



INSTITUTO POLITÉCNICO DE TOMAR
ESCOLA SUPERIOR DE TECNOLOGIA DE TOMAR

CURSO	Mestrado em Tecnologia Química	ANO LECTIVO	2014/2015
-------	--------------------------------	-------------	-----------

UNIDADE CURRICULAR	ANO	SEM	ECTS	HORAS TOTAIS	HORAS CONTACTO
Matemática e Computação	1º	1º	6	162	30 T; 30 TP

DOCENTES	Doutor João Manuel Mourão Patrício (Professor Adjunto)
----------	--

OBJETIVOS E COMPETÊNCIAS A DESENVOLVER

Nesta Unidade Curricular pretende-se dotar os alunos de conhecimentos na área dos Métodos de Equações Diferenciais Ordinárias e de Derivadas Parciais, bem como de Otimização Não Linear Sem e Com Restrições, fundamentais para a modelação e resolução de vários problemas no âmbito da Tecnologia Química.

Após a aprovação a esta Unidade Curricular, os alunos deverão ter capacidades a nível da formulação de alguns problemas no âmbito da Tecnologia Química como modelos envolvendo equações diferenciais ou problemas de otimização, e sua resolução recorrendo a métodos numéricos.

CONTEÚDOS PROGRAMÁTICOS

1. Equações Diferenciais Ordinárias
 - a. Definições e Terminologia;
 - b. Equações Diferenciais de 1ª Ordem;
 - c. Solução geral de uma Equação Diferencial Completa;
 - d. Problemas de Condição Inicial;
 - e. Modelação Matemática com Equações Diferenciais;
 - f. Alguns Métodos Numéricos:
 - i. Método de Euler;
 - ii. Métodos de Taylor;
 - iii. Métodos de Runge-Kutta.
2. Métodos Numéricos para Sistemas de Equações Lineares
 - a. Métodos Diretos e Métodos Iterativos;
 - b. Métodos de Jacobi, Gauss-Seidel e SOR;
 - c. Matrizes estritamente diagonalmente dominantes e matrizes positivas definidas e semi-definidas;
 - d. Método dos gradientes conjugados e Métodos dos gradientes conjugados com precondicionamento;
 - e. Matrizes esparsas: estruturas de dados e algoritmos.
3. Equações Diferenciais de Derivadas Parciais
 - a. Conceitos Básicos;
 - b. Problemas de Condição Inicial;
 - c. Métodos Numéricos de Diferenças Finitas;
 - d. Aplicação a Problemas Elípticos;
 - e. Aplicação a Problemas Parabólicos;
 - f. Aplicação a Problemas Hiperbólicos.

4. Introdução à Otimização Não Linear
 - a. Problemas Sem Restrições
 - i. Método de Newton para sistemas não lineares;
 - ii. Método de Newton local para problemas de minimização;
 - iii. Métodos Quasi-Newton;
 - iv. Aspectos Computacionais.
 - b. Problemas Com Restrições
 - i. Multiplicadores de Lagrange;
 - Aspetos Computacionais.

BIBLIOGRAFIA

- M. L. Krasnov, A. I. Kriseliov, G. I. Makarenko, *Problemas de Equações Diferenciais Ordinárias*, McGraw-Hill, 1994.
- N. S. Piskounov, *Cálculo Diferencial e Integral*, MIR, 1977.
- J. Stewart, *Cálculo*, Pioneira, 2001.
- D. Zill, *A First Course in Differential Equations with Applications*, PWS-Kent Publishing Company, 1989.
- M. T. Heath, *Scientific Computing: An Introductory Survey*, McGraw-Hill, 2001.
- R. L. Burden, J. D. Faires, *Numerical Analysis*, Brooks-Cole, 2010.
- J. E. Dennis Jr., R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, 1983.
- M. S. Bazaraa, C. M. Shetty, *Nonlinear Programming: Theory and Applications*, Wiley, 1979.
- D. P. Bertsekas, *Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods*, Academic Press, 1982.
- P. E. Gill, W. Murray, M. H. Wright, *Practical Optimization*, Academic Press, 1981.

MÉTODOS DE AVALIAÇÃO

A avaliação contínua e final consiste num projeto computacional, elaborado individualmente ou em grupo, que terá que incorporar um relatório escrito detalhado e um conjunto de listagens do software produzido. O projeto referido é defendido oralmente.



(João Manuel Mourão Patrício – Prof. Adjunto)