

Programa da Unidade Curricular

Ano Lectivo: 2013-2014

MATEMÁTICA E COMPUTAÇÃO
Curso de Mestrado em Tecnologia Química

1.º ano 1.º sem 6 ECTS

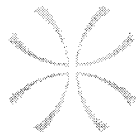
Carga Horária	Horas			Docente
	T	TP	Totais	
30	30		162	João M. Patrício Professor Adjunto

Objectivos

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 Optimização Não Linear Sem e Com Restrições, fundamentais para a modelação e resolução de vários problemas no âmbito da Tecnologia Química.

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 condicionamento;
 - 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 Optimização 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;
 - ii. Aspectos Computacionais.

Método de Avaliação

- Avaliação contínua, que consiste na realização de trabalhos, quer individuais, quer em grupo.
- Exame de Época Normal.
- Exame de Recurso.

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.

Tomar, 17 de Setembro de 2013

O Docente

(João Manuel Mourão Patrício, Prof. Adjunto)