



Universidad de Puerto Rico

Recinto de Río Piedras
Facultad de Ciencias Naturales
Departamento de Matemáticas
Programa Subgraduado



MATE 3163 – SÍLABO

Título del Curso

Métodos Matemáticos para Química Física

Codificación

MATE 3163

Número de Horas / Créditos

Cuatro (4) créditos. Cuatro horas de conferencia y una hora de taller a la semana.

Prerrequisitos

MATE 3151 (o su equivalente), QUIM 3001-3002 (o su equivalente).

Descripción del Curso

This course has been designed for Chemistry students. The purpose is to expose the student to a series of techniques and topics at an opportune moment in his or her academic training. It also includes the use, at all times, of a computer algebraic system (CAS). The topics to be covered are the following:

Integral Calculus: antiderivatives, indefinite and improper integrals. Integration methods, numerical integration. Probability distributions and mean values. Series and transforms: Fourier, Laplace. Several variables calculus: partial derivatives, exact and inexact differentials, multiple and line integrals. Extreme values in several variables. Differential equations: Newton's Laws, harmonic oscillator, separable equations, exact and inexact equations, partial derivatives equations. Solution methods: Laplace transform, numerical. Operators, matrices and group theory. Cramer's rule, matrix inverses. Experimental data treatment: random errors, data reduction, error propagation, least squares method.

Curso diseñado para estudiantes de química. El propósito es exponer al estudiante a una serie de técnicas y tópicos en un momento oportuno en su preparación académica. Incluye además la utilización, en todo momento, de un sistema algebraico computadorizado (CAS por sus siglas en inglés). Los temas a cubrirse son los siguientes:

Cálculo integral: antiderivadas, integrales indefinidas e impropias. Métodos de integración, integración numérica. Distribuciones de probabilidad y valores medios. Series y transformadas: Fourier, Laplace. Cálculo de varias variables: derivadas parciales, diferenciales exactas e inexactas, integrales múltiples y de línea. Valores extremos en varias variables. Ecuaciones diferenciales: Leyes de Newton, Oscilador armónico, ecuaciones separables, ecuaciones exactas e inexactas, ecuaciones de derivadas parciales. Métodos de solución: transformada de Laplace, numérico. Operadores, matrices y teoría de grupos. regla de Cramer, inversos de matrices. Tratamiento de datos experimentales: errores aleatorios, reducción de datos, propagación de errores, método de mínimos cuadrados.

Fecha de Vigencia:	SEGUNDO SEMESTRE DEL AÑO ACADÉMICO 2020-2021
Salón y Horario:	MATE 3163 – Sección 0U1 LW 0700AM-0820AM MJ 0700AM-0750AM SALÓN VIRTUAL http://icardona.org
Información del Profesor:	Iván Cardona Torres Oficina A-117 (CNL) Phone: (787) 764-0000 x 88271 e-mail: ivan.cardona1@upr.edu

Objetivos del Curso

Objetivos Generales

- Exponer al estudiante a una serie de técnicas (matemáticas) y tópicos (matemáticos) en un momento oportuno en su preparación académica como químicos.
- Aplicar las Matemáticas a problemas de interés específico para químicos, biólogos e ingenieros.
- Utilizar conceptos y cálculos matemáticos para entender propiedades químicas y describir el comportamiento de la materia cinético-molecular y condensada.
- Enfatizar la naturaleza interdisciplinaria de la Química Física.
- Desarrollar destrezas cuantitativas de alto nivel necesarias para el entendimiento de las distintas teorías presentadas en la Química Física.

Objetivos Específicos

En este curso los estudiantes:

- obtendrán una integral indefinida para ciertos integrandos mediante el uso de tablas de integrales;
- calcularán una integral definida utilizando la integral indefinida y entender su rol como un incremento en la antiderivada;
- entenderán la relación entre una integral definida y el área debajo de la gráfica del integrando;
- obtendrán un valor aproximado de la integral definida utilizando análisis numérico;
- manipularán integrales a formas manejables mediante el uso de fracciones parciales, el método de sustitución y el método de integración por partes;
- calcularán valores medios de cantidades utilizando la distribución de probabilidad de una variable aleatoria;
- determinarán si una serie con términos constantes converge;
- calcularán los coeficientes para la serie de potencias que representa a una función dada;
- determinarán el intervalo de convergencia de una serie de potencias;
- determinarán los coeficientes de la serie de Fourier para representar algunas funciones elementales;
- determinarán la transformada de Fourier para algunas funciones elementales;

- determinarán la transformada de Laplace para algunas funciones elementales;
- manipularán la transformada de Laplace utilizando varios teoremas;
- escribirán fórmulas para las derivadas parciales y para la diferencial de una función de varias variables;
- ejecutarán un cambio de variables independientes para obtener fórmulas que relacionen diferentes derivadas parciales;
- utilizarán identidades que envuelven derivadas parciales para eliminar cantidades indeseables en fórmulas de termodinámica;
- identificarán una diferencial exacta y un factor de integración;
- evaluarán una integral de línea con dos variables independientes;
- evaluarán una integral múltiple;
- cambiarán variables independientes en una integral múltiple;
- utilizarán operadores de derivadas vectoriales;
- encontrarán máximos y mínimos de funciones de varias variables con y sin restricciones en el dominio;
- construirán una ecuación de movimiento para una partícula a partir de la segunda ley de Newton;
- resolverán una ecuación diferencial lineal homogénea con coeficientes constantes;
- resolverán una ecuación diferencial separable;
- resolverán una ecuación diferencial exacta;
- utilizarán factores de integración para resolver una ecuación diferencial inexacta;
- resolverán ecuaciones diferenciales parciales sencillas mediante el método de separación de variables;
- resolverán una ecuación diferencial mediante el uso de transformadas de Laplace;
- utilizarán un CAS (e.g. Mathematica) para resolver simbólicamente y numéricamente ecuaciones diferenciales;
- realizarán las operaciones elementales de álgebra de operadores;
- identificarán y utilizarán operadores de simetría asociados a una molécula;
- realizarán las operaciones elementales de álgebra de matrices, incluyendo la multiplicación y la búsqueda de inversas de matrices;
- identificarán un grupo de operadores simetrías y construir la tabla de multiplicación para este grupo;
- resolverán cualquier sistema relativamente sencillo de ecuaciones lineales mediante el método de eliminación de variables;
- resolverán un sistema no homogéneo de ecuaciones lineales utilizando la regla de Cramer e inversión de matrices;
- resolverán un sistema homogéneo de ecuaciones lineales utilizando la condición de dependencia;
- identificarán posibles fuentes de error en un experimento de química física y clasificar los errores como sistémicos o aleatorios;
- calcularán la media y desviación estándar de una muestra de medidas;
- calcularán el error probable en la medida de una cantidad medible;
- realizar reducción de data numéricamente utilizando mínimos cuadrados y otros métodos numéricos y determinar los errores probables, de ciertas cantidades, obtenidos con estos métodos;

Contenido Temático

Bosquejo del contenido y Distribución del Tiempo

Sección del Texto	Tema	Tiempo (en horas)
5.1-5.2	La antiderivada de una función	1.0 horas
5.3	El proceso de integración	1.0 horas
5.4	Integrales impropias	1.0 horas
	Laboratorio CAS ("Computer Algebraic System")-1	1.0 horas
5.5	Métodos de integración	2.0 horas
5.6	Integración Numérica	1.5 horas
5.7	Distribuciones de probabilidad	2.5 horas
	Laboratorio CAS-2	1.0 horas
6.1	Series de constantes	2.0 horas
6.2	Series de funciones	3.0 horas
	Laboratorio CAS-3	1.0 horas
6.3	Series de Fourier	2.0 horas
6.4	Operaciones matemáticas en series	0.5 horas
6.5	Transformadas de integrales	1.5 horas
	Laboratorio CAS-4	1.0 horas
7.1	Funciones de varias variables	1.5 horas
7.2	Cambio de variables	1.0 horas
7.3	Relaciones adicionales entre derivadas parciales	1.5 horas
	Laboratorio CAS-5	1.0 horas
7.4	Diferenciales exactas e inexactas	1.0 horas
7.5	Integrales de línea	2.0 horas
7.6	Integrales múltiples	2.0 horas
	Laboratorio CAS-6	1.0 horas
7.7	Operadores de derivadas vectoriales	2.0 horas
7.8	Valores extremos de funciones de varias variables	2.0 horas
	Laboratorio CAS-7	1.0 horas
8.1	Ecuaciones diferenciales y las leyes de movimiento de Newton	1.0 horas
8.2	El oscilador armónico	2.0 horas
	Laboratorio CAS-8	1.0 horas
8.3	Ecuaciones diferenciables separables	1.0 horas
8.4	Ecuaciones diferenciables exactas	1.0 horas
8.5	Ecuaciones diferenciables inexactas: factores de integración ...	1.0 horas
8.6	Ecuaciones diferenciables parciales: ondas en una cuerda	1.0 horas
	Laboratorio CAS-9	1.0 horas
8.7	Solución de ecuaciones mediante la transformada de Laplace .	1.0 horas
8.8	Soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales	2.0 horas
9.1	Operadores y álgebra de operadores	1.0 horas
	Laboratorio CAS-10	1.0 horas
9.2	Operadores simétricos	2.0 horas
9.3	Álgebra de matrices	2.0 horas
	Laboratorio CAS-11	1.0 horas
9.5	Introducción a la teoría de grupos	2.0 horas
10.2	Regla de Cramer	1.0 horas
10.3	Solución mediante inversión de matrices	2.0 horas
	Laboratorio CAS-12	1.0 horas
11.1	Errores experimentales	1.0 horas
11.2	Tratamiento estadístico de errores aleatorios	2.0 horas
	Laboratorio CAS-13	1.0 horas
11.3	Reducción de datos y propagación de errores	1.5 horas
11.4	Reducción de datos gráfica y numéricamente	1.5 horas
	Laboratorio CAS-14	1.0 horas
11.5	El método de mínimos cuadrados	3.0 horas
	Laboratorio CAS-15	1.0 horas
	TOTAL DE HORAS	75.0 horas

Técnicas Instruccionales

Nuestros cursos están centrados en la interacción del maestro y el estudiante como colaboradores en la comprensión y solución de problemas de contenido matemático.

Durante este segundo semestre 2020-2021, debido a la situación por el COVID-19, **el curso se ofrecerá completamente en línea, mediante videoconferencias asincrónicas** equivalentes a setenta y cinco (75) horas contacto. Para impartir la clase, utilizaremos las siguientes herramientas tecnológicas

- Moodle
- BigBlueButton
- Google Classroom
- Google Meets
- Google Sites
- Google Forms
- Microsoft Teams
- WeBWork
- Página del Departamento de Matemáticas
- Página del Profesor
- YouTube
- Internet

Muchas de las herramientas arriba pueden ser encontradas en <https://enlinea.uprrp.edu/estudiantes/>.

Métodos alternos de enseñanza¹

La Certificación Núm 112 (2014-2015) de la Junta de Gobierno define un curso presencial como un curso en el cual 75% o más de las horas de instrucción requieren la presencia física del estudiante y el profesor en el salón de clases. Esto quiere decir que 25% de un curso presencial, pudiera ofrecerse sin requerir la presencia física de los estudiantes y el profesor en el salón de clases. En caso de ser necesario, este curso podrá completar hasta 25% de las horas contacto (18.75 horas) de forma no presencial por métodos alternos como, por ejemplo: Video-conferencias, módulos instruccionales, foros de discusión y cibercharlas entre otros. De ser así, se modificará el calendario/temario para incluir los temas que serán cubiertos por métodos alternos.

Recursos de Aprendizaje

Salón de clases y libro de Texto. Algún Sistema Algebraico Computarizado (CAS) (e.g. Mathematica, Maple). Acceso, una vez por semana a un salón con computadoras (al menos una (1) computadora por cada dos (2) estudiantes).

Técnicas de Evaluación

Las calificaciones se asignarán a base de tres (3) actividades de evaluación parcial denotadas por E_1, E_2, E_3 respectivamente y una (1) actividad de evaluación final (que cubre todo el material del curso y contará doble) que será denotada por F_1 . Vea el contenido temático. Haciendo $F_2 = F_1$ para que F_1 cuente dos (2) veces, el promedio final se calculará a base de las siguientes cinco (5) notas²: $\{E_1, E_2, E_3, F_1, F_2\}$ eliminándose la menor de las cinco. A saber,

$$\text{Promedio Final} = \frac{(E_1 + E_2 + E_3 + F_1 + F_2) - \text{Minimo}(E_1, E_2, E_3, F_1, F_2)}{4}$$

Cada una de las actividades de evaluación consistirá de tres "quizzes" (o pruebas cortas). Específicamente, la actividad E_1 consistirá de tres quizzes Q_1, Q_2, Q_3 que se administrarán el mismo día a través de Moodle o WeBWork; la actividad E_2 consistirá de tres quizzes Q_4, Q_5, Q_6 que se administrarán el mismo día a través de Moodle o WeBWork; la actividad E_3 consistirá de tres quizzes Q_7, Q_8, Q_9 que se administrarán el mismo día a través de Moodle o WeBWork y, finalmente, la actividad F_1 consistirá de tres quizzes

¹Este curso es presencial bajo circunstancias normales. Sin embargo, durante este segundo semestre 2020-2021, debido a la situación por el COVID-19, se ofrecerá completamente en línea mediante videoconferencias asincrónicas.

²Aquí identificamos el puntaje total de cada actividad con la actividad, e.g. si el puntaje de la actividad E_1 es 85, diremos que $E_1 = 85$.

Q_{10}, Q_{11}, Q_{12} que se administrarán el mismo día a través de Moodle o WeBWork. En cada uno de los quizzes $Q_1, Q_2, \dots, Q_{11}, Q_{12}$ habrá **un solo problema por página y la navegación será en formato secuencial**, esto es, tendrá que contestar cada problema antes de continuar con el siguiente. De estar disponible un sistema de *proctoring* electrónico, lo usaremos para las actividades de evaluación. Habrá evaluación diferenciada a estudiantes con necesidades especiales.

Por ejemplo, un estudiante cuyos puntajes sean:

$$Q_1 = 25, Q_2 = 20, Q_3 = 30, Q_4 = 36, Q_5 = 12, Q_6 = 11, Q_7 = 22, Q_8 = 36, Q_9 = 30, Q_{10} = 31, Q_{11} = 32, Q_{12} = 20,$$

obtiene lo siguiente:

$$E_1 = 25 + 20 + 30 = 75$$

$$E_2 = 36 + 12 + 11 = 59$$

$$E_3 = 22 + 36 + 30 = 88$$

$$F_1 = 31 + 32 + 20 = 83$$

$$F_2 = F_1 = 83$$

Su promedio final sería,

$$\frac{(75 + 59 + 88 + 83 + 83) - \text{Mínimo}(75, 59, 88, 83, 83)}{4} = 82.25.$$

Sistema de Calificación

A, B, C, D, F

Acomodo Razonable

La Universidad de Puerto Rico cumple con todas las leyes federales, estatales y reglamentos concernientes a discriminación, incluyendo "*The American Disabilities Act*" (Ley ADA) y la Ley 51 del Estado Libre Asociado de Puerto Rico. Los estudiantes que reciban servicios de Rehabilitación Vocacional deben comunicarse con el profesor al inicio del semestre para planificar el acomodo razonable y equipo asistivo necesario conforme a las recomendaciones de la Oficina de Asuntos para las Personas con Impedimento (OAPI) del Decanato de Estudiantes. También aquellos estudiantes con necesidades especiales que requieren de algún tipo de asistencia o acomodo deben comunicarse con el profesor. Una solicitud de acomodo razonable NO EXIME al estudiante de cumplir con los requisitos académicos de los programas de estudio.

Integridad Académica

La Universidad de Puerto Rico promueve los más altos estándares de integridad académica y científica. El Artículo 6.2 del Reglamento General de Estudiantes de la UPR (Certificación Núm. 13, 2009-2010, de la Junta de Síndicos) establece que

“la deshonestidad académica incluye, pero no se limita a: acciones fraudulentas, la obtención de notas o grados académicos valiéndose de falsas o fraudulentas simulaciones, copiar total o parcialmente la labor académica de otra persona, plagiar total o parcialmente el trabajo de otra persona, copiar total o parcialmente las respuestas de otra persona a las preguntas de un examen, haciendo o consiguiendo que otro tome en su nombre cualquier prueba o examen oral o escrito, así como la ayuda o facilitación para que otra persona incurra en la referida conducta”.

Cualquiera de estas acciones estará sujeta a sanciones disciplinarias en conformidad con el procedimiento disciplinario establecido en el Reglamento General de Estudiantes de la UPR vigente.

Política Institucional contra el Hostigamiento sexual en la Universidad de Puerto Rico

La Universidad de Puerto Rico prohíbe el discrimen por razón de sexo y género en todas sus modalidades, incluyendo el hostigamiento sexual. Según la Política institucional contra el Hostigamiento Sexual en la Universidad de Puerto Rico, Certificación Núm. 130, 2014-2015 de la Junta de Gobierno, si un estudiante está siendo o fue afectado por conductas relacionadas a hostigamiento sexual, puede acudir ante la Oficina de la Procuraduría Estudiantil, el Decanato de Estudiantes o la Coordinadora de Cumplimiento con Título IX para orientación y/o presentar una queja.

Libro de Texto

Mortimer R. G., *Mathematics for Physical Chemistry, Third Edition*, Elsevier Academic Press (2011). ISBN-13: 978-9380931814

Referencias

- McQuarrie D. A., and Hansen M., *Mathematics for Physical Chemistry*, University Science Books, 2008.
- Barrante J. R., *Applied Mathematics for Physical Chemistry*, 3rd ed., Prentice Hall, 2003.
- Spiegel M., Lipschutz S., *Schaum's Outline of Vector Analysis*, 2nd ed, McGraw-Hill, 2009.
- Bronson R., *Schaum's Outline of Differential Equations*, McGraw-Hill, 2009.
- Lipson M., *Schaum's Outline of Linear Algebra*, 4th ed, McGraw-Hill, 2009.

Referencias Electrónicas

- UPRRP-Moodle: <https://online.uprrp.edu/?lang=en>
- Wolfram Demonstrations Project: <http://demonstrations.wolfram.com/index.html>
- Physical Chemistry Lecture Notes: <http://www.colby.edu/chemistry/PChem/Lecture1.html>
- Understanding Chemistry: <http://www.chemguide.co.uk/phymenu.html>
- Mathlets: Java™ Applets for Math Explorations: <http://cs.jsu.edu/mcis/faculty/leathrum/Mathlets/>
- Symmetry Resources at Otterbein University: <http://symmetry.otterbein.edu/index.html>