

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
PROGRAMACIÓN CIENTÍFICA EN QUÍMICA	FUNDAMENTOS DE PROGRAMACIÓN CIENTÍFICA EN QUÍMICA	4º	1º	6	OPTATIVA
Coordinador de la asignatura: Luis Javier Herrera Maldonado (Arquitectura y Tecnología de Computadores, jherrera@ugr.es)					
GRUPO	PROFESORES DE TEORÍA , DEPARTAMENTOS Y CORREOS ELECTRÓNICOS			HORARIO DE TUTORÍAS	
Grupo A	Luis Javier Herrera Maldonado (Arquitectura y Tecnología de Computadores, jherrera@ugr.es)			Lunes de 11:00 a 12:00 y de 13:00 a 15:00, jueves de 10:00 a 11:00	
GRADO EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR		
Grado en QUÍMICA					
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES					
No se exigen					
BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS					
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.					
COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS					
<ul style="list-style-type: none"> • 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:

Tema 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

Tema 2. Introducción a MATLAB: Entorno de programación MATLAB. Variables, tipos de datos, constantes. Expresiones. Funciones matemáticas básicas

Tema 3. Operaciones básicas en MATLAB: Vectores y matrices. Funciones avanzadas. Derivación e Integración. Aplicaciones básicas de Quimiometría

Tema 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

Tema 5. Programación estructurada en MATLAB: Programación estructurada. Depuración de programas. Resolución de problemas científicos de optimización y minimización

Tema 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

Tema 7: Aplicaciones avanzadas utilizando Programación en Química. Análisis de datos Químicos. 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
- Simulación de procesos Químicos: Chemcad, Simulink

Prácticas de Laboratorio

Bloque I. Entorno de programación y programación básica con MATLAB

Bloque II. Vectores y matrices

Aplicaciones básicas en Quimiometría: PCA, PLS

Bloque III. Entrada y salida de datos. Visualización de datos

Bloque IV. Biblioteca de Funciones

Bloque V. Programación estructurada en MATLAB

Aplicaciones de optimización y minimización

Bloque VI. Programación estructurada en MATLAB II



Simulación de procesos cinéticos y de equilibrio
 Bloque VII. Verificación y Depuración de programas
 Bloque VIII. Aplicaciones avanzadas en Química

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. 4ª Edición, Elsevier, 2010.
- (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-ton. 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

PROGRAMA DE ACTIVIDADES

Primer cuatrimestre	Temas del temario	Actividades presenciales (NOTA: Modificar según la metodología docente propuesta para la asignatura)						Actividades no presenciales (NOTA: Modificar según la metodología docente propuesta para la asignatura)			
		Sesiones teóricas (horas)	Sesiones prácticas (horas)	Exposiciones y seminarios (horas)	Tutorías colectivas (horas)	Exámenes (horas)	Etc.	Tutorías individuales (horas)	Estudio y trabajo individual	Trabajo en grupo (horas)	Etc.



										del alumno (horas)		
Semana 1												
Semana 2												
Semana 3												
Semana 4												
Semana 5												
Semana 6												
Semana 7												
Semana 8												
Semana 9												
Semana 10												
Semana 11												
Semana 12												
Semana 13												
Semana 14												
Semana 15												
Total horas												

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%

INFORMACIÓN ADICIONAL

Guía Didáctica elaborada por el profesor responsable. Solicitarla mediante correo electrónico jherrera@ugr.es

