

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	43996
<b>Nombre</b>	Técnicas computacionales avanzadas
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	6.0
<b>Curso académico</b>	2022 - 2023

**Titulación(es)**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	Facultad de Química	2	Anual

**Materias**

Titulación	Materia	Caracter
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	3 - Aspectos avanzados	Obligatoria

**Coordinación**

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

**RESUMEN**

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Universidad de Perugia del 3 al 28 de septiembre de 2018.

**CONOCIMIENTOS PREVIOS****Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.



### Otros tipos de requisitos

No hay requisitos previos

## COMPETENCIAS

### 2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Conocimiento de una lengua extranjera
- Los estudiantes deben ser 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.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante debe ser capaz de mantener una conversación en una lengua extranjera, normalmente inglés, y se expresa correctamente tanto en forma oral como escrita.
- Conocer y evaluar críticamente la aplicabilidad de los métodos avanzados de la Química Cuántica a los sistemas cuasidegenerados, tales como, sistemas con metales de transición o estados excitados (su espectroscopia y reactividad).
- Conocer las teorías y los métodos de cálculo para el estudio de sólidos y superficies; evaluación crítica de su aplicabilidad a problemas de catálisis, magnetismo, conductividad, etc.
- Conocer la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.

**2193 - M.ErasMund en Química Teórica y Modelización Computacional**

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Los estudiantes deben ser 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.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante debe ser capaz de mantener una conversación en una lengua extranjera, normalmente inglés, y se expresa correctamente tanto en forma oral como escrita.
- Conocer y evaluar críticamente la aplicabilidad de los métodos avanzados de la Química Cuántica a los sistemas cuasidegenerados, tales como, sistemas con metales de transición o estados excitados (su espectroscopia y reactividad).
- Conocer las teorías y los métodos de cálculo para el estudio de sólidos y superficies; evaluación crítica de su aplicabilidad a problemas de catálisis, magnetismo, conductividad, etc.
- Conocer la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.

**RESULTADOS DE APRENDIZAJE**

- Plantear o reconocer la ecuación de Schödinger 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 calculo numérico paralelo usando algún problema como referencia (por ejemplo, sistemas magnéticos)



## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. 1.

- Aprender sobre el método Hartree (MCTDH) para resolver problemas dinámicos cuánticos dependientes del tiempo
- Centrarse en las transiciones entre diferentes estados electrónicos que ocurren sin absorción o emisión de fotones ("transiciones sin radiación")
- Aprender a procesar la realización de Objetos de Aprendizaje Digitales

## VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	32,00	100
Tutorías regladas	10,00	100
Elaboración de trabajos individuales	35,00	0
Estudio y trabajo autónomo	50,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	23,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>150,00</b>	

## METODOLOGÍA DOCENTE

**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/a 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.

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

**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.



## EVALUACIÓN

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 realizados en la asignatura.

## REFERENCIAS

### Básicas

- W. Schattke and R. Diez, Quantum Monte Carlo Programming, Wiley 2013.
- J. Singh, Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures, Cambridge University Press 2003.
- A. Costantini, S. Tasso, O. Gervasi (2009). Visualization and Web Services for Studying Molecular Properties. in O. GERVASI, D. TANIAR, Y. MUN, A. IGLESIAS, M.L. GAVRILOVA: Selected Papers of the 2009 International Conference on Computational Science and Applications IEEE Computer Society Los Alamitos, CA 222-228
- A. Lagana'; Manuali C; N. Faginas Lago; O. Gervasi; S. Crocchianti; (2009). From Computer Assisted to Grid Empowered Teaching and Learning Activities in Higher Chemistry Education, Innovative Methods of Teaching and Learning Chemistry in Higher Education, 153-190
- Appropriate bibliographical support material for all the subjects will be included in advance on the website of the Intensive Course .