

Matemáticas de la Especialidad

Química Industrial y Medio Ambiente

Grado en Ingeniería Industrial. Curso 2013/2014

Segundo semestre; 4,5 créditos ECTS

Programa

Fundamentos de los métodos numéricos en la ingeniería

- Conceptos básicos
- Representación de un número en formato estándar IEEE
- Aritmética en un ordenador
- Evaluación de errores
 - Error de cancelación
 - Errores en algoritmos
 - Solución de una ecuación cuadrática
 - Aproximación de la derivada
 - Una suma de infinitos sumandos
 - Polinomios de Wilkinson

Fundamentos de álgebra lineal numérica

- Operaciones con matrices
 - Producto de una matriz por un vector
 - Producto de dos matrices
 - Fórmula de Strassen
- Normas
 - Vectoriales
 - Matriciales
- Condicionamiento de sistemas de ecuaciones

Sistemas de ecuaciones lineales. Métodos directos de solución

- El problema a resolver; consideraciones teóricas
- Eliminación de Gauss
 - Pivotación
 - Algoritmo
 - Número de operaciones
 - Método de Gauss-Jordan
- Matlab y los sistemas de ecuaciones lineales
- Factorización LU
 - Métodos explícitos para su obtención
 - Método de Crout
 - Método de Doolittle
 - Matlab y la factorización LU
- Solución de sistemas modificados
- Refinamiento iterativo
- Sistemas con matrices especiales
 - Matrices simétricas
 - Factorización LDL^T
 - Factorización de Cholesky: matrices simétricas definidas positivas
 - ◊ Matlab y la factorización de Cholesky

- Matrices simétricas semidefinidas positivas
- Matrices simétricas indefinidas

Mínimos cuadrados lineales

- Fundamentos teóricos
 - Sistemas incompatibles. Ecuaciones normales
 - Sistemas indeterminados
- Resolución numérica del problema
 - Método de Gram-Schmidt
 - Método de Gram-Schmidt modificado
 - Factorización QR
 - Descomposición numérica en valores singulares
 - Comparación de los métodos
- Matlab y la solución de problemas de mínimos cuadrados

Interpolación y aproximación de funciones

- Interpolación polinómica
 - Polinomios de Lagrange
 - Polinomios de Newton
 - Polinomios Ortogonales
- Interpolación polinomial por trozos
 - Interpolación de Hermite
 - Interpolación de splines cúbicas

Interpolación trigonométrica y la transformada de Fourier

- Interpolación trigonométrica
- Números complejos
- Transformada de Fourier Discreta
- Transformada Rápida de Fourier
- Interpolación Trigonométrica con la Transformada Rápida de Fourier

Sistemas lineales de grandes dimensiones: Matrices dispersas

- Matrices dispersas
- Almacenamiento en ordenador de matrices dispersas
- Operaciones algebraicas elementales con matrices dispersas
- Solución de grandes sistemas lineales de matriz dispersa
- Matrices dispersas simétricas y eliminación de Gauss
 - Nociones básicas sobre grafos
 - Interpretación mediante grafos de la eliminación de Gauss
 - El algoritmo de grado mínimo
 - El algoritmo de Cuthill-McKee
- Matrices dispersas no simétricas y eliminación de Gauss
- Mínimos cuadrados
- Software para matrices dispersas

Sistemas de ecuaciones lineales. Métodos iterativos de solución

- Velocidad o rapidez de convergencia
- Método de Jacobi
- Método de Gauss-Seidel
- Métodos de relajación
- Métodos de dirección de descenso (minimización)
 - Obtención de direcciones de descenso
 - Método de los gradientes conjugados
- Comparación numérica de los métodos

Cálculo de valores propios, vectores propios y valores singulares

- Apuntes teóricos sobre valores y vectores propios
 - Propiedades de los valores propios
- Tipos de matrices y valores propios
- Triangularización de Schur y aplicaciones
- Localización de valores propios
- Obtención numérica
 - Método de Jacobi
 - Método de la iteración de potencia
 - Método de la iteración inversa
 - Iteración mediante cociente de Rayleigh
 - Deflación
 - Iteración simultánea
 - Iteración QR
 - Subespacios de Krylov
 - Comparación de los métodos
- Cálculo de valores singulares

Sistemas de ecuaciones no lineales

- El problema
- Sistemas de una ecuación y una variable
 - Método de la bisección
 - Método de Newton
 - Variantes del método de Newton
 - Método de Müller
- Sistemas de ecuaciones no lineales
 - Método de Newton-Raphson
 - Variantes del método de Newton
 - Métodos cuasi Newton

Mínimos cuadrados no lineales

- Definición del problema
 - Estimación del estado de sistemas eléctricos
- Resolución numérica del problema
 - Método de Gauss-Newton
 - Método de Levenberg-Marquardt
 - Método de Newton

Introducción a la Optimización: Programación no lineal sin condiciones

- El problema
- Condiciones de mínimo
- Métodos de dirección de descenso
 - Método del gradiente o de la máxima pendiente
 - Método de Newton
 - Métodos de Newton amortiguado y de Región de Confianza
 - Método de los gradientes conjugados
 - Métodos cuasi Newton

Derivación e integración de funciones

- Derivación numérica de funciones
 - Fórmulas centradas de segundo orden o superior
 - Extrapolación de Richardson

- Fórmulas derivadas del polinomio de interpolación de Newton
- Derivación simbólica con Matlab
- Integración de funciones
 - Fórmulas de Newton-Cotes
 - Fórmulas abiertas y cerradas
 - Método de Romberg
 - Cuadratura de Gauss-Legendre
 - Cuadratura adaptativa

Integración de ecuaciones diferenciales ordinarias

- Integración numérica de EDOs (ODEs)
 - Método de Euler
 - Mejoras en el método de Euler
 - Método de Taylor
 - Métodos de Runge-Kutta
 - Métodos implícitos y problemas stiff

Integración de ecuaciones diferenciales ordinarias con condiciones de contorno o frontera

- El método del disparo
- El método de las diferencias finitas
- Métodos de colocación y de elementos finitos

Solución de ecuaciones en derivadas parciales

- Métodos de solución. Ecuaciones parabólicas
 - Método de las diferencias adelantadas
 - Método de las diferencias atrasadas
 - El método de Crank-Nicolson
- Métodos de solución. Ecuaciones hiperbólicas
- Métodos de solución. Ecuaciones elípticas
 - Método de las diferencias finitas
 - Método de los Elementos Finitos
- Métodos para EDP no lineales

Optimización Lineal: Introducción a la Programación Lineal

- Formulación
- Definiciones y formas de programas lineales
- Historia
- Ejemplos de programas lineales
- Consideraciones geométricas
- Polítopos
- Puntos extremos y soluciones básicas factibles
 - Teorema fundamental de la programación lineal

Programación Lineal: El método Simplex

- Condiciones de punto óptimo
- Mejora de una solución básica factible
- El algoritmo Simplex
 - Degeneración y ciclado
- Solución básica factible inicial
- Análisis de sensibilidad
- El método Simplex para variables acotadas
- Implementaciones comerciales del método Simplex
 - El método Simplex en forma de "tableau"

- Otras variantes y mejoras del Símplex
- Complejidad computacional del método Símplex

Dualidad en Programación Lineal. Métodos de puntos interiores

- Dualidad
- Dualidad y condiciones de óptimo
 - Condiciones de Karush-Kuhn-Tucker
- El algoritmo dual del Símplex
- Métodos de punto interior
 - Formulación del procedimiento general

Optimización o Programación no lineal con condiciones

- Introducción y planteamiento
- Condiciones de Karush-Kuhn-Tucker
- Algoritmos
 - Programación Cuadrática
 - Programación Cuadrática Secuencial
 - Métodos de puntos interiores

Bibliografía recomendada

- Apuntes de clase en: www.jldelafuenteoconnor.es
- *Applied Numerical Methods with Matlab for Engineers and Scientists*. Chapra, S.C. Third Edition, McGraw-Hill, 2012.
- *Numerical Mathematics*. Quarteroni, A., Sacco, R. y Saleri, F., Springer, 2007.
- *Aprenda Matlab 7.0 como si estuviera en primero*. Javier García de Jalón. UPM, ETSII.
- *Numerical Methods in Finance and Economics. A MATLAB-Based Introduction*. Brandimarte, P. Second Edition. John Wiley and Sons, 2006.
- *Scientific Computing. An Introductory Survey*. Heath, M. Second Edition. McGraw-Hill, 2002.