

AMPLIACIÓ DE MATEMÀTIQUES

LLICENCIATURA EN QUÍMICA. Curs 2006–2007

OBJECTIU:

Un dels objectius més importants de la Ciència és el de la comprensió dels fenòmens que hi ha al món, primer a un nivell més descriptiu i a continuació quantitativament. Aquesta quantificació passa sovint per unes lleis que es poden matematitzar donat lloc a problemes matemàtics. L'objectiu d'aquesta assignatura és donar eines per a abordar aquests problemes que tant sovint apareixen, tenint especialment en compte els que provenen del món de la Química.

PROGRAMA

PART I: MÈTODES NUMÈRICS

- 0. Teoria dels errors.** Errors absolut i relatiu. Propagació dels errors. Tractament estadístic de l'error. Problemes ben i mal condicionats. Algorismes ben i mal condicionats.
- 1. Zeros de funcions.** Mètodes de bisecció, de la secant, iteratius, de Newton,... Ordre de convergència. Estudi de l'error. Sistemes d'equacions.
- 2. Interpolació polinomial.** Càlcul del polinomi interpolador: Mètodes de Lagrange i de Newton (diferències dividides). Error d'interpolació. Altres tipus d'interpolació.
- 3. Integració numèrica.** Mètode del trapezi i mètode de Simpson. Estimació de l'error. Mètode de Romberg.
- 4. Aproximació de funcions.** Aproximació, en els casos discret i continu, pel mètode dels mínims quadrats. Polinomis de Fourier i polinomis de Legendre com exemples de sistemes ortogonals de funcions. Sistemes lineals sobredeterminats.

PART II: EQUACIONS DIFERENCIALS I SÈRIES DE FOURIER

- 5. Transformada de Laplace.** Modelització amb equacions diferencials. Equacions diferencials de la Cinètica Química. Definició de la Transformada de Laplace. Taula dels parells de Laplace més freqüents. Transformada de Laplace de la derivada. Altres propietats. Aplicació a resoldre equacions diferencials.
- 6. Successions i Sèries numèriques.** Exemples de successions. Criteris de convergència. Exemples de sèries. Sèrie geomètrica i sèrie harmònica. Criteris de convergència. Càlcul de la suma d'algunes sèries.
- 7. Sèries de Fourier.** Successions i sèries de funcions. Representació d'una funció periòdica mitjançant la seva sèrie de Fourier. Recuperació de la funció a partir del seu espectre discret en el camp de les freqüències. Aplicacions.

BIBLIOGRAFIA BÀSICA

- R. L. Burden ,J. D. Faires, *Análisis Numérico*, Grupo Editorial Iberoamérica, México D.F., 1985. **(1,2,3,4)**
- F. Balibrea Gallego, V. Jiménez López, *Ecuaciones diferenciales para las ciencias químicas y físicas*, ICE, Universidad de Murcia, 2000. **(5,7)**
- D. G. Zill *Ecuaciones diferenciales con aplicaciones*, Grupo Editorial Iberoamérica, México, 1988. **(5,7)**
- J.M. Ortega, *Introducció a l'anàlisi matemàtica*, Manuals de la UAB, num. 4, 1990. **(6)**
- I. Serra i Pujol, R. Vilanova i Arbós, *Tractament del senyal*, Manuals de la U.A.B., 1999. **(5,7)**

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA

- A. Aubanell, A. Benseny, A. Delshams, *Eines bàsiques de càlcul numèric*, Manuals de la U.A.B., 1991. **(0,1,2,3,4)**
- M. Braun, *Ecuaciones Diferenciales y sus aplicaciones*, Grupo Editorial Iberoamericano, México, 1990. **(5,7)**
- C. Bonet et al., *Càlcul Numèric*, Centre Publicacions d'Abast, U.P.C., Barcelona, 1992. **(0,1,2,3,4)**
- S. C. Chapra, R. P. Canale , *Métodos numéricos para ingenieros*. Ed. McGraw-Hill, 1988. **(1,2,3,4,7)**
- I. Peral Alonso, *Ecuaciones en derivadas parciales*, Addison-Wesley/Univ. Autónoma de Madrid, E.U.A. 1995. **(7)**
- M. Spivak, *Calculus*, Editorial Reverté, 1995. **(6)**

PROFESSORS

Teoria: Armengol Gasull (despatx C1/318). Tel: 93-5812909.
e-mail: gasull@mat.uab.cat.
Horari de Consulta: Dimarts de 12 a 13 i Dijous de 11 a 12.
Problemes: Anna Samà.
e-mail: sama@mat.uab.cat.

AVALUACIÓ

En l'avaluació de l'assignatura es té molt en compte el treball que realitzen els alumnes a les classes de problemes. De fet els alumnes han de fer problemes regularment i exposar-los en aquesta classe. Aquesta feina dóna lloc al 25% de la nota. També hi ha un examen final que dóna el 75% restant de la nota. La nota de la classe de problemes es conservarà per la convocatòria de setembre.

NOTA FINAL

L'assignatura estarà donada d'alta al Campus Virtual.