

Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos - TPQBq

**Escola de Química - UFRJ
Agosto de 2007**

DISCIPLINA

Métodos Matemáticos Aplicados a Processos Químicos e Bioquímicos

EQE-703

Carga Horária 40 hs

José Luiz de Medeiros e Ofélia Q.F. Araújo

Engenharia Química – UFRJ

jlm@eq.ufrj.br, ofelia@eq.ufrj.br

Tel. 21-2562-7535

OBJETIVOS

Fornecer elementos necessários à obtenção de soluções para problemas dos tipos:

- (i) Equações Algébricas(EA),**
- (ii) Equações Diferenciais Ordinárias(EDO),**
- (iii) Equações Diferenciais Parciais(EDP).**

Nas três categorias são discutidos problemas lineares e não-lineares; métodos aplicáveis a uma e a várias equações, analíticos e aproximados/numéricos.

EMENTA

Equações Algébricas (EA) :

Álgebra Linear; Matrizes e Determinantes; Sistemas Lineares; Inversas e Pseudo-inversas. Sistemas Não-Lineares; Métodos Numéricos de Resolução.

Equações Diferenciais Ordinárias (EDO) :

Classificação; Métodos Analíticos; Funções Ortogonais; Séries de Fourier; Problema de Sturm-Liouville; Sistemas de EDO; Estabilidade em EDOs.

Equações Diferenciais Parciais (EDP) :

Classificação das EDP's. EDPs e Princípios de Conservação; Soluções por Separação de Variáveis. Soluções via Transformadas de Laplace e Fourier. Soluções Numéricas e Métodos Aproximados.

Tópicos opcionais : A critério do professor, do interesse de alunos, e em função da disponibilidade de tempo.

DETALHAMENTO

Equações Algébricas (EA):

Espaços vetoriais, bases, bases ortogonais, ortogonalização. Matrizes e transformações lineares. Determinantes. Auto-valores e auto-vetores. Posto. Formas quadráticas. Diagonalização. Sistemas EA Lineares: Posto e soluções. Inversa e pseudo-inversas. Sistemas EA Não-Lineares: Métodos numéricos Newton-Raphson, otimização e gradiente conjugado.

Equações diferenciais ordinárias (EDO):

Soluções analíticas de sistemas de EDO de ordens 1 e 2. Exponencial matricial. Funções Ortogonais. Séries de Fourier. Problema de Sturm-Liouville. Resoluções numéricas. Teoria de estabilidade de EDOs.

Equações diferenciais parciais (EDP):

EDPs e Princípios de Conservação. Classificação EDP: elípticas, parabólicas, e hiperbólicas. Métodos analíticos: Separação de variáveis e transformadas Laplace e Fourier. Métodos numéricos de resolução de EDP.

Tópicos opcionais: Equações integrais. Sistemas mistos algébrico-diferenciais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Livro texto 1:** **Advanced Engineering Mathematics
8th Ed., Kreyszig, 1999**
- Livro texto 2:** **Advanced Engineering Mathematics
5th Ed., Wylie and Barret, 1982.**
- Livro texto 3:** **Applied Mathematics and Modeling
for Chemical Engineers.
Rice and Do, 1985.**
- Livro texto 4:** **Programação em MATLAB para
Engenheiros
S. J. Chapman, Ed.Thompson, 2002.**

PONTOS

- 1) Operações Matriciais; Determinantes; Posto; Inversão. Sistemas Lineares: Solução Única; Infinitude de Soluções; Solução Impossível; Pseudo-Inversa.**
- 2) Problema de Auto-Valor; Auto-Vetores; Matrizes Simétricas; Auto-Vetores Ortogonais; Transformações de Similaridade / Congruência; Diagonalização; Formas Quadráticas; Classificação de Formas Quadráticas (Auto Valores).**
- 3) Métodos Numéricos 1: Sistemas Algébricos Não Lineares; Newton Raphson; Mínimos Quadrados; Decomposição LU; Fatorização QR.**
- 4) EDO de ordens 1,2 e superior; EDO Homogênea e Não Homogênea; Coeficientes Constantes; Sistemas de EDOS Lineares: Solução Analítica (Homogênea e Não-Homogênea); Séries de Fourier; Probl. Sturm-Liouville.**
- 5) Sistemas de EDO's Não Lineares; Plano de Fase e Variáveis de Estado; Pontos Críticos; Análise de Estabilidade: Critérios de Lyapunov 1 e 2.**

PONTOS

6) Métodos Numéricos 2: Resolução de Sistemas EDOs; Integração e Diferenciação Numérica.

7) Classificação de EDPs: Parabólicas, Hiperbólicas, Elípticas. Método de Separação de Variáveis; Equação da Difusão, Calor e Onda.

8) Resolução de EDPs via Transformadas Laplace e Fourier; EDP-1 : Escoamento em Tubo, Cromatografia a gás; EDP-2: Dispersão atmosférica estacionária e transiente.

9) Métodos Numéricos 3: Método de Diferenças Finitas para EDP-1; Método de Diferenças Finitas para EDP-2: Equações da Difusão, Calor e Onda; Abordagem Crank-Nicolson.

10) Métodos Numéricos 4: Elementos Finitos para EDP-1; Elementos Finitos para EDP-2: Equações da Difusão, Calor e Onda;

AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO

Trabalhos MATLAB :

T1, T2, T3, T4, T5

Provas:

P1 (em casa), P2 (em sala)

Listas de Exercícios :

Para treino, não entregar

Critério para Grau :

A partir da Média Final (MF)

$$MF = \frac{\sum_{i=1}^5 T_i + 2 * P1 + 3 * P2}{10}$$

\Rightarrow

$$MF < 4 \quad \Rightarrow D$$

$$4 \leq MF < 6.5 \quad \Rightarrow C$$

$$6.5 \leq MF < 8.5 \quad \Rightarrow B$$

$$8.5 \leq MF \quad \Rightarrow A$$

PROGRAMA

<i>Semana</i>	<i>Dias</i>	<i>Ponto</i>	<i>Professor(a)</i>	<i>Lista</i>	<i>Trabalho/Prova</i>
1		1	OA	1	-
2		2	JLM	2	<i>T1</i> (Ptos 1, 2)
3		3	OA	3	<i>T2</i> (Pto 3)
4		7	JLM	4	-
5		4	OA	5	-
6		8	JLM	6	<i>T3</i> (Ptos 7, 8)
7		5	OA	7	-
8		9	JLM	8	<i>P1</i>
9		6	OA	9	<i>T4</i> (Ptos 4,5,6)
10		10	JLM	10	<i>T5</i> (Ptos 7,8,9,10)
10		10	JLM	10	<i>P2</i>

Metodologia

- **Aulas Expositivas Baseadas em Recursos Microsoft-Office**
- **Material Expositivo Digital Disponibilizado para Acompanhamento Individual pelos Alunos**
- **Exercícios e Trabalhos Práticos em Sala de Aula e/ou Laboratório de Computação Utilizando Ambiente MATLAB R12 (The Mathworks Inc.) for Windows**
- **Trabalhos em Grupo acerca dos Principais Pontos do Curso**
- **Provas Individuais**