

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

Código	44988
Nombre	Proyecto de programación de química computacional
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - Máster Universitario EM en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	2	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2245 - Máster Universitario EM en Química Teórica y Modelización Computacional	4 - Optativas de segundo	Optativa

Coordinación

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

RESUMEN

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).

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 EM 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 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.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- El estudiante es capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.
- El 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.
- 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.
- 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 organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.
- El/la estudiante tiene capacidad de generar nuevas ideas a partir de sus propias decisiones.

**RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)****DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS****1.**

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.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en aula informática	20,00	100
Tutorías regladas	10,00	100
Clases de teoría	10,00	100
Seminarios	5,00	100
TOTAL	45,00	

METODOLOGÍA DOCENTE**EVALUACIÓN****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.

Convocatoria extraordinaria

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



REFERENCIAS

