

FISA DISCIPLINEI

Metode numerice in ingineria chimica si biochimica

Titlul Disciplinei: Metode numerice in ingineria chimica si biochimica

Titulari de disciplină: Prof.dr.ing. Valentin PLESU, Conf.dr.ing Gheorghe BUMBAC, conf.dr.ing. Raluca Daniela ISOPESCU

Tipul: pregatire: specialitate

Numar ore curs: 28 ore

Numar ore aplicatii: 28 ore

Numarul de puncte de credit: 5

Semestrul: 5

Pachetul: aria curriculara de specialitate **Ingineria si Informatica Proceselor Chimice si Biochimice**

Preconditii: parcurgerea si/sau promovarea urmatoarelor discipline:

- Matematici
- Utilizarea calculatoarelor si grafica computerizata
- Bazele ingineriei chimice

1. OBIECTIVELE DISCIPLINEI

- **pentru curs :**
Abilitatea de a aplica cunostinte de stiinte naturale (fizica, chimie si biologie), matematica, informatica si de inginerie in obtinrea de modele matematice complexe si rezolvarea acestora pe cale numerica pentru a analiza procese si fenomene specifice inginerie chimice si biochimice
- **pentru aplicatii:**
Acomodarea cu modul de aplicare a tehnicilor numerice in rezolvarea modelelor mantematice ale proceselor specifice ingineriei chimice si biochimice, inclusiv utilizand instrumente informatice dedicate (Matlab si Mathcad)

2. COMPETENTE SPECIFICE (din spectrul de competente al programului de studii)

- Capacitatea de a formula modele matematice specifice ingineriei chimice si biochimice, de a formula modele numerice adecvate fiecarei situatii, de a

selecta cele mai potrivite metode de rezolvare si de a utiliza calculatorul atat pentru rezolvarea modelelor cat si pentru interpretarea datelor numerice obtinute.

- Abilitatea de a aplica cunostinte de stiinte naturale (fizica, chimie si biologie), matematica, informatica si de inginerie in formulare modele matematice si a corespondentului lor numeric pentru a analiza procese si fenomene specifice.
- Abilitatea de a formula si rezolva modele necesare proiectarii si analizei utilajelor si instalatiilor, luând in considerare restrictii economice, de protectia mediului si de siguranta in exploatare, pentru tehnologiile caracteristice industriei chimice si bioindustriilor.
- Abilitatea de a utiliza instrumente informatice in rezolvarea modelelor matematice asociate problemelor de inginerie chimica si biochimica, in special programe specializate de calcul tehnico-stiintific (Mathcad, Matlab),
- Capacitatea de abstractiza si a realiza algoritmi de rezolvare a problemelor in forma numerica.

3. CONTINUTUL TEMATIC (SYLABUS)

a. Curs:

Capitolul	Continutul	Nr. Ore
1. Erori in metodele numerice	1.1. Formularea problemelor - metode numerice in practica inginereasca 1.2. Erori prin trunchiere; 1.3. Reprezentarea numerelor in calculator; 1.4. Erori prin rotunjire; 1.5. Acuratete si precizie	1
2.Rezolvarea numerica a ecuatiilor algebrice si transcendente	2.1 Separarea radacinilor; 2.2 Metoda bisectiei; 2.3 Metoda secantei; 2.4 Metoda aproximatiilor succesive; 2.5 Metoda lui Newton (metoda tangentei);	4
3. Sisteme de ecuatii liniare si metode matriceale	3.1. Metode directe (Eliminare Gauss simpla si cu pivotare); 3.2 Algoritmul Thomas; 3.3. Metode iterative (Iacobi, Gauss-Seidel, relaxarilor succesive); 3.4 Calculul numeric al vectorilor si valorilor proprii (metoda puterii); Factorizarea matricelor	5
4.Interpolarea si aproximarea numerica a functiilor	4.1. Formularea problemelor; 4.2. Interpolare polinomiala (Lagrange, Newton, Hermite, Cebisev); 4.3. Analiza interpolarii polinomiale; 4.4 Interpolare cu functii rationale; 4.5. Interpolare cu functii spline cubice; 4.6 Interpolarea bidimensionala; 4.7 Aproximarea functiilor cu cele mai mici patrate; 4.8 Aproximarea functiilor intr-un punct	5
5. Diferentiere si integrare numerica a functiilor	5.1. Formularea problemelor; 5.2 Diferentiere numerica; 5.3 Formulele Newton-Cotes (regula dreptunghiului, a trapezului, regulile Simpson (1/3 si 3/8)); 5.4. Formule compozite; 5.5. Cuadratura Gauss;	4
6. Integrarea numerica a ecuatiilor diferentiale ordinare;	6.1 Formularea problemei; 6.2 Metode pentru probleme de valori initiale cu un pas (Metoda dezvoltarii in serie Taylor, Metoda Euler, Metode Runge-Kutta) 6.3 Metode pentru probleme de valori initiale multipas (explicite si implicite); 6.4 Rezolvarea numerica a sistemelor de ecuatii diferentiale ordinare; Probleme cu valori la limita (metodele shooting si diferite finite); Aplicatii practice	5
7. Integrarea numerica	7.1. Formularea problemei – discretizarea 7.2 Metode	4

a ecuatilor cu derivate partiale	numerice pentru probleme cu ecuatii parabolice; 7.3. Metode numerice pentru probleme cu ecuatii eliptice; 7.4. Metode numerice pentru probleme cu ecuatii hiperbolice; 7.5. Aplicatii practice	
	TOTAL	28

a. Aplicatii:

1	Elemente practice privind utilizarea matricelor in metode numerice – elemente de MATLAB Aplicatii privind evaluarea erorilor in calculul numeric	2
2	Aplicatii privind rezolvarea numerica a ecuatilor algebrice si transcendente	2
3	Aplicatii privind rezolvarea numerica a sisteme de ecuatii liniare prin metode directe	2
4	Aplicatii privind rezolvarea numerica a sisteme de ecuatii liniare prin metode iterative	2
5	Aplicatii privind calculul numeric al vectorilor si valorilor proprii prin metoda puterii si factorizarea matricelor	2
6	Aplicatii privind interpolare polinomiala (Lagrange, Newton, Hermite, Cebisev) si analiza interpolarii polinomiale	2
7	Aplicatii privind interpolare cu functii spline cubice interpolarea bidimensionala, aproximarea functiilor cu cele mai mici patrute si aproximarea functiilor intr-un punct	2
8	Aplicatii privind diferentiere numerica si integrare numerica (regula dreptunghiului, a trapezului su regulile Simpson (1/3 si 3/8) si formule compozite	2
9	Aplicatii de integrare a ecuatii lor diferentiale ordinare cu metoda Euler si metode Runge-Kutta	2
10	Aplicatii de integrare a ecuatii lor diferentiale ordinare cu metode pentru probleme de valori initiale multipas explicite si implicite	2
11	Aplicatii practice pentru rezolvarea numerica a sistemelor de ecuatii diferentiale ordinare si a problemelor cu valori la limita prin metodele shooting si diferente finite	2
12	Aplicatii de integrare numerica a problemelor cu ecuatii diferentiale cu derivate partiale de tip parabolic	2
13	Aplicatii de integrare numerica a problemelor cu ecuatii diferentiale cu derivate partiale de tip eliptic	2
14	Recapitulare generala a aplicatiilor privind utilizarea metodelor numerice de rezolvare a modelor in ingineria chimica si biochimica	2
		Total 28 ore

4. EVALUAREA

a) Activitatile evaluate si ponderea fiecareia :

Studentii vor fi evaluati in mod continuu, pe perioada semestrului
universitar, precum si la finalul acestuia:

- Activitate la curs (raspuns la intrebari, lucrari,
implicare in activitatea din cadrul cursului): 10% din nota finala
- Activitate individuala (tema de casa) 20% din nota finala
- Activitate practica (laborator) 35% din nota finala
- Verificare finala (aplicatii) 35% din nota finala

b) Cerintele minimale pentru promovare

- obtinerea a 50 % din punctajul total al reperelor 1,2 si 3 de la punctul a si obtinerea a 50 % din punctajul verificarii finale(reper 4 punctul a)

c) Calculul notei finale

50-55 puncte-nota 5; 56-63-nota 6; 64-72- nota7; 73- 81- nota 8; 82-90 nota 9; 91- 100- nota 10)

5. REPERE METODOLOGICE (modul de prezentare, materiale, etc.)

In activitatea de predare sunt utilizate prezentari Powerpoint cu elemente de animatie care alterneaza cu prezentari scrise pe tabla si dialog intens cu studentii. Se mai prezinta si alte materiale sugestive. Sunt puse la dispozitia studentilor notele de curs in forma electronica. Intregul proces de didactic este interactiv. La seminar se lucreaza partial la tabla (formularea, algoritmizarea problemei si demonstrare metodei numerice) si partial pe calculator (rezolvarea efectiva a problemei in MATLAB/MATHCAD)

6. BIBLIOGRAFIA

Materiale de baza :

1. Curs prezentat la Texas A&M University CVEN 302-504 disponibil in forma electronica
2. Danaila S., Berbente C., **2003**, *Metode numerice in Dinamica fluidelor*, Editura Academiei Române, 715p.
3. Postolache M., *Metode Numerice*, Editura Sirius, **1994**
4. Bratianu C., Bostan V., Cojocia L., Negreanu G-P., *Metode Numerice*, Editura Tehnica, **1996**
5. Udriste C., Iftode V., Postolache M., *Metode numerice de calcul*, Editura Tehnica, **1996**
6. Rice R. G., Duong D.D, *Applied Mathematics and Modelling for Chemical Engineers*, John Wiley & Sons, **1995**
7. Constantinides A., Mostoufi N., *Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB – Applications*, Prentice Hall
8. Burden R.L., Faires J.D., *Numerical Analysis*, Prindle Weber&Schmidt, Boston, **1997**.

Materiale suplimentare recomandate :

9. Anderson J. D., Degrez G., Dick E., Grundmann R., **1992**, *Computational Fluid Dynamics. An Introduction*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 291p.
10. Carnahan B., Luther H. A., Wilkes J. O., **1969**, *Applied Numerical Methods*, John Wiley & Sons Inc., New York, 604p.
11. Chapra S., Canale R., **1988**, *Numerical methods for engineers*, Second Edition, McGraw-Hill Inc., New York, 839p.

12. Eaton J., 1998, *GNU OCTAVE – Interactive Language for Numerical Computations*, Department of Chemical Engineering, University of Wisconsin, html document (<http://www.octave.org>).
13. Erokhin V. G., Makhan'Ko M. G., **1986**, *Problems on Fundamentals of hydraulics and heat engineering*, MIR Publishers, Moscow, 286p.
14. Euvrard D., **1994**, *Résolution numérique des équations aux dérivées partielles – Différences finies, éléments finis, problèmes en domaine non borné*, 3e Édition, Masson, Paris, Milan, Barcelone, 329p.
15. Fletcher C. A. J., **1991**, *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, vol. I & II, Second Edition, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 401p. & 493p.
16. Moszyński K., **1973**, *Metode numerice de rezolvare a ecuatiilor diferentiale ordinare*, Editura Tehnica, Bucuresti, 159p.