

# Simulación Molecular – MÓDULO II: METODOLOGÍAS COMPUTACIONALES

Métodos numéricos

## 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	Métodos numéricos					
Módulo	MÓDULO II: METODOLOGÍAS COMPUTACIONALES					
Curso académico	2022-2023					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	<b>Teoría:</b>	5.00	<b>Práctica:</b>	0.00	<b>Total:</b>	5.00
Periodo de impartición	Del 19 de diciembre de 2022 al 6 de febrero de 2023					
Modalidad	VIRTUAL					
Web universidad coordinadora	<a href="https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3">https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3</a>					
Web universidad colaboradora	<a href="http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular">http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular</a>					
Idiomas de impartición	Español					

<b>Profesorado</b>			
<b>Nombre y apellidos</b>	<b>Email</b>	<b>Universidad</b>	<b>Créditos</b>
Enrique de Miguel Agustino		UNIVERSIDAD DE HUELVA	3.00
Iván Michael Zerón Jiménez		UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO (MEXICO)	2.00
<b>TUTORIAS (Coordinador/a de asignatura): Horario y localización</b>			
Aula Virtual de la UNIA <a href="https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular">https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular</a>			
<b>COMPETENCIAS</b>			
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 oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de		

	<p>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. Conocer los algoritmos básicos necesarios para formular numéricamente problemas físico-matemáticos, incluyendo interpolación, diferenciación, integración, resolución de ecuaciones algebraicas y diferenciales, etc.
2. Familiarizarse con la bibliografía básica de métodos numéricos.
3. Ser capaz de formular un problema físico en términos algorítmicos y plantear el método numérico adecuado para su resolución.
4. Conocer los principios básicos de la programación en paralelo.
5. Analizar las ventajas/inconvenientes de la paralelización de un algoritmo para la resolución de problema físico determinado.

### CONTENIDOS

#### Descriptores

Métodos numéricos básicos (interpolación, diferenciación, integración). Resolución numérica de ecuaciones algebraicas y diferenciales. Modelización de sistemas físicos. Análisis y transformadas de Fourier. Algoritmos paralelos y su implementación

#### Temario

Tema 1. Métodos básicos de interpolación y diferenciación.

Tema 2. Métodos de integración. Métodos de intervalo regular. Métodos gaussianos.

Tema 3. Integración multidimensional. Integración regular. Integración estocástica.

Tema 4. Resolución de sistemas lineales por métodos iterativos.

Tema 5. Resolución de ecuaciones y sistemas no lineales.

Tema 6. Ecuaciones diferenciales ordinarias y sistemas de ecuaciones. Elementos de análisis de estabilidad. Métodos numéricos de solución de sistemas de ecuaciones.

Tema 7. Ejemplos de modelización de sistemas dinámicos con ecuaciones diferenciales. Dinámica de poblaciones. Dinámica de N-cuerpos.

Tema 8. Transformadas de Fourier. Aplicaciones básicas: análisis de frecuencias, filtros de ruido y factores de estructura. La resolución experimental: Convolución y transformadas de Fourier. Transformadas discretas: condiciones de ortogonalidad. Métodos de cálculo: transformación directa y FFT

Tema 9. Elementos de programación en paralelo. Paradigmas de programación: MPI/OpenMP/CUDA. Elementos básicos de MPI

<b>ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES</b>			
Véase actividades formativas.			
<b>Actividad formativa</b>	<b>Modalidad de enseñanza</b>	<b>Dedicación</b> (horas de trabajo autónomo del estudiante)	<b>Dedicación</b> (horas de trabajo del estudiante con apoyo del profesor)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	VIRTUAL	30	30
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	VIRTUAL	20	20
AF3. Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	VIRTUAL	25	0
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>			
Véase estrategias/metodologías de evaluación.			
<b>OBSERVACIONES</b>			
<b>Estrategias/metodologías de evaluación</b>			<b>Porcentaje de valoración sobre el total</b>
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%%
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>			
Computational Physics, J. Thijssen, (Cambridge Univ. Press, 2007). Numerical Computing with Modern Fortran, R.J. Hanson & T. Hopkins (SIAM, 2013). Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing, William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery, (Cambridge Univ. Press, 2007).			

## 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.

• 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 académicos

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>