas:
c rkutta(FUNCT,n,p,t,y,tmax,dtpt,ipnt,cay,y1,dydt)(Riggs,1994)
c FUNCT(n,t,y,dydt) (usuario)
c secant(F,erlim,icmax,dxmax,iprint,x1) (Riggs 1994)
c F(x,fv) (usuario).
c
c*****
c OBJETIVOS GENERALES:
c -----
c 1) Este programa integra una ecuación ODE-BVP con dos condiciones
c frontera constantes mediante el método del disparo transformandolo en
c un sistema ODE_IVP de 1ºorden.
c 2) la condición límite en xo se utiliza como condición inicial de y1
c la condición inicial de y2 se SUPONE
c la condición límite en x1 se esa para comprobar que la condición
c inicial supuesta para y2 permite la integración correcta.
c 3) Para integrar el sistema ODE-IVP se usa una subrutina que contiene un
c algoritmo de Runge-Kutta de 4º orden con los argumentos: rkutta
c (FUNCT,n,p,t,y,tmax,dtpt,ipnt,cay, y1,dydt) siendo FUNC la subrutina
c donde se almacena el sistema de ODE-IVP: subroutine FUNCT (n,t,y,dydt).
c 4) Para determinar que la condición inicial supuesta es corecta se
c utiliza un método iterativo creando una función : Fv= Y1(1)teorico -
c Y1(1)numeric.
c Si la función tiene un valor mayor que el del error máximo permitido
c se modifica la conidición inicial de y2 y se vuelve a realizar la
c integración numérica del sistema ODE-IVP. Para llevar a cabo el proceso
c iterativo se ha usado el método de la secante en la subrutina:
c secant(F,erlim,icmax,dxmax,iprint,x)que necesita
c la subrutina F(x, fv) que contiene la función objetivo.
c
c OBJETIVOS DEL PROBLEMA EJEMPLO:
c -----
c El ejemplo a resolver: y''+y*y'+5=0 en el intervalo [0,1] con y(0)=0.0 y(1)=1
c El sistema creado es: y1'=y2 y1(0)=0.0
c y2'=- (y1*y2)-5.0 y2(0)=se comineza suponiendo 1.0 y se
c obtendrá mediante itraciones el valor que haga que y1(1)-1.0<error permitido.
c
c NOMENCLATURA:
c -----
c a) argumentos de la subrutina rkutta (Funct,
c n,p,t,y,tmax,dtpt,ipnt,cay,y1,dydt)
c Func: subrutina donde se almacenan las funciaones a evaluar.
c n: Entero. argumento de entrada. Número de ecuaciones del ssistema ODE-IVP
c p: máximo cambio en el valor de la función permitido. control del reero.
c t: variable independiente. como argumento de entrada el valor inicial de t
c y= vector de variables dependientes del sistema IVP a resolver (incógnitas).
c como argumento d entrad la condición inicial.
c tmax: valor final del intervalo de integración. Argumento de entrada.
c dtpt: tamaño de paso de la slida de resultados.

```



```

c      ipnt: Entero. señal para indicar si se desea o no la impresión de resultados
c      cay:  vector de evaluaciones de la función del algoritmo de RK
c      y1:   vector de variables dependientes dentro de la subrutina de RK
c      dydt: vector de funciones.
c
c b) argumentos de la subrutina FUNCT(n,t,y,dydt)
c     ya comentados en apartado a)
c
c c) argumentos de la subrutina secant(F,erlim, icmax,dxmax,iprint,x1)
c     F:      subrutina que contiene la función cuya raíz se desea obtener
c     erlim:  error máximo permitido
c     icmax:  número máximo de iteraciones.
c     dxmax:  máximo cambio permitido de la variable x en cada iteración.
c     iprint: Entero, señal para indicar si se desea o no la impresión de resultados
c     x1:     variable.
c
c d) argumentos de la subrutina F(x,fv)
c     x:      variable .
c     fv:     función a evaluar.
c
*****
c
c     declaración de variables en el programa principal
c     -----
c     implicit real*8 (a-h, o-z)
c     dimension y(2), cay(2), y1(2), dydt(2)
c     common /one/rcay,d
c     external F
c
c     open (unit=12,file="bomba")
c
c     parámetros del método de la secante
c     -----
c     erlim=1.d-6
c     icmax=100
c     dxmax=1.
c     iprint=1
c
c     primer valor iterativo para z(0)
c     -----
c     x=1.
c
c     llamada al método de la secante
c     -----
c     call secant (F, erlim, icmax, dxmax, iprint, x)
c     write (12,*)
c     stop
c     end
c
*****
c
*****
c
c     SUBROUTINE F(x, fv)
c     -----
c     ---
c     COMENTARIOS:
c     Esta subrutina contiene la función que se intenta hacer cero mediante
c     el
c     método de la secante: FV. En este caso para generar esta función es

```

```

c      preciso
c      integrar un sistema de 2 ODE-IVP de primer orden.El valor numerico de la
c      variable y1 en el último punto de integración menos el valor teorico que
c      debe tener es la función buscada.
c      -----
c      implicit real*8 (a-h, o-z)
c      dimension y(2), cay(2), y1(2), dydt(2)
c      external FUNCT

c      especificación de los datos de entrada para el integrador Runge-Kutta
c      -----

c      N=2
c      tmax=1.
c      dtpnt=.1
c      ipnt=1
c      p=10.

c      Especificamos condiciones iniciales
c      -----
c
c      t=0.0
c      y(1)=0.0

c      valor supuesto (objetivo del proceso itrativo):
c      -----
c      y(2)=x

c      Llamada al integrador Runge-Kutta
c      -----
c      call rkutta (FUNCT,n,p,t,y,tmax, dtpnt, ipnt, cay, y1, dydt)

c      creamos la función sobre la que aplicamos el método de la secante
c      -----
c      FV=y(1)-1.

c      return
c      end
C*****

c      SUBROUTINE FUNCT      (n,t,y,dydt)
c      -----
c      COMENTARIOS:
c      En esta subrutina se contienen las funciones que se han de evaluar en
c      el algoritmo de Runge Kutta para la integración de un sistema de ODE-IVP.

c      implicit real*8 (a-h, o-z)
c      dimension y(2), dydt(2)
c      common /one/rcay,d

c      dydt(1)=y(2)
c      dydt(2)=-y(1)*y(2)-5.
c      eturn
c      end

c *****
c      SUBROUTINE SECANT (F, erlim, icmax, dxmax, iprint,x1)
c      -----
c      COMENTARIOS:
c      Esta subrutina aplica el método de la secante para encontrar la solu-

```

```

c      ción a una ecuación algebraica no lineal.
c      La ecación a resolver se encuentra en la subrutina F.
      implicit real*8 (a-h, o-z)

      external F
         write (*,*) 'hola7'
      ic=0
c      COMIENZO DEL BUCLE ITERATIVO

10     ic=ic+1

      call F(x1,F1)
c      Inicialización:

      if (ic.eq.1) x0=x1*0.95
      if (ic.eq.1) call F(x0,F0)

c      Aplicación de la aproximación de la secante:
      dx=-F1*(x1-x0)/(F1-F0)

      if (dabs(dx).GT.dxmax) dx=dxmax*dabs(dx)/dx
      xc=x1+dx

c      Transferencia de valores del punto i-a al i:
      x0=x1
      F0=F1
      x1=xc
c      Impresión de resultados intemedios:
110    if (iprint.eq.1) write (12,110) ic,xc,F1
      format (5x, 'ic=',i3,5x,'x=',f7.5,5x,'F(x)=',d10.3)

c      chequeo del número de iteaciones:
22     if (ic.gt.icmax) write (6,22)
      format('el metodo de la secante no converge')

      if (ic.gt.icmax) stop

c      chequeo de la convergencia
      if (abs(dx).gt.erlim) go to 10
      return
      end
c *****

```

OBTENCIÓN VALORES  $f(0)$  Y  $f(1)$ :

X= .00000D+00	Y= .0000000D+00	.1000000D+01
X= .10000D+00	Y= .7488977D-01	.4971958D+00
X= .20000D+00	Y= .9946972D-01	-.4947122D-02
X= .30000D+00	Y= .7405465D-01	-.5027415D+00
X= .40000D+00	Y= -.1051573D-02	-.1000000D+01
X= .50000D+00	Y= -.1262937D+00	-.1507975D+01
X= .60000D+00	Y= -.3036400D+00	-.2046098D+01
X= .70000D+00	Y= -.5375037D+00	-.2644455D+01
X= .80000D+00	Y= -.8360571D+00	-.3349495D+01
X= .90000D+00	Y= -.1213400D+01	-.4236170D+01
X= .10000D+01	<b>Y= -.1693547D+01</b>	-.5434051D+01

X= .00000D+00	Y= .0000000D+00	.9500000D+00
X= .10000D+00	Y= .6990286D-01	.4475568D+00
X= .20000D+00	Y= .8954908D-01	-.5400954D-01
X= .30000D+00	Y= .5923767D-01	-.5517541D+00
X= .40000D+00	Y= -.2081645D-01	-.1050216D+01
X= .50000D+00	Y= -.1512217D+00	-.1561434D+01
X= .60000D+00	Y= -.3341976D+00	-.2105844D+01
X= .70000D+00	Y= -.5745315D+00	-.2715043D+01
X= .80000D+00	Y= -.8809675D+00	-.3438052D+01
X= .90000D+00	Y= -.1268531D+01	-.4354585D+01
X= .10000D+01	<b>Y= -.1762845D+01</b>	-.5603812D+01

ic= 1 x=2.00000 F(x)= -.269D+01

X= .00000D+00	Y= .0000000D+00	<b>.2000000D+01</b>
X= .10000D+00	Y= .1744541D+00	.1484783D+01
X= .20000D+00	Y= .2965144D+00	.9560396D+00
X= .30000D+00	Y= .3658645D+00	.4330716D+00
X= .40000D+00	Y= .3836817D+00	-.7360500D-01
X= .50000D+00	Y= .3517668D+00	-.5618672D+00
X= .60000D+00	Y= .2717564D+00	-.1036923D+01
X= .70000D+00	Y= .1444409D+00	-.1510429D+01
X= .80000D+00	Y= -.3087219D-01	-.2000474D+01
X= .90000D+00	Y= -.2570586D+00	-.2533037D+01
X= .10000D+01	<b>Y= -.5401340D+00</b>	-.3145869D+01

ic= 2 x=3.00000 F(x)= -.154D+01

X= .00000D+00	Y= .0000000D+00	<b>.3000000D+01</b>
X= .10000D+00	Y= .2736887D+00	.2462547D+01
X= .20000D+00	Y= .4909952D+00	.1879462D+01
X= .30000D+00	Y= .6493537D+00	.1289170D+01
X= .40000D+00	Y= .7495178D+00	.7191117D+00
X= .50000D+00	Y= .7943708D+00	.1844920D+00
X= .60000D+00	Y= .7877558D+00	-.3102708D+00
X= .70000D+00	Y= .7335246D+00	-.7690170D+00
X= .80000D+00	Y= .6348332D+00	-.1201493D+01
X= .90000D+00	Y= .4936353D+00	-.1621824D+01
X= .10000D+01	<b>Y= .3102749D+00</b>	-.2048121D+01

ic= 3 x=3.81105 F(x)= -.690D+00

X= .00000D+00	Y= .0000000D+00	<b>.3811051D+01</b>
X= .10000D+00	Y= .3539323D+00	.3248417D+01
X= .20000D+00	Y= .6468873D+00	.2601820D+01
X= .30000D+00	Y= .8734572D+00	.1929587D+01
X= .40000D+00	Y= .1033480D+01	.1277011D+01
X= .50000D+00	Y= .1130467D+01	.6720765D+00
X= .60000D+00	Y= .1169897D+01	.1267317D+00
X= .70000D+00	Y= .1157803D+01	-.3591869D+00
X= .80000D+00	Y= .1099778D+01	-.7936839D+00
X= .90000D+00	Y= .1000365D+01	-.1189290D+01
X= .10000D+01	<b>Y= .8627158D+00</b>	-.1561063D+01

ic= 4 x=4.01260 F(x)= -.137D+00

X= .00000D+00	Y= .0000000D+00	<b>.4012601D+01</b>
X= .10000D+00	Y= .3738399D+00	.3442723D+01
X= .20000D+00	Y= .6853753D+00	.2777732D+01
X= .30000D+00	Y= .9283668D+00	.2081669D+01
X= .40000D+00	Y= .1102377D+01	.1404984D+01
X= .50000D+00	Y= .1211083D+01	.7792432D+00
X= .60000D+00	Y= .1260402D+01	.2183050D+00
X= .70000D+00	Y= .1256931D+01	-.2773187D+00
X= .80000D+00	Y= .1206854D+01	-.7156235D+00
X= .90000D+00	Y= .1115295D+01	-.1109313D+01
X= .10000D+01	<b>Y= .9859765D+00</b>	-.1473445D+01

ic= 5 x=4.03553 F(x)= -.140D-01

X= .00000D+00	Y= .0000000D+00	<b>.4035532D+01</b>
X= .10000D+00	Y= .3761040D+00	.3464805D+01
X= .20000D+00	Y= .6897478D+00	.2797656D+01
X= .30000D+00	Y= .9345945D+00	.2098798D+01
X= .40000D+00	Y= .1110175D+01	.1419288D+01
X= .50000D+00	Y= .1220184D+01	.7911093D+00
X= .60000D+00	Y= .1270593D+01	.2283386D+00
X= .70000D+00	Y= .1268062D+01	-.2684409D+00
X= .80000D+00	Y= .1218843D+01	-.7072336D+00
X= .90000D+00	Y= .1128125D+01	-.1100774D+01
X= .10000D+01	<b>Y= .9996940D+00</b>	-.1464133D+01

ic= 6 x=4.03604 F(x)= -.306D-03

X= .00000D+00	Y= .0000000D+00	<b>.4036043D+01</b>
X= .10000D+00	Y= .3761545D+00	.3465297D+01
X= .20000D+00	Y= .6898454D+00	.2798100D+01
X= .30000D+00	Y= .9347334D+00	.2099180D+01
X= .40000D+00	Y= .1110349D+01	.1419607D+01
X= .50000D+00	Y= .1220387D+01	.7913733D+00
X= .60000D+00	Y= .1270821D+01	.2285616D+00
X= .70000D+00	Y= .1268310D+01	-.2682439D+00
X= .80000D+00	Y= .1219110D+01	-.7070475D+00
X= .90000D+00	Y= .1128410D+01	-.1100585D+01
X= .10000D+01	<b>Y= .9999993D+00</b>	-.1463927D+01

ic= 7 x=4.03604 F(x)= -.692D-06

X= .00000D+00	<b>Y= .0000000D+00</b>	<b>.4036044D+01</b>
X= .10000D+00	<b>Y= .3761546D+00</b>	.3465298D+01
X= .20000D+00	<b>Y= .6898456D+00</b>	.2798101D+01
X= .30000D+00	<b>Y= .9347337D+00</b>	.2099181D+01
X= .40000D+00	<b>Y= .1110349D+01</b>	.1419607D+01
X= .50000D+00	<b>Y= .1220388D+01</b>	.7913739D+00
X= .60000D+00	<b>Y= .1270821D+01</b>	.2285621D+00
X= .70000D+00	<b>Y= .1268310D+01</b>	-.2682435D+00
X= .80000D+00	<b>Y= .1219110D+01</b>	-.7070471D+00
X= .90000D+00	<b>Y= .1128411D+01</b>	-.1100584D+01
X= .10000D+01	<b>Y= .1000000D+01</b>	-.1463926D+01

ic= 8 x=4.03604 F(x)= -.342D-10

## 5. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

Textos que desarrollan los métodos numéricos presentados a nivel de usuario con ejemplos de ingeniería química:

**Davis, M. E.;** *Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos* CAPÍTULO 2. Compañía Editorial Continental de C. V. México, México D.F. 1990.

**Riggs, J. B.;** *An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers* CAPÍTULO 5. Texas Tech University Press, Lubbock, Texas. 1994.

**Walas, S. M.;** *Modeling with Differential Equations in Chemical Engineering*. Ed Butterworth-Heinemann, Stoneham, MA, USA. 1991.

Textos que desarrollan los métodos numéricos presentados a nivel de usuario con ejemplos generales:

**Gerald, C. F., Wheatley P. O.;** *Applied Numerical Analysis*. CAPÍTULO 6. Addison-Wesley Publishing Company. 1994.

**Mathews, J. H., Fink K. D.;** *Métodos Numéricos con MATLAB*. Prentice Hall Iberia, Madrid. 2000.