



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 2023)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
Métodos Numéricos Aplicados a Procesos	INGENIERÍA QUÍMICA	OCD N° 21/20 22 Ord	2023	1° cuatrimestre
Métodos Numéricos Aplicados a Procesos	INGENIERÍA QUÍMICA	24/12 -17/2 2	2023	1° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ARDISSONE, DANIEL	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
HERRERO, ALFREDO RICARDO	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
TONELLI, FRANCO	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
COMELLI, OLGA ELISA	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 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	0 Hs	5 Hs

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

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
13/03/2023	24/06/2023	15	75

IV - Fundamentación

El análisis numérico trata del diseño y análisis de algoritmos utilizados para resolver problemas matemáticos que se originan en distintos 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 la 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 proceso iterativo (teóricamente infinito) que converge a una solución. En la práctica no se itera de forma indefinida, sino hasta que el resultado converge y se toma el valor obtenido como aproximadamente cercano 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 lo suficientemente rápida, aun en algunos problemas que son susceptibles de ser resueltos mediante algoritmos no iterativos, tales como sistemas de ecuaciones algebraicas lineales, pueden ser más convenientemente resueltos mediante 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. Aún la aritmética utilizada es aproximada en el sentido que las computadoras digitales no pueden representar exactamente a todos los números reales

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

- Adquirir un lenguaje de programación particular para comprender la fundamentación de los métodos numéricos en la solución de problemas de ingeniería.
- Incorporar un sólido conocimiento de los métodos numéricos para discriminar a priori las diferencias entre ellos y de la elección del más apto para la resolución de problemas de ingeniería.
- Ejecutar un software como herramienta útil y eficaz para resolver cálculos mediante algoritmos numéricos de cuantiosas variables no resueltos de forma tradicional, a través de la utilización de lenguaje FORTRAN

VI - Contenidos

Unidad 1: Solución numérica de ecuaciones algebraicas

Introducción. Errores: Revisión. Definiciones de Errores. 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. Método de punto fijo. Orden de convergencia.

Unidad 2: Sistemas lineales

Introducción. Métodos directos. Eliminación gaussiana. Estrategias de pivoteo. Peligros de los métodos de Eliminación. Técnicas para mejorar las soluciones. Descomposición LU. Sistemas tri-diagonales. 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.

Unidad 3: Métodos iterativos para sistemas no lineales

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

Unidad 4: Ajuste de curvas e interpolación

Ajuste de curvas por mínimos cuadrados. Regresión lineal. Linealización. Regresión polinomial. Interpolación. Polinomio de interpolación de Newton. Polinomio de interpolación de Lagrange.

Unidad 5: 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.

Unidad 6: 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.

Unidad 7: Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales

Clasificación. Método de diferencias finitas. Métodos Explícitos. Métodos Implícitos. Método de Crank-Nicholson

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Se realizan Trabajos Prácticos de aula equipadas con computadoras cuyas guías de actividades se apoyan en el Aprendizaje Basado en Problemas (ABP) conforme a una guía proporcionada por los docentes de la asignatura, según la siguiente descripción:

Unidad 1: Solución numérica de ecuaciones algebraicas

Solución de Problemas de aula y aplicación a computadora usando software de programación de alto nivel específico

Unidad 2: Sistemas lineales

Solución de Problemas de aula y aplicación a computadora usando software de programación de alto nivel específico

Unidad 3: Métodos iterativos para sistemas no lineales

Solución de Problemas de aula y aplicación a computadora usando software de programación de alto nivel específico

Unidad 4: Ajuste de curvas e interpolación

Solución de Problemas de aula y aplicación a computadora usando software de programación de alto nivel específico

Unidad 5: Ecuaciones diferenciales ordinarias. Problemas de valor inicial

Solución de Problemas de aula y aplicación a computadora usando software de programación de alto nivel específico

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

Solución de Problemas de aula y aplicación a computadora usando software de programación de alto nivel específico

Unidad 7: Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales

Solución de Problemas de aula y aplicación a computadora usando software de programación de alto nivel específico

Los encuentros se darán en el aula de computación

La metodología empleada para el dictado de las guías de trabajo práctico para el curso de MNAP es la siguiente:

1° En el primer encuentro de la presentación del curso, se expone el tema "Nociones de Fortran". Se explica que es un software (programa de computación) utilizado para resolver todos los métodos numéricos que se verán en el curso, la importancia de su utilización y su funcionamiento.

2° Antes del comienzo de cada guía se realiza un breve repaso de los contenidos vistos en teoría para dar comienzo al trabajo práctico correspondiente al tema dado. Despejamos dudas, vemos ventajas y desventajas entre métodos y las diferencias entre ellos.

3° Se da comienzo a la guía correspondiente. Antes de su resolución, se preguntará por su interpretación para comenzar a resolverlo. Parte del análisis del enunciado de un problema se lleva a cabo con lápiz y papel o MathCad, posteriormente se continúa con la resolución en la PC utilizando lenguaje Fortran y programas gráficos (Excel, Origin) que ya son de su conocimiento y resultan necesarios para complementar la actividad.

4° Se hace una lectura y análisis de los valores que arroja el programa, estableciendo una coherencia con los gráficos realizados. Finalmente darán una conclusión grupal, respetando la palabra del/la compañero/a.

5° Entre todos, cerraremos conceptualmente la clase práctica realizando una puesta en común oral y con ayuda de la pizarra.

Se contemplarán en la evaluación de los trabajos prácticos los siguientes ítems:

- Asistencia (asistir como mínimo al 80% de las clases prácticas)
- Participación
- Trabajo individual
- Comprensión de la actividad

Y en cada ítem se tendrá en cuenta el nivel de alcance estimando si cumple o no cumple con lo estipulado.

VIII - Regimen de Aprobación

A - METODOLOGÍA DE DICTADO DEL CURSO:

La metodología empleada para el dictado del curso se basa en la exposición oral de cada uno de los temas del presente programa, utilizando recursos tecnológicos tales como PC y proyector, y usando las herramientas digitales disponibles; para tal fin se emplea Power Point. Se acompaña la exposición con el uso del pizarrón.

Tal como se mencionó en el ítem anterior (Ítem VII) la metodología del curso se apoya sobre el Aprendizaje Basado en Problemas (ABP), es por ello que los exámenes parciales y sus respectivos recuperatorios seguirán la misma modalidad descripta en dicho ítem. A su vez, para conformar globalmente parte de la evaluación, se brinda una retroalimentación de forma presencial y personal entre el/los profesor/es y el/la estudiante para resaltar aspectos importantes del examen parcial; si se observan características similares se discuten en conjunto.

B - CONDICIONES PARA REGULARIZAR EL CURSO

Es requisito para los alumnos:

- Asistir como mínimo al 80% de las clases teórico/prácticas
- Superar todos los aspectos evaluatorios de las guías de TP mencionados en el ítem VII
- Aprobar dos evaluaciones parciales de carácter práctico, o sus correspondientes recuperaciones, con un mínimo de 7 (siete) puntos.
- Para aprobar el examen parcial se evaluarán las siguientes competencias:
 - Manejo del software
 - Elección del método a aplicar y su fundamentación
 - Lectura y Análisis de resultados
 - Conclusiones

C – RÉGIMEN DE APROBACIÓN CON EXÁMEN FINAL

Se requiere la aprobación de un examen oral individual sobre aspectos teóricos de la asignatura.

Características del examen:

1º Parte

- Los estudiantes eligen anticipadamente un tema del programa, el cuál prepararán en sus casas.
- El día de la fecha y hora del examen lo expondrán en el laboratorio de IRQUI (Laboratorio N°3). Se les ofrece un tiempo máximo de 20 minutos para desarrollar el tema sobre el pizarrón.

2º Parte

- Contemplado el tiempo, comienzan la exposición oral del tema seleccionado frente a un jurado asignado para tomar el examen.
- Una vez superada la instancia previa, el jurado hace preguntas del mismo tema y/o sobre otras unidades del programa.
- El estudiante se retira; el jurado propone, discute y decide la calificación final.

D – RÉGIMEN DE PROMOCIÓN SIN EXAMEN FINAL

Condiciones para promocionar el curso:

- Podrán cursar por este régimen aquellos alumnos que hayan aprobado las asignaturas correlativas requeridas por el plan de estudios.
- Es requisito que los alumnos contemplen las condiciones evaluatorias del Ítem VII, y el apartado B del ítem VIII.
- Además se considera requisito indispensable para acceder a la promoción aprobar dos evaluaciones parciales de carácter práctico, o sus correspondientes recuperaciones, con un mínimo de 8 (ocho) puntos.

E – RÉGIMEN DE APROBACIÓN PARA ESTUDIANTES LIBRES

Se requiere:

1. Aprobar un examen escrito, que consistirá en la resolución de problemas basado en los trabajos prácticos de aula.
2. Aprobar un examen oral de los temas teóricos del curso, mediante sorteo de temas del programa de la asignatura.

Nota: Cada instancia tiene carácter eliminatorio, es decir, no podrá acceder al examen teórico sin antes haber aprobado el examen práctico. Y, en caso contrario, si avanza al oral habiendo superado la instancia práctica, pero éste se considera para NO aprobar, deberá presentarse nuevamente al siguiente turno de examen a ambas instancias.

IX - Bibliografía Básica

- [1] [1] [1] Métodos numéricos para ingenieros. S.C. Chapra, R.P. Canale. Mc Graw Hill.
- [2] [2] [2] Análisis Numérico. R. Burden, J.D. Faires. Grupo Editorial Iberoamérica
- [3] [3] [3] Métodos numéricos Aplicados con Software. S. Nakamura Prentice Hall
- [4] [4] [4] An introduction to numerical analysis. K. Atkinson, John Wiley & Sons.
- [5] [5] [5] Applied mathematics and modeling for Chemical Engineering. R. Rice, D.E. Do, John Wiley & Sons.
- [6] [6] [6] Numerical Recipes. The art of Scientific Computing. Third Edition. W. Press. S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flanery. Cambridge University. Press. 2007.
- [7] [7] [7] Fotocopia de material didáctico de lectura proporcionado por la cátedra dispuesto en formato digital e impreso
- [8] Nota: Todos los libros mencionados anteriormente se encuentran disponibles en la Biblioteca de la FICA y en el Área de Procesos Químicos, más específicamente en el box de la cátedra Ingeniería de las Reacciones Químicas, en este último se encuentran también en formato digital.

X - Bibliografía Complementaria

[1] [1] [1] Introduction to Chemical Engineering Computing. Bruce Finlayson. John Wiley & Sons. 2006
[2] [2] [2] Partial Differential Equations with Numerical Methods. Stig Larsson, Vidar Thomé, Springer. 2009
[3] [3] [3] Numerical Methods for ordinary differential equations. Second Edition. J.C. Butcher, Wiley, 2008.
[4] Nota: Los tres libros mencionados anteriormente se encuentran disponibles en la Biblioteca de la FICA y en el Área de Procesos Químicos, más específicamente en el box de la cátedra Ingeniería de las Reacciones Químicas, en este último se encuentran también en formato digital

XI - Resumen de Objetivos

- Adquirir un lenguaje de programación particular
- Incorporar un sólido conocimiento de los métodos numéricos
- Ejecutar un software como herramienta útil y eficaz

XII - Resumen del Programa

Unidad 1: Solución numérica de ecuaciones algebraicas
Unidad 2: Sistemas lineales
Unidad 3: Métodos iterativos para sistemas no lineales
Unidad 4: Ajuste de curvas e interpolación
Unidad 5: Ecuaciones diferenciales ordinarias. Problemas de valor inicial
Unidad 6: Ecuaciones diferenciales Ordinarias. Problemas de valor de contorno
Unidad 7: Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales

XIII - Imprevistos

En caso de imprevistos, dependiendo de qué se trate, se convocará a los estudiantes a proceder a trabajar en clases virtuales a través de plataforma G-Classroom, ya sea para clases teóricas o prácticas y/o clases teóricas-prácticas. Para ello deberán otorgarnos sus correos electrónicos.

En situación de Pandemia, se trabaja de la siguiente manera

La metodología de del dictado teórico-práctico es semejante a la descrita en el presente programa.

La condición para regularizar/promocionar cambia a la realización de una única resolución integral de un problema de mayores características y complejidad.

El examen final para alumnos regulares, consiste en asistir presencialmente a la facultad y rendir un examen escrito de características teóricas (cuestionario) frente a un docente de la asignatura. La calificación se informa algunos días después mediante correo electrónico.

XIV - Otros

Aprendizajes Previos:

- Representar esquemáticamente el funcionamiento de un programa
- Desarrollar el pensamiento lógico y algorítmico
- Representar gráficamente los datos obtenidos
- Resolver variaciones de campos escalares y vectoriales
- Resolver sistemas de ecuaciones algebraicas
- Resolver ecuaciones diferenciales de primer orden

Detalles de horas de la Intensidad de la formación práctica.

Cantidad de horas de Teoría: 30 hs

Cantidad de horas de Práctico Aula:

Cantidad de horas de Práctico de Aula con software específico: 30 hs

Cantidad de horas de Formación Experimental: No tiene

Cantidad de horas de Resolución Problemas Ingeniería con utilización de software específico: 15 hs

Cantidad de horas de Resolución Problemas Ingeniería sin utilización de software específico: No aplica en este curso

Cantidad de horas de Diseño o Proyecto de Ingeniería con utilización de software específico: No aplica en este curso

Cantidad de horas de Diseño o Proyecto de Ingeniería sin utilización de software específico: No aplica en este curso

Aportes del curso al perfil de egreso:

- 1.1 Identificar, formular y resolver problemas (Nivel 1 y 2)
- 2.1 Utilizar y adoptar de manera efectiva las técnicas, instrumentos y herramientas de aplicación (Nivel 1 y 2)
- 2.4 Aplicar conocimientos de las ciencias básicas de la ingeniería y de las tecnologías básicas (Nivel 2)
- 2.6 Evaluar críticamente ordenes de magnitud y significación de resultados numéricos (Nivel 1)
- 3.2 Comunicarse con efectividad en forma escrita, oral y gráfica. (Nivel 1)
- 3.5 Aprender en forma continua y autónoma. (Nivel 1 y 2)