



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
SECRETARIA ACADÊMICA DE PÓS-GRADUAÇÃO

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

Código: IT-1354	Nome: Métodos Computacionais Aplicados à Engenharia Química
	Carga Horária Total: 04 créditos, 60T

**Cada crédito Teórico corresponde a 15 horas-aula e cada Prático a 30 ou 45 horas.*

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
INSTITUTO DE TECNOLOGIA

OBJETIVOS:

Resolver sistemas de equações algébricas, diferenciais ordinárias e equações diferenciais parciais aplicadas a problemas de diversas áreas da Engenharia Química.

EMENTA:

Abordagem matemática e numérica para resolver modelos matemáticos de processos químicos. Formulação de problemas físico-químicos. Métodos de solução de sistemas de equações algébricas, diferenciais ordinárias e equações diferenciais parciais. Técnicas de regressão linear e não linear.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

Matrizes e Sistemas de Equações Algébricas Lineares Eliminação gaussiana. Fatoração LU. Pivotamento. Métodos iterativos: Jacobi, Gauss Seidel. Método de Thomas para solução de sistemas tri-diagonais. Estudo de casos

0. Sistemas de Equações Algébricas Não Lineares Bisseção. Regula falsi. Método de Newton-Raphson – Métodos quasi-Newton. Análise de convergência. Estudo de casos

Solução de Sistemas de Equações Diferenciais Ordinárias Revisão de técnicas analíticas de solução de EDOs. Solução de problemas de valor no contorno: Métodos explícitos, implícitos e semi-implícitos. Conceito de rigidez. Restrições algébricas e conceito de índice diferencial. Estimativa de erro, estabilidade e convergência. Solução de problemas de valor no contorno: Método das Diferenças Finitas. Método de Cranck Nicholson. Estudo de casos

Solução de Sistemas de Equações Diferenciais Parciais Solução analítica de EDPs: Método da Separação de Variáveis. Método de Diferenças Finitas. Métodos de Resíduos Ponderados. Métodos de Volumes Finitos. Estudo de casos

Solução de Sistemas de Equações Algébrico-Diferenciais Caracterização de equações algébrico-diferenciais. Métodos tipo BDF. Estudo de casos.

METODOLOGIA:

Aulas expositivas, trabalhos, seminários, provas.

BIBLIOGRAFIA: *(usar normas ABNT para as citações)***BÁSICA:**

CARNAHAN, B.; LUTHER, H.A.; WILKES, J.O. Applied Numerical Methods. New York, John Wiley & Sons, 1969.

PINTO, J.C. e LAGE, P.L.C. Métodos Numéricos em Engenharia Química. Série Escola Piloto de Engenharia Química, COPPE/UFRJ, E-papers, Rio de Janeiro, 2001.

RUGGIERO, M.A.G. e LOPES, V.L.R. Cálculo Numérico – Aspectos Teóricos e Computacionais (2a Edição). Makron Books, 1997.

SECCHI, A.R, BISCAIA JR, E.C. Métodos Numéricos para Engenheiros Químicos Algoritmos e Aplicações. PUBLICADO PELOS AUTORES, 2020.

COMPLEMENTAR:

CONSTANTINIDES, A. & MOSTOUFI, N. Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications. Prentice-Hall, 2000.

CUTLIP, M.B. The Use of Mathematical Software Packages in Chemical Engineering – A Collection of Representative Problems in Chemical Engineering for Solution by Numerical Methods. Prentice-Hall, 2008.

ELNASHAIE, S. & UHLIG, F. Numerical Techniques for Chemical & Biological Engineers Using MATLAB – A Simple Bifurcation Approach. Springer-Verlag, 2007.

SCHWAAB, M; PINTO, J. C., Análise de dados experimentais I. e-papers, Rio de Janeiro, RJ Brasil, 2007.