

TEMARIO TEÓRICO: MÉTODOS MATEMÁTICOS DE LA QUÍMICA

1. Almacenamiento de números en computadores. Representación de punto flotante. Redondeo. Propagación de errores. Condicionamiento y estabilidad.
2. Solución de ecuaciones en una variable. Método de la bisección, la secante, Newton e iteración de punto fijo.
3. Resolución de sistemas lineales: Métodos directos: eliminación gaussiana y estrategias de pivoteo. Factorización de matrices. Métodos iterativos: Jacobi y Gauss-Seidel.
4. Interpolación y aproximación de funciones: Interpolación de Lagrange y Hermite. Interpolación polinomial fraccionaria. Transformada de Fourier discreta.
5. Diferenciación e integración numérica: Reglas de cuadratura de Newton-Côtes. Fórmulas compuestas. Fórmulas gaussianas.
6. Problemas del valor inicial en ecuaciones diferenciales ordinarias. Ecuaciones de primer orden: Método de Euler y métodos de Runge-Kutta. Sistemas de ecuaciones y ecuaciones de orden superior.
7. Problemas de contorno en ecuaciones diferenciales ordinarias. Método de disparo. Introducción al método de las diferencias finitas.

Campus Universitario de Puerto Real. Polígono Río San Pedro s/n. 11510. Puerto Real (Cádiz), Spain. Tel: 34.956.016300 . Fax: 34.956.016288 E-Mail: ciencias@uca.es

Código Seguro de verificación: 711AT2GjnIwRxSxzSNoDhQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/4



711AT2GjnIwRxSxzSNoDhQ==



TEMARIO PRÁCTICO: MÉTODOS MATEMÁTICOS DE LA QUÍMICA

1. Introducción al programa MATEMÁTICA.
2. Cálculo simbólico.
3. Aplicación a problemas usuales y a los algoritmos incluidos en el programa teórico.

Código Seguro de verificación:711AT2GjnIwRxSxzSNoDhQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/4



711AT2GjnIwRxSxzSNoDhQ==



CRITERIOS DE EVALUACIÓN: MÉTODOS MATEMÁTICOS DE LA QUÍMICA

Se evaluarán las prácticas de ordenador y se realizará un examen final de carácter teórico-práctico.

Campus Universitario de Puerto Real, Polígono Río San Pedro s/n. 11510. Puerto Real (Cádiz), Spain. Tel: 34.956.016300 · Fax: 34.956.016288 E-Mail: ciencias@uca.es

Código Seguro de verificación: 711AT2GjnIwRxSxzSNoDhQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/4



711AT2GjnIwRxSxzSNoDhQ==



BLIBLIOGRAFIA: MÉTODOS MATEMÁTICOS DE LA QUÍMICA

Burden, R.L.; Faires, J.D.: "Análisis Numérico" International Thomson Editores. México 1998.

Kincaid, D.; Cheney, W.: "Análisis Numérico" Addison-Wesley Iberoamericana 1994.

Issacson, E.; Keller, H.B.: "Analysis of numerical methods" Dover Publications 1994.

Stoer, J.; Bulirsch, R. "Introduction to numerical analysis" Springer-Verlag 1980.

Código Seguro de verificación:711AT2GjnIwRxSxzSNoDhQ==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/4



711AT2GjnIwRxSxzSNoDhQ==