

CONTENIDO

PRÓLOGO	13
UNA VISIÓN DE LA MODELACIÓN Y SIMULACIÓN DE PROCESOS	15
1. SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES	21
1.1 Métodos de solución directa.....	21
1.1.1 Eliminación de Gauss-Jordan.....	21
1.1.2 Caso de matrices tridiagonales.....	24
1.1.3 Número de operaciones requeridas	27
1.1.4 Métodos directos implementados en Matlab®	28
1.2 Métodos iterativos	29
1.2.1 Método de Jacobi (Desplazamientos simultáneos).....	30
1.2.2 Método de Gauss-Seidel (Desplazamientos sucesivos)	31
1.2.3 Método de relajaciones sucesivas	31
1.2.5 Estimación del error en métodos iterativos.....	34
1.2.6 Métodos iterativos implementados en Matlab®	35
1.3 Análisis del error.....	35
1.4 Problemas propuestos	36
1.5 Referencias	40
2. ECUACIONES NO LINEALES	43
2.1 Método del punto fijo.....	44
2.2 Teorema de la función contractante (o del punto fijo)	48
2.2.1 Representación gráfica de la iteración de punto fijo.....	49
2.3 Métodos de interpolación.....	49
2.3.1 Interpolación lineal (método de Newton)	50

2.3.2	Interpolación cuadrática.....	52
2.3.3	Rutinas implementadas en Matlab® para ecuaciones escalares.....	54
2.4	Sistemas de ecuaciones: el método de Newton y sus variantes	55
2.4.1	Variaciones del método de Newton	56
2.4.2	Rutinas implementadas en Matlab® para sistemas de ecuaciones.....	59
2.5	Problemas propuestos	60
2.5.1	Método del punto fijo para ecuaciones escalares	60
2.5.2	Métodos de interpolación para ecuaciones escalares.....	61
2.5.3	Sistemas de ecuaciones	63
2.6	Referencias	68
3.	ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.....	71
3.1	¿Cómo operan los métodos numéricos?.....	72
3.2	Métodos de un paso.....	74
3.2.1	Métodos de Runge-Kutta explícitos	75
3.2.2	Error local de truncación y su control a lo largo de la integración numérica.....	76
3.2.3	Métodos de Runge-Kutta implícitos	77
3.2.4	Conclusiones respecto a métodos Runge-Kutta.....	78
3.3	Métodos lineales multipasos (MLM).....	79
3.3.1	Construcción de los métodos MLM	80
3.3.2	Algoritmos más utilizados: las familias Adams	82
3.3.3	Algoritmos predictor-corrector	84
3.3.4	Conclusiones respecto a los métodos lineales multipasos.....	85
3.4	Estabilidad	86
3.4.1	Criterios y regiones de estabilidad	88
3.5	Ecuaciones diferenciales con escalas de tiempo muy diferentes (sistemas ultra-estables)	94
3.5.1	Métodos apropiados para ecuaciones ultraestables o “stiff”	98
3.5.2	Implementación de algoritmos para ecuaciones ultraestables	99
3.6	Selección de un método de integración numérica	102
3.7	Implementación de integradores numéricos en Matlab®	104
3.8	Optimización de parámetros en modelos dinámicos.....	105
3.8.1	Implementación en Matlab®	107
3.9	Problemas propuestos	110
3.9.1	Integración de EDO-PVI.....	110
3.9.2	Ajuste de parámetros en modelos dinámicos.....	116
3.10	Referencias	119

4. ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS:	
PROBLEMAS DE VALORES EN EL CONTORNO	125
4.1 Introducción	125
4.2 Definición del problema	126
4.3 Métodos más utilizados.....	127
4.4 Métodos de disparos	128
4.4.1 Comentarios respecto al método de disparos.....	133
4.5 Métodos de diferencias finitas	134
4.5.1 Aproximaciones por diferencias finitas	135
4.5.2. Construcción del sistema de ecuaciones	136
4.5.3 Condiciones de borde más generales	137
4.5.4. Implementación de la solución en Matlab®: iteración funcional (o de punto fijo)	139
4.5.5 Implementación de la solución en Matlab®: método de Newton	141
4.5.6 Mejoramiento de la precisión de los resultados.....	144
4.5.7. Comentarios y conclusiones con respecto a diferencias finitas.....	145
4.6 Problemas propuestos	145
4.7 Referencias	154
5. ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES.....	157
5.1 Introducción	157
5.2 Problemas de equilibrio	158
5.3 Problemas de propagación.....	159
5.4 Tipos de condiciones de borde	161
5.5 El método de las líneas en problemas de propagación	163
5.6 El método de diferencias finitas en problemas de equilibrio	169
5.7 Métodos de diferencias finitas en problemas de propagación	174
5.8 Problemas propuestos	179
5.9 Referencias	184
CASOS DE ESTUDIO.....	187
Problema 1. Reacciones múltiples en un reactor batch.....	189
Problema 2. Tiempo de residencia óptimo para reacciones en serie en un reactor CSTR.....	193
Problema 3. Reactores CSTR en serie con tiempo muerto	197
Problema 4. Estanques oscilantes.....	203
Problema 5. Estimación de parámetros: ecuación de Arrhenius e inhibición por sustrato.....	211

Problema 6. Estimación de parámetros e intervalos de confianza: Inhibición por sustrato en sistemas biológicos	219
Problema 7. Biorreactor de cultivo continuo: cinéticas de Monod e inhibición por sustrato	223
Problema 8. Estimación de parámetros: ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO).....	233
Problema 9. Estimación y sensibilidad de parámetros en ecuaciones diferenciales ordinarias	243
Problema 10. Transferencia de calor en una aleta circular: problema de valor de contorno	251
Problema 11. Cilindro que rota entre dos fluidos	259
Problema 12. Aplicación de diferencias finitas a ecuaciones diferenciales parciales	267
Referencias	273
ANEXOS	275
Selección de recursos de The Mathworks.....	277
Los mandamientos de la programación en Matlab®	279