

ANEXO I

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL
FACULTAD REGIONAL ROSARIO

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

PROGRAMA ANALÍTICO DE LA ASIGNATURA: **Análisis Numérico y Cálculo Avanzado**

PLAN DE ESTUDIOS 1995

NIVEL DE IMPLEMENTACIÓN: 3^{ro}.

HORAS SEMANALES: 2 hs.

DICTADO: cuatrimestral

ÁREA DE CONOCIMIENTO: Informática Aplicada a la Ingeniería Química

MODALIDAD: Presencial

CORRELATIVIDADES:

Materias aprobadas: Análisis Matemático I, Álgebra y Geometría Analítica

Materia regularizada: Análisis Matemático II

PROFESOR: **Dr. en Tecnología Química. Alejandro S. M. Santa Cruz**

DIRECTOR DE DEPARTAMENTO: **Ing. Héctor S. Garibaldi**

OBJETIVOS GENERALES DE LA ASIGNATURA: Que el alumno domine integralmente la resolución de sistemas de ecuaciones, tanto algebraicas como diferenciales. Asimismo, deberá contemplarse técnicas de optimización de funciones, tanto lineales como no - lineales, con o sin restricciones, resueltos en forma numérica. Se deberá poner énfasis en técnicas matriciales y en particular las apropiadas para su implementación en algoritmos computacionales, específicamente destinados a la simulación de procesos químicos que en general se caracterizan por matrices ralas en banda. Para el caso de sistemas de ecuaciones diferenciales, es importante que el alumno comprenda el concepto de *stiffness* de un sistema a través de ejemplos concretos de simulación dinámica de procesos caracterizados por distintas constantes de tiempo. Por último se pretende que el alumno sea capaz de implementar los algoritmos numéricos en algún lenguaje computacional, por ejemplo FORTRAN, BASIC ó C, o bien en programas específicos de cálculo que utilizan lenguajes de alto nivel como MATLAB, a partir de los conocimientos ya adquiridos en Utilitarios de Computación.

FUNCIÓN DE LA ASIGNATURA EN EL PLAN DE ESTUDIOS: La presente asignatura constituye el soporte matemático destinado a la implementación numérica por computadora de problemas típicos que se plantean en ingeniería de procesos químicos, cuyos fundamentos se presentan en la asignatura Integración IV: Modelización, Simulación y Optimización de Procesos Químicos, correspondiente al cuarto año de la Carrera en Ingeniería Química.

CONTENIDOS SINTÉTICOS:

- Ecuaciones lineales y no lineales. Búsqueda de raíces. Diversas técnicas numéricas. Sus aplicaciones a problemas específicos en Ingeniería Química.
- Sistemas de ecuaciones lineales y no lineales. Procedimientos numéricos. Sus aplicaciones a problemas específicos en Ingeniería Química. Simulación de procesos.
- Optimización de funciones mono y multivariables. Optimización de funciones no lineales. Optimización de funciones con restricciones de diverso tipo. Sus aplicaciones a problemas específicos en Ingeniería Química. Aplicaciones a la simulación y optimización simultánea de procesos químicos.
- Resolución numérica de ecuaciones diferenciales. Métodos explícitos. Métodos implícitos. Sistemas *stiff*. Sus aplicaciones a problemas específicos de simulación dinámica.
- Breves nociones de optimización dinámica. Cálculo de variaciones. Soluciones numéricas. Sus aplicaciones a problemas específicos en Ingeniería Química.

PROGRAMA ANALÍTICO

Tema 1: Introducción: ¿Qué son los métodos numéricos? Series de Taylor. Los números en las computadoras. Bases de representación de los números. Rango de las constantes numéricas. Números en el hardware de la computadora. Errores numéricos: Errores de redondeo y errores de truncamiento. Overflow, underflow y problemas mal acondicionados. Introducción al uso de MATLAB.

Tema 2: Sistemas de ecuaciones lineales: Existencia y unicidad de la solución. Métodos directos de resolución: a) Método de Eliminación de Gauss. b) Método de Gauss - Jordan. c) Método de Thomas para la resolución de matrices tridiagonales. Estrategias de pivoteo: pivoteo parcial y pivoteo completo. Descomposición LU y PLU. Análisis de la condición del sistema: Números de condición, normas y errores. Métodos iterativos de resolución: a) Método de Jacobi. b) Método de Gauss - Seidel. c) Método de sobrerelajación.

Tema 3: Regresión lineal. Ecuaciones normales. Factorización QR. Matrices degeneradas. Descomposición en valores singulares.

Tema 4: Probabilidades y estadística. Propagación de errores. Propagación de errores en funciones de varias variables. La matriz de covarianza. Propagación de errores en la regresión lineal. Análisis y error de regresión. *Undersampling y bootstrap*.

Tema 5: Determinación de las raíces de ecuaciones no - lineales de una variable. Métodos básicos. Discusión de la convergencia. Orden de convergencia del método. Métodos iterativos: a) Método de sustitución directa o de aproximaciones sucesivas. b) Aceleradores de la convergencia: Método de Wegstein. c) Método de Newton -

Raphson. d) Método de Newton Raphson de 2do. Orden. e) Método modificado de Newton - Raphson. f) Método de Von Mises o de la cuerda paralela. g) Método de la secante. h) Método de división del intervalo o bisección. i) Regula Falsi y métodos relacionados.

Tema 6: Optimización unidimensional. Optimización multidimensional. Optimización con restricciones.

Tema 7: Cuadratura numérica. Cuadratura Gaussiana. Estimación del error. Cuadratura adaptativa. Cuadratura multidimensional y mapping. Integración Monte Carlo.

Tema 8: Ecuaciones diferenciales ordinarias. Estabilidad numérica. Métodos implícitos de integración. Métodos de integración de orden superior. Algoritmos de paso adaptativo y *shooting methods* para resolver EDO's con condiciones de borde. Métodos matriciales para resolver EDO's lineales. Problemas con condiciones de borde tipo Sturm - Liouville.

TRABAJOS PRÁCTICOS:

Práctico N°. 1: Manipulación de matrices con MATLAB.

Práctico N°. 2: Errores numéricos.

Práctico N°. 3: *Overflow* y *underflow*.

Práctico N°. 4: Sistemas de ecuaciones lineales: extracción líquido - líquido.

Práctico N°. 5: Regresión lineal.

Práctico N°. 7: Descomposición PLU.

Práctico N°. 8: Norma de vectores y de matrices.

Práctico N°. 9: Factorización QR: Aplicación a problemas de regresión lineal.

Práctico N°. 10: Probabilidades y estadística: Distribución de Poisson.

Práctico N°. 11: Probabilidades y estadística: Cálculo del valor medio y de la desviación estándar.

Práctico N°. 12: Determinación del error de regresión y de predicciones basadas en regresiones.

Práctico N°. 13: Determinación del error en una regresión lineal ponderada.

Práctico N°. 14: Aplicación de los métodos de bisección, de Newton y de la secante en la determinación de la raíz de una función.

Práctico N°. 15: Análisis del comportamiento de algoritmos en la determinación de raíces dobles de funciones.

Práctico N°. 16: Resolución de sistemas de ecuaciones no lineales por el método de Newton: Aplicación a redes de tuberías.

Práctico N°. 17: Problema combinado de regresión lineal y no lineal por cuadrados mínimos.

Práctico N°. 18: Optimización restringida: Determinación del mínimo de una función de dos variables independientes.

Práctico N°. 19: Optimización restringida con función de penalización.

Práctico N°. 20: Estimación del error en la cuadratura Gaussiana.

Práctico N°. 21: Aplicación de la regla de Richardson.

Práctico N°. 22: Determinación del momento de inercia de un esferoide alargado.

Práctico N°. 23: Integración Monte Carlo.

Práctico N°. 24: Aplicación de métodos explícitos de resolución de EDO's.

Práctico N°. 25: Inestabilidad de los métodos explícitos aplicados a la resolución de EDO's stiff.

Práctico N°. 26: Algoritmos de paso adaptativo.
Práctico N°. 27: Problema de valores de contorno (*shooting methods*).
Práctico N°. 28: Métodos matriciales para la resolución de EDO's.

BIBLIOGRAFÍA:

- Borse, G. J., *Numerical Methods with MATLAB: A Resource for Scientists and Engineers*, PWS Publishing Company, Boston (1997).
- Carnahan, B., H. A. Luther, y J. O. Wilkes, *Applied Numerical Methods*, John Wiley and Sons, Inc., New York (1969).
- Cohen, A. M., J. F. Cutts, R. Fielder, D. E. Jones, J. Ribbans y E. Stuart, *Análisis Numérico*, Editorial Reverté S. A., Barcelona (1977).
- Cooper, J. M., *Introduction to Partial Differential Equations with MATLAB*, Birkhäuser, Boston (1998).
- Etter, D. M., *Solución de Problemas de Ingeniería con MATLAB*, 2da. Edición, Prentice Hall, Inc., México (1998).
- Franks R.G.E., *Mathematical Modeling in Chemical Engineering*, John Wiley and Sons Inc. N.Y. (1965).
- Franks R.G.E., *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*, John Wiley and Sons Inc. N.Y. (1972).
- Hornbeck, R. W., *Numerical Methods*, Quantum Publishers, Inc., New York.
- Luthe, R., A. Olivera y F. Schutz, *Métodos Numéricos*, Editorial Limusa, México (1978).
- Nakamura, S., *Métodos Numéricos Aplicados con Software*, Prentice Hall Hispanoamericana, S. A. (1992).
- Polking, J. C., *Ordinary Differential Equations using MATLAB*, Prentice Hall, Inc., New Jersey (1995).
- Ralston, A. y P. Rabinowitz, *First Course in Numerical Analysis*, McGraw-Hill Inc., New York (1978).
- Scenna, N. J. y otros, *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos*, Universidad Tecnológica Nacional (en prensa).
- Sigmon, K., *Introducción a MATLAB*, 2da. Edición, Departamento de Matemáticas, Universidad de Florida (1992).