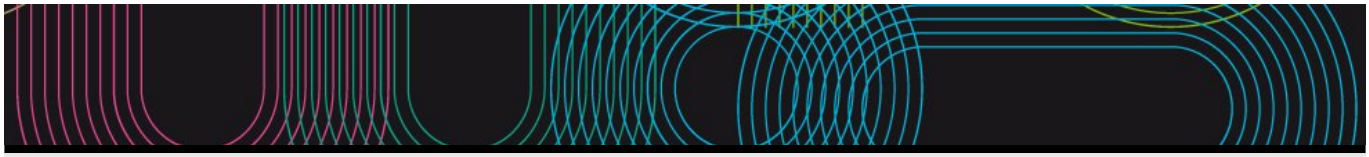

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Métodos numéricos en química				
Asignatura	Métodos numéricos en química			
Código	V11G200V01402			
Titulacion	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	6	OB	2	2c
Lengua Impartición	Gallego			
Departamento	Matemáticas Química analítica y alimentaria Química Física			
Coordinador/a	Besada Morais, Manuel			
Profesorado	Besada Morais, Manuel Hermida Ramón, José Manuel Leao Martins, Jose Manuel			
Correo-e	mbesada@uvigo.es			
Web				
Descripción general	"Traducción automática gallego-->castellano de la guía docente original" Esta materia es la versión práctica matemática de aplicación a datos observados y de solución numérica de numerosos problemas que tienen difícil, o imposible, solución analítica. Permitirá al alumno adquirir habilidades sobre lo manejo de gran cantidad de información numérica y consolidar el manejo de una calculadora científica de gran potencia.			

Competencias	
Código	
A3	Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
A5	Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C29	Demostrar habilidades para los cálculos numéricos y la interpretación de los datos experimentais, con especial énfasis en la precisión y la exactitud
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones

Resultados de aprendizaje		
Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Utilizar los paquetes numéricos y simbólicos de *MATLAB.	C22 C29	D5

Controlar distintas bases de numeración y enterarse de la existencia de errores cometidos en las aproximaciones	A3	C29	D6 D9 D13 D14
Buscar aproximaciones de raíces de ecuaciones de una variable y sistemas de ecuaciones.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Utilizar *polinomios que se ajustan a varios puntos del plano.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Derivar e integrar numéricamente, relacionar estos conceptos numéricos y analíticos y entender lo porque de su necesidad.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Manejar ajustes de datos a distintos tipos de curvas de elección previa mediante paquetes informáticos.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14

Contenidos

Tema	
Tema 1. *Introducción el análisis *numerica.	Sistemas de numeración Necesidad de los métodos numéricos. Fontes y análisis del error. Software *disponible.
Tema 2. Aproximación de raíces de ecuaciones de una variable.	Condicionamiento del cálculo de raíces. Métodos de separación de raíces-Método de la *bisección. Método de Newton-*Raphson. *Teorema del punto hizo.
Tema 3. *Interpolación numérica.	El problema general de *interpolación. *Interpolación de *Lagrange. Error de *interpolación y elección excelente de *nodos. *Interpolación *polinomial.
Tema 4. Ajuste de curvas.	Ajuste de datos. Rectas de regresión por mínimos cuadrados. Aproximación de funciones por mínimos cuadrados. *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 ecuaciones.	Métodos directos de resolución de sistemas lineales: *Gauss. Métodos *iterativos clásicos. Métodos de descenso: Máximo desciendo y *gradiente conjugado. Resolución de sistemas no lineales.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	13	26	39
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Pruebas de tipo test	4	12	16

Resolución de problemas y/o ejercicios	2	8	10
Trabajos y proyectos	0	7	7

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

Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Exposición de las bases teóricas y orientación por parte del profesorado sobre los contenidos de la materia
Prácticas en aulas de informática	Desarrollo en las aulas de informática de los ejercicios que se propongan en las aulas teóricas utilizando la calculadora científica *MATLAB.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Prácticas en aulas de informática	Los alumnos trabajarán de manera autónoma con la supervisión permanente del profesor

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Prácticas en aulas de informática	Al final de las sesiones en las aulas de informática, el alumno resolverá algunos ejercicios del incluso tipo que los de los realizados en el aula.	25	C19 C22 C29	D6
Pruebas de tipo test	Durante lo curso se realizarán *alomenos tres pruebas parciales cortas tipo test y tipo práctico que contarán un 25 por cien en la calificación final. Además, en una prueba final, se realizará otra prueba tipo test de *tódala materia que contabilizará otro 10 por cien en la calificación final.	35	C19 C22 C29	D6
Resolución de problemas y/o ejercicios	Al finalizar el curso *realizaráse una prueba práctica resolviendo algunos ejercicios prácticos en el aula de informática	30	C19 C22 C29	D6
Trabajos y proyectos	*Participacion con aprovechamiento en todas las actividades propuestas por el profesorado, sean estas para realizar dentro o fuera del aula.	10	C19 C22 C29	D6

Otros comentarios sobre la Evaluación

Los alumnos que no superen la materiaen la convocatoria común y pretendan hacerlo en la convocatoriaextraordinaria, mantendrán las calificaciones obtenidas durante lo curso en cada unode los apartados anteriores, salvo las calificaciones de las pruebas prácticas de informática, que podrán ser recuperadas, y lasdos pruebas realizadas al final de curso que serán evaluadas en el examencorrespondiente. En este caso, el alumno tiene que ponerse en contacto con el profesor con suficiente antelación para acordar el trabajo a realizar antes de las pruebas finales.

La participación del estudiante en alguno de los actos de evaluación de la materia implicará la condición de "presentado" y, por lo tanto, la asignación de una calificación. Se consideran actos de evaluación la asistencia a las prácticas de informática (cuatro o más), la realización de alguna prueba o la entrega de un mínimo del 25% de los problemas o ejercicios encargados por el profesor.

Fuentes 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,

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203