



Máster en Ciencia y Tecnología Químicas
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Complutense de Madrid

Guía docente
Escenarios 1, 2 y 3:

ESTRUCTURA Y SÍNTESIS QUÍMICA:
MÉTODOS MATEMÁTICOS
APLICADOS A LA QUÍMICA

Código: 605200

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE
MADRID
CURSO 2021-2022

ESCENARIO 1. PRESENCIAL

Nombre de la asignatura (*Subject name*)

Estructura y síntesis química: Métodos matemáticos aplicados a la Química
Structure and Chemical synthesis: Mathematical methods for Chemistry

Duración

Primer semestre

Créditos ECTS /Carácter

6 créditos ECTS/ Optativo

Contenidos básicos (*Subject knowledge*)

Estudio de la propagación de errores. Descomposición de matrices. Ecuaciones diferenciales. Transformada rápida de Fourier. Diseño de experimentos.

Error propagation. Matrix decompositions. Differential equations. Fast Fourier Transform. Design of experiments.

Profesores y ubicación

Profesor	Mihaela Negreanu Pruna
Departamento	Análisis Matemático y Matemática Aplicada (Fac. CC. Químicas)
Correo electrónico	mihaela@ucm.es

Objetivos y competencias (*Abilities and Skills*)

OBJETIVOS

A parte de los objetivos generales propuestos en el documento de master universitario en ciencia y tecnología químicas, esta asignatura pretende dotar a los estudiantes de una base matemática para la resolución de problemas y el análisis de datos.

ABILITIES

Besides the general goals established for this Master, this subject provides the students with a basic mathematical background and techniques to be able to solve problems and analyze data.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG1.- Integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de problemas químicos.
- CG2.- Desarrollar habilidades teórico-prácticas para resolver problemas de interés científico y social en el contexto de la Química.
- CG3.- Interpretar y analizar datos complejos en el entorno de la química y la tecnología química.
- CG4.- Reconocer y evaluar la calidad de los resultados teóricos y prácticos utilizando las herramientas adecuadas.

GENERAL SKILLS

- GS1.- Integrate knowledge and to face the complexity of problems in Chemistry.*
- GS2.- Develop theoretical and practical abilities to solve scientifically interesting problems in Chemistry*
- GS3.- Interpret and analyze complex data in Chemistry*
- GS4.- Recognize and asses the quality of the theoretical and practical outcomes using appropriate tools*

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE3.- Utilizar programas informáticos que permitan plantear y resolver problemas químicos.

SPECIFIC SKILLS:

- SS3.- Use computer programs to pose and solve problems in Chemistry.*

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT1.- Elaborar, escribir y defender informes de carácter científico y técnico.
- CT2.- Trabajar en equipo.
- CT3.- Valorar la importancia de la sostenibilidad y el respeto al medio ambiente.
- CT4.- Demostrar capacidad de autoaprendizaje.
- CT5.- Demostrar compromiso ético.
- CT6.- Comunicar resultados de forma oral/escrita.
- CT8.- Demostrar motivación por la investigación científica.

GENERIC COMPETENCES

- GC1.- Elaborate, write and defend scientific and technical reports*
- GC2.- Work as a team*
- GC3.- Value the importance of sostenibility and respect for the environment*
- GC4.- Show capacity for sealfteaching*
- GC5.- Show ethics commitment*
- GC6.- Communicate results in a verbal and written way*
- GC8.- Show motivation for scientific research.*

Contextualización en el Máster

La asignatura se oferta como asignatura optativa dentro de las dos materias que configuran el primer módulo.

Programa de la asignatura

1. Introducción al programa MATLAB: comandos y programación
2. Álgebra matricial. Autovalores. Ajuste (SVD)
3. Ecuaciones diferenciales. Diferencias finitas.
4. Integración numérica. Optimización.
5. Diseño de experimentos.

Se insistirá en el enfoque numérico y computacional y se mostrarán aplicaciones.

Resultados del aprendizaje

Una vez superada esta asignatura, el alumno debería ser capaz de:

1. Implementar en MATLAB algoritmos sencillos teniendo en cuenta su eficacia, tanto a nivel teórico como práctico.
2. Interpretar los resultados (numéricos y gráficos) de los algoritmos implementados.
3. Resolver numéricamente ecuaciones diferenciales.
4. Diseñar métodos de recogida de datos y su posterior análisis.

Metodología y programación docente

La signatura se desarrollará mediante clases teóricas (1'2 ECTS), seminarios (3'6 ECTS) y tutorías programadas (0'2 ECTS). A lo largo del curso, el alumno tendrá que entregar algún trabajo y se realizarán controles para comprobar el seguimiento (1 ECTS).

Actividad	Presencial (hrs)	Trabajo autónomo (hrs)	Créditos ECTS
Clases teóricas/Theory classes	12	20	1'2
Seminarios/Seminars	36	52	3'6
Tutorías/ Tutorials	2	10	0'2
Preparación de trabajos y exámenes	3	15	1
Total	53	97	6

Evaluación del aprendizaje

Control del trabajo de clase: 50%

Elaboración de prácticas y controles evaluación continua: 50%

Todas las clases y evaluaciones se realizarán con ordenador.

Idioma o idiomas en que se imparte

Español (clases) e inglés (programa informático).

Bibliografía y recursos complementarios

1. J. García de Jalón, J.I. Rodríguez & J. Vidal. *Aprenda Matlab 7.0 como si estuviera en primero*. ETSII (UPM), 2005.
2. S.C. Chapra & R.P. Canale. *Métodos numéricos para ingenieros: con programas de aplicación*. McGraw-Hill, 2005.
3. K.J. Beers. *Numerical methods for chemical engineering: applications in Matlab*. Cambridge University Press, 2007.
4. D.C. Montgomery. *Design and analysis of experiments*. John Wiley & Sons, 2009 (7^a ed.).

ESCENARIO 2. SEMIPRESENCIAL

Metodología

- **Clases de teoría y seminarios** impartidos por el profesor en el régimen habitual, como en el Escenario 1, y con el mismo contenido. Atendiendo al principio de *máxima presencialidad* aprobado por el Rectorado de la UCM, la sesión será seguida presencialmente por los alumnos en el aula, hasta aforo completo considerando distancia social. Los alumnos ubicados en aulas provistas de cámaras, y que no quepan en el aula, seguirán la sesión virtualmente, bien desde su domicilio o en las zonas de uso público habilitadas por la Facultad para este fin, que estarán debidamente publicitados en el CV. Para las aulas que no tienen cámara, se establecerá un turno rotatorio de alumnos presenciales en el aula, atendiendo a la numeración del DNI. Este procedimiento podrá ser modificado por el profesor a lo largo del curso, según considere oportuno, para ir ajustando el aforo del aula con los estudiantes asistentes a su clase.
 - El material docente utilizado será las presentaciones de clase habilitadas en el Campus Virtual UCM empleadas también en el Escenario 1, así como vídeos relacionados con la materia y otros tipos de materiales que los profesores de la asignatura consideran de relevancia e interés. Todo el material estará con antelación a disposición de los estudiantes a través del Campus Virtual para su utilización.
 - Los medios telemáticos utilizados para que los alumnos sin presencialidad en el aula sigan virtualmente las sesiones serán las plataformas: Google Meet, Microsoft Teams o Zoom. El profesor mantendrá abierta una sesión de este tipo para mantener una relación directa y fluida con los estudiantes que asisten virtualmente, pudiendo así proyectarse simultáneamente la presentación .ppt y seguir las tradicionales explicaciones que se den en la pizarra.
- **Tutorías Individuales**
Se realizarán por vídeo conferencia y/o correo electrónico.
- **Seguimiento del alumnado**
En la parte de docencia que se realiza de forma presencial se seguirán las mismas técnicas empleadas de forma tradicional.
En la parte de docencia virtual el seguimiento se realizará por diversas técnicas, según considere el profesor: mediante la herramienta de registro de actividades de cada sesión (Microsoft Teams), el nombre de los asistentes (Google Meet), hoja de firmas habilitada en el CV a modo de cuestionario, análisis de descargas efectuadas por los alumnos en el CV, etc.

Evaluación del aprendizaje

Se realizarán exámenes presenciales y la evaluación descrita en el procedimiento del Escenario 1.

ESCENARIO 3. TOTALMENTE VIRTUAL

Metodología

- **Clases de teoría y seminario** que serán impartidas de forma combinada en sesiones: (a) síncronas, en el horario oficial establecido y (b) asíncronas.
 - El material docente utilizado será las presentaciones de clase habilitadas en el Campus Virtual UCM empleadas también en los Escenarios 1 y 2, presentaciones PowerPoint acompañadas de grabaciones de voz donde se incluyen las explicaciones necesarias como si fuese una clase presencial, así como vídeos relacionados con la materia y otros tipos de materiales que los profesores de la asignatura consideran de relevancia e interés. Como en los Escenarios anteriores, todo el material estará con antelación a disposición de los estudiantes a través del Campus Virtual para su utilización.
 - Los medios telemáticos utilizados serán las plataformas ya mencionadas en el Escenario 2: Google Meet, Microsoft Teams o Zoom.
- **Las tutorías individuales** se realizarán como en el Escenario 2.
- **Seguimiento del alumnado**
Se realizará igual que lo descrito en el Escenario 2 para la docencia virtual.

Evaluación del aprendizaje

DESCRIPCIÓN DEL PROTOCOLO DE EVALUACIÓN

- **Identificación de estudiantes:**

En los minutos anteriores al inicio del examen, los alumnos deberán entregar un documento de compromiso escrito a mano y digitalizado en formato PDF, aceptando las normas para la realización de la prueba. El texto del documento, elaborado por el Departamento, estará disponible en el espacio de la asignatura del Campus Virtual. En dicho documento se deberá hacer constar: nombre y apellidos, firma, lugar y copia del DNI. La identificación de los alumnos que realicen el examen se llevará a cabo a través de: (i) entrada al Campus Virtual para poder visualizar los enunciados del examen, (ii) imagen de vídeo a través de Google Meet o Microsoft Teams (desde la cámara del ordenador o del móvil), (iii) documento de compromiso, y (iv) posible comprobación telemática a lo largo del examen por parte del profesor.

- **Tipo de examen:**

El examen se diseñará en el Campus Virtual (Moodle) a través de la herramienta de Tareas, de tal manera que diferentes estudiantes pueden acceder a exámenes diferentes.

Elaboración de prácticas y controles evaluación continua.

Todas las clases y evaluaciones se realizarán con ordenador.

- **Seguimiento de estudiantes durante la prueba:**

Durante la realización de la prueba, los alumnos deberán tener conectada una cámara (del ordenador o del móvil) que haga posible la comprobación por parte del profesor del cumplimiento del compromiso firmado por el alumno para realizar el examen de forma individual y con los medios indicados.

- **Revisión de exámenes:**

Los estudiantes que deseen revisión se pondrán en contacto con los profesores de su grupo mediante correo electrónico y se establecerá el horario de revisión individual mediante Microsoft Teams/Google Meet. El estudiante conservará copia de los ficheros PDF enviados como respuesta del examen para facilitar la revisión. Por otra parte, el profesor podrá requerir del alumno la revisión y discusión interactiva de su examen dentro del plazo que se establezca para la revisión de los mismos que se notificará en el CV.

- **Mecanismo empleado para la documentación/grabación de las pruebas de evaluación para su posterior visualización y evidencia:**

El profesor conservará los ficheros (en el formato electrónico que se especifique) del ejercicio de examen enviados por el estudiante, con las calificaciones parciales que estime oportunas. Además, si se estima oportuno, se podrá proceder a la grabación de la sesión del examen, con las limitaciones establecidas por la UCM, para posterior revisión si fuera necesario. Dicha grabación, de efectuarse, se almacenará con las medidas de seguridad necesarias en equipos de UCM y será eliminada pasado el tiempo de revisión.