



DATOS IDENTIFICATIVOS

Técnicas informáticas en química

| | | | | |
|---------------|---|------------|-------|-------------|
| Asignatura | Técnicas informáticas en química | | | |
| Código | V11G201V01415 | | | |
| Titulación | Grado en Química | | | |
| Descriptores | Creditos ECTS | Seleccione | Curso | Cuatrimstre |
| | 6 | OP | 4 | 2c |
| Lengua | #EnglishFriendly | | | |
| Impartición | Castellano Gallego | | | |
| Departamento | Química Física | | | |
| Coordinador/a | Hermida Ramón, José Manuel | | | |
| Profesorado | Hermida Ramón, José Manuel | | | |
| Correo-e | jose_hermida@uvigo.es | | | |
| Web | http://moovi.uvigo.gal/ | | | |

Descripción general La materia "Técnicas Informáticas en Química" pretende introducir al alumnado en el uso de herramientas informáticas avanzadas, basadas en software libre, más allá de paquetes ofimáticos ya empleados durante los cursos previos del grado, ampliando así las competencias de cara al mundo laboral y/o investigador.

La materia se divide en cuatro bloques en los que se considerarán los aspectos generales del sistema operativo GNU/Linux y cómo instalarlo, creación de documentos en LaTeX con aplicaciones químicas, Fortran y Python. Serán impartidas combinando pequeñas sesiones teóricas junto con ejemplos prácticos que comprobará el alumnado in situ y tuteladas por los responsables de la materia.

La evaluación consistirá en la realización de unas tareas escritas (programas y documentos en LaTeX) con un peso del 50% junto con la realización de informes en los se explica cómo se han implementado las susodichas tareas (con un peso del 30%) y de la observación sistemática del trabajo realizado durante las sesiones prácticas en una presentación al final del curso (20%). También se dispondrá de la posibilidad de no utilizar la evaluación continua con un examen escrito cuyo peso será del 100% si lo desea algún estudiante.

Materia del programa English Friendly: Los/las estudiantes internacionales podrán solicitar al profesorado: a) materiales y referencias bibliográficas para el seguimiento de la materia en inglés, b) atender las tutorías en inglés, c) pruebas y evaluaciones en inglés.

Resultados de Formación y Aprendizaje

| | |
|--------|---|
| Código | |
| A1 | Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio |
| A5 | Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía |
| B1 | Capacidad de aprendizaje autónomo |
| B2 | Capacidad de organización y planificación |
| B3 | Capacidad de gestión de la información |
| C37 | Adquirir conocimientos básicos de programación y ser capaz de utilizar paquetes informáticos adecuados para resolver problemas de interés químico |
| D1 | Capacidad para resolver problemas |

Resultados previstos en la materia

| | | | |
|--------------------------------------|---------------------------------------|-----|----|
| Resultados previstos en la materia | Resultados de Formación y Aprendizaje | | |
| Elaborar programas de Python/Fortran | B1 B2 | C37 | D1 |

Contenidos

Tema

| | |
|-------------------------------|--|
| * Sistema operativo GNU/Linux | <ul style="list-style-type: none"> - Instalación de una distribución. - Entorno gráfico. - Iniciación a la línea de comandos. - Instalación de programas. - Instalación y configuración de un entorno de desarrollo integrado. |
| * Introducción a LaTeX | <ul style="list-style-type: none"> - Estructura de los documentos. - Elementos comunes a todos los tipos de documentos o clases. - Herramientas para textos técnicos. - Presentaciones (Beamer). - Aplicaciones para químicos. |
| * Python 3 | <ul style="list-style-type: none"> - Estructura del código fuente de los programas y fundamentos de Python. - Variables y cadenas. - Tipos de datos. - Sintaxis y comandos básicos. - Programación de algunos ejemplos prácticos. |
| * Fortran moderno | <ul style="list-style-type: none"> - Estructura del código fuente de los programas y fundamentos de Fortran. - Variables y arrays. - Sintaxis y comandos básicos. - Programación de algunos ejemplos prácticos. |

Planificación

| | Horas en clase | Horas fuera de clase | Horas totales |
|---|----------------|----------------------|---------------|
| Lección magistral | 12 | 12 | 24 |
| Resolución de problemas | 12 | 27 | 39 |
| Prácticas con apoyo de las TIC | 14 | 28 | 42 |
| Resolución de problemas de forma autónoma | 12 | 27 | 39 |
| Trabajo | 2 | 4 | 6 |

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

| | Descripción |
|---|--|
| Lección magistral | Clases teóricas impartidas mediante una presentación en pantalla (a disposición de los alumnos en la plataforma Moovi). En estas clases se introducirán los contenidos básicos, haciendo énfasis en las cuestiones de mayor importancia y dificultad. Se mostrarán ejemplos prácticos. |
| Resolución de problemas | Destinados a la resolución de problemas y/o tareas y debate de estos. A través de la plataforma Moovi se proporcionará el material necesario. |
| Prácticas con apoyo de las TIC | Aplicación de lo tratado en la lección magistral y en la resolución de problemas a casos prácticos más generales y relacionados con la materia. A través de la plataforma Moovi se proporcionarán los guiones de prácticas y las normas de trabajo en el laboratorio. |
| Resolución de problemas de forma autónoma | (*Destinados a resolución de tareas que integren o contados dados e ejerciten las competencias a adquirir. A través de la plataforma Moovi se proporcionará el material necesario. |

Atención personalizada

| Metodologías | Descripción |
|---|---|
| Lección magistral | El alumno que lo desee podrá acudir a tutorías personalizadas para resolver dudas, principalmente en los horarios que se indiquen. Para optimizar el tiempo, es conveniente que el alumno contacte con el profesor con antelación suficiente. |
| Prácticas con apoyo de las TIC | El alumno que lo desee podrá acudir a tutorías personalizadas para resolver dudas, principalmente en los horarios que se indiquen. Para optimizar el tiempo, es conveniente que el alumno contacte con el profesor con antelación suficiente. |
| Resolución de problemas | El alumno que lo desee podrá acudir a tutorías personalizadas para resolver dudas, principalmente en los horarios que se indiquen. Para optimizar el tiempo, es conveniente que el alumno contacte con el profesor con antelación suficiente. |
| Resolución de problemas de forma autónoma | |

| Evaluación | | | | | | |
|---|--|--------------|---------------------------------------|----------------|-----|----|
| | Descripción | Calificación | Resultados de Formación y Aprendizaje | | | |
| Resolución de problemas | Se acabarán las sesiones de los dos primeros temas recogiendo los ejercicios que haga el alumnado. | 20 | | B1 B2 | C37 | D1 |
| Prácticas con apoyo de las TIC | Entregables con lo realizado en la sesión sobre creación de documentos den LaTeX y programación. | 30 | A1 A5 | B1 B3 | C37 | D1 |
| Resolución de problemas de forma autónoma | (*)Presentación da resolución de tareas complejas que integren o coñecementos e competencias da materia. | 30 | A1 | B1 | C37 | D1 |
| Trabajo | Se presentarán los resultados de las prácticas realizadas utilizando LaTeX y explicando el diseño de sus aplicaciones de Fortran/Python. | 20 | A1 A5 | B1 B2 B3 | C37 | D1 |

Otros comentarios sobre la Evaluación

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Jay LaCroix, **Learn Linux TV**, Youtube, 2022

Bibliografía Complementaria

Jay LaCroix, **Mastering Ubuntu Server : explore the versatile, powerful Linux Server distribution Ubuntu 22.04 with this comprehensive guide**, 4, Packt Publishing Limited, 2022

Richard Blum, Christine Bresnahan, **Linux command line and shell scripting bible**, 3, John Wiley & Sons, 2015

Collaboratively writing open-content textbook, **LaTeX**, <https://en.m.wikibooks.org/wiki/LaTeX>, 2022

J. Mulero, J.M. Sepulcre, **LATEX con palabras clave**, Publicacions de la Universitat d'Alacant, 2016

Collaboratively writing open-content textbook, **Python Programming**,

https://en.m.wikibooks.org/wiki/Python_Programming,

Python 3 Tutorial, <https://www.tutorialspoint.com/python3/>,

Alberto Cuevas Álvarez, **Python 3**, RA-MA Editorial, 2016

David Beazley, Brian K. Jones, **Python Cookbook**, 3, O'Reilly, 2013

Fortran Tutorial, <https://www.tutorialspoint.com/fortran/index.htm>,

Collaboratively writing open-content textbook, **Fortran**, <https://en.m.wikibooks.org/wiki/Fortran>,

Michael Metcalf, John Reid, Malcolm Cohen, **Modern Fortran Explained (Numerical Mathematics and Scientific Computation)**, 4, Oxford University Press, 2011

William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, **Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing**, 2, University Press, 1992-1996

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G201V01103

Matemáticas: Matemáticas II/V11G201V01108

Química: Química I/V11G201V01104

Química: Química II/V11G201V01109