

PROGRAMA DE CURSO

Código	Nombre			
IQ7412	MÉTODOS MATEMÁTICOS EN INGENIERÍA QUÍMICA			
Nombre en Inglés				
Mathematical Methods in Chemical Engineering				
SCT	Unidades Docentes	Horas de Cátedra	Horas Docencia Auxiliar	Horas de Trabajo Personal
6	10	3	0	7
Carácter del Curso			Requisitos	
Electivo Ingeniería Civil Química e Ingeniería Civil en Biotecnología			Autorización Programa	
Básico para el Programa de doctorado y Magíster en Ciencias de la Ingeniería mención Química y Biotecnología.				
Resultados de Aprendizaje				
Al término del curso se espera que el estudiante demuestre que:				
<ol style="list-style-type: none"> 1. Maneja los conocimientos y las habilidades necesarias para resolver problemas numéricos de mediana y gran envergadura en el área de ingeniería de procesos. 2. Integra distintas metodologías numéricas y computacionales para resolver problemas numéricos en el área de ingeniería de procesos. 3. Utiliza las herramientas fundamentales para efectuar simulaciones numéricas de modelos de procesos y analiza los resultados de éstas apropiadamente. 				

Metodología Docente	Evaluación General
Clases expositivas con participación del estudiante. Desarrollo de tareas Seminarios	Calificación final: <ul style="list-style-type: none"> • Tareas 50% • Seminarios 50%

Unidades Temáticas

Número	Nombre de la Unidad	Duración en Semanas
1	Introducción	2 semanas
Contenidos	Resultados de Aprendizajes de la Unidad	Referencias a la Bibliografía
1.1 Modelos matemáticos, noción de método matemático y motivación. 1.2 Aplicaciones en el área de la Ingeniería Química y	Al término de la unidad estudiante demuestra que: <ul style="list-style-type: none"> • Reconoce una visión general del área de métodos 	Transparencias entregadas por el docente

<p>Biotecnología.</p> <p>1.3 Lenguajes de programación y bibliotecas. Software propietario, libre y de código abierto.</p> <p>1.4 Buenas prácticas de programación.</p> <p>1.5 Representación de números.</p> <p>1.6 Definiciones de error, fuentes de error, sesgo e incertidumbre, error de truncamiento y redondeo.</p> <p>1.7 Concepto de estabilidad numérica.</p> <p>1.8 Criterios de detención.</p>	<p>matemáticos y su relación con la ingeniería de procesos</p> <ul style="list-style-type: none"> • Comprende los conceptos generales asociados al. 	
--	--	--

Número	Nombre de la Unidad	Duración en Semanas
2	Software/hardware y conceptos de cálculo científico	4 semanas
Contenidos	Resultados de Aprendizajes de la Unidad	Referencias a la Bibliografía
<p>2.1 Sistemas de clusters de cálculo científico: Propósito, escenarios en que se utiliza, diferencias con supercomputadores. Grid computing.</p> <p>2.2 Hardware: Tipos de procesadores / número de procesadores. memoria RAM, memoria distribuida, elementos de almacenamiento, conectividad, racks, seguridad.</p> <p>2.3 Software: Sistemas operativos, distribuciones de Linux, protocolos de comunicaciones, servicios, administradores de colas, monitoreo.</p> <p>2.4 Cálculo paralelo: Propósito, conceptos básicos, tipos de cálculo paralelo, problemas paralelizables y no paralelizables, frameworks de desarrollo.</p>	<p>Al término de la unidad estudiante demuestra que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Reconoce una visión general del área de cálculo científico y su relación con la ingeniería de procesos. • Comprende los conceptos generales asociados al área cálculo científico. • Reconoce hardware y software utilizado en la implementación de clusters de cálculo científico. • Implementa y analiza el desempeño cálculos seriales y paralelos simples y medianamente complejos. 	

Número	Nombre de la Unidad	Duración en Semanas
3	Optimización	3 semanas
Contenidos	Resultados de Aprendizajes de la Unidad	Referencias a la Bibliografía
3.1 Optimización multidimensional no restringida, métodos directos, métodos basados en gradiente, efecto de las condiciones iniciales. 3.2 Métodos heurísticos, escenarios de aplicación, costos, ventajas y desventajas. 3.3 Algoritmos genéticos: implementación, función de adaptación, operadores genéticos, costo computacional. 3.4 Simulated annealing: implementación, funciones de annealing, efecto de la temperatura, mínimos locales.	Al término de la unidad estudiante demuestra que: <ul style="list-style-type: none"> • Comprende las características de los problemas de optimización y su relación con la ingeniería de procesos. • Comprende y aplica algoritmos de optimización tradicionales basados en gradiente. • Comprende los parámetros de algoritmos de optimización no tradicionales. • Comprende y aplica algoritmos genéticos y de simulated annealing. 	Transparencias entregadas por el docente

Número	Nombre de la Unidad	Duración en Semanas
4	Sistemas predictivos	3 semanas
Contenidos	Resultados de Aprendizajes de la Unidad	Referencias a la Bibliografía
4.1 Sistemas predictivos, redes neuronales, conceptos básicos, áreas de aplicación, ventajas y limitaciones. Aplicación en la ingeniería de procesos. 4.2 Problema de predicción/ajuste, problema de clasificación. 4.3 Redes neuronales feedforward, redes totalmente conectadas, parcialmente conectadas. Perceptrón. 4.4 Aprendizaje supervisado, generalización, validación cruzada. 4.5 Aprendizaje no supervisado, mapa de Kohonen. Aplicaciones	Al término de la unidad estudiante demuestra que: <ul style="list-style-type: none"> • Comprende las características de los sistemas predictivos y su relación con la ingeniería de procesos. • Comprende y utiliza redes neuronales para el ajuste y/o predicción de datos experimentales. • Comprende y utiliza redes neuronales para la clasificación de datos experimentales. 	Transparencias entregadas por el docente

Número	Nombre de la Unidad	Duración en Semanas
5	Problema inverso	3 semanas
Contenidos	Resultados de Aprendizajes de la Unidad	Referencias a la Bibliografía
5.1 Problema inverso y ajuste de parámetros. 5.2 Regresión lineal, regresión lineal múltiple. Mínimos cuadrados. 5.3 Regresión no lineal. 5.4 Análisis con enfoque frecuentista y bayesiano. Intervalos de confianza y test de hipótesis. 5.5 Aplicaciones,	Al término de la unidad estudiante demuestra que: <ul style="list-style-type: none"> • Comprende relación del problema del problema inverso y la ingeniería de procesos. • Comprende, aplica y analiza metodologías de ajuste de parámetros. • Evalúa los resultados obtenidos a partir de un ajuste de parámetros. • Resuelve problemas inversos en el área de ingeniería de procesos. 	Transparencias entregadas por el docente

Bibliografía General	
Steven Chapra y Raymond Canale, Métodos numéricos para ingenieros, McGraw-Hill, Primera edición, 1999.	
John H. Mathews, Kurtis D. Fink, Métodos numéricos con MATLAB, Prentice Hall, Tercera edición, 2000.	
Michael B. Cutlip y Mordechai Shacham, Problem solving in chemical engineering with numerical methods, Prentice Hall, Primera edición, 1999.	
Mark E. Davis, Numerical methods and modeling for chemical engineers, Wiley, Primera edición, 1984.	
William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling y Brian P. Flannery, Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press; Segunda edición, 1992.	
Kenneth J. Beers, Numerical Methods for Chemical Engineering: Applications in MATLAB, Cambridge University Press; Primera edición, 2006.	
Alkis Constantinides y Navid Mostoufi, Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications, Prentice Hall PTR, 1999.	

Vigencia desde:	Primavera 2011
Elaborado por:	J. Cristian Salgado
Revisado por:	Jefe Docente