

## 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 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