

MÉTODOS COMPUTACIONALES EN INGENIERÍA QUÍMICA (2014-15)**DATOS GENERALES**

Código 43271

Créditos ECTS 3

Departamentos y áreas

Departamento	Área	Dpt. Resp.	Dpt. Acta
INGENIERIA QUIMICA	INGENIERIA QUIMICA	SÍ	SÍ

Estudios en que se imparte

MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA QUÍMICA

Contexto de la asignatura

Asignatura de carácter optativo que se imparte en el segundo semestre del primer curso y que pertenece al módulo de Ingeniería de Procesos y Producto. Complementa a las asignaturas obligatorias del Máster en Ingeniería Química facilitando el diseño de los equipos y sistemas que por su tamaño y complejidad exigen la utilización de las herramientas informáticas más novedosas y potentes, pero al mismo tiempo de fácil manejo. Los estudiantes aprenden a utilizar estos programas de ordenador y aplicarlos a los distintas áreas de la Ingeniería Química, convirtiéndose en herramientas fundamentales para el posterior desarrollo de su trabajo de fin de Máster. Asimismo, esta asignatura permite abordar desde el punto de vista de modelado y simulación cualquiera de los problemas con los que se enfrentaría un futuro estudiante de doctorado en Ingeniería Química.



OBJETIVOS

Objetivos específicos aportados por el profesorado (2014-15)

Conocer el manejo de las herramientas informáticas más novedosas y eficaces que capaciten al futuro Ingeniero Químico para el diseño, análisis, síntesis y simulación de procesos y operaciones que exigen la resolución de modelos matemáticos complejos, y que inevitablemente aparecen en los casos reales propios de la industria de procesos químicos. Asimismo, se pretende que el alumno que desee continuar con los estudios de doctorado en Ingeniería Química domine las herramientas informáticas de cálculo numérico para la resolución de los sistemas que aparecen en las áreas de investigación propias de la Ingeniería Química.

CONTENIDOS

Contenidos teóricos y prácticos (2014-15)

TEMA 1. ERRORES DE REDONDEO Y ARITMÉTICA CON PRECISION FINITA
Representación de números reales en un ordenador. Propagación de errores.

TEMA 2. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES
Algoritmos disponibles en los programas de cálculo numérico para la factorización de matrices y resolución de sistemas lineales. Valores propios y valores singulares. Condición de una matriz. Matrices dispersas. Casos de estudio.

TEMA 3. INTERPOLACIÓN Y AJUSTE
Interpolación y ajuste de datos. Regresión no lineal. Interpolación con splines. Casos de estudio.

TEMA 4. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES
Método de sustitución sucesiva y relajación. Métodos del valor propio dominante y de Wegstein. Métodos de Newton-Raphson y cuasi-Newton. Método de Broyden. Casos de estudio.

TEMA 5. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS
Métodos explícitos. Métodos implícitos. Métodos predictor-corrector. Sistemas de ecuaciones diferenciales acoplados. Estabilidad. Descripción solvers para sistemas rígidos y no rígidos, y para sistemas diferenciales-algebraicos. Problemas con valores de contorno. Herramientas de integración y diferenciación numérica. Cuadratura de Gauss. Casos de estudio.

TEMA 6. OPTIMIZACIÓN NUMÉRICA
Métodos directos. Método de Newton para problemas de gran tamaño. Optimización con restricciones. Control óptimo en Ingeniería Química. Métodos genéticos y por enjambre de partículas. Utilización de software para optimización global. Casos de estudio.

TEMA 7. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES
Aproximaciones mediante diferencias finitas. Aproximación de primer orden. Aproximación de segundo orden. Planteamiento del problema en diferencias finitas. Condiciones iniciales y de contorno. Método explícito. Estabilidad. Métodos implícitos de resolución. Introducción al método de los elementos finitos. Software para la resolución de problemas descritos por ecuaciones en derivadas parciales. Casos de estudio.



EVALUACIÓN

Instrumentos y criterios de Evaluación 2014-15

En cualquier convocatoria la evaluación continua se podrá recuperar mediante una prueba escrita.

Tipo	Criterio	Descripción	Ponderación
EXAMEN FINAL	Se evaluará la exposición del proyecto final que integrará todos los contenidos desarrollados durante el cuatrimestre.	Exposición del proyecto final	30
ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	Se evaluará la resolución de los ejercicios propuestos en las clases de ordenador.	Resolución de problemas	70