

Métodos Numéricos Aplicados a Ingeniería

Casos de estudio en ingeniería
de procesos usando MATLAB®

EDICIONES UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE
Vicerrectoría de Comunicaciones y Educación Continua
Alameda 390, Santiago, Chile

editorialedicionesuc@uc.cl
www.ediciones.uc.cl

Métodos Numéricos Aplicados a Ingeniería
Casos de estudio en ingeniería de procesos usando MATLAB®

Héctor Jorquera G.
Claudio Gelmi W.

© Inscripción N° 247.517
Derechos reservados
Noviembre 2014
ISBN N° 978-956-14-1482-2

Primera Edición

Diseño:
versión | producciones gráficas ltda.

Impresor:
Salesianos Impresores S.A.

CIP-Pontificia Universidad Católica de Chile
Jorquera, Héctor.

Métodos numéricos aplicados a ingeniería : casos de estudio en ingeniería de procesos usando MATLAB®
/ Héctor Jorquera González, Claudio Gelmi Weston.

Incluye bibliografías.

1. Análisis numérico – Procesamiento de datos.
2. Ingeniería de la producción – Procesamiento de datos.
3. MATLAB (Programa para computador)
 - I. Tit.
 - II. Gelmi Weston, Claudio Andrés.

2014

518.0285 + dc 23

RCAA2

FACULTAD DE INGENIERÍA

Métodos Numéricos Aplicados a Ingeniería

Casos de estudio en ingeniería
de procesos usando MATLAB®

Héctor Jorquera González
Claudio Gelmi Weston



EDICIONES UC

CONTENIDOS

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	<i>Interpolación cuadrática</i>	52
2.3.3	<i>Rutinas implementadas en Matlab® para ecuaciones escalares</i>	54
2.4	Sistemas de ecuaciones: el método de Newton y sus variantes	55
2.4.1	<i>Variaciones del método de Newton</i>	56
2.4.2	<i>Rutinas implementadas en Matlab® para sistemas de ecuaciones</i>	59
2.5	Problemas propuestos	60
2.5.1	<i>Método del punto fijo para ecuaciones escalares</i>	60
2.5.2	<i>Métodos de interpolación para ecuaciones escalares</i>	61
2.5.3	<i>Sistemas de ecuaciones</i>	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	<i>Métodos de Runge-Kutta explícitos</i>	75
3.2.2	<i>Error local de truncación y su control a lo largo de la integración numérica</i>	76
3.2.3	<i>Métodos de Runge-Kutta implícitos</i>	77
3.2.4	<i>Conclusiones respecto a métodos Runge-Kutta</i>	78
3.3	Métodos lineales multipasos (MLM).....	79
3.3.1	<i>Construcción de los métodos MLM</i>	80
3.3.2	<i>Algoritmos más utilizados: las familias Adams</i>	82
3.3.3	<i>Algoritmos predictor-corrector</i>	84
3.3.4	<i>Conclusiones respecto a los métodos lineales multipasos</i>	85
3.4	Estabilidad	86
3.4.1	<i>Criterios y regiones de estabilidad</i>	88
3.5	Ecuaciones diferenciales con escalas de tiempo muy diferentes (sistemas ultra-estables)	94
3.5.1	<i>Métodos apropiados para ecuaciones ultraestables o “stiff”</i>	98
3.5.2	<i>Implementación de algoritmos para ecuaciones ultraestables</i>	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	<i>Implementación en Matlab®</i>	107
3.9	Problemas propuestos	110
3.9.1	<i>Integración de EDO-PVI</i>	110
3.9.2	<i>Ajuste de parámetros en modelos dinámicos</i>	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

PRÓLOGO

Este texto universitario tiene dos propósitos: i) presentar de manera concisa en qué consisten los métodos numéricos más utilizados para resolver las ecuaciones habitualmente usadas en el ámbito de la ingeniería. Esto desde el punto de vista de quien necesite resolver dichos problemas, pero sin entrar en los detalles del análisis numérico propiamente tal: existencia, unicidad de soluciones, convergencia, etcétera; y ii) mostrar cómo se puede utilizar Matlab® para resolver las distintas categorías de problemas típicos en el amplio campo de la ingeniería de procesos. Actualmente, más de tres mil universidades en todo el mundo emplean Matlab® para la enseñanza e investigación en las más diversas disciplinas científicas e ingenieriles. Este explosivo aumento en su uso ha estado acompañado de un aumento importante de libros universitarios. Sin embargo, a nuestro parecer no existen muchos textos en donde se hayan vinculado directamente los métodos numéricos más comunes con el lenguaje Matlab®, de manera de presentar tanto la técnica numérica como su implementación de modo conjunto, como en esta obra.

La primera parte de este texto hace una revisión de los distintos métodos numéricos existentes y cómo ellos se pueden implementar con ayuda de funciones disponibles en Matlab®, por lo que presenta una perspectiva complementaria al manual de usuario disponible en dicho software, o a los libros que enseñan a programarlo. Se presentan las diversas técnicas y algoritmos enfatizando cuáles son más adecuados para cada problema en particular; si bien no siempre existen algoritmos “universales” para un problema dado, se comentan los tipos de dificultades que se pueden presentar, cómo diagnosticarlos y prevenirlos. Cada capítulo contiene ejemplos resueltos y un listado de problemas propuestos, todos ellos han sido probados en evaluaciones de los cursos “Matemáticas aplicadas a la ingeniería de procesos” y “Modelación y simulación dinámica”, impartidos por los autores en la Escuela de Ingeniería de la Pontificia Universidad Católica de Chile desde hace más de 15 años.

La segunda parte de este texto presenta una selección arbitraria de problemas resueltos, incluyendo su código y figuras de resultados. Hemos tenido especial cuidado en incluir aquellos problemas que consideramos son más ilustrativos e interesantes para el estudiante (ajuste de parámetros en ecuaciones no lineales y ecuaciones diferenciales ordinarias, intervalos de confianza, optimización de un biorreactor, etcétera). Como podrán apreciar, el nivel de estos no defraudará ni a los alumnos de pregrado ni a los de postgrado. Los problemas no se limitan a describir situaciones en estado estacionario, sino que por el contrario, hemos tratado de incluir la mayor cantidad de problemas dinámicos. La estructura general de resolución de cada problema es simple: una vez que las ecuaciones gobernantes del fenómeno son derivadas o identificadas, se presentan los códigos en Matlab[®], junto a una breve explicación de ellos. Se incluyen abundantes gráficas y, en algunos casos, las explicaciones de los problemas sobrepasan con creces el propósito de estos, permitiendo con ello introducir al estudiante en algún tema derivado del problema. Quisiéramos recordarle al lector que la programación —así como se nos enseñó cuando aprendimos a integrar— es más bien un arte. Con ello, queremos hacer notar que otras soluciones son totalmente correctas, aunque nos hemos esforzado en buscar las más simples y directas. Todos los programas desarrollados en la segunda parte se encuentran disponibles en la página web www.systemsbiology.cl/matlab. Quedan cordialmente invitados a explorarlos y modificarlos. En ella también encontrarán las posibles correcciones que surjan a este texto (como toda obra escrita no estaremos exentas de ellas).

Finalmente, pero no menos importante, quisiéramos agradecer en forma muy especial a nuestras respectivas familias por su comprensión por el tiempo sustraído para la elaboración de este libro.

Héctor Jorquera González, Ph.D.
Claudio Gelmi Weston, Ph.D.
Santiago, julio 2014.