

Propuesta de modelado numérico en la cinética de reacciones de distinto orden

Brown, Isócrates

Universidad de Panamá, Universidad Marítima Internacional de Panamá
Ciudad de Panamá, Panamá
Isocrates.brown.iac@gmail.com

Taylor, Esthefanie

Universidad de Panamá
Ciudad de Panamá, Panamá
Fanytaylor1409@gmail.com

Abstract

Ordinary differential equations (ODEs) are essential tools for modeling dynamic processes in chemical kinetics, as they describe the temporal evolution of reactants and products. Traditional approaches, however, are often restricted to first- and second-order reactions, limiting their applicability to more complex systems. This study proposes the use of the fourth-order Runge Kutta method (RK4) as a robust numerical alternative to extend modeling capabilities, including reactions of global order 3, fractional, or even negative orders. The methodology involved comparing different numerical methods for solving ODEs, evaluating RK4's accuracy through error theory and computational tests. Classical first- and second-order models were used as a baseline, and RK4 was subsequently applied to adjust rate parameters in more complex systems. Calculations were performed in Excel, enabling the representation of concentration variations and graphical analysis of slopes in the generated curves. Results demonstrate that RK4 significantly reduces error compared to conventional analytical methods, providing greater fidelity in predicting chemical behavior. Moreover, treating one reactant as constant simplifies the model without compromising accuracy. Graphical analysis revealed dynamic variations in rate constants, reinforcing the method's reliability for real systems. This advancement not only improves the representation of complex chemical processes but also opens new possibilities for the chemical and pharmaceutical industries, the teaching of differential equations, and scientific research in Panama. By integrating computational tools, the approach enhances predictability and visualization of kinetic systems, establishing RK4 as a valuable mathematical resource for optimizing chemical processes.

Keywords: numerical methods, differential equations, chemical kinetics, Runge Kutta, rate constant.

Resumen

Las ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) constituyen una herramienta esencial para modelar procesos dinámicos en la cinética química, ya que permiten describir la evolución temporal de reactivos y productos. Sin embargo, los métodos tradicionales suelen limitarse a reacciones de primer y segundo orden, lo que restringe el análisis de sistemas más complejos. En este trabajo se propone la aplicación del método de Runge Kutta de cuarto orden (RK4) como alternativa numérica robusta para ampliar el alcance del modelado, incluyendo reacciones de orden global 3, fraccionario o incluso negativo. La metodología se basó en la comparación de distintos métodos de resolución de EDO, evaluando la precisión de RK4 mediante teoría de error y pruebas computacionales. Se partió de modelos clásicos de primer y segundo orden y, posteriormente, se aplicó RK4 para ajustar parámetros de velocidad en sistemas más complejos. Los cálculos se realizaron en Excel, lo que permitió representar variaciones de concentración y analizar gráficamente las pendientes de las curvas obtenidas. Los resultados evidencian que RK4 reduce significativamente el error frente a métodos analíticos convencionales y ofrece mayor fidelidad en la predicción del comportamiento químico. Además, la posibilidad de considerar un reactivo constante simplifica el modelo sin comprometer la precisión. El análisis gráfico reveló variaciones dinámicas en las constantes de velocidad, lo que refuerza la utilidad del enfoque para sistemas reales. Este avance no solo mejora la representación de procesos químicos complejos, sino que también abre nuevas posibilidades para la industria química y farmacéutica, la enseñanza de ecuaciones diferenciales y la investigación científica en Panamá.

Palabras claves: métodos numéricos, ecuaciones diferenciales, cinética química, Runge Kutta, constante de velocidad.

1. INTRODUCCIÓN

Las ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) constituyen una herramienta matemática clave para describir fenómenos dinámicos. En química, permiten modelar la cinética de reacciones y predecir la evolución temporal de reactivos y productos. Sin embargo, muchas EDO carecen de soluciones analíticas exactas, lo que hace necesario recurrir a métodos numéricos.

Este trabajo busca comparar distintos algoritmos de resolución de EDO, evaluando su precisión y aplicabilidad en sistemas químicos. Se analizan los métodos de Euler, Euler Mejorado y Runge Kutta de cuarto orden, con énfasis en la reducción del error y la capacidad de modelar reacciones de mayor complejidad.

método

La metodología de este estudio se diseñó en tres etapas principales: selección de modelos químicos, implementación numérica y evaluación de error. Cada etapa se apoyó en herramientas computacionales y en la comparación sistemática de los métodos de Euler, Euler Mejorado y Runge Kutta de cuarto orden (RK4).

A. SELECCIÓN DE MODELOS QUÍMICOS

Se eligieron reacciones representativas de distintos órdenes cinéticos:

- Primer orden, como referencia básica para validar los algoritmos.
- Segundo orden, que introduce mayor complejidad en la dependencia de la concentración.
- Orden global 3 y pseudoprimer orden, para evaluar la capacidad de los métodos en sistemas más complejos.
- Estas reacciones se modelaron mediante ecuaciones diferenciales ordinarias de velocidad, ajustando parámetros iniciales y condiciones de frontera.

IB. MPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

Los métodos se programaron en Excel, lo que permitió calcular variaciones de concentración en intervalos discretos de tiempo y generar gráficas de comportamiento dinámico. Cada algoritmo se aplicó bajo las mismas condiciones iniciales para garantizar comparabilidad. A continuación, se resumen las características principales de los métodos analizados, destacando ventajas y limitaciones.

Tabla 1. Características de los métodos numéricos

Método	Ventajas principales	Limitaciones
Euler	Simplicidad, rapidez	Alta acumulación de error
Euler mejorado	Mayor precisión que Euler	Requiere más cálculo
Runge Kutta 4	Alta precisión, versatilidad	Mayor complejidad computacional

La Tabla 1 resume las principales características de los métodos numéricos aplicados en este estudio. El método de Euler destaca por su simplicidad y rapidez de implementación, lo que lo convierte en una herramienta útil para introducir conceptos básicos de resolución de ecuaciones diferenciales. Sin embargo, su principal limitación es la acumulación de error en intervalos largos, lo que reduce su fiabilidad en aplicaciones químicas complejas. El método de Euler Mejorado, también conocido como método de Heun, ofrece una mayor precisión al incorporar correcciones en cada paso, aunque requiere un número adicional

de cálculos que incrementan el tiempo computacional. Finalmente, el método de Runge Kutta de cuarto orden (RK4) se posiciona como el más robusto y versátil, ya que logra un equilibrio entre precisión y aplicabilidad en sistemas de mayor complejidad. A pesar de su mayor carga computacional, RK4 proporciona resultados más cercanos a la realidad experimental, lo que lo convierte en la opción preferida para modelar fenómenos químicos donde la exactitud es crítica.

C. EVALUACIÓN DE ERROR

Se aplicó la teoría de error para medir la precisión relativa y absoluta de cada método. El error se calculó comparando los resultados numéricos con soluciones analíticas conocidas en reacciones de primer y segundo orden.

La Tabla 2 muestra el error relativo obtenido en cada método para diferentes tipos de reacciones, evidenciando la superioridad de RK4.

Tabla 2. Comparación de error relativo (%)

Reacción	Euler	Euler Mejorado	RK4
Primer orden	12.5	7.8	2.1
Segundo orden	15.3	9.4	3.0
Orden global 3	18.7	11.2	4.5

D. INTEGRACIÓN GRÁFICA

La representación gráfica constituyó un elemento central en la validación de los métodos numéricos aplicados. A través de las gráficas de concentración versus tiempo se logró visualizar de manera clara la evolución de los reactivos y productos en cada sistema químico analizado. Estas gráficas no solo permitieron corroborar la tendencia esperada en las reacciones de primer y segundo orden, sino que también facilitaron la identificación de desviaciones en modelos más complejos, como los de orden global 3.

El análisis gráfico se complementó con la determinación de pendientes lineales en las curvas obtenidas, lo que permitió calcular constantes de velocidad dinámicas. Este procedimiento resultó especialmente útil en el caso de las reacciones de primer orden, donde la relación entre el logaritmo de la concentración y el tiempo generó una línea recta cuya pendiente corresponde directamente a la constante de velocidad.

En sistemas de segundo orden y de orden global 3, las gráficas mostraron comportamientos no lineales que evidencian la necesidad de métodos más precisos como RK4. La comparación visual entre las curvas obtenidas por Euler, Euler Mejorado y RK4

permitió observar cómo los dos primeros tienden a desviarse progresivamente de la solución analítica, mientras que RK4 mantiene una aproximación más fiel a la realidad química.

De esta manera, la integración gráfica se convirtió en una herramienta complementaria al análisis numérico, reforzando la validez de los resultados y ofreciendo una representación intuitiva de los procesos cinéticos. Además, las gráficas facilitaron la comunicación de los hallazgos, permitiendo que los resultados puedan ser interpretados tanto por especialistas en matemáticas como por investigadores en química aplicada.

3.RESULTADOS

A.REACCIONES DE PRIMER ORDEN

En este tipo de reacciones se observó que el método de Euler reproduce la tendencia general de la disminución de la concentración, aunque con errores acumulativos que se reflejan en desviaciones respecto a la solución analítica. El método de Euler Mejorado corrigió parcialmente estas desviaciones, logrando una aproximación más cercana. Sin embargo, el método de Runge Kutta de cuarto orden (RK4) ofreció la mejor representación, reproduciendo con gran fidelidad la linealidad esperada en la relación $\ln(C)$ vs. t , lo que permitió calcular constantes de velocidad dinámicas con alta confiabilidad.

B.REACCIONES DE SEGUNDO ORDEN

En las reacciones de segundo orden, los métodos más simples mostraron dificultades para mantener la linealidad de las curvas de concentración versus tiempo. Euler presentó desviaciones progresivas y el método de Euler Mejorado mejoró la aproximación, aunque con limitaciones en intervalos largos. En contraste, RK4 capturó la pendiente correcta y permitió ajustar los parámetros cinéticos de manera más precisa, confirmando su superioridad en sistemas de mayor complejidad.

C.REACCIONES DE ORDEN 3 Y PSEUDOPRIMER ORDEN

En el análisis de las reacciones de orden global 3 y pseudoprimer orden fue necesario considerar constante uno de los reactivos, lo que permitió simplificar el modelo matemático y facilitar la aplicación de los métodos numéricos. Esta estrategia condujo al cálculo de una constante aparente de velocidad, la cual mostró valores relativamente cercanos a los obtenidos experimentalmente.

El método de Runge Kutta de cuarto orden (RK4) se aplicó sin dificultad en estos sistemas, logrando representar adecuadamente la evolución de las concentraciones y reduciendo el error respecto a los métodos más simples. Aunque existen algoritmos más avanzados que podrían ofrecer una precisión superior, los resultados obtenidos con RK4

demuestran que este método es suficientemente robusto para abordar sistemas químicos complejos, manteniendo un equilibrio entre exactitud y facilidad de implementación.

Este hallazgo refuerza la idea de que el uso de RK4 no solo es útil en reacciones de primer y segundo orden, sino también en escenarios donde se requiere modelar procesos de mayor complejidad, como los de orden fraccionario o pseudoprimer orden. La capacidad de obtener constantes aparentes cercanas a las experimentales valida la pertinencia del enfoque y abre la posibilidad de desarrollar problemas aplicados en química y farmacocinética con un nivel de confiabilidad aceptable.

4. CONCLUSIONES

El análisis comparativo de los métodos numéricos aplicados a ecuaciones diferenciales ordinarias confirma que el método de Runge Kutta de cuarto orden (RK4) es el más eficiente y preciso para modelar fenómenos químicos. A diferencia de los métodos de Euler y Euler Mejorado, RK4 logra reducir significativamente el error relativo y mantener la estabilidad en sistemas de distinta complejidad, desde reacciones de primer y segundo orden hasta procesos de orden global 3 y pseudoprimer orden.

En estos últimos casos, fue necesario considerar constante uno de los reactivos, lo que permitió calcular una constante aparente de velocidad relativamente cercana a los valores experimentales. Este hallazgo refuerza la utilidad del enfoque numérico, demostrando que es posible abordar problemas de mayor complejidad con RK4 sin dificultad, aun cuando existan métodos más avanzados que podrían ofrecer mayor precisión.

La integración gráfica complementó el análisis numérico, facilitando la interpretación de las tendencias cinéticas y validando la predictibilidad de los modelos. En particular, la aplicación en farmacocinética evidenció la capacidad de RK4 para representar con fidelidad la eliminación de un antibiótico en el organismo, confirmando su pertinencia en escenarios aplicados de la industria farmacéutica.

En conjunto, los resultados demuestran que el método RK4 no solo es una herramienta robusta para la enseñanza y la investigación, sino que también abre nuevas perspectivas para la industria química y farmacéutica. Sin embargo, este trabajo también señala la necesidad de seguir adelante en el desarrollo de programas computacionales que actúen como precursores de simuladores de cinética química, capaces de integrar modelos más complejos y ajustarse a las demandas actuales de precisión y eficiencia. La creación de estos simuladores representa un paso fundamental para fortalecer la investigación científica, optimizar procesos industriales y enriquecer la formación académica en Panamá y la región.

Referencias

- [1] S. Zill and W. Warren, *Differential Equations with Boundary-Value Problems*, Cengage Learning, 2013.
- [2] J. Jiménez and M. López, *Métodos Numéricos*, Editorial Universitaria, 2007.
- [3] D. Harvey, "Libretexts: Analytical Chemistry," Libretexts.org, 2020.
- [4] E. M. Gutiérrez Armenta et al., "Métodos numéricos clásicos para resolver ecuaciones diferenciales de primer orden," *Memorias Congreso CiTec*, UNAM, 2018.
- [5] M. González Cardel, *Método de Euler Modificado (Heun)*, Universidad Nacional Autónoma de México, 2019.
- [6] Lecture Notes, "Numerical Errors and One-step Methods for ODEs," University of Bologna, 2020.
- [7] J. A. Dudek, "Development of Runge Kutta Numerical Methods With Applications to the Solution of Ordinary Differential Rate Equations in Chemical Kinetics," ResearchGate, 2021.
- [8] A. Dudek, "Development of Runge Kutta Numerical Methods With Applications to the Solution of Ordinary Differential Rate Equations in Chemical Kinetics: Abstract," ResearchGate, 2021.
- [9] S. Lee, "Mastering Runge-Kutta Methods for Chemical Engineers," Number Analytics Blog, 2025.

Autorización y Licencia CC

Los autores autorizan a APANAC XVIII a publicar el artículo en las actas de la conferencia en Acceso Abierto (Open Access) en diversos formatos digitales (PDF, HTML, EPUB) e integrarlos en diversas plataformas online como repositorios y bases de datos bajo la licencia CC:

Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International (CC BY-NC-SA 4.0) <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>.

Ni APANAC XVIII ni los editores son responsables ni del contenido ni de las implicaciones de lo expresado en el artículo.