



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				
Departamento	Matemáticas Química analítica e alimentaria Química física			
Coordinador/a	Besada Moraes, Manuel			
Profesorado	Besada Moraes, Manuel Estevez Valcarcel, Carlos 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 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.	

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Sesión maxistral	14	28	42
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	4	4

*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	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 algúns exercicios do mesmo tipo que os dos realizados na aula.	25
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
Resolución de problemas e/ou exercicios	Ó finalizar o curso realizarase unha proba práctica resolvendo algúns exercicios prácticos na aula de informática	30
Traballos e proxectos	Participación 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