

Simulación Molecular – MÓDULO II: METODOLOGÍAS COMPUTACIONALES

Sistemas Operativos y Programación

GUÍA DOCENTE



**INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN Y TRAMITACIÓN DE LAS GUÍAS DOCENTES
DE LAS ASIGNATURAS**

Curso Académico:	2022-2023					
Máster:	Simulación Molecular					
Denominación de la asignatura	Sistemas Operativos y Programación					
Módulo	MÓDULO II: METODOLOGÍAS COMPUTACIONALES					
Curso académico	2022-2023					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	Teoría:	5.00	Práctica:	0.00	Total:	5.00
Periodo de impartición	Del 3 de noviembre al 14 de diciembre de 2022					
Modalidad	VIRTUAL					
Web universidad coordinadora	https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3					
Web universidad colaboradora	http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular					
Idiomas de impartición	Español					

Profesorado			
Nombre y apellidos	Email	Universidad	Créditos
Enrique Lomba García		Instituto de Química Física Rocasolano (IQFR/CSIC)	2.00
José Manuel Míguez Díaz		UNIVERSIDAD DE HUELVA	3.00
TUTORIAS (Coordinador/a de asignatura): Horario y localización			
Aula Virtual de la UNIA https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular			
COMPETENCIAS			
Básicas y Generales	CG2: Demostrar dominio en la utilización de bibliografía científica y bases de datos, así como en el análisis de documentos científicotécnicos, en los ámbitos de la Termodinámica, la Mecánica Estadística y la Simulación Molecular. CB6: Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u		

	<p>oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p>
<p>Transversales</p>	<p>CT2: Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.</p> <p>CT3: Gestionar la información y el conocimiento.</p> <p>CT4: Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.</p> <p>CT5: Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.</p> <p>CT6: Sensibilización en temas medioambientales.</p>
<p>Específicas</p>	<p>CE1: Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular.</p> <p>CE2: Ser capaz de desarrollar scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo.</p> <p>CE3: Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel.</p> <p>CE4: Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular.</p> <p>CE11: Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones.</p>

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1. Familiarizarse con los elementos básicos de sistemas operativos UNIX/Linux, tanto en entornos gráficos como en la línea de comandos.
2. Ser capaz de construir scripts para procesamiento de datos, tanto numéricos como de texto. Conocer qué es un sistema de procesado en lotes (colas) y cuando es necesario.
3. Conocer las herramientas básicas en Linux para el tratamiento de datos y su presentación gráfica.
4. Conocer los elementos fundamentales de los lenguajes de programación, en particular Fortran90 y Python.
5. Ser capaz de construir scripts básicos en Python usando bibliotecas numéricas y gráficas, para resolver problemas científicos y presentar resultados.
6. Ser capaz de reducir un problema físico a su forma algorítmica y programarlo en Fortran90.
7. Familiarizarse con algún entorno gráfico de desarrollo.

CONTENIDOS

Descriptores

Sistemas operativos Unix/Linux. Herramientas de análisis y presentación de datos. Lenguajes de programación: intérpretes y compiladores. Python y Fortran90/2008.

Temario

Tema 1. Introducción a los sistemas operativos: UNIX/Linux. Funciones de los sistemas operativos. Organización de sistemas de ficheros. Comandos básicos en Linux.

Tema 2. Intérpretes de comandos: bash/csh. Funciones del intérprete. Programación de scripts.

Tema 3. Utilidades básicas. Editores en línea y visuales. Tuberías (pipes). Grep/awk y otros elementos en el procesado de información.

Tema 4. Paquetes básicos de presentación y análisis de resultados en UNIX/Linux. Grace. Gnuplot.

Tema 5. Lenguajes de programación I. Intérpretes: Python básico. Estructuras de datos. Bucles y control de flujo. Estructuras de entrada/salida. Herramientas básicas de procesado de cadenas.

Tema 6. Bibliotecas científicas en Python. Numpy/Scipy: rutinas de cálculo numérico vectorial/matricial y escalar. matplotlib/matplotlib: rutinas representación gráfica.

Tema 7. Lenguajes de programación II. Compiladores: Fortran 90- Fortran 2008. Tipos de datos y datos estructurados. Programación estructurada y programación orientada a objetos en Fortran: módulos, funciones, subrutinas. Control de flujo e iteradores. Vectores, matrices, punteros y operaciones matriciales intrínsecas. Entrada/salida y operaciones con cadenas de caracteres. Bibliotecas científicas:

Atlas/MathKernel, FFTW.

Tema 8. Entornos gráficos de desarrollo. Eclipse.

ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES			
Véase actividades formativas.			
Actividad formativa	Modalidad de enseñanza	Dedicación (horas de trabajo autónomo del estudiante)	Dedicación (horas de trabajo del estudiante con apoyo del profesor)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	VIRTUAL	35	35
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	VIRTUAL	15	15
AF3 - Dedicación (horas de trabajo autónomo del estudiante)	VIRTUAL	25	0
SISTEMA DE EVALUACIÓN			
Véase estrategias/metodologías de evaluación.			
OBSERVACIONES			
Estrategias/metodologías de evaluación			Porcentaje de valoración sobre el total
Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (Adobe Connect) y Campus Virtual (Moodle) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)			0-20%%
Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura			20-40%%
Pruebas escritas de evaluación mediante el uso del Campus Virtual (Moodle)			20-40%%
Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (Moodle)			20-40%%
BIBLIOGRAFÍA			
D. J. Barret, Linux Pocket Guide, 3rd Edition, Essential Commands (O'Reilly Media, 2016). P. Cobbaur, Linux Fundamentals, http://linux-training.be/linuxfun.pdf Python Crash Course, Eric Matthes (Nostarch Press, 2015). E. Bressert, SciPy and NumPy (O'Reilly Media, 2012). R.J. Hanson y T. Hopkins, Numerical Computing with Modern Fortran, (SIAM, 2013).			

PLAN DE CONTINGENCIA

No procede, ya que la enseñanza es VIRTUAL.

Conforme a lo dispuesto en la legislación vigente en materia de protección de datos de carácter personal (Reglamento (UE) 2016/679, de 27 de abril) le informamos que los datos personales que nos ha facilitado pasarán a ser tratados por la UNIVERSIDAD INTERNACIONAL DE ANDALUCÍA como responsable del tratamiento, siendo órgano competente en la materia la Dirección del Área de Gestión Académica (Monasterio Santa María de las Cuevas, C / Américo Vespucio nº2. Isla de La Cartuja - 41092 - Sevilla) ante quien Ud. puede ejercitar sus derechos de acceso, rectificación, limitación, oposición o portabilidad señalando concretamente la causa de su solicitud y acompañando copia de su documento acreditativo de identidad. La solicitud podrá hacerse mediante escrito en formato papel o por medios electrónicos.

Caso de no obtener contestación o ver desestimada su solicitud puede dirigirse al Delegado de Protección de Datos de la Universidad (rgpd@unia.es Tfno 954 462299) o en reclamación a la Agencia Española de Protección de Datos a través de los formularios que esa entidad tiene habilitados al efecto y que son accesibles desde su página web: <https://sedeagpd.gob.es>

Como responsable, la Universidad le informa que exclusivamente tratará los datos personales que Ud. le facilite para dar cumplimiento a los siguientes fines:

- a) Gestión académica y administrativa de:
- Participación en procesos de acceso y admisión a las enseñanzas oficiales (Grado, Máster y Doctorado) o de formación Continua de la Universidad Internacional de Andalucía.
 - Inscripción y/o matrícula como alumno en cualquiera de las titulaciones oficiales (Grado, Máster y Doctorado), Formación Continua u otras actividades académicas ofrecidas por la Universidad Internacional de Andalucía.
- Andalucía.
- Participación en convocatorias de becas y ayudas al estudio de la Universidad Internacional de Andalucía, la Admón. General del Estado o la de las Comunidades Autónomas y de otras entidades públicas o privadas.
 - Participación en convocatorias de programas de movilidad de carácter nacional o internacional.
 - Obtención y expedición de títulos oficiales, títulos propios y otros títulos académico
- b) Gestión de su participación como estudiante en prácticas y actividades formativas nacionales o internacionales en instituciones, empresas, organismos o en otros centros.
- c) Utilización de servicios universitarios como obtención del carné universitario, bibliotecas, actividades deportivas u otros.

La Universidad se encuentra legitimada para tratar estos datos al ser necesarios para la ejecución de la relación jurídica establecida entre Ud. y la Universidad y para que ésta pueda cumplir con sus obligaciones legales establecidas en la Ley Orgánica 6/2001, de Universidades.

Usted responde de la veracidad de los datos personales que ha proporcionado a la Universidad y de su actualización.

La Universidad comunicará los datos personales que sean indispensables, y nunca en otro caso, a las siguientes categorías de destinatarios:

- A otras Administraciones y organismos públicos para el ejercicio de las competencias que les sean propias y compatibles con las finalidades arriba enunciadas (Así - a modo enunciativo y no limitativo - a Ministerios con competencias en educación y ciencia, a otras administraciones, a otras Universidades o Centros formativos equivalentes para la gestión de traslados, a empresas para la realización de prácticas)
- A entidades bancarias para la gestión de pagos y cobros.
- A organismos públicos o privados en virtud de la celebración de convenios de colaboración o contratos, conforme a lo dispuesto en la legislación vigente en materia de Protección de Datos.
- A los servicios de la propia Universidad que sean adecuados para gestionar la utilización de los servicios universitarios ofertados.

Sus datos de carácter personal se tratarán y conservarán por la Universidad conforme a la legislación vigente en materia de protección de datos, pasando luego a formar parte -previo expurgo- del Archivo Histórico Universitario conforme a lo dispuesto en la legislación sobre Patrimonio Histórico.

La Universidad sólo prevé la transferencia de datos a terceros países en el caso de su participación como alumno en alguno de los programas de formación o becas de carácter internacional. La transferencia se realizará siguiendo las directrices establecidas al respecto por el Reglamento Europeo de Protección de Datos y normativa de desarrollo.

El Servicio de Protección de Datos de la Universidad Internacional de Andalucía cuenta con una página en la que incluye legislación, información y modelos en relación con la Protección de Datos Personales a la que puede acceder desde el siguiente enlace: <https://www.unia.es/protecciondatos>