

Cálculos Avanzados en Ingeniería Química I

Modalidad de dictado: curso teórico-práctico

Carácter: obligatoria

En la actividad curricular se abordan las estrategias actuales destinadas a la resolución de sistemas de ecuaciones: lineales, no lineales, diferenciales ordinarias y a derivadas parciales. Se estudia tanto la teoría que subyace a la estrategia como las herramientas de cómputo empleadas para su resolución.

Los estudiantes profundizan sus conocimientos sobre métodos numéricos a la vez que desarrollan métodos rigurosos de razonamiento, y adquieren habilidades para emplear, con criterio, programas que resuelven sistemas de ecuaciones de interés en Ingeniería Química.

Carga horaria semanal

6 horas semanales de dictado de clases de teoría y práctica, y aproximadamente 2.5 horas de actividades autónomas por parte de los alumnos.

CARGA TEORICA 44 h

CARGA PRÁCTICA 56 h

Objetivos

Comprender y dominar las herramientas matemáticas asociadas con la solución de ecuaciones algebraicas lineales y no-lineales y con la solución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias y a derivadas parciales.

Contenidos

Modelado Matemático en Ingeniería Química. Conceptos fundamentales. Ejemplos de aplicación en Ingeniería Química y sistemas de ecuaciones asociados. Métodos Numéricos. Análisis del Error. Error de aproximación. Errores de truncado y redondeo. Estabilidad y Velocidad de convergencia de algoritmos.

Ecuaciones Algebraicas Lineales. Métodos de solución de sistemas de ecuaciones algebraicas lineales. Sistemas lineales especiales. Problema de autovalores. Descomposición QR. Descomposición en valores singulares.

Ecuaciones algebraicas no lineales. Solución de una ecuación simple con una incógnita. Sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. Método de Newton. Métodos Quasi-Newton. Método de continuación (homotopía). Soluciones asintóticas a ecuaciones con un parámetro. Uso y/o implementación de programas para computadora.

Interpolación y Regresión por Cuadrados Mínimos. Interpolación lineal. Interpolación con Polinomios. Interpolación por splines. Cuadrados mínimos lineales y no lineales. Regresión lineal y no lineal múltiple.

Ecuaciones diferenciales ordinarias. Revisión de métodos convencionales para problemas de valor inicial no rígidos. Estimación del error local y global. Análisis de estabilidad. Ecuaciones diferenciales rígidas. Aplicaciones especiales para problemas de valor inicial. Problemas de condiciones de borde. Uso directo del teorema de Taylor. Métodos de diferencias finitas y de shooting. Método de los residuos. Colocación ortogonal. Colocación ortogonal sobre elementos finitos.

Introducción a ecuaciones diferenciales a derivadas parciales. Introducción y ejemplos de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales. Condiciones de borde. Ecuaciones diferenciales elípticas, parabólicas e hiperbólicas. Método de diferencias finitas. Método de las líneas. Método de elementos finitos. Estabilidad de los métodos.

Introducción a ecuaciones algebraicas-diferenciales. Generalidades de su resolución. Índice. Problemas numéricos en sistemas de alto índice.

Bibliografía

1. "Análisis Numérico", R. Burden y J. Douglas Faires, Cengage Learning, 10ma. Ed., 2017.
2. "Matrix computations", G. Golub and C. Van Loan, Johns Hopkins University Press, 4th Ed., 2013.
3. "Numerical Methods for Engineers", S. Chapra and R. Canale, Mac Graw Hill, 7th Ed., 2015.
4. "Numerical Methods Applied to Chemical Engineering", W. Green Jr. and J. Swan. Massachusetts Institute of Technology, 2015.
5. "Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations", U.M. Ascher, L.R. Petzold, SIAM, 1st Ed., 1998.