**PQI - 5783 – Análise de Processos da Indústria Química**

http://ae4.tidia-ae.usp.br/

Prof. Galo Antonio Carillo Le Roux **galoroux@usp.br**

**Objetivos da disciplina**

O objetivo é dar ao aluno a capacidade de criar modelos de sistemas em engenharia química. Para tal são apresentadas ferramentas de programação e fundamentos de caracterização de sistemas de equações algébricas e diferencias. A ideia não é simplesmente apresentar métodos para a resolução de sistemas de equações algébricas, lineares e não lineares, diferenciais ordinárias e algébrico-diferenciais através de métodos numéricos e analíticos, mas de instrumentalizar o aluno, visitando um grande número de exemplos de aplicação em engenharia química.

**Justificativas**

Construir modelos é uma tarefa nobre e especializada em engenharia. É necessário capacitar pessoas a realizar esta tarefa. Alguns alunos serão capazes de criar e implementar algoritmos.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | Data | Doc | Conteúdo |
| 1 | 31/03 | GACLR | Introdução – Introdução ao Matlab e ao Python |
| 2 | 07/04 | GACLR | Algebra Linear – Determinantes e Matrizes – Métodos Computacionais para Matrizes. Decomposições QR e Schur. Matrizes esparsas. |
| 3 | 14/04 | GACLR | Auto-valores e auto-vetores- Sistemas de EDO´s - Resolução de sistemas de EDO´s Lineares – Transformadas de Laplace e Fourier. |
| 4 | 28/04 | GACLR | Diagrama de fases – Diagrama de fases de sistemas não lineares - Estabilidade |
| 5 | 05/05 | GACLR | Sistemas de equações não lineares algébricas. Métodos de secção, Newton-Raphson, Levenberg-Marquardt |
| 6 | 12/05 | GACLR | Diagramas de bifurcação |
| 7 | 19/05 | GACLR | Sistemas de EDO ́s – Resolução numérica – Estabilidade |
| 8 | 26/05 | GACLR | Sistemas de EDO´s – Principais Métodos |
| 9 | 02/06 | GACLR | Sistemas de Equações Diferenciais e Algébricas – Princípios e Métodos |
| 10 | 09/06 | GACLR | Sistemas de Equações Diferenciais e Algébricas - Aplicações |
| 11 | 23/06 | GACLR | Método dos resíduos ponderados – Álgebra computacional |
| 12 | 30/06 | GACLR | Resolução de sistemas EDO através de colocação ortogonal em elementos finitos |

**Bibliografia**:

AMUNDSON - Mathematical Methods in Chemical Engineering (Matrices and Their Aplications). Prentice-Haal, 1966

BEERS, K.J., Numerical Methods for Chemical Engineering, Cambridge, 2007

BIEGLER, L.T., CAMPBELL, S.L., MEHRMANN, V., Control and Optimization with Differential-Algebraic Constraints, SIAM, 2012

BOYCE, W.E., DIPRIMA, R.C., Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems, Wiley, 10th ed., 2012.

BURDEN, R.L., FAIRES, J.D., BURDEN A., Numerical Analysis, 10th edition, Brooks Cole, 2015

FINLAYSON – Non-Linear Analysis in Chemical Engineering. MCGraw-Hill, 1980

FINLAYSON, B., Introduction to Chemical Engineering Computing, Wiley-Interscience, 2022

GEAR, C.W, *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential*, Prentice Hall, 1971

LAPIDUS, L., SEINFELD, J., Numerical Solution of Ordinary Differential Equations, Academic Press, 1971

MOORE, H., MATLAB for Engineers - 5th Edition, Pearson, 2017

RICE, R.G., DO., D.D., Applied Mathematics and modeling for Chemical Engineers*,* 2nd edition, Wiley-AIChE, 2012.

SECCHI, A.R., BISCAIA JR., E.C., Métodos Numéricos para Engenheiros Químicos: algoritmos e aplicações, publicado pelos autores, 2020

VARMA, A., MORBIDELLI, M., Mathematical Methods in Chemical Engineering, Oxford University Press, 1997.

VILLADSEN, J., MICHELSEN, M.L., Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation, Prentice Hall, 1978