

DATOS DE LA ASIGNATURA

Denominación:	MÉTODOS MATEMÁTICOS Y APLICACIONES INFORMÁTICAS EN INGENIERÍA QUÍMICA	Código:	57610		
Clase:	OBLIGATORIA	Curso:	2º		
Carácter:	Anual	Cuatrimestre:	1º y 2º		
Créditos LRU:	9	Teóricos:	6	Prácticos:	3
Créditos ECTS:	8	Horas totales asignatura:	200		
Descriptor: (BOE)	Métodos numéricos y estadísticos de interés en Ingeniería Química. Lenguajes de programación científicos. Algoritmos de utilidad en la resolución de problemas de balances de materia y energía en unidades y procesos. Manejo de paquetes informáticos de interés en Ingeniería Química				

Departamento: Ingeniería Química

Área de conocimiento: Ingeniería Química

PROFESORADO

	Nombre	Ubicación	Horario tutorías
Responsable(s):	Dr. Jose Luis Valverde Palomino. Catedrático de Universidad	Edificio Enrique Costa Novella	M y X de 10h30' a 12h30'
Otros:	Dra. María Jesús Ramos Marco. Titular de Universidad.	Edificio Enrique Costa Novella	L, M y J de 12h30' a 13h00'

PLANIFICACIÓN DOCENTE

1. SITUACIÓN DE PARTIDA

Se requieren conocimientos básicos de análisis numérico.

2. OBJETIVOS DE LA ASIGNATURA

Los objetivos específicos que se pretenden alcanzar con el programa que se propone son básicamente cinco:

- Repaso de los conceptos básicos del análisis matemático útiles en la resolución de problemas de la Ingeniería Química
- Introducción a los principales procedimientos numéricos de regresión lineal y no lineal y de resolución de ecuaciones lineales y no lineales, de integración y de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales empleados en la resolución de problemas de la Ingeniería Química.
- Introducción a la programación en Visual Basic para Aplicaciones (VBA) en el entorno de la hoja de cálculo Excel. El empleo del lenguaje de programación VBA es muy útil porque

permite iniciar al alumno en la programación orientada a objetos básica, en la creación de aplicaciones comerciales y en la conexión de aplicaciones Microsoft Office a otras como Mathcad o HYSYS.

- Manejo del paquete de módulos escritos en VBA que se suministra al alumno para la resolución de cualquier problema numérico en Ingeniería Química.
- Fomentar a través de los ejercicios de resolución obligatoria, que se proponen a lo largo del curso, el que los alumnos posean un dominio adecuado de las calculadoras científicas y programables que ha de serle muy útil en las diferentes asignaturas y laboratorios que han de cursar en el futuro.

3. COMPETENCIAS Y DESTREZAS TEÓRICO-PRÁCTICAS A ADQUIRIR POR EL ALUMNO

3.1 COMPETENCIAS TRANSVERSALES/GENÉRICAS		
INSTRUMENTALES <input type="checkbox"/> Capacidad de análisis y síntesis <input checked="" type="checkbox"/> Capacidad de gestión de la información <input checked="" type="checkbox"/> Capacidad de organizar y planificar <input type="checkbox"/> Comunicación oral y escrita en lengua propia <input type="checkbox"/> Conocimiento de informática en el ámbito del estudio <input type="checkbox"/> Conocimiento de una lengua extranjera <input checked="" type="checkbox"/> Resolución de problemas <input type="checkbox"/> Toma de decisiones <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	PERSONALES <input checked="" type="checkbox"/> Capacidad para comunicarse con expertos de otras áreas <input type="checkbox"/> Compromiso ético <input type="checkbox"/> Habilidades en las relaciones interpersonales <input checked="" type="checkbox"/> Razonamiento crítico <input type="checkbox"/> Reconocimiento a la diversidad y la multiculturalidad <input checked="" type="checkbox"/> Trabajo en equipo <input type="checkbox"/> Trabajo en un contexto internacional <input type="checkbox"/> Trabajo en un equipo de carácter interdisciplinar. <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	SISTÉMICAS <input type="checkbox"/> Adaptación a nuevas situaciones <input checked="" type="checkbox"/> Aprendizaje autónomo <input checked="" type="checkbox"/> Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica <input type="checkbox"/> Conocimientos de otras culturas y costumbres <input checked="" type="checkbox"/> Creatividad <input checked="" type="checkbox"/> Habilidad para trabajar de forma autónoma <input checked="" type="checkbox"/> Iniciativa y espíritu emprendedor <input type="checkbox"/> Liderazgo <input type="checkbox"/> Motivación por la calidad <input type="checkbox"/> Sensibilidad hacia temas medioambientales <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
3.1 COMPETENCIAS ESPECÍFICAS		
Cognitivas (Saber):		
<input type="checkbox"/> Analizar sistema utilizando balances de materia y energía <input type="checkbox"/> Analizar, modelizar y calcular sistemas con reacción química <input checked="" type="checkbox"/> Aplicar conocimientos de matemáticas, física, química e ingeniería <input checked="" type="checkbox"/> Aplicar herramientas de planificación y optimización <input type="checkbox"/> Comparar y seleccionar alternativas técnicas <input checked="" type="checkbox"/> Concebir <input type="checkbox"/> Construir <input type="checkbox"/> Cuantificar los componentes ambientales de un proyecto <input type="checkbox"/> Dimensionar sistemas de intercambio de energía <input type="checkbox"/> Dirigir <input type="checkbox"/> Diseñar <input type="checkbox"/> Diseñar sistemas de manipulación y transporte de materiales	<input type="checkbox"/> Diseño básico de sistemas de automatización y control <input type="checkbox"/> Especificar equipos e instalaciones <input type="checkbox"/> Establecer la viabilidad económica de un proyecto <input type="checkbox"/> Evaluar <input type="checkbox"/> Evaluar e implementar criterios de calidad <input type="checkbox"/> Evaluar e implementar criterios de seguridad <input type="checkbox"/> Evaluar y aplicar sistemas de separación <input type="checkbox"/> Formar <input type="checkbox"/> Identificar tecnologías emergentes <input type="checkbox"/> Integrar diferentes operaciones y procesos <input type="checkbox"/> Liderar <input type="checkbox"/> Modelar procesos dinámicos <input checked="" type="checkbox"/> Operar <input type="checkbox"/> Optimizar <input type="checkbox"/> Planificar	<input type="checkbox"/> Planificar investigación aplicada <input type="checkbox"/> Poner en marcha <input type="checkbox"/> Prever cambios <input type="checkbox"/> Realizar estudios bibliográficos y sintetizar resultados <input type="checkbox"/> Realizar estudios y cuantificación de la sostenibilidad <input type="checkbox"/> Realizar evaluaciones económicas <input type="checkbox"/> Realizar proyectos de I.Q. <input type="checkbox"/> Realizar proyectos de mejora e innovación tecnológica <input type="checkbox"/> Simular procesos y operaciones industriales Otras: <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
Procedimentales/Instrumentales (Saber hacer):		
<input checked="" type="checkbox"/> Calcular <input type="checkbox"/> Concebir <input type="checkbox"/> Construir	<input type="checkbox"/> Evaluar <input type="checkbox"/> Formar <input type="checkbox"/> Liderar	<input type="checkbox"/> Planificar <input type="checkbox"/> Poner en marcha <input type="checkbox"/>

<input type="checkbox"/> Dirigir	<input checked="" type="checkbox"/> Operar	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Diseñar	<input checked="" type="checkbox"/> Optimizar	<input type="checkbox"/>
Actitudinales:		
<input type="checkbox"/> Compromiso	<input type="checkbox"/> Excelencia	<input type="checkbox"/> Sensibilidad medioambiental
<input type="checkbox"/> Conducta ética	<input type="checkbox"/> Honestidad	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Confianza	<input checked="" type="checkbox"/> Iniciativa	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Cooperación	<input checked="" type="checkbox"/> Mentalidad creativa	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Coordinación con otros	<input checked="" type="checkbox"/> Participación	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Decisión	<input type="checkbox"/> Respeto a los demás	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/> Disciplina	<input checked="" type="checkbox"/> Responsabilidad	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Evaluación	<input type="checkbox"/> Sensibilidad social	<input type="checkbox"/>

4. TEMARIO TEÓRICO-PRÁCTICO

UNIDAD TEMÁTICA 1: REPASO DE CONCEPTOS DEL ANÁLISIS MATEMÁTICO DE INTERÉS EN INGENIERÍA QUÍMICA

1. Cálculo vectorial y tensorial. Clases de magnitudes. Operaciones matriciales. Magnitudes auxiliares. Producto entre escalares, vectores y tensores. Operador diferencial nabla. Características de los tensores de segundo orden. Ejemplos aplicados a los Fenómenos de Transporte.
2. Números complejos. Módulo y argumento. Conjugado de un número complejo. Exponencial compleja. Raíz n-ésima de un número complejo. Potencias complejas. Ejemplos aplicados al Control de Procesos Químicos.
3. Resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias. Conceptos previos. Clasificación. Ecuaciones diferenciales de primer orden. Ecuaciones diferenciales de orden superior a uno. La Transformación de Laplace. Ejemplos aplicados a los Fenómenos de Transporte.
4. Resolución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Introducción. Problemas de valor inicial y valor límite. Métodos de resolución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. La Transformada de Laplace en la resolución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Ecuación de Sturm-Liouville. Funciones ortogonales. Método de separación de variables. Ejemplos aplicados a los Fenómenos de Transporte.

UNIDAD TEMÁTICA 2: MÉTODOS NUMÉRICOS DE INTERÉS EN INGENIERÍA QUÍMICA

5. Generalidades. Introducción. Errores numéricos.
6. Métodos de resolución de ecuaciones algebraicas. Introducción. Algoritmo de eliminación gaussiana. La descomposición LU y sus aplicaciones. Algoritmo de Gauss-Seidel. Solución de sistemas de ecuaciones tridiagonales. Ejemplos.
7. Interpolación y extrapolación numérica. Introducción. Interpolación lineal. Interpolación cuadrática. Interpolación a través del polinomio de Lagrange. Interpolación a través del método de los esplines cúbicos. Ejemplos.
8. Integración numérica de funciones. Introducción. Regla de los trapecios. Regla de Simpson. Algoritmo de Romberg. Integración múltiple. Integración de datos discretos. Ejemplos.
9. Evaluación de funciones y derivadas. Introducción. Series y su convergencia. Evaluación de fracciones continuas. Evaluación numérica de funciones especiales. Evaluación de derivadas numéricas. Suavización de datos experimentales. Ejemplos.
10. Cálculo de raíces de funciones de una variable. Introducción. Método de Newton. Método de la secante. Método de la regla falsi. Cálculo de todas las raíces de un polinomio. Cálculo de los valores propios de una matriz. Ejemplos.
11. Modelización de datos experimentales. Introducción. Regresión lineal. Regresión lineal múltiple. Regresión no lineal: el algoritmo de Marquardt. Ejemplos.
12. Resolución de sistemas de ecuaciones no lineales. Algoritmo de sustitución directa. Método de Newton-Raphson. Método cuasi-Newton. Algoritmo de Marquardt. Ejemplos.
13. Ecuaciones diferenciales ordinarias. Problemas de valor inicial. Introducción. Método de Euler. Métodos de Runge-Kutta de cuarto orden. Método de Runge-Kutta-Fehlberg adaptativo. Método de Gear. Método de Michelsen. Método de Rosenbrock. Método de Bader-Deuffhard. Resolución de ecuaciones diferenciales de orden superior a uno. Ejemplos.
14. Fundamentos de resolución de ecuaciones diferenciales: métodos de diferencias finitas y de colocación ortogonal. Introducción. Fundamento del método de diferencias finitas.

Fundamentos del método de colocación ortogonal. Determinación de integrales mediante el procedimiento de colocación ortogonal. Ejemplos.

15. Resolución de ecuaciones diferenciales. Ecuaciones diferenciales ordinarias: problemas de valor frontera. Ecuaciones diferenciales parabólicas. Ecuaciones diferenciales elípticas. Ejemplos.

UNIDAD TEMÁTICA 3: INTRODUCCIÓN A LA PROGRAMACIÓN EN VISUAL BASIC

16. Fundamentos de programación en Visual Basic. Introducción. Mecánica de la escritura de código. Conceptos básicos del código en VBA. Tipos de datos, constantes y variables. Matrices. Operaciones aritméticas y lógicas. Estructuras básicas de control y comandos. Algoritmo de utilidad. Ejemplos.

17. Programación modular. Introducción. Programación modular. Organización general de los módulos de VBA. Subrutinas. Funciones predefinidas en VBA. Ejemplos.

UNIDAD TEMÁTICA 4: DESCRIPCIÓN, MANEJO Y USO DE MÓDULOS NUMÉRICOS EN LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA

18. Descripción de módulos y su manejo. Resolución de ecuaciones algebraicas. Interpolación y extrapolación numérica. Integración numérica de funciones. Evaluación de funciones y derivadas. Cálculo de raíces de funciones de una variable. Modelización de datos experimentales. Resolución de sistemas de ecuaciones no lineales. Ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales. Ejemplos.

19. Resolución de problemas de la Ingeniería Química. Fenómenos de Transporte. Flujo de Fluidos. Transmisión de Calor. Transferencia de materia. Ingeniería de la Reacción Química. Control de Procesos Químicos. Ejemplos.

5. DISTRIBUCIÓN DE ACTIVIDADES

	H O R A S			TOTAL
	Tiempo presencial	Factor aplicable	Tiempo personal	
Clases magistrales	50	1.5	75	125
Laboratorio	0	0	0	0
Tutoría obligatoria	0	0	0	0
Seminario / talleres	40	0	0	40
Trabajo individual	0	25	25	25
Evaluaciones continuas	6	0	0	6
Exámenes periodos establecidos	3	0	0	3
Tiempos totales	99		100	199

6. TÉCNICAS DOCENTES

Señalar con una X las técnicas que va a utilizar en el desarrollo de su asignatura. Puede señalar más de una.		
<input checked="" type="checkbox"/> Sesiones académicas teóricas	<input type="checkbox"/> Exposición y debate	<input checked="" type="checkbox"/> Tutorías especializadas
<input checked="" type="checkbox"/> Prácticas en aula informática	<input type="checkbox"/> Visitas y excursiones	<input type="checkbox"/> Controles de lecturas obligatorias
<input type="checkbox"/> Prácticas en laboratorios	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

7. METODOLOGÍA DOCENTE

La metodología docente de las clases presenciales de esta asignatura se basa en las recomendaciones propuestas por el profesor Felder encaminadas a mejorar el proceso de enseñanza-aprendizaje; especialmente las dirigidas a promover el aprendizaje activo en clase, el uso del aprendizaje cooperativo a través de la elaboración conjunta de ejercicios por parte de grupos pequeños de alumnos y el planteamiento de exámenes que sean accesibles y desafiantes para los mismos.

Las clases presenciales se desarrollan combinando la lección magistral en la que se señalan los conceptos básicos y la resolución por parte de los alumnos de problemas representativos. Esto último permite detectar los errores que los mismos cometen a la hora de la resolución de los mismos y, como consecuencia, incidir en aquellos aspectos que podrían inducir a confusión o mala interpretación de conceptos.

Una parte importante de la asignatura se desarrolla en el aula informática (40 h). Así, los alumnos divididos en dos grupos asisten a clases prácticas en las que el estudiante se inicia en el manejo de la aplicación EXCEL-VBA (12 horas), y se le explica, atendiendo la metodología de casos, los aspectos fundamentales de los cuatros últimos temas del curso incluidos en las unidades temáticas 3 y 4 y dedicadas a la programación VBA y su aplicación a problemas típicos de la Ingeniería Química (28 horas). El primer grupo de prácticas, que se enumerará más adelante, al no requerir formación previa alguna, se impartirá en el formato de seminarios a la par que se explican las dos primeras unidades temáticas; el segundo grupo de prácticas se realizarán una vez finalizada la explicación de las dos primeras unidades temáticas.

Para facilitar la misma, a principio de curso se pone a disposición del alumno toda la información relativa a la organización del curso, las transparencias empleadas durante el mismo, las colecciones de problemas que ha de resolver a lo largo del mismo y exámenes propuestos en cursos anteriores. Esta información se facilita a través de la página web

personal del profesor responsable (<http://www.uclm.es/profesorado/jlvalverde/>) o a través del CD que se entrega al alumno cuando formaliza la matrícula. Asimismo, el estudiante que así lo solicite puede disponer de toda esta información en formato papel. Además, tras la entrega, por parte de los alumnos, de los resultados de una colección de problemas propuesta o de la realización de un examen, el profesor responsable sitúa su página web personal un fichero con las soluciones correcta de la colección o del examen que corresponda.

Los alumnos han de entregar, según plazos que se fijan a principio de curso, cuatro colecciones de problemas (correspondientes a cada uno de los módulos que se evalúan). Para fomentar el aprendizaje cooperativo, estos se organizan en grupos reducidos; de forma que es el grupo el que ha de entregar la colección resuelta y no cada uno de los alumnos.

El primer grupo de prácticas comentado anteriormente se organizan de acuerdo a los siguientes apartados:

PRÁCTICA 1. Introducción al manejo de EXCEL y su entorno.

En esta práctica se repasan los conceptos básicos del manejo de la hoja de cálculo EXCEL, desde el conocimiento básico del entorno de esta aplicación y la realización de cálculos simples con listas de datos al manejo de gráficos. También se muestra la aplicabilidad de la herramienta SOLVER.

PRÁCTICA 2. Construcción de Macros

En esta práctica se introduce al alumno en la construcción y manejo de Macros como modo de automatizar cálculos y operaciones sencillas dentro del entorno EXCEL. El alumno al examinar la mecánica de construcción de estas Macros y el código que toda aplicación Microsoft Office genera, intuye la potencialidad de la conexión entre EXCEL y VBA.

PRÁCTICA 3. Desarrollo de aplicaciones en VBA: botones, cuadros, formularios, controles y menús.

Esta práctica se dedica a la introducción de funciones que facilitan el manejo de aplicaciones y su interacción con el potencial usuario. Así el alumno aprende a incluir en sus futuras aplicaciones botones de comando, cuadro de textos, etiquetas, botones de opciones, casillas de verificación, marcos, cuadros de listas y combinados, formularios, controles y menús.

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN

Evaluación continuada. Se considerarán cuatro módulos:

- ◆ Módulo 1. Temas 1-4
- ◆ Módulo 2. Temas 5-11
- ◆ Módulo 3. Temas 12-15
- ◆ Módulo 4. Temas 16-19

Para que el alumno pueda superar cada módulo es necesario realizar una prueba parcial (P) y entregar una colección de problemas (C) formando parte de un grupo predeterminado a principio de curso. Cada una de las partes, una vez evaluadas, ha de superar la calificación de 5.0 sobre 10. En caso contrario el alumno, deberá acudir a los exámenes ordinarios o extraordinarios para aprobar la asignatura. La nota media de cada módulo se obtendrá realizando la siguiente operación:

$$= 0.7 P + 0.3 C$$

La nota final se obtendrá como media de las obtenidas con cada módulo.

Examen ordinario o extraordinario: En caso de que la evaluación continuada no sea superada, el alumno podrá aprobar la asignatura en la convocatoria ordinaria o en la extraordinaria siempre que en el correspondiente examen realizado se haya obtenido una nota media superior a 5.0 sobre 10.

En cualquier caso, será obligatoria la asistencia al 100% de las prácticas programadas, para poder superar la asignatura.

9. BIBLIOGRAFÍA

9.1. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

CHAPRA, S.C. y CANALE, R.P. Métodos Numéricos para Ingenieros. Ed. McGraw-Hill, México, 1999.

CORDERO, A.; HUESO, J.L.; MARTÍNEZ, E. y TORREGROSA, J.R. Problemas resueltos de Métodos Numéricos. Ed. Thomson, Madrid (2006).

FINLAYSON, B.A. Nonlinear analysis in chemical engineering, Ed. McGraw-Hill, New York, 1980.

JACOBSON, R. Microsoft Excel 97 Visual Basic paso a paso. Ed. Mc Graw-Hill. Madrid 1999.

SPIEGEL, M.R., Transformadas de Laplace. Ed. McGraw-Hill. Madrid, 1981.

VARMA, A. y MORBIDELLI, M. Mathematical Methods in Chemical Engineering, Oxford University Press, New York, 1997.

9.2. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

BRONSON. R., Ecuaciones diferenciales modernas. Ed. McGraw-Hill, Madrid, 1973.

FOGIEL, M., The numerical analysis Problem Solver, Ed. REA New Jersey, 1988.

HOLLAND, C.D. y LIAPIS, A.I. Computer methods for solving dynamic separation problems. Ed. McGraw-Hill. New York, 1983.

JENSON, V.G. y JEFFREYS, G.V. Métodos matemáticos en Ingeniería Química. Ed. Alhambra, Madrid 1969

JOYANES, L. y MUÑOZ, A. Microsoft Visual Basic 6.0. Ed. McGraw-Hill. Madrid, 1999.

KINCAID, D. y CHENEY, W. Análisis numérico. Las matemáticas del cálculo científico. Ed. AddisonWesley Iberoamericana. Wilmington, 1994.

MICROSOFT CORPORATION. Microsoft Visual Basic 6.0. Manual del programador. Ed. McGraw-Hill. Madrid, 1998.

PRESS, W.H., TEUKOLSKY, S.A., VETTERLING, W.T. y FLANNERY, B.P. Numerical Recipes in FORTRAN: the Art of Scientific Computation. Ed. Cambridge University Press. Segunda edición. New York, 1992.

RIGGS, J.B. An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers. Ed. Texas Tech. University Press. Segunda edición. Lubbock, 1994.

SPIEGEL, M.R., Transformadas de Laplace. Ed. McGraw-Hill. Madrid, 1981.

WALKENBACH, J., Programación en EXCEL 2000 con VBA. Ed. Anaya Multimedia. Madrid, 2000.