

**Mestrado em Tecnologia Química**

Mestrado, 2º Ciclo

Plano: Despacho nº 9183/2020 - 25/09/2020

**Ficha da Unidade Curricular: Matemática e Computação**

ECTS: 6; Horas - Totais: 162.0, Contacto e Tipologia, TP:45.0;

Ano | Semestre: 1 | S1

Tipo: Obrigatória; Interação: Presencial; Código: 300101

Área Científica: Matemática

**Docente Responsável**

João Manuel Mourão Patrício

Professor Adjunto

**Docente(s)**

João Manuel Mourão Patrício

Professor Adjunto

**Objetivos de Aprendizagem**

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.

**Objetivos de Aprendizagem (detalhado)**

1. Conhecer, implementar e interpretar as soluções obtidas por métodos de resolução numérica de equações diferenciais ordinárias;
2. Conhecer e implementar os métodos numéricos para a solução aproximada de sistemas de equações lineares;
3. Conhecer, implementar e interpretar os resultados obtidos por aplicação de métodos numéricos para alguns tipos de equações diferenciais de derivadas parciais;
4. Conhecer, implementar e interpretar os resultados obtidos por aplicação de métodos numéricos aplicados a problemas de otimização não linear.

**Conteúdos Programáticos**

1. Equações Diferenciais Ordinárias.
2. Métodos Numéricos para Sistemas de Equações Lineares
3. Equações Diferenciais de Derivadas Parciais
4. Introdução à Otimização Não Linear

### **Conteúdos Programáticos (detalhado)**

1. Equações Diferenciais Ordinárias
  - 1.1. Definições e Terminologia;
  - 1.2. Equações Diferenciais de 1ª Ordem;
  - 1.3. Solução geral de uma Equação Diferencial Completa;
  - 1.4. Problemas de Condição Inicial;
  - 1.5. Modelação Matemática com Equações Diferenciais;
  - 1.6. Alguns Métodos Numéricos:
    - 1.6.1. Método de Euler;
    - 1.6.2. Métodos de Taylor;
    - 1.6.3. Métodos de Runge-Kutta.
2. Métodos Numéricos para Sistemas de Equações Lineares
  - 2.1. Métodos Diretos e Métodos Iterativos;
  - 2.2. Métodos de Jacobi, Gauss-Seidel e SOR;
  - 2.3. Matrizes estritamente diagonalmente dominantes e matrizes positivas definidas e semi-definidas;
  - 2.4. Método dos gradientes conjugados e Métodos dos gradientes conjugados com condicionamento;
  - 2.5. Matrizes esparsas: estruturas de dados e algoritmos.
3. Equações Diferenciais de Derivadas Parciais
  - 3.1. Conceitos Básicos;
  - 3.2. Problemas de Condição Inicial;
  - 3.3. Métodos Numéricos de Diferenças Finitas;
  - 3.4. Aplicação a Problemas Elípticos;
  - 3.5. Aplicação a Problemas Parabólicos;
  - 3.6. Aplicação a Problemas Hiperbólicos.
4. Introdução à Otimização Não Linear
  - 4.1. Problemas Sem Restrições
    - 4.1.1. Método de Newton para sistemas não lineares;
    - 4.1.2. Método de Newton local para problemas de minimização;
    - 4.1.3. Métodos Quasi-Newton;
    - 4.1.4. Aspectos Computacionais.
  - 4.2. Problemas Com Restrições
    - 4.2.1. Multiplicadores de Lagrange;
    - 4.2.2. Aspectos Computacionais.

### **Metodologias de avaliação**

Tanto a avaliação contínua como a final consistem 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.

### **Software utilizado em aula**

Matlab/Octave, GAMS.

### **Estágio**

Não Aplicável

### **Bibliografia recomendada**

- Burden, R. e Faires, J. (2010). *Numerical Analysis..* Brooks-Cole. USA
- Canale, R. e Chapra, S. (2006). *Numerical Methods For Engineers..* 1ª, McGraw-Hill. NY
- Heath, M. (2001). *Scientific Computing: an Introductory Survey..* 1, McGraw-Hill. New York
- Wright, M. e Murray, W. e Gill, P. (2019). *Practical Optimization..* 1, SIAM. USA
- Zill, D. (1989). *A First Course in Differential Equations with Applications..* 1, PWS-Kent Publishing Company. Kent

### **Coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos**

Muitos dos problemas reais em Tecnologia Química são modeláveis através de resolução de equações diferenciais, sejam elas ordinárias sejam elas parciais, bem como através de modelos de Otimização. Por outro lado, as técnicas de resolução de sistemas de equações lineares são basilares tanto para os métodos de equações diferenciais como os de otimização. As matérias lecionadas nesta unidade curricular cobrem estas questões, do ponto de vista da modelação e do ponto de vista da sua resolução computacional.

### **Metodologias de ensino**

Aulas teórico-práticas em que se descrevem e exemplificam os conceitos inerentes aos conteúdos lecionados, e aulas teórico-práticas em que são propostos exercícios de aplicação dos conceitos ministrados.

### **Coerência das metodologias de ensino com os objetivos**

Nesta unidade curricular procura-se privilegiar a interligação entre os problemas da vida real e os métodos matemáticos e algorítmicos para a sua resolução. Num curso moderno de Matemática e Computação para alunos de 2º Ciclo de Tecnologia Química é impossível ignorar a vertente computacional, indispensável à resolução de problemas de grande dimensão. É por esta razão que não só a leccionação como também a avaliação desta unidade curricular têm uma fortíssima componente computacional, procurando tirar partido das mais atuais metodologias de resolução dos problemas referidos.

### **Língua de ensino**

Português

**Pré-requisitos**

Não Aplicável

**Programas Opcionais recomendados**

Não Aplicável

**Observações**

Objetivos de Desenvolvimento Sustentável:

- 4 - Garantir o acesso à educação inclusiva, de qualidade e equitativa, e promover oportunidades de aprendizagem ao longo da vida para todos;
  - 11 - Tornar as cidades e comunidades inclusivas, seguras, resilientes e sustentáveis;
  - 12 - Garantir padrões de consumo e de produção sustentáveis;
  - 17 - Reforçar os meios de implementação e revitalizar a parceria global para o desenvolvimento sustentável;
- 

**Docente responsável**

---