

Curso
2026/2027

Guía Docente:

CÁLCULO COMPUTACIONAL



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS



1. IDENTIFICACIÓN

Titulación	Grado en Química		Código	801514	
Asignatura	Cálculo Computacional		ECTS	6	
Materia	Complementos Avanzados en Química				
Módulo	Avanzado				
Carácter	Optativo	Curso	Cuarto	Semestre	Primero
Departamento responsable	Análisis Matemático y Matemática Aplicada				

Profesores responsables

Actividad	Profesor	Email	Despacho
Tª/S/Tut.	ALEXANDRE SALAS BERNÁRDEZ	alexsala@ucm.es	302C1 Facultad de Matemáticas

2. OBJETIVOS

Objetivo General

Familiarizar al alumno en la resolución numérica y simbólica de problemas que sólo se pueden abordar con el uso de ordenadores. Se hará uso de algún programa informático de fácil manejo que permita resolver problemas sin tener ninguna noción particular sobre lenguajes clásicos de programación. En particular se considera el uso del paquete **Matlab**, que contiene numerosos comandos y rutinas propias para resolver problemas de gran variedad en una forma muy cómoda para el usuario. La idea general es familiarizar al alumno con este paquete y sus comandos propios y al final del curso enseñar algunos conceptos 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

- Introducción a vectores y matrices, matrices dispersas en particular, y las operaciones básicas correspondientes. Resolver numéricamente sistemas lineales no homogéneos y homogéneos, con un especial énfasis en su aplicación al ajuste de reacciones químicas. Problemas de autovalores usando métodos directos.
- Interpolación y aproximar numéricamente. Se empieza con los comandos simples para operar con polinomios, por ejemplo, su multiplicación, el comando para encontrar sus raíces y también su representación gráfica. El siguiente paso consiste en usar los propios comandos para interpolar una nube de puntos por un polinomio de interpolación. Finalmente se discute brevemente la interpolación a trozos usando splines. En problemas de aproximación se aprenderá a plantear el sistema lineal correspondiente de regresión por mínimos cuadrados y a resolverlo con las herramientas desarrolladas en la actividad anterior.
- Representar gráficamente datos y funciones en múltiples dimensiones usando las funciones gráficas de Matlab: Comandos básicos para gráficos 2D: Coordenadas cartesianas. Ecuaciones paramétricas. Coordenadas polares. Gráficas 3D: Curvas en el espacio. Gráficos de funciones $z=f(x,y)$. Superficies PVT. Isotermas del gas ideal. Otras ecuaciones de estado. Orbitales del átomo de hidrógeno. Funciones de onda. Hibridación. Orbitales Moleculares.



- Aplicar la resolución de sistemas no lineales a sencillos modelos de equilibrio termodinámico y velocidad terminal de partículas sólidas en fluidos.
- Implementar métodos de aproximación numérica a soluciones de ecuaciones diferenciales y sus aplicaciones al estudio de concentraciones de reactivos y productos en cinéticas químicas: en primer lugar, se usa la rutina propia de Matlab para resolver y representar dichas ecuaciones. Luego se empiezan a introducir los conceptos de bucles con la finalidad de programar un algoritmo sencillo como el método de Euler, y luego el método de Runge Kutta. Se discuten brevemente algunos conceptos fundamentales como la convergencia, la estabilidad y el orden de un método, pero solo mediante algunos experimentos numéricos. También se tratan ecuaciones de reacciones con velocidades de reacción muy distintas entre sí, conocidos como ecuaciones rígidas. Dichas ecuaciones necesitan una diferente rutina de Matlab o la implementación de métodos implícitos.
- Usar técnicas de inferencia estadística.

3. CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

Recomendaciones

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

Recomendaciones

Sería útil, pero no imprescindible, poseer algunos conocimientos de conceptos de programación.

Es recomendable que el estudiante tenga un nivel básico de inglés que le permita manejar bibliografía en inglés, realizar búsqueda de información, y comunicar por escrito y oralmente en ese idioma.

4. 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. Álgebra Lineal Numérica: Matrices. Autovalores. Resolución de sistemas lineales. Sistemas sobredeterminados y sistemas homogéneos. Ajuste de reacciones químicas.
2. Interpolación y Aproximación: Polinomios. Interpolación polinomial; uso de splines. Aproximación a mínimos cuadrados.
3. Representación Gráfica de Datos: Representaciones gráficas 2D y 3D. Orbitales del átomo de hidrógeno.
4. Cálculo simbólico aplicado a integrales, derivadas y a la solución de sencillas ecuaciones diferenciales lineales.
5. Resolución de sistemas no lineales. Método de Newton. Cálculo de raíces de un polinomio. Equilibrio termodinámico. Velocidad terminal de partículas sólidas en fluidos.
6. Resolución de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias: Resolución numérica de ecuaciones diferenciales. Concentraciones de reactivos y productos en cinéticas químicas.
7. Inferencia estadística.



5. COMPETENCIAS

Generales

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.
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.
CG4-MA1	Plasmar los conocimientos específicos de cada materia en el lenguaje científico universal, entendido y compartido interdisciplinariamente.
CG7-MA1	Aplicar conocimientos teóricos y prácticos a la solución de problemas en Química y seleccionar el método más adecuado para resolverlos.
CG13-MA1	Desarrollar buenas prácticas científicas de medida y experimentación.

Específicas

CE26-MACQ1	Resolver sistemas lineales, sistemas sobredeterminados y sistemas homogéneos.
CE26-MACQ2	Representar gráficas pVT y orbitales.
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

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

6. RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Una vez superado el curso el alumno debería ser capaz de:

1. Utilizar paquetes informáticos apropiados para la resolución de problemas matemáticos.
2. Explicar las ideas básicas de la derivación y la integración numérica con ordenador.
3. Implementar en el ordenador representaciones de graficas en 2D y 3D.
4. Utilizar paquetes de cálculo simbólico para resolver ecuaciones y para calcular derivadas e integrales.
5. Implementar en ordenador algunos métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales.
6. Resolver problemas de inferencia estadística mediante el uso de un paquete informático.



7. 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

8. 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.

9. BIBLIOGRAFÍA

Básica

- Infante, J.A. y Rey, J.M.: “Métodos Numéricos. Teoría, problemas y prácticas con MATLAB”, Pirámide, 2008.
- Pérez, C.: “Matlab y sus aplicaciones en las Ciencias y la Ingeniería”, Prentice-Hall, Madrid, 2002.
- Quarteroni, A. y Saleri, F.: “Cálculo Científico con Matlab y Octave”, Springer, Milán, 2006.
- Beers, K.J.: “Numerical Methods for Chemical Engineering”, Cambridge, 2007.

Complementaria

- Chapra, S.: “*Applied Numerical Methods with MATLAB For Engineers and Scientists*”, 3rd Edition McGraw-Hill, 2011.
- Chen, K.; Giblin, P. E. y Irving, A.: “*Mathematical Explorations with MATLAB*”, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- Elnashaie S., Uhlig F. y Affane, Ch.: “*Numerical techniques for Chemical and Biological Engineers using MATLAB. A simple bifurcation approach*”, Springer, 2007.
- Duffy, D.: “*Advanced Engineering Mathematics with Matlab*”, Tercera edición, CRC Press Taylor & Francis, 2011.
- Finlayson, B. A.: “*Introduction to Chemical Engineering Computing*”, Wiley, 2011.
- Higham, D.J. y Higham, N. J.: “*Matlab guide*”, SIAM, Filadelfia, 2000.
- Lindfield, G., Penny, J.: “*Numerical methods using MATLAB*”, Elsevier, 2012.

10. EVALUACIÓN

Se efectuará una evaluación continua del siguiente modo:

- La asistencia a clase será obligatoria.
- Se entregará un trabajo escrito de la asignatura.
- La asistencia a las tutorías programadas será obligatoria.

En la calificación final se tendrá en cuenta:

- Examen final (3 horas): 70%.
- Entrega de trabajo escrito: 20%.
- Participación en seminarios y tutorías: 10%.

Para poder acceder a la evaluación final será necesario que el alumno haya participado, al menos, en el 70% de las actividades presenciales.

Las calificaciones de las actividades se comunicarán a los estudiantes con la antelación suficiente antes de la realización del examen final para que puedan planificar adecuadamente el estudio de esta u otras asignaturas.

CONVOCATORIA ORDINARIA

❖ EXÁMENES ESCRITOS: 70%

Se realizará un examen final (prácticas de informática) de 3 horas de duración máxima sobre toda la asignatura.

❖ TRABAJO PERSONAL Y ACTIVIDADES DIRIGIDAS: 20%

El alumno entregará un trabajo escrito aplicando los conocimientos adquiridos a un caso concreto relevante para la Química.

Se valoran las competencias CG2-MA2, CG3-MA1, CG4-MA1, CG7-MA1, CE26-MACQ2, CE27-MACQ1, CT3-MA1, CT4-MA1, CT7-MA1 y CT11-MA1.

❖ PARTICIPACION EN SEMINARIOS/TUTORÍAS: 10%

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

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



CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

❖ EXAMEN ESCRITO: 100%

En caso de suspender la asignatura, el alumno tendrá derecho a realizar un examen en la convocatoria extraordinaria de 3 horas de duración máxima (100% de la nota).

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

PLANIFICACIÓN DE ACTIVIDADES - CRONOGRAMA

TEMA	ACTIVIDAD	HORAS	GRUPOS	INICIO	FIN
Introducción práctica con desarrollo de ejemplos en MatLab	Clases Prácticas en Aula de Informática	4	1	1ª Semana	2ª Semana
1. Algebra lineal numérica	Clases Prácticas en Aula de Informática	10	1	2ª Semana	5ª Semana
2. Interpolación y aproximación	Clases Prácticas en Aula de Informática	8	1	5ª Semana	7ª Semana
3. Representación gráfica de datos	Clases Prácticas en Aula de Informática	6	1	7ª Semana	9ª Semana
4 y 5. Cálculo simbólico y Sistemas no lineales	Clases Prácticas en Aula de Informática	10	1	9ª Semana	13ª Semana
6 y 7. Solución numérica de EDOs e Inferencia estadística numérica	Clases Prácticas en Aula de Informática	7	1	13ª Semana	15ª Semana
	Tutorías Programadas	3	1	A determinar*	
	Exámenes Escritos	6	1	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 ESTUDIANTE	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	75	130	30%⁽¹⁾
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	4,5	7,5	
Exámenes	Todas las competencias	Propuesta, vigilancia y corrección del examen. Calificación del alumno.	Preparación y realización.	Controles y exámenes finales.	6	16,5	22,5	70%⁽²⁾

P: Actividades presenciales

NP: Actividades no presenciales (trabajo autónomo)

C: Calificación

⁽¹⁾ 0% en la convocatoria extraordinaria.

⁽²⁾ 100% en la convocatoria extraordinaria.