

# FUNDAMENTOS DE PROGRAMACIÓN CIENTÍFICA EN QUÍMICA

Curso 2018-2019

(Fecha última actualización: 07/05/2018)

(Fecha de aprobación en Consejo de Departamento: 17/05/2018)

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
PROGRAMACIÓN CIENTÍFICA EN QUÍMICA	FUNDAMENTOS DE PROGRAMACIÓN CIENTÍFICA EN QUÍMICA	4º	7º	6	Optativa
PROFESORES <sup>(1)</sup>			DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS		
<ul style="list-style-type: none"> <li>Luis Javier Herrera Maldonado</li> </ul>			Dpto. Arquitectura y Tecnología de Computadores. - 3ª planta, Facultad de Ciencias. 958240460 - 2ª planta, D25, E.T.S.I.Inf y Telec.. 958240569 Correo electrónico: jherrera@ugr.es		
			HORARIO DE TUTORÍAS Y/O ENLACE A LA PÁGINA WEB DONDE PUEDAN CONSULTARSE LOS HORARIOS DE TUTORÍAS <sup>(1)</sup>		
			Lunes de 12-14 y de 16 a 18. Martes de 10-12.		
GRADO EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR		
Grado en Química			Matemáticas, Física, Biología, Telecomunicaciones.		
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)					
<ul style="list-style-type: none"> <li>Ninguno</li> </ul>					
BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)					
<p>Conceptos básicos sobre Programación. Lenguajes de alto nivel orientados al cálculo científico. Datos, estructuras de control y funciones. Ficheros. Representación gráfica y visualización de datos. Métodos informáticos para el análisis de datos.</p>					

<sup>1</sup> Consulte posible actualización en Acceso Identificado > Aplicaciones > Ordenación Docente

(∞) Esta guía docente debe ser cumplimentada siguiendo la "Normativa de Evaluación y de Calificación de los estudiantes de la Universidad de Granada" ([http://secretariageneral.ugr.es/pages/normativa/fichasugr/ncg7121/!](http://secretariageneral.ugr.es/pages/normativa/fichasugr/ncg7121/))



## COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS

- CG1 Capacidad de análisis y síntesis
- CG5 Capacidad para la gestión de datos y la generación de información / conocimiento
- CG6 Resolución de problemas
- CG9 Razonamiento crítico
- CE0 Los fundamentos o principios de otras disciplinas necesarios para las distintas áreas de la Química.
- CE30 Utilizar razonadamente las herramientas matemáticas e informáticas para trabajar con datos químicos

## OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)

- Identificar las posibilidades y limitaciones de los ordenadores como herramienta para el avance del conocimiento científico y para el desarrollo profesional
- Aprender a utilizar un entorno de programación avanzado para operar con datos de origen químico
- Comprender los principios básicos y los elementos de la programación estructurada
- Identificar y analizar diversos problemas químicos prácticos resolubles mediante programación

## TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

### TEMARIO TEÓRICO:

- BLOQUE 1. Conceptos básicos sobre Programación de Ordenadores: Informática, sistema informático, datos e información. Arquitectura básica de un computador. El sistema operativo. Programación de ordenadores. Informática, programación de ordenadores y Química. Química computacional
- BLOQUE 2. Introducción a MATLAB: Entorno de programación MATLAB. Variables, tipos de datos, constantes. Expresiones. Funciones matemáticas básicas
- BLOQUE 3. Operaciones básicas en MATLAB: Vectores y matrices. Funciones avanzadas. Derivación e Integración. Aplicaciones básicas de Quimiometría
- BLOQUE 4. Lectura y visualización de datos. Scripts: Directorio de trabajo. Creación de scripts. Comandos de entrada y salida de datos. Gráficos: Visualización de datos en 2D y 3D. Lectura de datos de fichero. Guardando datos en fichero
- BLOQUE 5. Programación estructurada en MATLAB: Programación estructurada. Depuración de programas. Resolución de problemas científicos de optimización y minimización
- BLOQUE 6. Programación avanzada: funciones y estructuras de datos: Introducción, estructura de una función. Argumentos de entrada y salida. Variables locales y globales. Comparativa entre scripts y funciones. Estructuras. Otros conceptos: Cells, Recursividad y Programación dirigida a Objetos
- BLOQUE 7: Aplicaciones avanzadas utilizando Programación en Química. Análisis de datos Químicos, Calibración en Química. Clasificación. Regresión. Simulación de procesos químicos. Uso de plataformas de altas prestaciones para aplicaciones químicas

### TEMARIO PRÁCTICO:

#### Seminarios/Talleres

- Introducción a la programación y control de procesos con Arduino (complementado con sesiones en teoría y prácticas)
- Otros lenguajes para programación científica avanzados: Octave, Python
- Interfaces entre MATLAB y Excel
- Calibración y Validación en Química

#### Prácticas de Laboratorio:



Bloque I. Entorno de programación y programación básica con MATLAB  
Bloque II. Vectores y matrices  
Bloque III. Primeros programas en MATLAB. Entrada y salida de datos. Visualización de datos. Problemas  
Bloque IV. Programación estructurada en MATLAB  
Bloque V. Programación estructurada en MATLAB II  
Bloque VI. Verificación y Depuración de programas  
Bloque VII. Eficiencia  
Bloque VIII. Estructuras de datos compuestas  
Bloque IX. Polinomios y regresión

#### BIBLIOGRAFÍA

##### BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL:

- MATLAB: Una Introducción con ejemplos prácticos. Amos Gilat. Barcelona : Reverté, 2006
- Curso Básico de Programación en MATLAB. Antonio Souto y otros. Editorial Tébar, 2013.
- Essential MATLAB for Engineers and Scientists, Brian H. Hahn & Daniel T. Valentine. 5ª Edición, Elsevier, 2013.
- (Recurso electrónico) Numerical Methods with Worked Examples: Matlab Edition. C. Woodford, C. Phillips. Springer 2012.

##### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

- (Recurso electrónico) Practical data analysis in chemistry. Marcel Maeder and Yorck-Michael Neuhold. Oxford : Elsevier, 2007.
- Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant. Richard G. Bre-reton. Wiley. 2003.
- Cálculo científico con MATLAB y Octave. A.Quarteroni, F.Saleri. Milano: Springer, 2006.
- MATLAB y sus Aplicaciones en las Ciencias y la Ingeniería. César Pérez. Prentice Hall. 2003
- MATLAB : a practical introduction to programming and problem solving. Stormy At-taway. Amsterdam : Butterworth-Heinemann, 2009

#### ENLACES RECOMENDADOS

##### PROGRAMACIÓN:

Página oficial de MATLAB: <http://www.mathworks.es/>  
Referencia de MATLAB: <http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/techdoc/>  
Página GNU Octave: <http://www.gnu.org/software/octave/>  
Software disponible en la UGR: <http://csirc.ugr.es/informatica/ServiciosCorporativos/software/>

##### BIBLIOGRAFÍA EN FORMATO ELECTRÓNICO:

A guide to MATLAB : for beginners and experienced users :  
<http://site.ebrary.com/lib/univgranada/docDetail.action?docID=10130468>  
Practical data analysis in chemistry :  
<http://www.sciencedirect.com/science/publication?issn=09223487&volume=26>  
C++ para Ingeniería y Ciencias: <http://books.google.es/>  
Tutoriales en la página web oficial de MATLAB: <http://www.mathworks.es/academia/>

#### METODOLOGÍA DOCENTE

En la asignatura se usará una pluralidad de técnicas, herramientas y enfoques que permitan un aprendizaje más completo.



Para ello en las horas de presencialidad de teoría se recurrirá a una lección magistral “participativa”, centrándose en la resolución conjunta de problemas. Durante las sesiones de prácticas y seminarios se aprovechará el trabajo en grupos reducidos para plantear metodologías basadas en el aprendizaje basado en problemas y en grupos de discusión. Por otra parte, en la no presencialidad se incluirá un seguimiento bajo tutorías individualizadas y grupales, así como guías de trabajo autónomo para garantizar la adquisición de los objetivos y competencias de la asignatura

#### EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)

La evaluación de la adquisición de las competencias de esta materia se realizará, de forma individualizada, a partir mecanismos que combinen un seguimiento continuo y un examen final. Se basará en los siguientes componentes principales:

- Asistencia y participación en las sesiones presenciales
- Examen escrito parcial de la asignatura (que podrá ser eliminatorio) y resolución y entrega de problemas análogos a los desarrollados en las clases presenciales de teoría
- Realización de las diferentes prácticas de ordenador propuestas a lo largo del curso
- Examen escrito final consistente en la resolución de diversos problemas de Programación (en muchos casos similares a los que se tratarán en teoría y prácticas)

La ponderación de cada una de las partes de los criterios de evaluación será la siguiente

Asistencia y participación 10%

Exámenes escritos (control y final) 45%

Prácticas de laboratorio 45%

En virtud al Artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada, el alumno puede examinarse mediante la evaluación única final. Dicha evaluación consistirá en una prueba escrita en la que se incluirán cuestiones de teoría, problemas ejercicios prácticos. Para acogerse a esta opción, el estudiante ha de solicitarlo al Director del Departamento en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

#### DESCRIPCIÓN DE LAS PRUEBAS QUE FORMARÁN PARTE DE LA EVALUACIÓN ÚNICA FINAL ESTABLECIDA EN LA “NORMATIVA DE EVALUACIÓN Y DE CALIFICACIÓN DE LOS ESTUDIANTES DE LA UNIVERSIDAD DE GRANADA”

Examen de ejercicios de programación, relacionados con el temario impartido en la asignatura. Durante la prueba, dichos ejercicios podrán ser practicados en el ordenador, y en cualquier caso serán entregados transcritos al profesor.

#### INFORMACIÓN ADICIONAL

