

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN

LICENCIATURA EN: QUÍMICA.

NOMBRE DE LA ASIGNATURA: MÉTODOS NUMÉRICOS.

ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

DEPARTAMENTO DE: MATEMÁTICAS.
SECCIÓN DE: SISTEMAS MATEMÁTICOS COMPUTACIONALES Y DE
OPTIMIZACIÓN.

CICLO AL QUE PERTENECE: PROFESIONAL.

REQUISITO DE SERIACIÓN: MATEMÁTICAS III.

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OPTATIVA.

TIPO DE ASIGNATURA: TEÓRICO-PRÁCTICA.

MODALIDAD: CURSO / TALLER.

SEMESTRE: 6°, 7°, 8°.

NÚMERO DE HORAS /SEMANA/ SEMESTRE:

TEORÍA:

2

PRÁCTICA:

2

N° DE CRÉDITOS:

6

CLAVE

0010

OBJETIVO GENERAL DE LA ASIGNATURA:

Proporcionar al alumno las herramientas del calculo numérico mas comúnmente usadas en las tecnologías de actualidad para el área de las ciencias químicas mediante el uso del Computo científico.

UNIDAD 1. SOLUCIÓN DE ECUACIONES ALGEBRAICAS Y TRASCENDENTES.

Número de horas de teoría: 6.

Número de horas de taller: 6.

OBJETIVO DE LA UNIDAD:

Dar a conocer los algoritmos y su formulación para su aplicación en problemas de la Química que se modelen mediante ecuaciones algebraicas o trascendentes usando la computadora.

1.1 Método de Bisección.

1.2 Método de Newton-Raphson.

1.3 Método de los Factores Cuadráticos, para casos con raíces complejas.

1.4 Método de laguerre.

UNIDAD 2. SOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES.

Número de horas de teoría: 4.

Número de horas de taller: 4.

OBJETIVO DE LA UNIDAD:

El estudiante aplicara los algoritmos utilizados actualmente por la comunidad científica para la solución de sistemas de ecuaciones lineales en los problemas de la Química usando la computadora.

2.1 Eliminación de Gauss-Jordan.

2.2 Eliminación "Gaussiana", con sustitución hacia atrás.

2.3 Descomposición LU.

UNIDAD 3. INTERPOLACIÓN, DERIVACIÓN E INTEGRACIÓN NUMÉRICAS.

Número de horas de teoría: 6.

Número de horas de taller: 6.

OBJETIVO DE LA UNIDAD:

Proporcionar al estudiante los métodos más efectivos para la solución de problemas de interpolación, derivación e integración cuya solución solo es posible a través del cálculo numérico por medio de la computadora.

3.1 Interpolación de Newton y de Lagrange.

3.2 Método de las Diferencias Finitas para el calculo numérico de derivadas.

3.5 Formulas de integración.

3.5.1 Formula Trapezoidal.

3.5.2 Fórmula de Simpson de 1/3.

3.5.3 Fórmula de Simpson de 3/8.

UNIDAD 4. SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.

Número de horas de teoría: 10.

Número de horas de taller: 10.

OBJETIVO DE LA UNIDAD:

Capacitar al estudiante en el uso de las herramientas del computo científico para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias en problemas de la Química.

4.1 Método de Euler.

4.2 Método de Euler-Gauss.

4.3 Polinomios de Taylor como alternativa para la solución de Ecs. Diferenciales

4.4 Métodos de Runge-Kutta.

4.5 Método Predictor-Corrector de Milne.

4.6 Funciones de Bessel.

UNIDAD 5. MODELADO DE DATOS.

Número de horas de teoría: 6.

Número de horas de taller: 6.

OBJETIVO DE LA UNIDAD.

Habilitar al alumno en el manejo y aplicación de la tecnología del computo, científico para el modelado de datos experimentales en el área de la Química.

5.1 Método general lineal de Mínimos Cuadrados.

5.2 Los Mínimos Cuadrados como una estimación de probabilidad máxima.

5.3 Ajuste de datos para una línea recta.

5.4 Modelos no lineales.

5.4.1 Ajuste Polinomial.

5.4.2 Ajuste Cúbico "spline".

Las horas de taller serán dedicadas a la resolución de problemas relacionados con los contenidos temáticos de las unidades teóricas correspondientes.

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.

- Exposición oral.
- Ejercicios dentro de clase mediante software de aplicación.
- Ejercicios fuera del Taller.
- Lecturas obligatorias.
- Trabajos de investigación.
- Prácticas de laboratorio de cómputo.

PROPUESTA DE EVALUACIÓN.

- Exámenes parciales por tema.
- Exámenes finales.
- Trabajos y tareas fuera del Taller o Laboratorio.
- Participación en clase.
- Desarrollo de programas por computadora.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DEL DOCENTE.

Egresados de alguna licenciatura en Ciencias Químicas o del área físico-matemáticas y de las ingenierías; con conocimiento y experiencias en la enseñanza de las Matemáticas para Químicos.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA.

1. Press W. et al. *Numerical recipes: The art of scientific computing*, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
2. Nieves H. A. y S. F. Domínguez. *Métodos numéricos aplicados a la Ingeniería*, CECSA, México. 1997.
3. Shoichiro, Nakamura. *Métodos numéricos aplicados con software*, Prentice-Hall, México, 1997.
4. Smith, W. A. *Análisis numérico*, Prentice Hall, México, 1998.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA.

1. Maron, Kelvin J. y Robert J. López. *Análisis numérico: un enfoque práctico*, 3ª, CECSA, México, 1995.
2. Iriarte, Rafael y V. Valderrama. *Métodos numéricos*, Trillas, México, 1995.
3. Terrense, J. Akai. *Métodos numéricos aplicados a la ingeniería* Limusa, México, 1999.