

# FUNDAMENTOS DE PROGRAMACIÓN CIENTÍFICA EN QUÍMICA

Curso 2020-2021

(Fecha última actualización: 13/07/2020)

(Fecha de aprobación en Consejo de Departamento: 15/07/2020)

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 (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)		
<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: <a href="mailto:jherrera@ugr.es">jherrera@ugr.es</a>		
			HORARIO DE TUTORÍAS Y/O ENLACE A LA PÁGINA WEB DONDE PUE DAN CONSULTARSE LOS HORARIOS DE TUTORÍAS <sup>(1)</sup>		
			Martes de 10-12 y de 16 a 18. Miércoles de 10-12. <a href="http://directorio.ugr.es/static/Personal/*/jherrera@ugr.es">http://directorio.ugr.es/static/Personal/*/jherrera@ugr.es</a>		
GRADO EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR		
Grado en Química			Física, Matemáticas, Biología.		
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)					
<ul style="list-style-type: none"> <li>Disponer de un computador portátil.</li> </ul>					
BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)					
Conceptos básicos sobre Programación. Lenguajes de alto nivel orientados al cálculo científico.					

<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/>)



Datos, estructuras de control y funciones.  
Ficheros.  
Representación gráfica y visualización de datos.  
Métodos informáticos para el análisis de datos.

#### 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, 2014.
- Essential MATLAB for Engineers and Scientists, Brian H. Hahn & Daniel T. Valentine. 5ª Edición, Elsevier, 2019.
- (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, 2011.
- 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. 2012
- MATLAB : a practical introduction to programming and problem solving. Stormy At-taway. Amsterdam : Butterworth-Heinemann, 2016

## 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 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 las horas de trabajo fuera del horario lectivo 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, independientemente del régimen de asistencia (presencial o virtual):

- Asistencia y participación en las sesiones presenciales, realizando los ejercicios que se irán proponiendo a lo largo de las sesiones.
- Realización de las diferentes prácticas de ordenador.
- El examen final consiste en la resolución de diversos problemas de Programación (en muchos casos similares a los que se tratarán en teoría y prácticas).
- Será necesario superar el examen final para superar la asignatura.
- La ponderación aproximada de cada una de las partes de los criterios de evaluación será la siguiente:
  - Asistencia, participación 10%.
  - Examen final 45%.
  - Prácticas de laboratorio 45%.
- En la *convocatoria extraordinaria*, la calificación final será el *máximo* entre la nota del examen final, y la ponderación anterior (asistencia y participación 10%; examen 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 final 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 al profesor.

#### ESCENARIO A (ENSEÑANZA-APRENDIZAJE PRESENCIAL Y NO PRESENCIAL)

#### ATENCIÓN TUTORIAL

#### HORARIO

(Según lo establecido en el POD)

#### HERRAMIENTAS PARA LA ATENCIÓN TUTORIAL

(Indicar medios telemáticos para la atención tutorial)

[http://directorio.ugr.es/static/Personal/\\*/jherrera@ugr.es](http://directorio.ugr.es/static/Personal/*/jherrera@ugr.es)

Aparte de e-mail, y de los avisos, mensajería y foros de la



plataforma docente, que ya se venían usando para preguntas cortas y dudas frecuentes, se podrán usar las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI)  
<https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia>

#### MEDIDAS DE ADAPTACIÓN DE LA METODOLOGÍA DOCENTE

- En el caso de que sea posible mantener una distancia de seguridad en el aula de al menos 1,5 metros entre los ocupantes, las sesiones serán presenciales en su totalidad.
- En otro caso, se establecerán turnos de asistencia, habilitándose material para la preparación de las sesiones y su asistencia de forma síncrona para aquellos estudiantes que no puedan asistir.
- Tutorías grupales o individuales online en el horario previsto en la programación docente presencial. Dichas tutorías también podrán ser llevadas a cabo en horario distinto tras acuerdo con el alumnado, procurando no interferir en las actividades programadas en el resto de las asignaturas del curso.

#### MEDIDAS DE ADAPTACIÓN DE LA EVALUACIÓN (Instrumentos, criterios y porcentajes sobre la calificación final)

##### Convocatoria Ordinaria

- No hay cambios, tan solo que las pruebas de evaluación continua y el examen final se realizarán de forma presencial preferentemente, utilizando si es necesario turnos rotatorios para dicho objetivo, salvo en el caso que por circunstancias sanitarias no pueda realizarse, en cuyo caso se realizará de forma virtual síncrona, utilizando, según sea el caso, la plataforma docente de la asignatura y las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI).  
<https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia>

##### Convocatoria Extraordinaria

- No hay cambios, tan solo que la prueba se realizará de forma presencial preferentemente, salvo en el caso que por circunstancias sanitarias no pueda realizarse, en cuyo caso se realizará de forma virtual síncrona, utilizando, según sea el caso, la plataforma docente de la asignatura y las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI).
- <https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia>

##### Evaluación Única Final

- No hay cambios, tan solo que la prueba se realizará de forma presencial preferentemente, salvo en el caso que por circunstancias sanitarias no pueda realizarse, en cuyo caso se realizará de forma virtual síncrona, utilizando, según sea el caso, la plataforma docente de la asignatura y las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI).
- <https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia>

### ESCENARIO B (SUSPENSIÓN DE LA ACTIVIDAD PRESENCIAL)



ATENCIÓN TUTORIAL	
<a href="http://directorio.ugr.es/static/Personal/*/jherrera@ugr.es">http://directorio.ugr.es/static/Personal/*/jherrera@ugr.es</a>	HERRAMIENTAS PARA LA ATENCIÓN TUTORIAL (Indicar medios telemáticos para la atención tutorial)
<a href="http://directorio.ugr.es/static/Personal/*/jherrera@ugr.es">http://directorio.ugr.es/static/Personal/*/jherrera@ugr.es</a>	Aparte de e-mail, y de los avisos, mensajería y foros de la plataforma docente, que ya se venían usando para preguntas cortas y dudas frecuentes, se podrán usar las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI) <a href="https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia">https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia</a>
MEDIDAS DE ADAPTACIÓN DE LA METODOLOGÍA DOCENTE	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Se utilizará la plataforma docente de la asignatura y las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI). <a href="https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia">https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia</a></li> <li>Tutorías grupales o individuales online en el horario previsto en la programación docente presencial. Dichas tutorías también podrán ser llevadas a cabo en horario distinto tras acuerdo con el alumnado, procurando no interferir en las actividades programadas en el resto de las asignaturas del curso.</li> </ul>	
MEDIDAS DE ADAPTACIÓN DE LA EVALUACIÓN (Instrumentos, criterios y porcentajes sobre la calificación final)	
Convocatoria Ordinaria	
<ul style="list-style-type: none"> <li>No hay cambios, tan solo que las pruebas de evaluación continua y el examen final se realizarán de forma virtual síncrona, utilizando, según sea el caso, la plataforma docente de la asignatura y las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI).</li> <li><a href="https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia">https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia</a></li> </ul>	
Convocatoria Extraordinaria	
<ul style="list-style-type: none"> <li>No hay cambios, tan solo que las pruebas se realizarán de forma virtual síncrona, utilizando, según sea el caso, la plataforma docente de la asignatura y las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI).</li> <li><a href="https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia">https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia</a></li> </ul>	
Evaluación Única Final	
<ul style="list-style-type: none"> <li>No hay cambios, tan solo que las pruebas se realizarán de forma virtual síncrona, utilizando, según sea el caso, la plataforma docente de la asignatura y las herramientas de videoconferencia sugeridas por la Universidad (Google Meet y/o JITSI).</li> <li><a href="https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia">https://covid19.ugr.es/informacion/teletrabajo/videoconferencia</a></li> </ul>	
INFORMACIÓN ADICIONAL (Si procede)	

Firma (1): FERNANDO JOSE ROJAS RUIZ  
En calidad de: Secretario/a de Departamento



UNIVERSIDAD DE GRANADA

Página 6

INFORMACIÓN SOBRE TITULACIONES DE LA UGR  
[grados.ugr.es](https://grados.ugr.es)



Este documento firmado digitalmente puede verificarse en <https://sede.ugr.es/verifirma/>  
Código seguro de verificación (CSV): 16DACC09E4E3AB66BEF1D8FE883B0678

16/07/2020

Pág. 6 de 7



Firma (1): FERNANDO JOSE ROJAS RUIZ  
En calidad de: Secretario/a de Departamento



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

Página 7

INFORMACIÓN SOBRE TITULACIONES DE LA UGR  
[grados.ugr.es](https://grados.ugr.es)



Este documento firmado digitalmente puede verificarse en <https://sede.ugr.es/verifirma/>  
Código seguro de verificación (CSV): 16DACC09E4E3AB66BEF1D8FE883B0678

16/07/2020  
Pág. 7 de 7