

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

EQE-358 – Métodos Numéricos em Engenharia Química

CARÁTER: Obrigatória

CARGA HORÁRIA: 60 horas

CRÉDITOS: 04

PRÉ-REQUISITOS RECOMENDADOS: Álgebra linear e cálculo diferencial e integral

RESPONSÁVEL: Prof. Argimiro R. Secchi – sala G-116

SÚMULA/EMENTA: Conceitos Básicos. Séries de Potência. Resoluções de Equações Algébricas Não-Lineares. Resolução de Sistemas de Equações Algébricas Lineares e Não-Lineares. Interpolação Polinomial. Diferenciação Numérica. Integração Numérica. Resolução de Equações Diferenciais Ordinárias. Resolução de Equações Diferenciais Parciais. Regressão Linear e Não-Linear. Aplicações em Problemas Industriais.

OBJETIVOS: Discutir e aplicar técnicas e métodos numéricos para a resolução de problemas típicos de processos químicos, bioquímicos e da indústria de alimentos.

PROGRAMA:

1. Introdução – 2h
 - 1.1 Sistemas numéricos
 - 1.2 Erros em computação
2. Aproximações de Funções – 2h
 - 2.1 Série de potências
 - 2.2 Frações continuadas
 - 2.3 Razão de polinômios
 - 2.4 Séries de Fourier
3. Interpolação Polinomial – 6h
 - 3.1 Tabela de diferenças de Newton
 - 3.2 Interpolação de Lagrange
 - 3.3 Análise de erros
 - 3.4 Critério de minimização do erro máximo
 - 3.5 Telescopagem de séries
4. Soluções de Equações em uma Variável – 6h
 - 4.1 Métodos diretos
 - 4.2 Substituições sucessivas
 - 4.3 Método de Newton-Raphson
 - 4.4 Métodos quasi-Newton
 - 4.5 Método de Müller
 - 4.6 Homotopia e método da continuação
 - 4.7 Análise de convergência
5. Sistemas de Equações Algébricas – 6h
 - 5.1 Pivotamento e eliminação de Gauss
 - 5.2 Métodos iterativos para sistemas lineares
 - 5.3 Sistemas tri-diagonais
 - 5.4 Método das substituições sucessivas para sistemas não-lineares
 - 5.5 Generalização do método de Newton-Raphson

6. Integração Numérica – 4h
 - 6.1 Método tipo Newton-Cotes
 - 6.2 Métodos tipo quadratura de Gauss
 - 6.3 Integrais múltiplas
 - 6.4 Integrais impróprias
7. Problemas de Valor Inicial para Equações Diferenciais Ordinárias – 8h
 - 7.1 Métodos de Euler
 - 7.2 Métodos de Runge-Kutta
 - 7.3 Métodos de múltiplos passos
 - 7.4 Conceito de rigidez
 - 7.5 Restrições algébricas e conceito de índice diferencial
8. Introdução à Otimização – 6h
 - 8.1 Condições de otimalidade
 - 8.2 Métodos diretos
 - 8.3 Métodos indiretos
 - 8.4 Método dos mínimos quadrados na estimação de parâmetros
9. Problemas de Valor de Contorno para Equações Diferenciais Ordinárias – 4h
 - 9.1 Métodos iterativos
 - 9.2 Método da aproximação polinomial
10. Problemas de Valor de Contorno para Equações Diferenciais Parciais – 6h
 - 10.1 Métodos de diferenças finitas
 - 10.2 Métodos de volumes finitos

MÉTODO DE TRABALHO: aulas teórico-práticas em sala de aula e em laboratório de computação.

CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO NA DISCIPLINA

- (a) Serão realizados sete ou oito testes escritos ao longo do curso com conteúdo não acumulativo e uma avaliação escrita adicional, abrangendo **TODA A MATÉRIA**, com dupla finalidade: (i) segunda chamada; (ii) avaliação para melhorar a média. A média do aluno será o maior valor entre a média aritmética de todos os testes e a média aritmética desconsiderando a pior e a melhor nota dos testes. Para os alunos que fizerem a avaliação adicional, a média será o maior valor entre a média dos testes e a média ponderada das quatro melhores notas dos testes com peso um e da avaliação adicional com peso 3. O aluno que obtiver média inferior a sete (7,0) e superior a três (3,0) poderá fazer uma avaliação escrita final com **toda a matéria**, cuja média, calculada com a nota desta avaliação e a média anterior, deve ser maior ou igual a cinco (5,0) para aprovação.

Datas das Provas: Testes – na quarta-feira seguinte ao término do conteúdo do teste

Prova Substitutiva – ver no link abaixo

Prova Final – ver no link abaixo

- (b) Frequência às aulas é verificada e o aluno deve assistir a, no mínimo, **75%** das mesmas, **caso contrário o aluno será reprovado por falta.**

BIBLIOGRAFIA:

- Dalcídio Moraes Cláudio e Jussara Maria Marins: “Cálculo Numérico Computacional”, Atlas, 2a Edição, 1994.
- Décio Sperandio, João Teixeira Mendes e Luiz Henry Monken e Silva: “Cálculo Numérico: Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos”, Pearson - Prentice Hall- São Paulo – 2003.
- Edgar, T. F. & Himmelblau, D. M.: Optimization of Chemical Processes – McGraw-Hill, 1988.
- Márcia A. Gomes Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes: “Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais”, Makron, 2a Edição, 1996.
- M. Cristina C. Cunha: “Métodos Numéricos”, Editora Unicamp, 2a Edição, 2003.
- Richard L. Burden e J. Douglas Faires: “Análise Numérica”, Thomson, São Paulo, 2003.

MATERIAL DA DISCIPLINA DISPONÍVEL NO ENDEREÇO:

<http://www.peq.coppe.ufrj.br/Pessoal/Professores/Arge/EQE358>