



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

33426 - PROYECTO DE PROGRAMACIÓN DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

Información de la asignatura

Código - Nombre: 33426 - PROYECTO DE PROGRAMACIÓN DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

Titulación: 748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional
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

PROYECTO DE PROGRAMACIÓN DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

1.2. Carácter

Optativa

1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

1.4. Curso

2

1.5. Semestre

Segundo semestre

1.6. Número de créditos ECTS

6.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

No hay.

1.9. Recomendaciones

No hay.

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

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Jeremy Harvey (Universidad Católica de Lovaina).

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

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

Básicas y Generales

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

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.

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 auto dirigido o autónomo.

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT04 - El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.

CT05 - Capacidad de razonamiento y reflexión crítica y autocrítica como vía para mejorar el propio proceso de aprendizaje y la generación y desarrollo de ideas en un contexto profesional o de investigación.

CT11 - Identificar y seleccionar con rigor la metodología adecuada para formular hipótesis, definir problemas y diseñar estrategias de trabajo propias de la investigación incidiendo en el compromiso ético

CT13 - Capacidad de asumir la responsabilidad del propio desarrollo profesional, de acuerdo a los retos y oportunidades que plantea la sociedad

5.5.1.5.3 ESPECÍFICAS

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE14 - Es capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.

CE19 - El/la estudiante está familiarizado con las técnicas computacionales que, basadas en la mecánica y dinámica molecular, son la base del diseño de moléculas de interés en campos tales como farmacología, petroquímica, etc.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

No procede.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

El objetivo de este curso es aprender algunas técnicas básicas de programación y programación paralela, que son relevantes para muchos problemas de química computacional. Durante la clase, el estudiante aprenderá o reforzará sus conocimientos de un lenguaje de programación compilado (típicamente Fortran o C++), e implementará desde cero un programa básico (y quizás más avanzado) para simulaciones de dinámica molecular de partículas Lennard-Jones, así como desarrollar y probar una versión paralela de este código (usando OpenMP o MPI).

1.13. Contenidos del programa

Cada curso se adaptará para ofrecer un proyecto de programación en el que se exigirá unos requisitos mínimos del código que se programe como por ejemplo que el código pueda correr en paralelo. Para ello se darán nociones de Monte Carlo, Dinámica Molecular, Fortran, C, C++, Python, así como OpenMP y MPI. El estudiante decidirá cómo desarrollar su código con las herramientas que tiene y a partir de ahí tendrá un seguimiento por parte del coordinador del curso.

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

1.14. Referencias de consulta

No procede.

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	#Horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total).	43
Porcentaje de actividades no presenciales.	82

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Prácticas con medios informáticos	20
Actividades de evaluación	3

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final	20
Ejercicios propuestos	80

3.2. Convocatoria extraordinaria

La evaluación se realizará mediante la entrega de un informe con los ejercicios propuestos por el profesor.

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Ejercicios propuestos.	100
Evaluación continua	0

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	

4. Cronograma orientativo

La asignatura será organizada por la Universidad de Lovaina.

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