

# CALCULOS AVANZADOS EN INGENIERIA QUIMICA I

Profesora: Dra. María Soledad Díaz

## Programa

### 1. Modelado Matemático en Ingeniería Química

Conceptos fundamentales. Ecuaciones algebraicas en balances de masa. Ecuaciones diferenciales ordinarias en balances de masa y energía en estado no estacionario. Problemas de condiciones de borde y ecuaciones a derivadas parciales en problemas de transferencia de calor y masa.

### 2. Ecuaciones Algebraicas Lineales y Análisis Matricial

Solución de sistemas de ecuaciones algebraicas lineales. Sistemas lineales especiales. Problema de autovalores. Descomposición en valores singulares. Descomposición QR. Uso y/o implementación de programas para computadora.

### 3. Expansiones de Taylor y Técnicas de Aceleración

Derivación de las expansiones de Taylor y análisis de error, funciones de varias variables, aplicaciones. Transformación de Euler, Paddé, Shanks. Técnicas de adición para series. Uso y/o implementación de programas para computadora.

### 4. Interpolación y Regresión por Cuadrados Mínimos

Interpolación lineal. Interpolación con Polinomios. Interpolación por splines, Interpolación racional. Interpolación multidimensional. Cuadrados mínimos lineales y no lineales. Regresión lineal y no lineal múltiple. Uso y/o implementación de programas para computadora.

### 5. Ecuaciones Algebraicas No Lineales

Solución de una ecuación simple con una incógnita. Raíces de una ecuación polinomial. 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.

### 6. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias. Métodos Numéricos

Revisión de métodos convencionales para problemas de valor inicial no rígidos. Estimación del error local y global. Análisis de estabilidad de los métodos numéricos. Ecuaciones diferenciales rígidas y presentación de los métodos para resolverlas. 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. Algoritmo tridiagonal. Método de los residuos. Colocación ortogonal sobre elementos finitos. Uso y/o implementación de programas para computadora.

### 7. Introducción a Ecuaciones Diferenciales a Derivadas Parciales. Métodos Numéricos

Introducción y ejemplos de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales. Condiciones de borde. Ecuaciones diferenciales elípticas, parabólicas e hiperbólicas. Método de diferencia finitas. Método de las líneas. Método de elementos finitos. Estabilidad de los métodos. Uso y/o implementación de programas para computadora.

## Bibliografía

1. "Álgebra Lineal y Aplicada", B. Noble, J.W. Daniel, Prentice-Hall, 3ra. Ed., 1989.
2. "Análisis Numérico", R. Burden, J. Douglas Faires, Thomson Learning, 7a ed., 2002.
3. "Applied Nonlinear Analysis in Chemical Engineering", B.A. Finlayson, McGraw-Hill, 1980.
4. "Applied Numerical Linear Algebra", J.W. Demmel, SIAM, 1st Ed., 1997.

5. "An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers, Lineal" J.B. Riggs, Texas Tech. Univ. Press, 2<sup>nd</sup>. Ed., 1994.
6. "Computational Methods in Chemical Engineering", O.T. Hanna y O.C. Sandall, Prentice Hall, 1st. Ed., 1995.
7. "Computational Mathematics in Engineering and Applied Science: ODEs, DAEs, and PDEs", W.E. Schiesser, CRC Press, 1993.
8. "Numerical Computation in Science and Engineering", C. Pozrikidis, Oxford Univ. Press, 1<sup>st</sup>. Ed., 1998.
9. "Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations", U.M. Ascher, L.R. Petzold, SIAM, 1st Ed., 1998.
10. "The Numerical Method of Lines", W.E. Schiesser, San Diego, CA: Academic Press, 1991.