



Ministerio de Cultura y Educación  
 Universidad Nacional de San Luis  
 Facultad de Ingeniería y Ciencias Agropecuarias  
 Departamento: Ingeniería de Procesos  
 Área: Procesos Químicos

(Programa del año 2011)  
 (Programa en trámite de aprobación)  
 (Presentado el 08/07/2011 09:46:47)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
Computación II	Ing. Química		2011	1° cuatrimestre

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ARDISSONE, DANIEL	Prof. Responsable	P.Asoc Exc	40 Hs
BACHILLER, ALICIA	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
RODRIGUEZ, MARIA LAURA	Auxiliar de Práctico	A.1ra Semi	20 Hs

### III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
5 Hs	Hs	Hs	Hs	5 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoría con prácticas de aula	1° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
16/03/2011	24/06/2011	15	75

### IV - Fundamentación

El objeto de estudio de este curso es tradicionalmente llamado análisis numérico. El análisis numérico trata del diseño y análisis de algoritmos utilizados para resolver problemas matemáticos que se originan en diferentes campos, especialmente en ciencias e ingeniería. El análisis numérico opera con funciones y con ecuaciones cuyas variables subyacentes – tiempo, distancia, velocidad, temperatura, presión, intensidad de corriente, densidad – son continuas por naturaleza.

Un gran número de problemas de la matemática continua (por ejemplo, la mayoría de los problemas que incluyen derivadas, integrales, y/o no-linealidades) no pueden ser resueltos exactamente, aun en principio, en un número finito de pasos y deben resolverse mediante un (teóricamente infinito) proceso iterativo que converge últimamente a una solución. En la práctica no se itera indefinidamente, por supuesto, sino hasta que la solución obtenida es aproximadamente correcta, “suficientemente cercana” a la solución deseada. Por lo tanto, uno de los aspectos más importantes de la computación científica es encontrar algoritmos iterativos rápidamente convergentes y determinar la “exactitud” de la solución encontrada. Si la convergencia es suficientemente rápida, aun algunos problemas que son susceptibles de ser resueltos mediante algoritmos no iterativos, tales como sistemas de ecuaciones algebraicas lineales, pueden ser más convenientemente resueltos utilizando algoritmos iterativos. Un segundo factor que distingue a la computación científica es su “preocupación” respecto de los efectos de las aproximaciones. Un gran número de técnicas de solución involucran una serie de aproximaciones de varios tipos. Aun la aritmética utilizada es aproximada, en el sentido que las computadoras digitales no pueden representar exactamente a todos los números reales.

Este curso presenta un amplio panorama de los métodos numéricos y está dirigido a estudiantes de ingeniería química que necesitan resolver problemas matemáticos

## V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

El curso se tiene como objetivo que conozca y sea capaz de aplicar las técnicas disponibles para resolver problemas en los diferentes tópicos a ser tratados, incluyendo la formulación del problema y la interpretación de resultados. Otro objetivo es lograr que el estudiante tome conciencia de cuáles son los aspectos más relevantes al momento de seleccionar métodos y software, y que aprenda a utilizarlos inteligentemente.

## VI - Contenidos

### **Tema 1: Introducción al FORTRAN**

Lenguaje Fortran. Historia, evolución, Justificación de uso. Tipos de Datos, constantes y variables. 2 Operaciones y Funciones: Operaciones numéricas, Funciones numéricas. Composición de un Programa y Formato. Formato de un programa. Estructuras de Control. Expresiones Lógicas. Construcciones IF. Construcciones IF-ELSE IF. Ejecución Repetitiva. Do-Loops. Do-loops Generales. Entrada/Salida. Salidas Formateadas. Salidas Enteras. Salidas Reales. Descriptores posicionales. Entradas Formateadas. Entrada de enteros. Entrada de Reales. Sentencias READ y WRITE. Procesamiento de archivos. Apertura y cierre de archivos. Programación con Funciones. Subprogramas FUNCTION. Asociación de Argumentos. Identificadores locales. Introducción a módulos. Funciones externas. Programación con Subrutinas. Implementación de listas linkeadas.

### **Tema 2: Solución numérica de ecuaciones algebraicas**

#### **Introducción. Errores: Revisión. Exactitud y precisión Definiciones de Errores. Errores de redondeo.**

Solución de ecuaciones de una sola variable. Método de la bisección. Método de la Falsa Posición (Regula Falsi). Método de Newton. Método de la secante. Iteración de punto fijo. Orden de convergencia.

### **Tema 3: Sistemas lineales**

**Introducción. Métodos directos. Eliminación gaussiana. Estrategias de pivoteo. Peligros de los métodos de Eliminación. Técnicas para mejorar las soluciones. Descomposición LU. Sistemas tridiagonales. Análisis del error y condición del sistema. Normas de matrices y vectores. Numero de condición de una matriz. Refinamiento iterativo. Métodos iterativos: Algoritmo de Jacobi. Método de Gauss- Seidel.**

### **Tema 4: Métodos iterativos para sistemas no lineales**

**Introducción. Criterios de Convergencia. Teoría de punto fijo para sistemas de ecuaciones. El método de Newton Raphson n dimensional. Variaciones del Método de Newton Raphson. Métodos Cuasi Newton. Minimización de una función. Método del gradiente o del descenso más rápido.**

### **Tema 5: Ajuste de curvas e Interpolación**

**Ajustes por mínimos cuadrados. Regresión lineal. Linearización. Regresión polinomial. Interpolación. Polinomio de interpolación de Newton. Polinomio de interpolación de Lagrange.**

### **Tema 6: Ecuaciones diferenciales ordinarias. Problemas de valor inicial**

**Introducción. Existencia de soluciones. Aproximación de funciones. Aproximación por diferencias. Aproximaciones de la derivada de  $y(t)$ . Aproximación a la integral de  $y(t)$ . Integración de ODES. Introducción. Derivación de métodos explícitos. Derivación de métodos implícitos. Métodos predictor corrector. Métodos de Runge-Kutta.**

## **Tema 7: Ecuaciones diferenciales Ordinarias. Problemas de valor de contorno**

**Introducción. El método de los residuos ponderados. Colocación. Método de los subdominios. Método de Galerkin. El método de los cuadrados mínimos. El método de los momentos. El método de las diferencias finitas. Método de Shooting.**

## **Tema 8: Ecuaciones Diferenciales en Derivadas parciales**

**Clasificación. Métodos de Diferencias finitas. Métodos Explícitos. Métodos Implícitos. Método de Crank-Nicholson.**

## **VII - Plan de Trabajos Prácticos**

Trab. Práctico Tema 1:  
Ejercicios de Programación

Trab. Práctico Tema 2:  
Resolución de Problemas y Programación

Trab. Práctico Tema 3:  
Resolución de Problemas y Programación

Trab. Práctico Tema 4:  
Resolución de Problemas y Programación

Trab. Práctico Tema 5:  
Resolución de Problemas y Programación

Trab. Práctico Tema 6:  
Resolución de Problemas y Programación

Trab. Práctico Tema 7:  
Resolución de Problemas y Programación

Trab. Práctico Tema 8:  
Resolución de Problemas y Programación

## **VIII - Regimen de Aprobación**

REGIMEN DE REGULARIDAD:

Condiciones para regularizar el curso:

- Asistencia al 70% de las actividades presenciales programadas.
- Aprobación del 100% de las evaluaciones parciales prácticas o sus recuperaciones, con un mínimo de 7 (siete) puntos.

Régimen de examen para alumnos regulares:

- Aprobación de un examen oral individual sobre aspectos teóricos de la asignatura.

Régimen de Promoción sin examen final:

Sólo podrán acceder a este régimen los alumnos que cumplan con las condiciones requeridas para cursar y aprobar la asignatura que estipula el régimen de correlatividades vigentes en el plan de estudios de la carrera y se encuentren debidamente inscriptos en este curso.

Condiciones para promocionar el curso:

- Asistencia al 80% de las actividades presenciales programadas.
- Aprobación del 100% de las evaluaciones parciales teórico-prácticas con sus recuperaciones.
- Aprobación de la actividad final integradora.

Examen para alumnos libres:

Características de las evaluaciones:

- El examen versará sobre la totalidad del último programa, contemplando los aspectos teóricos y prácticos del curso.
- El examen constará de una instancia referida a los Trabajos Prácticos previa al desarrollo de los aspectos teóricos, que se realizará el día fijado para el Examen Final.
- La modalidad del examen final podrá ser escrita u oral de acuerdo a como lo decida el tribunal evaluador.

## **IX - Bibliografía Básica**

- [1] 1. Métodos numéricos para ingenieros. S.C. Chapra, R.P. Canale. Mc GRaw Hill.
- [2] 2. Análisis Numérico. R. Burden, J:D. Faires. Grupo Editorial Iberoamérica
- [3] 3. Métodos numéricos Aplicados con Software. S. Nakamura Prentice Hall
- [4] 4. An Introduction to Numerical Análisis. K. Atkinson. John Wiley & Sons.
- [5] 5. Elements of Numerical Análisis. Peter Henrici. John Wiley & Sons.
- [6] 6. Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineerings. R. Rice, D.D. Do. John Willey & Sons. 1995.
- [7] 7. Numerical Recipes. The art of Scientific Computing. Thrid Edition. W. Press, S.A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B.P. Flannery. Cambridge University Press. 2007.
- [8] 8. Introduction to FORTRAN 90 For Engineers and Scientists. L. R. Nyhoff, S.C. Leestma. Prentice Hall. 1997.
- [9] 9. FORTRAN 90 For Engineers and Scientists. L. R. Nyhoff, S.C. Leestma. Prentice Hall. 1997

## **X - Bibliografía Complementaria**

- [1] 1. Introduction to Chemical Engineering Computing. Bruce Finlayson. John Wiley & Sons. 2006.
- [2] 2. Partial Differential Equations with Numerical Methods. Stig Larsson, Vidar Thomé. Springer, 2009.
- [3] 3. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Second Edition. J.C. Butcher. Wiley. 2008.
- [4] 4. Numérical Methods for Least Squares Problems. Ake. Bjorck. SIAM. 1996.
- [5] 5. Nonlinear Ordinary Differential Equations: Problems and Solutions. A Sourcebook for Scientists and Engineers. D.W. Jordan, P. Smith. Oxford. 2007.
- [6] 6. Numerical Methods in Scientific Computing. Volume I. G. Dahlquist and A. Bjorck. SIAM. 2007.
- [7] 7. Numerical Methods in Scientific Computing. Volume II. G. Dahlquist and A. Bjorck. SIAM. 2009.
- [8] 8. Numerical Methods for Engineers and Scientists. Second Edition. Joe D. Hoffman Marcel Dekker. Inc. 2001.

## **XI - Resumen de Objetivos**

En este curso se tratará de que el estudiante logre adquirir una idea cabal de las técnicas disponibles para resolver problemas en los diferentes tópicos a ser tratados, incluyendo la formulación del problema y la interpretación de resultados. Uno de los objetivos más importantes es lograr que el estudiante tome conciencia de cuáles son los aspectos más relevantes al momento de seleccionar métodos y software, y que aprenda a utilizarlos inteligentemente.

## **XII - Resumen del Programa**

Tema 1: Solución numérica de ecuaciones algebraicas

Tema 2: Sistemas lineales

Tema 3: Métodos iterativos para sistemas no lineales

Tema 4: Ajuste de curvas e Interpolación

Tema 5: Ecuaciones diferenciales ordinarias. Problemas de valor inicial

Tema 6: Ecuaciones diferenciales Ordinarias. Problemas de valor de contorno

Tema 7: Ecuaciones Diferenciales en Derivadas parciales

### **XIII - Imprevistos**

--

### **XIV - Otros**

--

<b>ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA</b>	
--	--

<b>Profesor Responsable</b>	
-----------------------------	--

Firma:	
--------	--

Aclaración:	
-------------	--

Fecha:	
--------	--