



PERSONA CIENCIA EMPRESA  
UNIVERSITAT RAMON LLULL

## ASIGNATURA: INFORMÁTICA Y CÁLCULO NUMÉRICO

**MATERIA:** Informática y cálculo numérico

**MÓDULO:** Fundamental

**ESTUDIOS:** Grado en Química

Página 1 de 7

### CARACTERÍSTICAS GENERALES

**Tipo:**  Formación básica,  Obligatoria,  Optativa

Trabajo de fin de grado,  Prácticas externas

**Duración:** Anual

**Semestre/s:** 1 y 2

**Número de créditos ECTS:** 6

**Idioma/s:** Castellano, Catalán

### DESCRIPCIÓN

#### BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN

La informática forma parte esencial de nuestra vida cotidiana y del trabajo del profesional químico (elaboración de informes y presentaciones, captura y tratamiento de datos, gestión de recursos, documentación...)

La asignatura pretende introducir al alumno a la utilización del ordenador y de la programación informática para su uso científico. Estos conocimientos son fundamentales tanto para facilitar el desarrollo de asignaturas posteriores en los estudios como para el futuro trabajo profesional.

La asignatura incluye como contenidos esenciales los siguientes: descripción de los componentes de un equipo informático, descripción y utilización de un sistema operativo con interfaz gráfica de usuario, utilización de un programa de hoja de cálculo para la resolución de problemas científicos y técnicos, algorítmica, programación estructurada, descripción e utilización de algunos de los métodos numéricos básicos.

#### COMPETENCIAS

- Ser capaz de comprender y aplicar los conocimientos básicos de informática (ofimática, algorítmica, programación y cálculo numérico) que, partiendo de los conocimientos adquiridos en la educación secundaria general, son necesarios para la práctica de las Ciencias Químicas y Biomoleculares. (→E1, CB1)
- Ser capaz de identificar, formular y resolver problemas en el campo de la química y la ingeniería que hagan uso de métodos numéricos y computacionales. (→E7, CB2)
- Ser capaz de transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado (→CB4)

#### REQUISITOS PREVIOS

Las competencias propias de las etapas educativas anteriores.

## ASIGNATURA: INFORMÁTICA Y CÁLCULO NUMÉRICO

**MATERIA:** Informática y cálculo numérico

**MÓDULO:** Fundamental

**ESTUDIOS:** Grado en Química

Página 2 de 7

### CONTENIDOS

1. Introducción al funcionamiento de los sistemas informáticos  
Hardware. Software
2. Introducción a los sistemas operativos y utilización de un sistema operativo con interfaz gráfica de usuario  
Uso de la interfaz de usuario. Gestión de archivos y documentos. Configuración básica del sistema operativo.
3. Utilización de una aplicación de hoja de cálculo  
Introducción de texto, números y fórmulas. Uso de funciones matemáticas, lógicas, de texto, de búsqueda y de referencia. Uso de formatos y formatos condicionales.
4. Algorítmica  
Definición. Representación de algoritmos. Estructura de control: secuencial, de selección y de repetición. Variables y tipos de datos. Modularización.
5. Programación estructurada  
Introducción a Visual Basic. Programación en Visual Basic for Applications.
6. Tratamiento numérico de los errores  
Expresión de números aproximados. Propagación del error.
7. Interpolación  
Interpolación lineal. Interpolación polinomial. Error de interpolación.
8. Derivación numérica  
Incrementos finitos. Derivación basada en polinomios de interpolación. Métodos basados en diferencias centradas.
9. Integración numérica  
Métodos elementales. Integración por trapecios.
10. Resolución de ecuaciones no lineales  
Localización y acotación de raíces. Método de la bisección. Métodos de la tangente, la secante y Newton modificado.
11. Ajuste de ecuaciones empíricas  
Aproximación polinomial. Rectificación. Ajuste por mínimos cuadrados.



## ASIGNATURA: INFORMÁTICA Y CÁLCULO NUMÉRICO

**MATERIA:** Informática y cálculo numérico

**MÓDULO:** Fundamental

**ESTUDIOS:** Grado en Química

Página 3 de 7

### METODOLOGÍA

#### ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividades formativas	Horas	Créditos ECTS	Competencias
Sesiones de exposición de conceptos	35	1,3	E1, CB1
Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos	27	1,0	E1, CB1, E7, CB2
Seminarios	-	-	-
Trabajo práctico / laboratorio	22	0,8	E1, CB1, E7, CB2
Presentaciones	3	0,1	E7, CB2, CB4
Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes	54	2,0	E1, CB1, E7, CB2
Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento...)	22	0,8	E1, CB1, E7, CB2
<b>TOTAL</b>	<b>162</b>	<b>6</b>	E1, CB1, E7, CB2, CB4

#### EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA DIDÁCTICA

La metodología didáctica usada en la asignatura se basa en la disponibilidad de ordenadores portátiles por parte de los alumnos. La mayoría de las sesiones presenciales de la asignatura combinarán partes expositivas con partes prácticas dando lugar a cuatro modelos de interacción en el aula: dinámica expositiva (presentación de contenido), dinámica demostrativa (el docente muestra cómo realizar tareas o resolver problemas y el alumno las realiza al mismo tiempo en su propio equipo), dinámica activa (el alumno resuelve un problema que *a posteriori* es corregido por el docente) y dinámicas de trabajo autónomo (donde el alumno trabaja y es atendido de forma personalizada). De esta forma, el alumno participa activamente en las sesiones facilitándose la adquisición de los conocimientos y la práctica en la resolución de problemas.

La asignatura además tendrá dos bloques de trabajo práctico en grupos de 2 ó 3 personas. En estas prácticas, los alumnos se dedican a la resolución de un problema propuesto por el equipo docente que a continuación deberán presentar y defender.

Para el estudio personal del alumno, se facilitan los programas informáticos necesarios, colecciones de problemas, pruebas de evaluación a través del sistema de gestión del aprendizaje, documentos correspondientes a las sesiones presenciales y recursos bibliográficos.

## ASIGNATURA: INFORMÁTICA Y CÁLCULO NUMÉRICO

**MATERIA:** Informática y cálculo numérico

**MÓDULO:** Fundamental

**ESTUDIOS:** Grado en Química

Página 4 de 7

### EVALUACIÓN

#### MÉTODOS DE EVALUACIÓN

Métodos de evaluación	Peso	Competencias
Examen final	25%	E1, CB1, E7, CB2
Examen/es parcial/es	25%	E1, CB1, E7, CB2
Actividades de seguimiento	-	
Trabajos y presentaciones	25%	E7, CB2, CB4
Trabajo experimental o de campo	25%	E7, CB2
Proyectos	-	
Valoración de la empresa o institución	-	
Participación	-	

#### RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- El alumno debe demostrar el conocimiento de las estructuras algorítmicas fundamentales y los procedimientos básicos de la programación de sistemas informáticos, elaborando algoritmos de acuerdo con unos requisitos, analizando el funcionamiento de algoritmos ya elaborados y corrigiéndolos si es necesario. (→ E1, CB1)
- El alumno debe demostrar el conocimiento de los algoritmos y herramientas básicas del cálculo numérico, seleccionando y justificando los métodos más adecuados para la realización de cálculos numéricos aproximados y para el tratamiento del error en dichos cálculos. (→ E1, CB1)
- El alumno debe demostrar suficiencia en la elaboración de plantillas de cálculo y programas informáticos sencillos para la realización de cálculos sistemáticos y/o la resolución de problemas en el ámbito de la química, las biociencias y la ingeniería química. (→ E7, CB2)
- El alumno debe demostrar suficiencia en la utilización correcta de las herramientas del cálculo numérico aplicadas a la resolución de problemas de química, biociencias e ingeniería química. (→ E7, CB2)
- El alumno debe demostrar suficiencia en la documentación de las plantillas de cálculo y los programas informáticos desarrollados. (→ CB4)

## ASIGNATURA: INFORMÁTICA Y CÁLCULO NUMÉRICO

**MATERIA:** Informática y cálculo numérico

**MÓDULO:** Fundamental

**ESTUDIOS:** Grado en Química

Página 5 de 7

### CALIFICACIÓN

La evaluación de la asignatura considerará las calificaciones en las prácticas (PR), la evaluación continua (EC), los exámenes parciales (EP), el examen final, primera convocatoria o segunda convocatoria, (EF) y bonificaciones (BN). Todas estas notas serán sobre 10 y tendrán un valor máximo de 10.

La nota de prácticas (NP) se calculará como el promedio simple de las prácticas y la evaluación continua:  $NP = (PR + EC)/2$ , siendo tanto las prácticas (PR) como la evaluación continua (EC) el promedio ponderado de las distintas actividades realizadas. La nota de prácticas (NP) deberá ser superior o igual a 4 para poder aprobar la asignatura. Esta podrá recuperarse antes de cualquier examen final de la asignatura mediante la realización de trabajos prácticos compensatorios. Dicha recuperación deberá solicitarse con antelación al examen y tendrá una nota máxima de 5.

La nota de los exámenes (NE) se determinará considerando los dos bloques de contenidos abordados en ambos semestres de forma independiente. La nota de exámenes que deberá ser superior o igual a 4 se calculará considerando el valor mínimo de las notas obtenidas para cada uno de los semestres:  $NE = \min(\max(EP1; 2 \cdot EF1P); \max(EP2; 2 \cdot EF2P))$  donde EPx corresponde a cada uno de los exámenes parciales y EFXP a cada una de las partes del examen final (sobre 5).

Si la nota de prácticas o la nota de los exámenes son inferiores a 4, la calificación final será la menor de ambas notas.

Si la nota de prácticas (NP) y la nota de los exámenes (NE) son superiores o iguales a 4, entonces la calificación final (CF) de la asignatura se calculará, tanto en primera convocatoria como en segunda convocatoria, de acuerdo con la expresión siguiente:

$$CF = 0,5 NP + 0,25 EP + 0,25 EF$$

Alternativamente, la calificación final podrá calcularse como

$$CF = 0,5 NP + 0,5 (\max(EP1; 2 \cdot EF1P) + \max(EP2; 2 \cdot EF2P))/2$$

En cualquier caso, la nota de prácticas y de exámenes deberán ser superiores o iguales a 4 y la calificación final corresponderá a la más alta de estas dos alternativas de cálculo.

Si y solo si esta nota es superior o igual a 5 la asignatura estará aprobada y la calificación final se verá incrementada con un 10% de las bonificaciones (BN):  $CF = CF + 0,1 BN$ .

Esta nota de bonificaciones se obtendrá a través de la realización de tareas optativas destinadas a la mejora de los procesos de enseñanza-aprendizaje.



PERSONA CIENCIA EMPRESA  
UNIVERSITAT RAMON LLULL

## ASIGNATURA: INFORMÁTICA Y CÁLCULO NUMÉRICO

**MATERIA:** Informática y cálculo numérico

**MÓDULO:** Fundamental

**ESTUDIOS:** Grado en Química

Página 6 de 7

### EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS

Para la evaluación de la competencia E1/CB1, se usará como indicador una función de las notas de los exámenes. Para la evaluación de la competencia E7/CB2, el indicador usado será la nota final de la asignatura. Para la evaluación de la competencia CB4, se utilizará la nota promedio de las prácticas.

### BIBLIOGRAFÍA

- MICROSOFT. Centro de ayuda de Excel. <https://support.office.com/es-ES/Excel>
- MICROSOFT. Office 2013 VBA Documentation. <https://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=40326>
- JOYANES AGUILAR, L. Fundamentos generales de programación; McGrawHill; Madrid, 2012; ISBN: 978-607-15-0818-8
- WALKENBACH, JOHN; Excel VBA Programming for Dummies; John Wiley & Sons; 4th Revised edition (27 Oct. 2015); ISBN: 978-1119077398
- CARNEY, KEN. Excel VBA Programming. <http://www.homeandlearn.org/index.html>
- EXCEL EASY. Excel easy. <http://www.excel-easy.com/>
- TOMAS, X, CUADROS, J., GONZÁLEZ, L.; Introducción al cálculo numérico; Institut Químic de Sarriá; Barcelona, 2006
- CUADROS, J., TOMAS, X, GONZÁLEZ, L.; Introducció al càlcul numèric; Institut Químic de Sarriá; Barcelona, 2007
- DEMIDOVICH, B.P., MARON, I.A.; Cálculo Numérico Fundamental; 4a Edición; Ed. Paraninfo; Madrid, 1993



PERSONA CIÈNCIA EMPRESA  
UNIVERSITAT RAMON LLULL

## **ASIGNATURA: INFORMÁTICA Y CÁLCULO NUMÉRICO**

**MATERIA:** Informática y cálculo numérico

**MÓDULO:** Fundamental

**ESTUDIOS:** Grado en Química

Página 7 de 7

### **HISTÓRICO DEL DOCUMENTO**

#### **MODIFICACIONES ANTERIORES**

9 de setiembre de 2017, Dr. Jordi Cuadros  
12 de setiembre de 2016, Dr. Jordi Cuadros  
14 de setiembre de 2015, Dr. Jordi Cuadros  
16 de setiembre de 2014, Dr. Jordi Cuadros  
20 de setiembre de 2013, Dr. Jordi Cuadros  
14 de setiembre de 2012, Dr. Jordi Cuadros  
11 de setiembre de 2011, Dr. Jordi Cuadros  
11 de enero de 2011, Dr. Jordi Cuadros  
13 de setiembre de 2010, Dr. Jordi Cuadros  
27 de setiembre de 2009, Dr. Jordi Cuadros  
11 de mayo de 2009, Dr. Jordi Cuadros  
28 de abril de 2009, Dr. Jordi Cuadros

**ÚLTIMA REVISIÓN** 12 de setiembre de 2018, Dr. Jordi Cuadros