

PROGRAMA DE CURSO

MÉTODOS MATEMÁTICOS PARA PROCESOS

A. Antecedentes generales del curso:

Departamento	Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales					
Nombre del curso	Métodos matemáticos para Procesos	Código	IQ4112	Créditos	6	
Nombre del curso en inglés	<i>Mathematical Methods for Process Engineering</i>					
Horas semanales	Docencia	3	Auxiliares	1,5	Trabajo personal	5,5
Carácter del curso	Obligatorio	X		Electivo		
Requisitos	MA3403: Probabilidades y estadística, IQ3311: Análisis de procesos/IQ3312: Fenómenos de transporte					

B. Propósito del curso:

El curso tiene como propósito que los y las estudiantes simulen numéricamente modelos matemáticos que sirvan para diseñar, operar o gestionar procesos o fenómenos químicos y biotecnológicos. Para ello deben seleccionar algoritmos o métodos apropiados en función de las características matemáticas de los modelos y las restricciones u objetivos del proceso o fenómeno. Los y las estudiantes podrán utilizar implementaciones computacionales ya disponibles en paquetes de software libre o comercial así como también realizar sus propias implementaciones en caso de que sea necesario. Se espera que los y las estudiantes puedan evaluar los resultados de sus simulaciones en cuanto a su correctitud numérica, en cuanto a su relación con el modelo matemático y con el proceso o fenómeno en estudio.

El curso tributa a las siguientes competencias específicas (CE) y genéricas (CG):

CE2: Modelar y simular procesos industriales, aplicando herramientas de las ciencias, a fin de analizar la prefactibilidad técnica de los procesos.

CE6: Optimizar y adaptar la operación de procesos industriales frente a nuevos escenarios productivos, considerando modificación de materias primas, normativas, y aspectos de sustentabilidad de procesos.

CG1: Comunicación académica y profesional

Comunicar en español de forma estratégica, clara y eficaz, tanto en modalidad oral como escrita, puntos de vista, propuestas de proyectos y resultados de investigación fundamentados, en situaciones de comunicación compleja, en ambientes sociales, académicos y profesionales.

CG2: Comunicación en inglés

Leer y escuchar de manera comprensiva en inglés una variedad de textos e informaciones sobre temas concretos o abstractos, comunicando experiencias y opiniones, adecuándose a diferentes contextos y a las características de la audiencia.

CG4: Trabajo en equipo

Trabajar en equipo, de forma estratégica y colaborativa, en diversas actividades formativas, a partir de la autogestión de sí mismo y de la relación con el otro, interactuando con los demás en diversos roles: de líder, colaborador u otros, según requerimientos u objetivos del trabajo, sin discriminar por género u otra razón.

C. Resultados de aprendizaje:

Competencias específicas	Resultados de aprendizaje
CE2	RA1: Selecciona herramientas matemáticas y computacionales apropiadas para efectuar simulaciones numéricas de procesos en base al tipo de modelo matemático que describe diversos procesos.
CE2, CE6	RA2: Simula numéricamente modelos matemáticos del área de Ingeniería de Procesos, analizando la pertinencia computacional, matemática, física, química y biológica de los resultados en diversos ejemplos.
CE2	RA3: Implementa computacionalmente algoritmos de solución numérica para la resolución de problemas de procesos, identificando sus fortalezas y debilidades.
	RA4: Selecciona los parámetros de control de los algoritmos de solución numérica, considerando que su aplicación sea la correcta en función del modelo y del fenómeno que representa.
CE6	RA5: Combina apropiadamente distintos algoritmos numéricos a fin de resolver problemas de mayor complejidad, enfatizando que las partes funcionen de manera armónica.
	RA6: Resuelve el problema de ajuste de parámetros de modelos lineales o no lineales de proceso, mediante el uso de herramientas de optimización, evaluando sus resultados tanto desde un punto de vista estadístico, como del de la ingeniería de procesos.
Competencias genéricas	Resultados de aprendizaje
CG1	RA7: Elabora reportes breves sobre la implementación de algoritmos, donde argumenta de manera efectiva sobre el uso y desarrollo de dicha herramienta, analizando con precisión los resultados obtenidos.
CG1, CG2	RA8: Lee, en inglés y español, diversa literatura científica sobre la implementación de ciertas técnicas matemáticas, extrayendo y sintetizando información aplicable a la ingeniería de procesos.
CG4	RA9: Ejecuta con su equipo diversas actividades académicas, analizando y discutiendo, en un clima de respeto, la implementación y el resultado de las simulaciones, cuyos resultados plasma en los reportes respectivos.

D. Unidades temáticas:

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
1	RA1, RA8	Métodos matemáticos en el contexto de la química y la biotecnología	1 semana
Contenidos		Indicador de logro	
1.1. Modelos matemáticos, noción de método matemático y motivación. 1.2. Aplicaciones en el área de la Ingeniería Química y Biotecnología. 1.3. Lenguajes de programación y bibliotecas. Software propietario, libre y de código abierto. 1.4. Buenas prácticas de programación. 1.5. Representación de números. 1.6. Definiciones de error, fuentes de error, sesgo e incertidumbre, error de truncamiento y redondeo. 1.7. Concepto de estabilidad numérica. 1.8. Criterios de detención.		El/la estudiante: <ol style="list-style-type: none"> 1. Analiza la relevancia de la simulación computacional y solución numérica para resolver problemas matemáticos, considerando una visión general sobre la importancia de estas áreas. 2. Identifica y analiza ejemplos donde se utilizan conceptos generales asociados al área de simulación computacional, tales como, error de truncamiento, error de redondeo, criterios de detención, entre otros. 3. Lee en inglés y español textos de diversa naturaleza sobre métodos matemáticos y simulación computacional, cuya información aplica a ejemplos diversos. 	
Bibliografía de la unidad		[Chapra, capítulos 1,2 y 3]	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
2	RA1, RA2, RA3, RA4, RA5, RA7, RA9	Solución de sistemas algebraicos	4 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>2.1. Breve revisión de conceptos generales de álgebra lineal. Existencia y unicidad de solución.</p> <p>2.2. Descomposición LU, inversión de matrices, determinante, norma y rango, submatrices.</p> <p>2.3. Método de eliminación de Gauss, Método de Gauss Jordan, método de sustitución de Gauss-Seidel, Método de Jacobi.</p> <p>2.4. Aplicaciones: Modelamiento de sistemas de separación, análisis de flujos metabólicos (MFA).</p> <p>2.5. Ecuaciones no lineales: existencia y unicidad de solución.</p> <p>2.6. Métodos iterativos, series de Taylor.</p> <p>2.7. Método de la secante, posición falsa y punto fijo.</p> <p>2.8. Método de <i>bracketing</i> y de bisección.</p> <p>2.9. Método de Newton.</p> <p>2.10. Extensión a sistemas de ecuaciones no lineales simultáneas: método de Newton, Cuasi-Newton y otros.</p> <p>2.11. Aplicación: Estudio de flujo laminar, modelamiento del estado estacionario de un reactor de polimerización condensado.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> Determina el impacto que tienen las características de un modelo lineal en los procesos o fenómenos que representa. Implementa algoritmos para la solución de sistemas de ecuaciones lineales y no lineales, determinando sus ventajas y limitaciones. Resuelve sistemas de ecuaciones no lineales, analizando y utilizando algoritmos apropiados según la naturaleza del problema. Selecciona y aplica algoritmos de solución de sistemas algebraicos para la resolución de problemas en el área de ingeniería de procesos. Trabaja con su equipo en diversas tareas, cumpliendo con los plazos solicitados. Produce reportes breves, claros y coherentes, sobre diversas tareas y actividades académicas. 	
Bibliografía de la unidad		[Chapra, capítulos 5, 6, 9, 10 y 11]	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
3	RA1, RA2, RA3, RA4, RA5, RA7, RA8, RA9	Optimización, interpolación y algoritmos inspirados en sistemas naturales	4 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>3.1. Introducción a la optimización multidimensional, utilizando métodos heurísticos o inspirados en la naturaleza: algoritmos genéticos y programación genética, simulated annealing, búsqueda tabú, colonias de hormigas.</p> <p>3.2. Algoritmo genético (GA), algoritmo básico, función de fitness, algoritmos de selección y operadores genéticos. Diferencia con programación genética.</p> <p>3.3. Algoritmo de <i>Simulated Annealing</i> (SA), temperatura, probabilidad de transición, recocido.</p> <p>3.4. Desempeño de los algoritmos GA y SA versus métodos basados en gradiente.</p> <p>3.5. Interpolación polinomial de Newton, polinomios de Lagrange, interpolación inversa, spline.</p> <p>3.6. Introducción al uso de redes neuronales. Modelo perceptrón y modelos multicapas. Algoritmos básicos de entrenamiento.</p> <p>3.7. Aplicaciones: <i>docking</i> de un complejo proteína-proteína o ligando proteína. Uso de redes neuronales en Ingeniería Química.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Identifica y analiza características de los problemas de optimización e interpolación, relacionándolas con la ingeniería de procesos. 2. Analiza y utiliza algoritmos de optimización inspirados en fenómenos naturales. 3. Compara el desempeño de algoritmos de optimización basados en sistemas naturales y en gradiente. 4. Selecciona y aplica algoritmos de interpolación para la resolución de problemas de diversa naturaleza. 5. Identifica y determina el dominio de aplicación de modelos básicos de redes neuronales en la ingeniería de procesos. 6. Lee en inglés y español, de manera analítica, sobre tópicos de optimización, interpolación y algoritmos inspirados en sistemas naturales, integrando nuevos conocimientos a aspectos de su formación. 7. Ejecuta con su equipo diversas actividades académicas, analizando y discutiendo los resultados obtenidos. 8. Escribe, con concisión y precisión, textos breves donde reporta el uso de algoritmos seleccionados aplicables a diversos problemas de procesos. 	
Bibliografía de la unidad		[Chapra, capítulo 18]	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
4	RA1, RA2, RA3, RA4, RA5, RA7, RA9	Ecuaciones diferenciales ordinarias	3 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>4.1. Integración y derivación numérica, regla del trapecio, Simpson, cuadratura de Gauss, Newton-Cotes.</p> <p>4.2. Fórmulas de diferenciación, derivadas de datos irregularmente espaciados, derivadas de datos con errores.</p> <p>4.3. Problemas de valor inicial. Método de Euler: deducción y análisis. Métodos de Heun y Ralston.</p> <p>4.4. Métodos de Runge-Kutta con paso fijo. Métodos de Runge-Kutta con paso variable: control de paso, algoritmos de paso doble y de Fehlberg o Cash-karp.</p> <p>4.5. Análisis de estabilidad numérica y de propagación del error.</p> <p>4.6. Ecuaciones diferenciales stiff, definición y ejemplos.</p> <p>4.7. Análisis de estabilidad numérica para métodos explícitos.</p> <p>4.8. Métodos implícitos de Euler. Métodos implícitos de alto orden: Runge-Kutta generalizado, Bulirsch-Stoer, predictor-corrector.</p> <p>4.9. Otros tópicos: control de paso PI, salida densa, interpolación.</p> <p>4.10. Aplicaciones: simulación de un sistema de reactores CSTR, simulación de un reactor flujo pistón no isotérmico, simulación del perfil de temperatura óptima para la fermentación de Penicilina, entre otros.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> Identifica y analiza las características de los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, relacionándolas con la ingeniería de procesos. Selecciona y aplica algoritmos para resolver EDOs en base a las características del sistema de EDO. Resuelve EDOs asociados a problemas del área de ingeniería de procesos. Analiza los resultados de las simulaciones numéricas de modelos basados en ODEs desde un punto de vista numérico, matemático y de ingeniería de procesos. Utiliza conceptos extraídos de diversas lecturas en inglés y español, para la resolución de problemas en el contexto de la ingeniería de procesos. Reporta por escrito, de forma clara y coherente, los resultados de la selección y aplicación de algoritmos en el contexto de las ecuaciones diferenciales ordinarias. 	
Bibliografía de la unidad		[Chapra, capítulos 21, 22, 23, 25 y 26]	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
5	RA1, RA2, RA3, RA4, RA5, RA6 RA7, RA9	Ajuste de parámetros	1,5 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
5.1. Problema de ajuste de parámetros y su relación con la Ingeniería de Procesos. 5.2. Enfoque frecuentista versus enfoque bayesiano. 5.3. Regresión lineal, regresión lineal múltiple. Mínimos cuadrados. Regresión no lineal. 5.4. Intervalos de confianza y test de hipótesis. Significancia de parámetros. Análisis de varianza. 5.5. Aplicaciones: Ajuste de parámetros de una cinética de Michaelis-Menten.		El/la estudiante: <ol style="list-style-type: none"> 1. Aplica y analiza metodologías de ajuste de parámetros para modelos lineales y no lineales en problemas de ingeniería de proceso. 2. Ajusta parámetros en diversos problemas del área de ingeniería de procesos. 3. Utiliza herramientas estadísticas estándar para evaluar las características del ajuste de parámetros en el área de la ingeniería de procesos. 4. Evalúa las características del ajuste de parámetros en base a las características del modelo y del proceso del cual proviene. 5. Produce textos donde argumenta con precisión sobre el uso y desarrollo de herramientas estadísticas y matemáticas, analizando los resultados obtenidos. 	
Bibliografía de la Unidad		[Chapra, capítulo 17]	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
6	RA1, RA2, RA3, RA4, RA5, RA7, RA9	Ecuaciones diferenciales parciales	1,5 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
6.1. Definición y ejemplos, clasificación, tipos de condiciones de borde. 6.2. Método de diferencias finitas. Otros métodos: método de elementos finitos. 6.3. Método de diferencias finitas aplicado a las ecuaciones tipo Laplace. Solución en el caso lineal y no lineal 6.4. Ecuaciones parabólicas, métodos explícitos y condición de estabilidad. Métodos implícitos tipo Crank Nicolson. Método de líneas. 6.5. Ecuaciones hiperbólicas.		El/la estudiante: <ol style="list-style-type: none"> 1. Relaciona las características matemáticas de las ecuaciones diferenciales parciales con las características fenomenológicas, operacionales, entre otras, del proceso de donde provienen. 2. Selecciona metodologías para simular EDPs en base a sus características matemáticas. 3. Simula EDPs encontradas en el área de ingeniería de procesos. 4. Ejecuta diversas actividades, asumiendo una actitud de respeto por las opiniones de sus pares al analizar y dar propuestas de solución a diversos procesos. 	

<p>6.6. Paquetes de software libre y comercial.</p> <p>6.7. Aplicaciones: Simulación de un reactor tubular con dispersión, Reacción química y difusión, Solución de las ecuaciones de transferencia de calor.</p>	<p>5. Produce textos breves donde sobre justifica con precisión y claridad sobre el uso de herramientas matemáticas para la resolución de problemas.</p>
<p>Bibliografía de la Unidad</p>	<p>[Chapra, capítulos 29 y 30]</p>

E. Estrategias de enseñanza – aprendizaje:

El curso considera las siguientes estrategias:

- **Clases expositivas:** se plantean de manera sintética los principales conceptos a trabajar en las sesiones de cátedra; se busca que con estos aprendizajes, los y las estudiantes puedan utilizar dichos conocimientos en un nuevo contexto de aplicación, a través de la resolución de problemas.
- **Resolución de problemas:** a partir de los aprendizajes adquiridos, los y las estudiantes aplican sus conocimientos en la resolución de problemas que se les plantean como desafíos.
- **Uso de laboratorios computacionales:** se trabajará con softwares para implementar y aplicar algoritmos computacionales a problemas ilustrativos o relacionados con la ingeniería de procesos.

F. Estrategias de evaluación:

Al inicio del semestre se informará sobre la propuesta de evaluación, considerando los tipos, cantidad, ponderaciones y fechas asignadas.

El curso considera las siguientes instancias de evaluación:

- **Actividades individuales y/o grupales semanales:** en algunas de las actividades grupales o individuales deben entregar reportes y se evaluará la lectura de algunos textos que se le presenten
- **Controles:** evalúan conceptos esenciales sobre Métodos matemáticos para procesos.
- **Examen (1):** evalúa de manera integradora los aprendizajes del curso

G. Recursos bibliográficos:

Bibliografía obligatoria:

- [1] Chapra, S. y Canale R. (2011). Métodos numéricos para ingenieros. McGraw-Hill, Primera edición. Sexta edición.
- [2] Beers, K.J. (2006). *Numerical Methods for Chemical Engineering: Applications in MATLAB*. Cambridge University Press; Primera edición.
- [3] Constantinides, A. y Navid Mostoufi, N. (1999). *Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications*, Prentice Hall PTR.

Bibliografía complementaria:

- [4] Mathews, J.H., Fink, K.D. (2000). Métodos numéricos con MATLAB. Prentice Hall, Tercera edición.
- [5] Cutlip, M.B. y Shacham, M.S. (1999). *Problem solving in chemical engineering with numerical methods*. Prentice Hall, Primera edición.
- [6] Davis, M.E. (1984). *Numerical methods and modeling for chemical engineers*. Wiley, Primera edición.
- [7] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. y Flannery, B.P. (1992). *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press; Segunda edición.

H. Datos generales sobre elaboración y vigencia del programa de curso:

Vigencia desde:	Otoño, 2022
Elaborado por:	J. Cristian Salgado, Felipe Díaz Alvarado, Guillermo Valenzuela
Validado por:	CTD de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales (IQBM)
Revisado por:	Área de Gestión Curricular