ASIGNATURA DE MÁSTER:

MÉTODOS DE CÁLCULO EN QUÍMICA TEÓRICA

Curso 2009/2010

(Código:21151075)

1.PRESENTACIÓN

Esta Asignatura pertence al Postgrado en Química, es de caracter optativo y está ubicada en el primer Semestre. Tiene asignados 6 créditos ECTS (150 horas de trabajo). Los prerrequisitos para cursar esta asignatura son los de haber cursado las asignaturas de Matemáticas previas existentes en los estudios de Grado. El aprendizaje se basa en la resolución de problemas y realización de dos trabajos de curso (obligatorios). La evaluación es continua y se complementa un examen (obligatorio).

2.CONTEXTUALIZACIÓN

Esta Asignatura tiene que ver con la aplicación práctica de técnicas matemáticas a la resolución de problemas de interés en Química Física Teórica. El lenguaje matemático es la herramienta para comprender los procesos naturales, algo ya reconocido por los científicos desde hace muchos años. Por consiguiente, el estudiante de Química debería conocer los rudimentos básicos de estas operaciones matemáticas tanto para su formación como para su posterior aplicación en los problemas que se le plantearán en el ejercicio de su actividad profesional. En particular, para el estudiante con intereses en los tratamientos teóricos (Mecánica y Química Cuánticas por un lado, y Mecánica y Termodinámica Estadística por el otro) estos conocimientos son y serán siempre centrales en su quehacer diario. Las cuestiones que se tratarán aquí comprenden temas de Cálculo Numérico y de Estadística y, evidentemente, las aplicaciones que pudieran derivarse de ellos no se limitan a las de interés teórico aludidas arriba, sino que pueden resultar muy útiles en el tratamiento de datos experimentales. Se pueden pues aplicar los conocimientos adquiridos con ella a cuestiones prácticas que se presentan en cinética química, espectroscopía, termodinámica, materiales poliméricos, etc.

Aunque es cierto que el nivel de profundidad al que se debería llegar en estos temas tendría que ser siempre el máximo posible, no es menos cierto que las limitaciones de tiempo imponen severas restricciones a este deseo. Por consiguiente, en esta Asignatura se darán una serie de ideas fundamentales sobre determinados temas matemáticos útiles, prestando especial atención al carácter eminentemente práctico y aplicado de los conocimientos a asimilar. De este modo las complejidades matemáticas formales (teoremas y demostraciones rigurosas) quedan relegadas a futuras ampliaciones. Esta formación inicial se espera que pueda servir de base para que los estudiantes interesados en proseguir en esta línea puedan acometer estudios más avanzados con posterioridad.

De especial trascendencia para el estudiante de estos temas es la utilización del cálculo con computador, si bien, por razones obvias de tiempo, en este curso introductorio el nivel de sofisticación no pasa del cálculo manual o con calculadora de escritorio. Esto responde a la experiencia contrastada de que solamente después de saber cómo se resuelve un problema ¿a mano¿ es uno capaz de, disponiendo de los conocimientos de programación adecuados (Fortran, C, etc.), abordar el diseño de programas o códigos de cálculo en computador para resolver los cálculos a los que las complicadas cuestiones a las que hay normalmente que hacer frente llevan, y que tomarían un tiempo desorbitado e incluso inalcanzable de ser realizadas manualmente. De nuevo, todas las cuestiones de cálculo con computador quedan relegadas a las posibles ampliaciones que los estudiantes interesados puedan hacer en el futuro.

3.REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Los prerrequisitos para cursar esta asignatura son los de haber cursado la/las asignaturas de Matemáticas previas existentes en los estudios de Grado y en enseñanza secundaria. En particular puede resultar muy provechoso haber cursado (o cursar a la par) la Asignatura de Métodos de Cálculo en Química Teórica, también parte de estos estudios de Postgrado. En particular sería útil para el estudiante refrescar sus conocimientos de:

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
7DE6D7C30FB8F80E0E1C1A65AC7D7566

-Análisis Matemático (funciones reales de una variable real, continuidad, diferenciación, integración, series de funciones y ecuaciones diferenciales ordinarias).

-Álgebra Lineal (espacios vectoriales, matrices y determinantes). -Nociones básicas de estadística (probabilidad, valores medios, dispersión, etc.).

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los objetivos generales son los de conocer y saber aplicar determinadas herramientas matemáticas básicas que son de uso común en Química Física y Química Teórica, tanto a un nivel elemental como de investigación. Es interesante hacer notar que para analizar muchos problemas que se presentan en la práctica diaria es necesario hacer un uso bien conjunto, bien complementario, de herramientas de cálculo que pueden pertenecer a temas diversos y aparentemente inconexos para el profano. En cuanto a los objetivos específicos se tratará de entender y saber utilizar técnicas del Análisis (o Cálculo) Numérico y de la Estadística Teórica.

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

1. La aproximación polinómica y sus aplicaciones.

2. Resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias.

3. Ecuaciones no lineales, sistemas y diagonalización de matrices.

4. Distribuciones de probabilidad y parámetros característicos.

5. Mínimos cuadrados y correlación.

6. Números aleatorios e integración Monte Carlo.

7. Cadenas de Markov discretas.

6.EQUIPO DOCENTE

DATOS NO DISPONIBLES POR OBSOLESCENCIA

7.METODOLOGÍA

Al tratarse de una materia eminentemente práctica el aprendizaje estará fundamentalmente basado en:

-La resolución de problemas/ejercicios.

-Actividades prácticas de tipo ensayo, como el comentario de artículos de investigación.

-En casos especiales, en los que el estudiante posea conocimientos de programación de computadores y acceso a razonables medios de cálculo (PC con compilador para cálculo numérico), también se podrá recurrir a este tipo de actividad (simulación con computador).

Tiempo de estudio de cada capítulo = 18 horas

Total tiempo de estudio de 7 capítulo = 126 horas

Tiempo empleado en cada trabajo = 11 horas

Total tiempo empleado en 2 trabajos = 22 horas

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
7DE6D7C30FB8F80E0E1C1A65AC7D7566

Tiempo empleado en examen presencial = 2 horas

Tiempo total = 150 horas

8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9788436225440
Título: MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA (1ª)
Autor/es: Sesé Sánchez, Luis M. ;
Editorial: UNED

Buscarlo en libreria virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

9.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

LIBRO ACTUALMENTE NO PUBLICADO
ISBN(13):
Título: MANUAL DE FÓRMULAS Y TABLAS MATEMÁTICAS (1996)
Autor/es: F. Scheid ;
Editorial: McGraw-Hill

LIBRO ACTUALMENTE NO PUBLICADO
ISBN(13):
Título: RELACIONES Y TABLAS MATEMÁTICAS, ADDENDA DE MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA (1990)
Autor/es: A. Hernanz Y L. M. Sesé ;
Editorial: UNED

10.RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

Recursos en la red.

-http://www.uned.es/095369/tqm_mtqf1_7.htm

Página de la asignatura de Métodos Teóricos de la Química Física (UNED)

-The Journal Of Chemical Physics

Es esta una revista de gran tradición en el campo de la investigación en Química Física. Se tiene acceso a sus fondos (desde 1975) en la dirección http://ojps.aip.org/jcpo/.

11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
7DE6D7C30FB8F80E0E1C1A65AC7D7566

En esta asignatura no se contempla la realización de Pruebas de Evaluación a Distancia convencionales. En su lugar a lo largo del curso el equipo docente propondrá al estudiante la realización (en su domicilio) de dos trabajos obligatorios, uno de cálculo numérico y otro de estadística. El estudiante podrá optar entre las siguientes alternativas para cada parte:

A) Realización de una serie de ejercicios representativos.

B) Comentario de artículos de investigación o de métodos de trabajo científico avanzados.

C) Realización de cálculos a nivel intermedio, siendo entonces necesario por parte del estudiante el disponer de facilidades de cálculo con computador y conocimientos de algún lenguaje de programación (Fortran, Basic, C, Pascal, etc.).

Estos trabajos estarán sujetos a un proceso de revisión (evaluación) continua. Una vez concluidos deben remitirse para su revisión al equipo docente/tutor (dependiendo de las circunstancias), que lo devolverá al estudiante, para que en su caso, efectúe las correcciones pertinentes. El proceso continuará hasta que se garantice una comprensión mínima de la materia. Estos trabajos obligatorios formarán parte de la calificación final en un porcentaje que se especifica en Evaluación.

De carácter obligatorio será también la realización de un Examen que medirá la comprensión global de la materia. Constará de una prueba con preguntas de respuesta razonada, pudiendo ser de tipo teórico o de cálculo. Todas estas preguntas puntuarán por igual. Será necesario pues disponer de una calculadora. El porcentaje con el que este Examen contribuirá a la calificación final se especifica también en Evalución.

La tutorización de los alumnos se llevará a cabo a través de la plataforma de e-learning Alf o por cualquier otro medio de contacto (e-mail, teléfono, etc.,). A través de la plataforma virtual Alf se suministrará todo el material didáctico elaborado específicamente para el máster: documentación teórica y práctica, lecturas, artículos, enlaces a páginas Web.

La plataforma de e-learning Alf proporcionará el adecuado interfaz de interacción entre el alumno y sus profesores. Alf es una plataforma de e-learning y colaboración que permite impartir y recibir formación, gestionar y compartir documentos, y crear y participar en comunidades temáticas.

Se ofrecerán las herramientas necesarias para que, tanto el equipo docente como el alumnado, encuentren la manera de compaginar tanto el trabajo individual como el aprendizaje cooperativo.

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

La evaluación (continua) de los dos trabajos obligatorios propuestos contribuirá a la calificación final en un 30%+30%= 60%, siendo ambos trabajos una medida de las competencias genéricas (capacidad de buscar, acceder y manejar información, resolver nuevos problemas, y ser autónomo) adquiridas por el estudiante durante el curso. El Examen contribuirá a la calificación final con el 40% restante, midiendo así los conocimientos y habilidades específicas de una forma global. Se exigirá un mínimo de un 30% satisfecho en la contribución "trabajos" y un 20% satisfecho en el Examen para conseguir una evaluación positiva global en la asignatura. Se entiende además que si uno de los dos trabajos obligatorios no se realiza o es calificado como nulo, no se conseguirá la evaluación positiva global de la asignatura.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
7DE6D7C30FB8F80E0E1C1A65AC7D7566