



DATOS IDENTIFICATIVOS

Métodos numéricos en química

| | | | | |
|-----------------------|--|--------|-------|--------------|
| Materia | Métodos numéricos en química | | | |
| Código | V11G200V01402 | | | |
| Titulación | Grao en Química | | | |
| Descritores | Creditos ECTS | Sinale | Curso | Cuadrimestre |
| | 6 | OB | 2 | 2c |
| Lingua de impartición | Galego | | | |
| Departamento | Matemáticas Química analítica e alimentaria Química física | | | |
| Coordinador/a | Besada Morais, Manuel | | | |
| Profesorado | Besada Morais, Manuel Estevez Valcarcel, Carlos Manuel | | | |
| Correo-e | mbesada@uvigo.es | | | |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | Esta materia é a versión práctica matemática de aplicación a datos observados e de solución numérica de numerosos problemas que teñen difícil, ou imposible, solución analítica. Permitirá ó alumno adquirir habilidades sobre o manexo de gran cantidade de información numérica e consolidar o manexo dunha calculadora científica de gran potencia. | | | |

Competencias de titulación

| | |
|--------|--|
| Código | |
| A22 | Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos |
| A23 | Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada |
| A29 | Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude |
| B1 | Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade |
| B3 | Aprender de forma autónoma |
| B4 | Procurar e administrar información procedente de distintas fontes |
| B5 | Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas |
| B6 | Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de erros, estimacións de ordes de magnitude, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos |
| B7 | Aplicar os coñecementos teóricos á práctica |
| B8 | Traballar en equipo |
| B9 | Traballar de forma autónoma |
| B12 | Planificar e administrar adecuadamente o tempo |
| B13 | Tomar decisións |
| B14 | Analizar e sintetizar información e obter conclusións |
| B15 | Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo |

Competencias de materia

| | | |
|--|---------------------------------------|----------------|
| Resultados previstos na materia | Resultados de Formación e Aprendizaxe | |
| Utilizar os paquetes numéricos e simbólicos de MATLAB. | A22 | B5 B9 |
| Controlar distintas bases de numeración e decatarse da existencia de erros cometidos nas aproximacións | A29 | B6 B9 |
| Buscar aproximacións de raíces de ecuacións dunha variable e sistemas de ecuacións. | A22 A29 | B5 B6 B7 |

| | | |
|--|------------|--|
| Utilizar polinomios que se axustan a varios puntos do plano. | A22 A29 | B5 B6 B7 |
| Derivar e integrar numericamente, relacionar estes conceptos numéricos e analíticos e entender o porque da súa necesidade. | A22 A29 | B5 B6 B7 |
| Manexar axustes de datos a distintos tipos de curvas de elección previa mediante paquetes informáticos. | A22 A29 | B4 B5 B6 B14 |
| Entender e resolver unha ecuación diferencial e a necesidade dos métodos numéricos. | A22 A29 | B3 B5 B6 B7 |
| Expresar con soltura, de forma oral e escrita, conceptos numéricos. | A23 | B1 B3 B4 B5 B8 B12 B13 B14 B15 |

Contidos

| Tema | |
|---|---|
| Tema 1. Introducción a análise numerica. | Sistemas de numeración Necesidade dos métodos numéricos. Fontes e análise do error. Software disponible. |
| Tema 2. Aproximación de raíces de ecuacións dunha variable. | Condicionamento do cálculo de raíces. Métodos de separación de raíces- Método da bisección. Método de Newton-Raphson. Teorema do punto fixo. |
| Tema 3. Interpolación numérica. | O problema xeral de interpolación. Interpolación de Lagrange. Error de interpolación e elección óptima de nodos. Interpolación polinomial. |
| Tema 4. Axuste de curvas. | Axuste de datos. Rectas de regresión por mínimos cadrados. Aproximación de funcións por mínimos cadrados. Interpolación polinomial a trozos. |
| Tema 5. Derivación e integración numérica. | Esquemas de derivación numérica basados en interpolación. Fórmulas de derivación finitas. Error de derivación. Fórmulas de integración con interpolación polinómica. Error de integración. Fórmulas de cuadraturas. |
| Tema 6. Resolución numérica de sistemas de ecuacións. | Métodos directos de resolución de sistemas lineais: Gauss. Métodos iterativos clásicos. Métodos de descenso: Máximo descenso e gradiente conxugado. Resolución de sistemas non lineais. |
| Tema 7. Ecuacións diferenciais. | Introducción ás ecuacións diferenciais. Método de Euler. Método da serie de Taylor. Método de Runge-Kutta. |

Planificación

| | Horas na aula | Horas fóra da aula | Horas totais |
|---|---------------|--------------------|--------------|
| Sesión maxistral | 13 | 26 | 39 |
| Prácticas en aulas de informática | 26 | 52 | 78 |
| Outros | 2 | 2 | 4 |
| Probas de tipo test | 4 | 12 | 16 |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | 2 | 8 | 10 |
| Traballos e proxectos | 0 | 3 | 3 |

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

| | Descrición |
|-----------------------------------|--|
| Sesión maxistral | Exposición das bases teóricas e orientación por parte do profesorado sobre os contidos da materia |
| Prácticas en aulas de informática | Desenvolvemento nas aulas de informática dos exercicios que se propoñan nas aulas teóricas utilizando a calculadora científica MATLAB. |
| Outros | Resolución de cuestións e dúbidas dos alumnos |

Atención personalizada

| Metodoloxías | Descrición |
|--------------|------------|
|--------------|------------|

| | |
|-----------------------------------|---|
| Prácticas en aulas de informática | Cada estudante demandará ó profesorado as aclaracións que estime oportunas para mellorar a comprensión da materia e desenvolver con éxito as tarefas que lle foron propostas. Estas consultas atenderanse no horario de titorías ou mediante petición previa. |
| Outros | Cada estudante demandará ó profesorado as aclaracións que estime oportunas para mellorar a comprensión da materia e desenvolver con éxito as tarefas que lle foron propostas. Estas consultas atenderanse no horario de titorías ou mediante petición previa. |

| Avaliación | | |
|---|---|---------------|
| | Descrición | Cualificación |
| Prácticas en aulas de informática | Ó final das sesións nas aulas de informática, o alumno resolverá algún exercicio do mesmo tipo que os dos realizados na aula. | 40 |
| Probas de tipo test | Durante o curso realizaranse alomenos tres probas parciais curtas tipo test que contarán un 15 por cen na cualificación final. Ademais, nunha proba final, realizarase outra proba tipo test de tódala materia que contabilizará outro 15 por cen na cualificación final. | 30 |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | Ó finalizar o curso realizarase unha proba práctica resolvendo algúns exercicios prácticos na aula de informática | 20 |
| Traballos e proxectos | Participacion en todas as actividades propostas polo profesorado, sexan estas para realizar dentro ou fóra da aula. | 10 |

Outros comentarios sobre a Avaliación

Os alumnos que non superen a materia na convocatoria ordinaria e pretendan facelo na convocatoria extraordinaria, manterán as cualificacións obtidas durante o curso en cada un dos apartados anteriores, salvo as cualificacións das probas prácticas de informática e as dúas probas realizadas a final de curso que serán avaliadas no exame correspondente. Neste caso, o alumno ten que poñerse en contacto co profesor con suficiente antelación.

A participación do estudante nalgún dos actos de avaliación da materia implicará a condición de presentado e, polo tanto, a asignación dunha cualificación. Considéranse actos de avaliación a asistencia ás prácticas de informática (tres ou mais), a realización de probas ou a entrega dun mínimo do 25% dos problemas ou exercicios encargados polo profesor.

Bibliografía. Fontes de información

Chapra, S.C.; Canale, R.P., **Métodos numéricos para ingenieros**, 2010,
 Besada, M., **MATLAB: todo un mundo**, 2007,
 Mathews, J.H.; Fink, K.D., **Métodos numéricos con MATLAB**, 2000,
 Nakamura, S., **Análisis numérico y visualización gráfica con MATLAB**, 1997,

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104
 Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203