



Máster en Ciencia y Tecnología Químicas
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Complutense de Madrid

Guía docente

**ESTRUCTURA Y SÍNTESIS QUÍMICA:
MÉTODOS MATEMÁTICOS
APLICADOS A LA QUÍMICA**

Código: 605200

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE
MADRID
CURSO 2022-2023

ESCENARIO 1. PRESENCIAL

Nombre de la asignatura (*Subject name*)

Estructura y síntesis química: Métodos matemáticos aplicados a la Química
Structure and Chemical synthesis: Mathematical methods for Chemistry

Duración

Primer semestre

Créditos ECTS /Carácter

6 créditos ECTS/ Optativo

Contenidos básicos (*Subject knowledge*)

Estudio de la propagación de errores. Descomposición de matrices. Ecuaciones diferenciales. Transformada rápida de Fourier. Diseño de experimentos.

Error propagation. Matrix decompositions. Differential equations. Fast Fourier Transform. Design of experiments.

Profesores y ubicación

Profesor	Mihaela Negreanu Pruna
Departamento	Análisis Matemático y Matemática Aplicada (Fac. CC. Químicas)
Correo electrónico	mihaela@ucm.es

Objetivos y competencias (*Abilities and Skills*)

OBJETIVOS

A parte de los objetivos generales propuestos en el documento de master universitario en ciencia y tecnología químicas, esta asignatura pretende dotar a los estudiantes de una base matemática para la resolución de problemas y el análisis de datos.

ABILITIES

Besides the general goals established for this Master, this subject provides the students with a basic mathematical background and techniques to be able to solve problems and analyze data.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG1.- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de problemas químicos.
- CG2.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés científico y social en el contexto de la Química.
- CG3.- Interpretar y analizar datos complejos en el entorno de la química y la tecnología química.
- CG4.- Reconocer y evaluar la calidad de los resultados teóricos y prácticos utilizando las herramientas adecuadas.

GENERAL SKILLS

- GS1.- Integrate knowledge and to face the complexity of problems in Chemistry.*
- GS2.- Develop theoretical and practical abilities to solve scientifically interesting problems in Chemistry*
- GS3.- Interpret and analyze complex data in Chemistry*
- GS4.- Recognize and asses the quality of the theoretical and practical outcomes using appropriate tools*

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE3.- Utilizar programas informáticos que permitan plantear y resolver problemas químicos.

SPECIFIC SKILLS:

- SS3.- Use computer programs to pose and solve problems in Chemistry.*

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT1.- Elaborar, escribir y defender informes de carácter científico y técnico.
- CT2.- Trabajar en equipo.
- CT3.- Valorar la importancia de la sostenibilidad y el respeto al medio ambiente.
- CT4.- Demostrar capacidad de autoaprendizaje.
- CT5.- Demostrar compromiso ético.
- CT6.- Comunicar resultados de forma oral/escrita.
- CT8.- Demostrar motivación por la investigación científica.

GENERIC COMPETENCES

- GC1.- Elaborate, write and defend scientific and technical reports*
- GC2.- Work as a team*
- GC3.- Value the importance of sostenibility and respect for the environment*
- GC4.- Show capacity for sealfteaching*
- GC5.- Show ethics commitment*
- GC6.- Communicate results in a verbal and written way*
- GC8.- Show motivation for scientific research.*

Contextualización en el Máster

La asignatura se oferta como asignatura optativa dentro de las dos materias que configuran el primer módulo.

Programa de la asignatura

1. Introducción al programa MATLAB: comandos y programación
2. Álgebra matricial. Autovalores. Ajuste (SVD)
3. Ecuaciones diferenciales. Diferencias finitas.
4. Integración numérica. Optimización.
5. Diseño de experimentos.

Se insistirá en el enfoque numérico y computacional y se mostrarán aplicaciones.

Resultados del aprendizaje

Una vez superada esta asignatura, el alumno debería ser capaz de:

1. Implementar en MATLAB algoritmos sencillos teniendo en cuenta su eficacia, tanto a nivel teórico como práctico.
2. Interpretar los resultados (numéricos y gráficos) de los algoritmos implementados.
3. Resolver numéricamente ecuaciones diferenciales.
4. Diseñar métodos de recogida de datos y su posterior análisis.

Metodología y programación docente

La signatura se desarrollará mediante clases teóricas (1'2 ECTS), seminarios (3'6 ECTS) y tutorías programadas (0'2 ECTS). A lo largo del curso, el alumno tendrá que entregar algún trabajo y se realizarán controles para comprobar el seguimiento (1 ECTS).

Actividad	Presencial (hrs)	Trabajo autónomo (hrs)	Créditos ECTS
Clases teóricas/Theory classes	12	20	1'2
Seminarios/Seminars	36	52	3'6
Tutorías/ Tutorials	2	10	0'2
Preparación de trabajos y exámenes	3	15	1
Total	53	97	6

Evaluación del aprendizaje

Control del trabajo de clase: 50%

Elaboración de prácticas y controles evaluación continua: 50%

Todas las clases y evaluaciones se realizarán con ordenador.

Idioma o idiomas en que se imparte

Español (clases) e inglés (programa informático).

Bibliografía y recursos complementarios

1. J. García de Jalón, J.I. Rodríguez & J. Vidal. *Aprenda Matlab 7.0 como si estuviera en primero*. ETSII (UPM), 2005.
2. S.C. Chapra & R.P. Canale. *Métodos numéricos para ingenieros: con programas de aplicación*. McGraw-Hill, 2005.
3. K.J. Beers. *Numerical methods for chemical engineering: applications in Matlab*. Cambridge University Press, 2007.
4. D.C. Montgomery. *Design and analysis of experiments*. John Wiley & Sons, 2009 (7^a ed.).