



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico

Asignatura	Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico			
Código	V11M030V01207			
Titulación	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional. R.D. 1393/2007			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	1	2c
Lengua	Castellano			
Impartición	Inglés			
Departamento	Química física			
Coordinador/a	Hermida Ramon, Jose Manuel			
Profesorado	Hermida Ramon, Jose Manuel			
Correo-e	jose_hermida@uvigo.es			
Web				
Descripción general				

## Competencias de titulación

Código	
A2	(*)Adquirir formación en los métodos de modelización
A3	(*)Aplicar los métodos teóricos y de modelización a sistemas químicos en general
B1	(*)Mejorar la comunicación oral y escrita en Inglés u otros idiomas europeos
B2	(*)Adquirir habilidades generales en el campo de la informática
B3	(*)Ser capaz de utilizar el sistema operativo Unix/Linux
B6	(*)Ser capaz de utilizar estaciones de cálculo y superordenadores
B7	(*)Ser capaz de obtener y manejar bibliografía científico técnica

## Competencias de materia

Resultados previstos en la materia	Tipología	Resultados de Formación y Aprendizaje
Formar a los alumnos en el manejo de las técnicas más usuales de programación en física y en química y familiarizarlo con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas. El alumno deberá ser capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.	saber hacer	A2 A3 B1 B2 B3 B6 B1

## Contenidos

Tema	
Algoritmos y Programación.	Nociones básicas. Métodos avanzados
Programación FORTRAN.	Programas Simples. Programación en Modulos. Programas complejos.

Cálculo matricial.	Nociones básicas. Diagonalización.
Cálculo Integral.	Nociones básicas. Métodos avanzados.
Búsqueda de ceros y optimización de funciones.	Métodos básicos. Algoritmos.
Análisis multivariante.	Dos variables. Varias variables.
Nociones de paralelización.	Introducción a la paralelización

### Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Seminarios	12	40	52
Prácticas en aulas de informática	32	46	78
Resolución de problemas y/o ejercicios	0	20	20

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

### Metodologías

	Descripción
Seminarios	Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.
Prácticas en aulas de informática	La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.  Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle ( <a href="http://www.uam.es/moodle">http://www.uam.es/moodle</a> ). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

### Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Prácticas en aulas de informática	El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.
Seminarios	El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

### Evaluación

	Descripción	Calificación
Seminarios	Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.  Discusión de los trabajos/ejercicios realizados que se irá realizando durante el curso.	40
Resolución de problemas y/o ejercicios	Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura. Corrección de los ejercicios, trabajos que el estudiante irá realizando durante el curso.	60

### Otros comentarios sobre la Evaluación

#### Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,

- 30% el trabajo individual

---

### **Fuentes de información**

Ingeniería del software: Diseño estructurado. J.A. Calco Manzasno y L.Fernández Sanz. Univ. Politécnica de Madrid (Madrid) 1995

S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran (second edition, Univ. Press, Cambridge, 2003)

P. J. Davis and P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration (second edition, Academic Press, Inc., London, 1984)

---

### **Recomendaciones**