

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 Hermida Ramón, José Manuel Leao Martins, Jose 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	
Código	
A3	Que os estudantes teñan a capacidade de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro da súa área de estudo) para emitir xuízos que inclúan unha reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica ou ética.
A5	Que os estudantes desenvolvan aquelas habilidades de aprendizaxe necesarias para emprender estudos posteriores cun alto grao de autonomía.
C19	Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
C22	Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
C29	Demostrar habilidades para os cálculos numéricos e a interpretación dos datos experimentais, con especial énfase na precisión e a exactitude
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
D5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
D6	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
D7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
D9	Traballar de forma autónoma
D12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
D13	Tomar decisións
D14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións

Resultados de aprendizaxe			
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe		
Utilizar os paquetes numéricos e simbólicos de MATLAB.		C22 C29	D5
Controlar distintas bases de numeración e decatarse da existencia de errores cometidos nas aproximacións	A3	C29	D6 D9 D13 D14

Buscar aproximacións de raíces de ecuacións dunha variable e sistemas de ecuacións.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Utilizar polinomios que se axustan a varios puntos do plano.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Derivar e integrar numericamente, relacionar estes conceptos numéricos e analíticos e entender o porque da súa necesidade.	A3 A5	C19 C22 C29	D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Manexar axustes 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

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 descendo e gradiente conxugado. Resolución de sistemas non lineais.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	13	26	39
Prácticas en aulas de informática	26	52	78
Probas de tipo test	4	12	16
Resolución de problemas e/ou exercicios	2	8	10
Traballos e proxectos	0	7	7

*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.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Prácticas en aulas de informática	Os alumnos traballarán de xeito autónomo coa supervisión permanente do profesor

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Prácticas en aulas de informática	Ó final das sesións nas aulas de informática, o alumno resolverá algúns exercicios do mesmo tipo que os dos realizados na aula.	25	C19 C22 C29	D6
Probas de tipo test	Durante o curso realizaranse alomenos tres probas parciais curtas tipo test e tipo práctico que contarán un 25 por cen na cualificación final. Ademais, nunha proba final, realizarase outra proba tipo test de tódala materia que contabilizará outro 10 por cen na cualificación final.	35	C19 C22 C29	D6
Resolución de problemas e/ou exercicios	Ó finalizar o curso realizaráse unha proba práctica resolvendo algúns exercicios prácticos na aula de informática	30	C19 C22 C29	D6
Traballos e proxectos	Participacion con aproveitamento en todas as actividades propostas polo profesorado, sexan estas para realizar dentro ou fóra da aula.	10	C19 C22 C29	D6

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, que poderán ser recuperadas, e as dúas probas realizadas ó final de curso que serán avaliadas no exame correspondente. Neste caso, o alumno ten que poñerse en contacto co profesor con suficiente antelación para acordar o traballo a realizar antes das probas finais.

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 (catro ou mais), a realización dalgunha proba 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