

PROGRAMA DE CURSO

| | | | | |
|--|-------------------|--|---|---------------------------|
| Código | | Nombre | | |
| IQ4101 | | Métodos Matemáticos para Ingeniería de Procesos | | |
| Nombre en Inglés | | | | |
| Mathematical Methods for Process Engineering | | | | |
| SCT | Unidades Docentes | Horas de Cátedra | Horas Docencia Auxiliar | Horas de Trabajo Personal |
| 6 | 10 | 3 | 1,5 | 5,5 |
| Requisitos | | | Carácter del Curso | |
| IQ3301 Análisis de Procesos MA3701 Optimización | | | Obligatorio Licenciatura en Ingeniería Civil Química e Ingeniería Civil en Biotecnología | |
| Resultados de Aprendizaje | | | | |
| Al término del curso se espera que el estudiante demuestre que: | | | | |
| <ul style="list-style-type: none"> • Maneja los conocimientos y las habilidades necesarias para resolver problemas numéricos en el área de ingeniería de procesos. • Integra los conocimientos adquiridos en los cursos previos, con aplicación a la solución de problemas matemáticos numéricos. • Utiliza las herramientas fundamentales para efectuar simulaciones numéricas de modelos de procesos y analiza los resultados de éstas apropiadamente. • Maneja técnicas de optimización y ajuste de parámetros que son esenciales para la interpretación y utilización de datos experimentales u obtenidos en planta. | | | | |
| Metodología Docente | | | Evaluación General | |
| Clases expositivas con participación del estudiante. Desarrollo de ejercicios | | | <ul style="list-style-type: none"> • 3 Controles parciales y un examen global • Tareas quincenales <ul style="list-style-type: none"> • Calificación final: <ul style="list-style-type: none"> 50% controles 50% tareas. | |

Unidades Temáticas

| Número | Nombre de la Unidad | | Duración en Semanas |
|------------|---|---|---------------------------------------|
| 1 | Introducción | | 1 semana |
| Contenidos | | Resultados de Aprendizajes de la Unidad | Referencias a la Bibliografía |
| 1.1 | Modelos matemáticos, noción de método matemático y motivación. | <p>Al término de la unidad estudiante demuestre que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Reconoce una visión general del área de métodos matemáticos y su relación con la ingeniería de procesos • Comprende los conceptos generales asociados al área de métodos. | <p>Handouts</p> <p>Transparencias</p> |
| 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. | | |

| Número | Nombre de la Unidad | | Duración en Semanas |
|------------|--|--|---------------------------------------|
| 2 | Solución de sistemas algebraicos | | 3 semanas |
| Contenidos | | Resultados de Aprendizajes de la Unidad | Referencias a la Bibliografía |
| 2.1 | Breve revisión de conceptos generales de algebra lineal. Existencia y unicidad de solución. | <p>Al término de la unidad el estudiante demuestra que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Comprende las características de sistemas de ecuaciones y su relación con la ingeniería de procesos. • Comprende, aplica y analiza algoritmos para la solución de sistemas de ecuaciones lineales. • Comprende, aplica y analiza algoritmos para la solución de sistemas de ecuaciones no lineales. • Aplica los algoritmos de solución de sistemas algebraicos a problemas | <p>Handouts</p> <p>Transparencias</p> |
| 2.2 | Descomposición LU, inversión de matrices, determinante, norma y rango, submatrices. | | |
| 2.3 | Método de eliminación de Gauss, Método de Gauss Jordan, método de sustitución de Gauss-Seidel, Método de Jacobi. | | |
| 2.4 | Aplicaciones: Modelamiento de sistemas de separación, análisis de flujos metabólicos (MFA). | | |
| 2.5 | Ecuaciones no lineales: existencia y unicidad de solución. | | |
| 2.6 | Métodos iterativos, series de Taylor. | | |

| | | | |
|------|--|---------------------------------------|--|
| 2.7 | Método de la secante, posición falsa y punto fijo. | en el área de ingeniería de procesos. | |
| 2.8 | Método de bracketing y de bisección. | | |
| 2.9 | Método de Newton. | | |
| 2.10 | Extensión a sistemas de ecuaciones no lineales simultáneas: método de Newton, Cuasi-Newton y otros. | | |
| 2.11 | Aplicación: Estudio de flujo laminar, modelamiento del estado estacionario de un reactor de polimerización condensado. | | |

| Número | Nombre de la Unidad | Duración en Semanas |
|--|--|--------------------------------|
| 3 | Optimización, interpolación y aproximaciones de Fourier | 4 semanas |
| Contenidos | Resultados de Aprendizajes de la Unidad | Referencias a la Bibliografía |
| 3.1 Optimización unidimensional no restringida, golden section, interpolación cuadrática, método de Newton. 3.2 Optimización multidimensional no restringida, métodos directos, métodos basados en el gradiente. 3.3 Optimización restringida, programación lineal, problemas no lineales. 3.4 Métodos heurísticos, algoritmos genéticos y programación genética, simulated annealing, búsqueda tabú, colonias de hormigas. 3.5 Aplicaciones: Optimización del costo de un reactor, docking de un sistema péptido-proteína. 3.6 Interpolación polinomial de Newton, polinomios de Lagrange, interpolación inversa, spline. 3.7 Aproximación de Fourier, integral y transformada de Fourier, transformada directa (TDF), transformada rápida. 3.8 Aplicaciones: docking de un complejo proteína-proteína | Al término de la unidad el estudiante: <ul style="list-style-type: none"> • Comprende las características de los problemas de optimización e interpolación y su relación con la ingeniería de procesos. • Aplica y analiza algoritmos de optimización. • Aplica algoritmos de interpolación. • Aplica los algoritmos de optimización e interpolación a problemas del área de ingeniería de procesos. | Handouts Transparencias |

| Número | Nombre de la Unidad | Duración en Semanas |
|--|--|---------------------------------------|
| 4 | Ecuaciones diferenciales ordinarias | 4 semanas |
| Contenidos | Resultados de Aprendizajes de la Unidad | Referencias a la Bibliografía |
| <p>4.1 Integración y derivación numérica, regla del trapecio, simpson, cuadratura de Gauss, Newton-Cotes, Fórmulas de diferenciación, derivadas de datos irregularmente espaciados, derivadas de datos con errores.</p> <p>4.2 Problemas de valor inicial.</p> <p>4.3 Método de Euler: deducción y análisis. Métodos de Heun y Ralston.</p> <p>4.4 Métodos de Runge-Kutta con paso fijo.</p> <p>4.5 Métodos de Runge-Kutta con paso variable: control de paso, algoritmos de paso doble y de Fehlberg o Cash-karp.</p> <p>4.6 Análisis de estabilidad numérica y de propagación del error.</p> <p>4.7 Ecuaciones diferenciales stiff, definición y ejemplos.</p> <p>4.8 Análisis de estabilidad numérica para métodos explícitos.</p> <p>4.9 Métodos implícitos de Euler. Métodos implícitos de alto orden: Runge-Kutta generalizado, Bulirsch-Stoer, predictor-corrector. 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 noisotérmico, simulación del perfil de temperatura óptima para la fermentación de Penicilina.</p> | <p>Al término de la unidad el estudiante:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Comprende las características de los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias y su relación con la ingeniería de procesos. • Aplica y analiza algoritmos para resolver EDOs • Resuelve EDOs asociados a problemas del área de ingeniería de procesos. | <p>Handouts</p> <p>Transparencias</p> |

| Número | Nombre de la Unidad | Duración en Semanas |
|---|---|--------------------------------|
| 5 | Ajuste de parámetros | 1.5 semanas |
| Contenidos | Resultados de Aprendizajes de la Unidad | Referencias a la Bibliografía |
| 5.1 Problema de ajuste de parámetros. 5.2 Regresión lineal, regresión lineal múltiple. Mínimos cuadrados. Regresión no lineal. 5.3 Estadística Bayesiana, intervalos de confianza y test de hipótesis. 5.4 Aplicaciones: Ajuste de parámetros de una cinética de Michaelis-Menten. | Al término de la unidad el estudiante: <ul style="list-style-type: none"> • Comprende la relación entre el problema de ajuste de parámetros y la ingeniería de procesos. • Aplica y analiza metodologías de ajuste de parámetros. • Evalúa las características de los resultados obtenidos a partir del ADP. • Ajusta parámetros en problemas del área de ingeniería de procesos. | Handouts Transparencias |

| Número | Nombre de la Unidad | Duración en Semanas |
|---|---|--------------------------------|
| 6 | Ecuaciones diferenciales parciales | 1.5 semanas |
| Contenidos | Resultados de Aprendizajes de la Unidad | Referencias a la Bibliografía |
| 6.1 Definición y ejemplos, clasificación, tipos de condiciones de borde. 6.2 Método de diferencias finitas. 6.3 Introducción al método de elementos finitos. 6.4 Análisis de estabilidad. 6.5 Paquetes de software libre y comercial. 6.6 Aplicaciones: Simulación de un reactor tubular con dispersión, Reacción química y difusión en un pellet, Solución de las ecuaciones de transferencia de calor. | Al término de la unidad el estudiante: <ul style="list-style-type: none"> • Comprende las características de ecuaciones diferenciales parciales en relación a la ingeniería de procesos. • Aplica y analiza metodologías para resolver EDPs. • Resuelve EDPs encontradas en el área de ingeniería de procesos. | Handouts Transparencias |

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 2009 |
| Elaborado por: | J. Cristian Salgado H. |
| Revisado por: | Coordinador Docente - ADD (junio de 2010) |