FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44985
Nombre	Técnicas computacionales avanzadas
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.	4 - Optativas de segundo	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN

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

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

COMPETENCIAS (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

2245 - Máster Universitario Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelizac. Comput.

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

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

- 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 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

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Computación en Grid

2. Técnicas de paralelización masiva: memoria compartida y memoria distribuida

3. Utilización de librerías matemáticas masivamente paralelas.

4. Computación Cuántica

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	35,00	100
Tutorías regladas	10,00	100
TOTAL	**45,00**	

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 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.

EVALUACIÓN

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.

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.

REFERENCIAS

Básicas

- Se informará sobre el material de consulta para todas las asignaturas con la suficiente antelación en la página web del Curso Intensivo.
-
- The teaching materials for all the subjects will be informed in advance on the website of the Intensive Course.