



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 31236 - TÉCNICAS COMPUTACIONALES AVANZADAS

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 31236 - TÉCNICAS COMPUTACIONALES AVANZADAS

**Titulación:** 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)  
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo  
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

**Centro:** 104 - Facultad de Ciencias

**Curso Académico:** 2021/22

### 1. Detalles de la asignatura

#### 1.1. Materia

Técnicas Computacionales Avanzadas.

#### 1.2. Carácter

616 - Obligatoria  
762 - Optativa  
651 - Obligatoria  
748 - Optativa  
751 - Obligatoria

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

2

#### 1.5. Semestre

Anual

#### 1.6. Número de créditos ECTS

6.0

#### 1.7. Idioma

Inglés

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	05/07/2021	1/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	1/4	

## 1.8. Requisitos previos

No hay

## 1.9. Recomendaciones

No hay

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Manuel Alcamí Pertejo

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias

#### BÁSICAS Y GENERALES:

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación. CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

CG04 - Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.

#### TRANSVERSALES:

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

#### ESPECÍFICAS:

CE22 - Conoce la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.

### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

Resultados del aprendizaje:

- Plantear o reconocer la ecuación de Schrödinger de sistemas modelo en presencia de condiciones externas para plantear su resolución con medios informáticos.
- Saber utilizar redes de computo de altas prestaciones en Red Deslocalizada (Grid o similares).
- Conocer al menos una biblioteca ("library") de rutinas de cálculo numérico paralelo usando algún problema como referencia (por ejemplo, sistemas magnéticos).
- Conocer las bases de la computación cuántica y su aplicación a Química Teórica

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

### 1.13. Contenidos del programa

- Computación en Grid

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	05/07/2021	2/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	2/4	

- Técnicas de paralelización masiva: memoria compartida y memoria distribuida
- Utilización de librerías matemáticas masivamente paralelas.
- Computación Cuántica

### 1.14. Referencias de consulta

Se informará sobre el material de consulta para todas las asignaturas con la suficiente antelación en la página web del Curso Intensivo.

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	42
Porcentaje de actividades no presenciales	108

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	32
Seminarios	
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	10
Actividades de evaluación	
Otras	

**Clases en aula de informática:** La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.

**Seminarios.** En ellos se discutirán los resultados obtenidos en los trabajos propuestos y las dudas sobre las metodologías empleadas.

**Tutorías.** El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en:

- 60% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 40% Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizadas en la asignatura.

#### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de Evaluación	%
Entrega de ejercicios de la asignatura o de informe crítico.	60
Discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas.	40

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	3/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

El 100% de la nota será la que se obtenga de la entrega de los ejercicios planteados por los profesores de la asignatura.

#### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Entrega de ejercicios	100

### 4. Cronograma orientativo

La asignatura de Técnicas Computacionales Avanzadas será impartida por la Universidad de Groningen en el formato de curso intensivo en el mes de noviembre de 2020. Debido a las circunstancias excepcionales del covid19 todas las sesiones estarán también disponible en formato online para todos los estudiantes que no puedan asistir.

Toda la información del curso está disponible en la página web del máster: [www.emtccm.org](http://www.emtccm.org)

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	05/07/2021	4/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	4/4	