



Guía Docente:

CÁLCULO COMPUTACIONAL EN QUÍMICA



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
CURSO 2011-2012

**I.- IDENTIFICACIÓN**

NOMBRE DE LA ASIGNATURA:	Cálculo Computacional
CARÁCTER:	Optativa
MATERIA:	Complementos avanzados de Química
MÓDULO:	Avanzado
TITULACIÓN:	Grado en Química
SEMESTRE/CUATRIMESTRE:	Primero (cuarto curso)
DEPARTAMENTO/S:	Sección departamental de Matemática Aplicada

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Grupo A		
Teoría	Profesor:	ALFREDO PINELLI
Seminario	Departamento:	Matemática Aplicada
Tutoría	Despacho:	302- Facultad de Matemáticas
Aula de informática	e-mail:	apinelli@mat.ucm.es

II.- OBJETIVOS**■ OBJETIVO GENERAL**

Familiarizar al alumno en la resolución numérica de problemas que sólo se pueden abordar con el uso de ordenadores. En particular, se hará uso de algún programa informático de fácil manejo que permita resolver problemas sin tener ninguna noción particular sobre lenguajes clásicos de programación.

Esta formación será de gran utilidad en el desarrollo profesional del futuro químico, tanto si se dedica a la investigación, al mundo técnico-empresarial o a cualquier otra actividad.

■ OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Resolver numéricamente sistemas lineales y problemas de autovalores usando técnicas directas disponibles como funciones en Matlab y programando técnicas iterativas (Jacobi, Gauss-Seidel y Relajación para sistemas lineales y método de la potencia para búsqueda de máximo y mínimo autovalor) aprendiendo a generar sencillas funciones.
- Interpolarse y aproximar numéricamente. En problemas de interpolación se aprenderá a programar la interpolación de Lagrange usando la tabla de diferencias divididas y se aprenderá a usar directamente el paquete de interpolación con splines de Matlab. En problemas de aproximación se aprenderá a ensamblar el sistema lineal



correspondiente a regresiones de mínimos cuadrados y a resolverlos con las herramientas desarrolladas en la actividad anterior.

- Representar gráficamente datos y funciones en múltiples dimensiones usando las funciones gráficas de Matlab: gráficas sencillas x-y, curvas de isoniveles y gráficas en tres dimensiones.
- Implementar métodos de aproximación numérica a soluciones de ecuaciones diferenciales y sus aplicaciones al estudio de concentraciones de reactivos y productos en cinéticas químicas: se programaran los métodos más sencillos tipo Taylor, poniendo de manifiesto con experimentos numéricos el concepto de estabilidad. También se aprenderá el uso de las funciones tipo Runge-Kutta directamente disponibles en Matlab.
- Usar técnicas de inferencia estadística programando Anova unifactorial y extendiendo la función a casos multifactoriales.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

■ CONOCIMIENTOS PREVIOS:

Los conocimientos descritos en el programa oficial de las asignaturas *Matemáticas y Estadística Aplicada y Cálculo Numérico* del Grado en Química.

■ RECOMENDACIONES:

IV.- CONTENIDOS

■ BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

Matrices. Autovalores. Resolución de sistemas lineales. Sistemas sobredeterminados y sistemas homogéneos. Polinomios. Interpolación. Representaciones gráficas 2D y 3D. Ejemplos de interés en la Química. Cálculo simbólico. Resolución numérica de ecuaciones diferenciales. Aplicaciones de interés en Química. Inferencia estadística.

■ PROGRAMA:

1. Matrices. Autovalores. Resolución de sistemas lineales: técnicas iterativas y directas. Método de la potencia. Sistemas sobredeterminados y sistemas homogéneos.
2. Polinomios. Interpolación bajo forma de polinomio de Newton usando diferencias divididas; uso de splines. Aproximación a mínimos cuadrados.
3. Representaciones gráficas 2D y 3D. Ejemplos de interés en la Química.
4. Cálculo simbólico aplicado a la solución de sencillas ecuaciones diferenciales lineales.
5. Resolución numérica de ecuaciones diferenciales. Aplicaciones de interés en Química.
6. Inferencia estadística con especial énfasis en ANOVA.



V.- COMPETENCIAS

■ GENERALES:

- o **CG2-MA2** Relacionar áreas interdisciplinarias en plena expansión, y tomar conciencia de la importancia que la investigación interdisciplinar tiene en el avance de la Ciencia.
- o **CG3-MA1** Demostrar una base de conocimientos y habilidades con las que pueda continuar sus estudios en áreas especializadas de Química o en áreas multidisciplinares.
- o **CG4-MA1** Plasmar los conocimientos específicos de cada materia en el lenguaje científico universal, entendido y compartido interdisciplinariamente.
- o **CG7-MA1** Aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la solución de problemas en Química y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.
- o **CG13-MA1** Desarrollar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.

■ ESPECÍFICAS:

- o **CE26-MACQ1** Resolver sistemas lineales, sistemas sobredeterminados y sistemas homogéneos.
- o **CE26-MACQ2** Representar gráficas pVT y orbitales.
- o **CE27-MACQ1** Ajustar datos y aproximar numéricamente soluciones de ecuaciones diferenciales con aplicaciones al estudio de concentraciones de reactivos y productos en cinética química.

■ TRANSVERSALES:

- o **CT2-MA1** Trabajar en equipo.
- o **CT3-MA1** Aprender a tomar decisiones ante un problema real práctico.
- o **CT4-MA1** Seleccionar el método más adecuado para resolver un problema planteado.
- o **CT7-MA1** Usar programas informáticos que sirvan, en el mundo de la Química, para calcular, diseñar, simular, aproximar y predecir.
- o **CT11-MA1** Desarrollar trabajo autónomo.

VI. – HORAS DE TRABAJO Y DISTRIBUCIÓN POR ACTIVIDAD

La asignatura de Cálculo Computacional es una asignatura que tiene asignada un total de 6 créditos que se imparten a lo largo del primer cuatrimestre del cuarto curso. La dedicación del alumno a esta asignatura será, de acuerdo con los criterios ECTS, de 150 horas al año, distribuidas de la siguiente manera:



Actividad	Presencial (horas)	Trabajo autónomo (horas)	Créditos
Clases prácticas	30	50	3,2
Seminarios	15	25	1,6
Tutorías	3	4,5	0,3
Preparación de trabajos y exámenes	6	16,5	0,9
Total	54	96	6

VII.- METODOLOGÍA

Durante las **clases presenciales** se dará a conocer al alumno el contenido de la asignatura, de acuerdo con el programa de la misma. Todas las clases se realizarán en el Aula de Informática.

Se pondrá en el campus virtual una relación de problemas/prácticas con el objetivo de que el alumno intente su resolución.

Las **clases** consisten en prácticas presenciales que se realizarán en el aula de informática. En los **seminarios** se llevará a cabo una explicación detallada de los algoritmos que se quieren emplear para la resolución de las prácticas.

Se elaborarán “guías-prácticas” de uso del programa informático (Matlab) adaptadas a los contenidos de la asignatura, a partir de las cuales el alumno, guiado por el profesor, debe aprender su utilización para la adquisición de las competencias exigidas en la asignatura.

Actividades dirigidas: también se propondrán prácticas a modo de trabajos dirigidos para lo que realizarán tutorías programadas.

Tutorías: se formarán grupos de estudiantes. Cada grupo asistirá a 3 tutorías de una hora de duración durante el curso.

Se trata de actividades formativas con su contenido en ECTS, su metodología de enseñanza y aprendizaje, y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante.

Se proporcionarán al alumno hojas de prácticas con ejemplos detallados que resuelve el profesor en clase, conjuntamente con los alumnos. A continuación el alumno deberá resolver prácticas similares. En estas clases el profesor asesorará a los alumnos en la resolución de las prácticas propuestas.

VIII.- BIBLIOGRAFÍA

■ BÁSICA:

- o Pérez, C.: “*Matlab y sus publicaciones en las Ciencias y la Ingeniería*”, Prentice-Hall, Madrid, 2002.
- o Quarteroni, A. y Saleri, F.: “*Cálculo Científico con Matlab y Octave*”, Springer, Milán, 2006.

**■ COMPLEMENTARIA:**

- o Chen, K.; Giblin, P. E. y Irving, A.: “*Mathematical Explorations with MATLAB*”, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- o Elnashaie S., Uhlig F. y Affane, Ch.: “*Numerical techniques for Chemical and Biological Engineers using MATLAB. A simple bifurcation approach*”, Springer, 2007.
- o Duffy, D.: “*Advanced Engineering Mathematics with Matlab*”, Tercera edición, CRC Press Taylor & Francis, 2011.
- o Higham, D.J. y Higham, N. J.: “*Matlab guide*”, SIAM, Filadelfia, 2000.

IX.- EVALUACIÓN

Se efectuará una **evaluación continua** del siguiente modo:

- La asistencia a clase será obligatoria.
- Las notas de los controles realizados a lo largo del curso son notas de clase que se mantienen a lo largo de todo el curso.
- El alumno que haya suspendido podrá presentarse al examen final, que puntuará el 70%, al que se le sumará la parte correspondiente obtenida durante el curso.

En la calificación final se tendrá en cuenta:

- Examen final: 70%
- Trabajos personales bajo formas de dos prácticas a realizar de forma individual durante el curso: 20%
- Participación en seminarios y tutorías 10%

Para poder realizar un examen final será necesario que el alumno haya participado, al menos, en el 70% de las actividades presenciales.

■ EXÁMENES ESCRITOS:**90%**

- Se realizarán dos controles de una hora de duración a lo largo del curso (20% de la nota).
- Se realizará un **examen final** de 3 horas de duración (70% de la nota)

Se valoran las competencias CG2, CG3, CG4, CG7, CG13, CT7, CE26 y CE27.

■ PARTICIPACIÓN EN SEMINARIOS/TUTORÍAS:**10%**

- Se realizarán seminarios dedicados a temas específicos. La participación en dichos seminarios y las tutoría también se evaluarán (10% de la nota).

Se valoran las competencias CT2, CT3, CT4 y CT11.


PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES – CRONOGRAMA

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	INICIO	FIN
Introducción práctica con desarrollo de ejemplos en MatLab	Clases Prácticas en Aula de Informática	4	1ª Semana	2ª Semana
1. Álgebra lineal numérica	Clases Prácticas en Aula de Informática	10	2ª Semana	5ª Semana
2. Interpolación y aproximación	Clases Prácticas en Aula de Informática	8	5ª Semana	7ª Semana
3. Representación gráfica de datos	Clases Prácticas en Aula de Informática	6	7ª Semana	9ª Semana
4 y 5. Cálculo simbólico y solución numérica de EDOs	Clases Prácticas en Aula de Informática	10	9ª Semana	13ª Semana
6. Inferencia estadística numérica	Clases Prácticas en Aula de Informática	7	13ª Semana	15ª Semana
	Tutorías Programadas	3	A determinar*	
	Exámenes Escritos	6	Determinado por la Facultad	

*La programación de las tutorías depende de la planificación global de todas las asignaturas del curso.



RESUMEN DE LAS ACTIVIDADES

Actividad docente	Competencias asociadas	Actividad Profesor	Actividad alumno	Procedimiento de evaluación	P	NP	Total	C
Clases presenciales en Aula de informática	CG2, CG3, CG4, CG7, CG13, CT7, CE26 y CE27	Aprendizaje del programa MATLAB, introducción teórica y práctica a la solución de los problemas propuestos	Aprendizaje guiado del uso del programa MATLAB. Resolución de los problemas propuestos bajo la guía del profesor.	Controles sobre los ejercicios en el aula de informática y exámenes finales. Controles presenciales.	45	96		20%
Tutorías en Aula de Informática	CT2, CT3, CT4 y CT11	Ayuda al alumno a la implementación de los algoritmos en MATLAB	Consulta al profesor sobre las dificultades que encuentra, tanto conceptuales como metodológicas en abordar las prácticas.	Asistencia obligatoria los días asignados.	3			10%
Exámenes	Todas las competencias	Propuesta, vigilancia y corrección del examen. Calificación del alumno.	Preparación y realización.	Controles y exámenes finales.	6			70%

P : Presenciales; NP: no presenciales (trabajo autónomo); C: calificación