



Universidad de Huelva
Vicerrectorado de Investigación, Posgrado
y Relaciones Internacionales

un
Universidad
Internacional
de Andalucía
A

**MÁSTER INTERUNIVERSITARIO EN
SIMULACIÓN MOLECULAR POR LA UNIVERSIDAD INTERNACIONAL DE
ANDALUCÍA Y LA UNIVERSIDAD DE HUELVA**

**MEMORIA PARA LA
SOLICITUD DE VERIFICACIÓN**

Aprobada en Junta de Facultad de Ciencias Experimentales el 5 de septiembre de 2017

Aprobada en Comisión de Posgrado de la UHU celebrada el 25 de septiembre de 2107

Aprobada en Consejo de Gobierno de la UHU celebrado el 2 de octubre de 2107

Aprobada en Consejo Social de la UHU el 4 de octubre de 2107

Convenio de colaboración UHU-UNIA firmado el 9 de octubre de 2017

Convenio aprobado por Consejo de Gobierno de UNIA el 30 de octubre de 2017

1.1.- DESCRIPCIÓN GENERAL							
Nivel académico	Máster						
Denominación del título <i>La denominación de los títulos que habiliten para el ejercicio de profesiones reguladas debe ajustarse a la Orden Ministerial correspondiente:</i>	Máster Interuniversitario en Simulación Molecular por la Universidad Internacional de Andalucía y la Universidad de Huelva Interuniversity Master in Molecular Simulation						
Especialidades	No se contemplan especialidades						
Título conjunto <i>(Señalar lo que proceda)</i>				No		Sí	X
Rama de conocimiento <i>(Seleccionar la que corresponda)</i>	Ciencias - Ciencias de la Salud - Ingeniería y Arquitectura						
Clasificación Internacional Normalizada de la Educación de la UNESCO Consultar códigos ISCED	ISCED 1				ISCED 2		
Habilita para profesión regulada <i>(Señalar lo que proceda)</i>	No	X	Sí		<i>En caso afirmativo indicar resolución o norma:</i>		
1.2.- DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS (ECTS)							
Créditos obligatorios	40		Créditos optativos <i>Indicar el nº de créditos optativos que debe cursar el estudiante y no el nº total de créditos optativos ofertados en el plan de estudios.</i>			0	
Prácticas externas <i>En caso de orientación profesional, es recomendable que contemplen prácticas externas con al menos 12 ECTS</i>	0		Trabajo Fin de Máster <i>En caso de orientación investigadora, se recomienda al menos 12 ECTS.</i>			20	
Complementos formativos			CRÉDITOS TOTALES			60	
1.3.- UNIVERSIDADES Y CENTROS							
Universidades participantes <i>(sólo en caso de un título conjunto)</i>	Universidad Internacional de Andalucía Universidad de Huelva						
Facultad o Centro responsable del Título	Oficina de Posgrado (Universidad Internacional de Andalucía)						
1.4.- TIPO DE ENSEÑANZA							
Tipo de enseñanza <i>(Señalar lo que proceda)</i>	Presencial		Semipresencial		A distancia	X	
1.5.- PLAZAS DE NUEVO INGRESO							

Número de plazas de nuevo ingreso ofertadas en el 1º año de implantación	30
Distribución por universidades: UNIA: 20 UHU:10	
Número de plazas de nuevo ingreso ofertadas en el 2º año de implantación	30
Distribución por universidades: UNIA: 20 UHU:10	

1.6.- REQUISITOS DE MATRICULACIÓN

Número mínimo de créditos ECTS de matrícula por estudiante y período lectivo:

Normas de acceso y matrícula en las Enseñanzas Oficiales de Máster de la Universidad de Huelva:
<http://www.uhu.es/mastersoficiales/normativa/normativa-propia-de-la-universidad-de-huelva>

	Tiempo completo		Tiempo parcial	
	ECTS matrícula mínima	ECTS matrícula máxima	ECTS matrícula mínima	ECTS matrícula máxima
PRIMER CURSO	60	60	20	45
RESTO DE CURSOS	0	60	0	45

Normas de permanencia:

El Master Interuniversitario en Simulación Molecular por la Universidad Internacional de Andalucía y la Universidad de Huelva, adoptará la normativa de permanencia vigente en la Universidad de Huelva, al momento de formalizar el alumno su matrícula, según viene establecido en el convenio entre ambas universidades

http://www.uhu.es/mastersoficiales/images/2016/permanencia_grado_master.pdf

1.7.- LENGUAS UTILIZADAS EN EL PROCESO FORMATIVO

Castellano	X	Inglés		Otras (especificar)	
------------	---	--------	--	------------------------	--

2. JUSTIFICACIÓN, ADECUACIÓN DE LA PROPUESTA Y PROCEDIMIENTOS

Este apartado deberá salvarse en formato pdf y adjuntarse en la aplicación

2.1. JUSTIFICACIÓN DEL TÍTULO: INTERÉS ACADÉMICO, CIENTÍFICO Y/O PROFESIONAL

INTRODUCCIÓN, JUSTIFICACIÓN Y OBJETIVO DEL TÍTULO.

El título que se presenta para su acreditación tiene como objetivo fundamental formar a estudiantes de grado de algunas titulaciones de la Rama de Ciencias, de Ingeniería y Arquitectura y de Ciencias de la Salud, para que éstos adquieran conocimientos avanzados en técnicas y metodologías en el ámbito de la simulación molecular clásica. Esta formación avanzada, y al mismo tiempo específica propia de unos estudios de máster, les permitirá afrontar con éxito la realización de una tesis doctoral en grupos de investigación cuya temática se enfoque en este campo científico.

Se trata, obviamente, de un título cuyos contenidos íntegros caen fuera del ámbito de cualquier título de grado dentro y fuera de nuestras fronteras. Si bien es cierto que algunos aspectos y contenidos del mismo se podrían cursar en algunos grados existentes en la oferta de las universidades españolas y del Espacio Común Europeo, éstos se imparten únicamente a un nivel básico, insuficientes para iniciar con éxito una formación de posgrado. Asimismo, enfrentarse a la realización de una tesis doctoral en el ámbito de la simulación molecular requiere una formación íntegra en diferentes disciplinas y aspectos muy diversos, que van desde la Mecánica Estadística y la Termodinámica, pasando por el dominio de técnicas matemáticas y numéricas avanzadas, sin dejar atrás el uso de sistemas operativos basados en el estándar *UNIX/Linux*, lenguajes de programación avanzados (*Fortran C, C++, Python* y *Perl*, entre otros), uso de paquetes comerciales de simulación, bien sean propietarios y/o de libre distribución (*DL_POLY, LAMMPS, GROMACS* y *HoomD*, entre otros muchos), etc. Obviamente, esta gran diversidad de conocimientos, técnicas y habilidades no se pueden adquirir con la profundidad necesaria sin la existencia de un título de máster específicamente diseñado para cubrir estas necesidades.

Dado el carácter específico y técnico de la simulación molecular, se hace preciso explicar brevemente en qué consiste este conjunto de técnicas y herramientas que en las últimas décadas se ha vuelto casi imprescindible en la forma de hacer Ciencia. Es importante matizar, puesto que repercute directamente en el éxito de esta propuesta como se pondrá de manifiesto a lo largo de este documento, que este ascenso en el uso y desarrollo de la simulación numérica en general, y de la simulación molecular en particular, se ha producido gracias a la enorme expansión que ha experimentado el sector tecnológico de la electrónica y computación a nivel mundial.

La simulación molecular es considerada hoy en día uno de los pilares en los que se fundamenta la creación de conocimiento en el ámbito científico y tecnológico. De hecho, la simulación molecular es considerada la tercera forma de hacer ciencia junto con la teoría y los experimentos. Desde las primeras simulaciones llevadas a cabo en los años 30 y 40, en el contexto del estudio de la difusión de neutrones en materiales fisionables (dentro del conocido Proyecto Manhattan) hasta nuestros días, la simulación ha sufrido una transformación radical desde todos los puntos de vista. La enorme evolución del hardware disponible, el uso de algoritmos matemáticos y computacionales más eficientes, en notable consonancia con el hardware actual (Computación de Alto Rendimiento o HPC, del inglés *High-Performance Computing*), y el desarrollo de nuevas técnicas avanzadas de simulación, están posibilitando elaborar, desde una perspectiva microscópica, modelos realistas de moléculas complejas y materiales, diseño de procesos (de fabricación) físicos y químicos, etc. Todo ello está permitiendo plantear, investigar y resolver problemas científicos y tecnológicos en ámbitos muy diferentes inimaginables hasta hace unos años. La determinación de propiedades interfaciales de fluidos complejos y sus mezclas, el estudio y caracterización de la adsorción en materiales porosos estructurados, el comportamiento de fluidos iónicos y cristales líquidos o el estudio microscópico de sistemas biológicos complejos, como el ADN o las membranas celulares, entre otros, son tan sólo algunos ejemplos en el contexto de la *Condensed Matter* o Materia Condensada para los que la simulación molecular tiene hoy en día (o en un futuro cercano tendrá) un conocimiento preciso de sus propiedades y comportamiento a nivel microscópico.

La importancia de la simulación molecular en este contexto es aún más cuantificable cuando se analiza detenidamente el entorno investigador en el que nuestro país está inmerso, el Espacio Europeo de Investigación. Entre los ejemplos más notables y recientes de los esfuerzos dirigidos a potenciar la simulación molecular en este contexto destacan el CECAM, y otros más novedosos y específicos, como el caso del programa *SimBioMa*.

El CECAM o Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular (<http://www.cecarn.org>), formado por 19 organizaciones investigadoras de 10 países europeos (entre ellos España, en cuyo consejo está representada por el Ministerio de Economía y Competitividad MINECO), pretende promover desde hace décadas la investigación fundamental en métodos computacionales avanzados y su aplicación a problemas en diferentes áreas de la ciencia y la tecnología. En particular, el acrónimo CECAM hace especial hincapié en actividades relacionadas con simulaciones moleculares y atomísticas en el contexto de la Física y la Química de la Materia Condensada. No es de extrañar, por tanto, el tremendo interés del CECAM en el desarrollo de software, nuevas técnicas y uso sinérgico de software y hardware, para de este modo lograr modelos moleculares realistas de sistemas complejos que permitan enfrentarse a los nuevos retos que plantea la sociedad y la industria actual, tanto fundamentales como aplicados, en líneas de investigación tan amplias y complejas como diseño en Ciencia de Materiales, Biología, Química, etc. No se debe olvidar, como se ha mencionado con anterioridad, que la simulación molecular es considerada por muchos científicos como la alternativa complementaria a la teoría y a los experimentos, lo que sin duda alguna ha propiciado su uso masivo como herramienta de investigación fundamental en diferentes campos científicos.

Más recientemente, el programa *SimBioMa* o *Molecular Simulations in Biosystems and Material Science* (<http://www.simbioma.org>) perteneciente a la *European Science Foundation* (2006-2011), ha pretendido concentrar los esfuerzos europeos en el desarrollo de técnicas y nuevos métodos de computación que permitan obtener una mejor comprensión a nivel molecular de nuevas estructuras mesoscópicas y dinámicas en sistemas biológicos y nanomateriales manufacturados. Uno de los objetivos concretos del programa es el uso de los avances más recientes en diferentes metodologías computacionales para su integración en herramientas prácticas que permitan conocer el comportamiento macroscópico, desde una perspectiva microscópica, de los sistemas de interés. La ventaja de la simulación de sistemas complejos mediante el uso de modelos realistas frente a la experimentación es patente a escalas espaciales y temporales (mesoscópicas y microscópicas) que generalmente no son accesibles directamente a través de los experimentos, de ahí la gran relevancia de los objetivos planteados por el programa *SimBioMa*.

Las iniciativas europeas, como es de esperar, hacen especial hincapié en el análisis de las técnicas de simulación existentes, la mejora de las técnicas computacionales y la extensión y desarrollo de nuevas técnicas a problemas cada vez más complejos y de gran interés fundamental y aplicado. Tanto el programa *SimBioMa* como el CECAM tienen como objetivos, entre otros, promover la organización de workshops, reuniones científicas para establecer discusiones, realizar proyectos de investigación, y por supuesto, ofertar cursos específicos de formación para jóvenes investigadores, que constituyen en definitiva las nuevas generaciones europeas de científicos.

La formación de jóvenes investigadores en la temática de la Simulación Molecular es esencial para sostener el tejido investigador actual y mantenerlo en buen estado en un futuro a medio y largo plazo. Un ejemplo de ello es el caso del CCP5 o *Collaborative Computational Project 5. The Computer Simulation of Condensed Phases*, programa específico financiado desde hace más de 25 años por el EPSRC o *Engineering and Physical Sciences Research Council* del Reino Unido. El objetivo fundamental es involucrar científicos e investigadores de este país en el campo de la simulación para potenciar el uso y el desarrollo de las simulaciones moleculares en el Reino Unido. Para ello, se organizan workshops anuales, de 1-2 días de duración, en los que los científicos de la propia red y científicos relevantes de otros países colaboran en proyectos de desarrollo de software para beneficio de la comunidad CCP5. Asimismo, el CCP5 también organiza una escuela de verano anual que instruye entre 60 y 70 estudiantes de doctorado en los diferentes métodos de simulación molecular en el contexto de fases condensadas (<http://www.ccp5.ac.uk>).

Desafortunadamente, no existe ningún título de Máster Oficial en nuestro país dedicado exclusiva e íntegramente a la simulación molecular clásica, pese a la existencia de un importante número de grupos de investigación que usan y desarrollan técnicas avanzadas de simulación desde hace décadas. Existen fundamentalmente dos razones que permiten explicar esta situación. En primer lugar, aunque existen másteres en los que se imparten algunos de los contenidos propuestos en esta memoria, no se centran específicamente en la simulación molecular clásica, sino que cubren un aspecto más general del ámbito de la simulación (véase sección 2.2 de la presente memoria). En segundo lugar, como se ha comentado previamente, la simulación molecular clásica abarca un conjunto de disciplinas con un carácter marcadamente multidisciplinar, difícil de conjugar en cualquier título existen en la actualidad. Y todo ello pese a que en nuestro país existe un importante y nutrido grupo de simuladores con una gran reputación internacional en el campo de la simulación molecular (de hecho, muchos de estos grupos forman parte del CECAM y han participado en el programa *SimBioMa*). Hasta muy recientemente no ha existido una Red específica ni un Grupo Especializado dedicada al uso, desarrollo, aplicación y enseñanza de estas metodologías en el campo de la Materia Condensada. De hecho, tampoco existe un congreso específico en el mencionado campo, ni ha existido una escuela de simulación permanente o Máster Oficial orientado a la formación de investigadores en este campo.

La solución que han dado los grupos de investigación con necesidades formativas en simulación molecular clásica para sus estudiantes de máster y/o grado ha sido muy variopinta. Entre otras, destacan: (1) la matriculación en másteres genéricos; (2) matriculación en másteres con poca o ninguna relación con la simulación molecular clásica; (3) recibir la formación necesaria dentro del seno de cada grupo de investigación; (4) asistir a cursos especializados o Escuelas de Simulación en el extranjero, como el caso del CCP5 del Reino Unido. En el caso de los grupos de investigación involucrados en la docencia de este título, prácticamente las opciones (1) - (4) han sido utilizadas en el pasado de manera sistemática.

De los párrafos anteriores se desprende que esta situación es poco adecuada, tanto para los grupos de investigación involucrados en este campo de especialización como para los graduados que desean iniciar una formación doctoral en el ámbito de la Simulación Molecular. La propuesta de este título supondrá un antes y un después y cambiará por completo el panorama formativo simulador en España. Asimismo, como se mostrará a lo largo de esta memoria, la participación directa de la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA) supondrá también una alternativa muy atractiva para estudiantes procedentes de Latinoamérica, donde apenas existen títulos de máster de las características aquí expuestas. En este sentido, el liderazgo de la UNIA en el seno del **Grupo de Universidades Iberoamericanas La Rábida** augura un ámbito de difusión y captación de alumnos verdaderamente relevante.

EXPERIENCIA PREVIA Y PREVISIÓN DE LA DEMANDA.

A principios del año 2011, y siguiendo estos modelos, gran parte de los grupos de simulación españoles liderados por la Universidad de Huelva consiguieron financiación por parte del entonces Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN), que corresponde al actual Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO), a través de una Acción Complementaria del Plan Nacional de I+D+i (FIS2011-13119-E) para crear la Red Española de Simulación Molecular (*RdSiMol*, <https://rdsimulacion.igfr.csic.es/es/>). Dicho proyecto contó con una financiación de 15,000 € durante el periodo 01-01-2012 a 30-06-2013. La Red está dirigida por el Prof. Dr. Felipe Jiménez Blas, Catedrático de Universidad del Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional del Centro de Investigación en Química Sostenible (CIQSO) y del Departamento de Ciencias Integradas (Área de Física Aplicada), ambos de la Universidad de Huelva. Es precisamente el Prof. Blas el responsable y coordinador de este título. A mediados de 2015, la Red Española de Simulación Molecular solicita y consigue nuevamente financiación por parte del MINECO de una Acción de dinamización "Redes de Excelencia" del Programa Estatal de Fomento de la Investigación Científica y Técnica de Excelencia (FIS2015-71749-REDT). Este proyecto, que está vigente en la actualidad, cuenta con una financiación de 30,000 € durante el periodo 01-12-2015 a 30-11-2018), y al igual que al anterior proyecto de investigación, su Investigador Principal es del Dr. Felipe Jiménez Blas.

Los grupos que han formado y forman parte de la Red Española de Simulación Molecular tienen como objetivo primordial establecer de manera continuada un marco común a nivel nacional para utilizar, desarrollar, aplicar y enseñar nuevas metodologías computacionales en el campo de la Materia Condensada. Todos ellos gozan de una excelente reputación nacional e internacional en el campo de la

simulación molecular, y constituyen un conjunto de científicos suficientemente representativo de la comunidad simuladora existente en nuestro país (incluyendo un centro extranjero). La lista de las universidades y centros en las que están adscritos los grupos que participan es la siguiente:

- Universidad de Huelva.
- Universidad de Sevilla.
- Universidad Pablo de Olavide.
- Universidade de Vigo.
- Universidad de Cantabria.
- Universidad Complutense
- Universidad Autónoma de Madrid.
- Universitat Rovira i Virgili.
- Instituto de Investigación de Química-Física Rocasolano (CSIC, Madrid).
- Imperial College London (Londres, Reino Unido).

Uno de los pilares esenciales en los que se fundamenta la Red es la capacidad formadora de los grupos que lo componen. Todos ellos tienen una amplia experiencia en la dirección de trabajos de investigación en general y en la dirección de tesis doctorales en particular. Esta experiencia, fruto de la continua labor formadora que todos los grupos vienen llevando a cabo durante los últimos años, posibilita que los miembros de esta Red sean candidatos idóneos para enseñar todas las técnicas básicas y avanzadas que han venido desarrollando, aplicando y enseñando a nuevos investigadores formados en sus respectivos grupos. Además, los grupos y los investigadores que conforman la Red gozan de una amplia, sobrada y contrastada actividad investigadora en el ámbito de la simulación molecular. Una buena prueba de ello es el elevado número de artículos internacionales, presentaciones en congresos, dirección de tesis doctorales y otros indicadores que se presentan en esta memoria (véase el apartado 6. Personal académico de esta memoria de verificación). Es importante enfatizar que esta amplia dedicación es especialmente importante y relevante en el desarrollo, aplicación y extensión de nuevas metodologías en Simulación Molecular.

Desde finales de 2011 hasta la actualidad, la Red Española de Simulación Molecular ha llevado a cabo diferentes actuaciones siguiendo los objetivos de la misma: (a) Workshops en los que diversos miembros de investigación de los diferentes grupos se han reunido para presentar sus resultados de investigación; (b) escuelas de simulación para formar a jóvenes investigadores pertenecientes a los diferentes grupos de investigación; y (c) colaboraciones entre dos o más grupos de investigación de la Red.

Merece la pena destacar que en el II Workshop de la Red Española de Simulación Molecular, celebrado en Baiona (Pontevedra) a finales de junio de 2016, asistió como invitada la Prof. Ana Laura Benavides, Catedrática de Universidad de la Universidad de Guanajuato (México). La Prof. Benavides informó que en su país existe una Red de Simulación Molecular similar a la española. Esto nos ha permitido establecer una relación con la red homóloga mexicana, pudiendo asistir el pasado diciembre de 2016 a su Escuela de Simulación Molecular, celebrada en México DF. El representante de la Red Española pudo constatar el enorme empuje que tiene la simulación molecular en México, ya que el número de alumnos presenciales que asistieron a la mencionada escuela fue del orden de 120 potenciales estudiantes de doctorado. El pasado mes de junio (de 2017) se ha celebrado la III Edición del Workshop de la Red Española de Simulación Molecular, a la que han acudido dos investigadores de reputación internacional de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa de México y de Imperial College London. Esto ha permitido asegurar que las relaciones de la Red Española con otras Redes de otros países (fundamentalmente iberoamericanas) y con otros centros de enorme prestigio internacional se están consolidando paulatinamente.

La experiencia adquirida por los investigadores de la Red en el diseño, organización e impartición de formación específica en simulación molecular durante todos los años de actividad docente e investigadora en sus diferentes universidades y centros de investigación ha permitido organizar una Escuela de Simulación Molecular en la Sede de la Rábida de la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA), proponer un Curso de Verano de la UNIA, y organizar una segunda Escuela de Simulación. A continuación, se muestran los indicadores más relevantes de cada una de ellas:

(a) I Escuela de Simulación de la Red Española de Simulación Molecular (septiembre 2012).

- Celebrada en la Sede de la Rábida de la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA).
- Profesores participantes: 10 profesores de diferentes universidades
- Alumnos participantes: 20 alumnos.
- Duración: desde el 24 de septiembre al 29 de septiembre.
- Horas impartidas: 40 horas lectivas, a razón de 8 horas diarias.

(b) Curso de Verano de la UNIA (julio 2015).

- Celebrada en la Sede de la Rábida de la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA), dentro de sus Cursos de Verano.
- Profesores participantes: 8 profesores de diferentes universidades
- Alumnos participantes: 37 alumnos.
- Duración: desde el 27 de julio al 31 de julio.
- Horas impartidas: 15 horas lectivas en toda la semana.

(c) III Escuela de Simulación de la Red Española de Simulación Molecular (septiembre 2017).

- A celebrar en la Sede de la Rábida de la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA).
- Profesores participantes: 13 profesores de diferentes universidades.
- Alumnos participantes: 34 alumnos.
- Duración: desde el 11 de septiembre al 15 de septiembre.
- Horas impartidas: 40 horas lectivas, a razón de 8 horas diarias.

El enorme éxito de la I Escuela de Simulación Molecular, especialmente del Curso de Verano de la UNIA celebrado en julio de 2015 y la III Escuela de Simulación Molecular ha motivado proponer la creación de un Máster Interuniversitario en Simulación Molecular que involucra a investigadores de prácticamente todas las universidades españolas en las que se desarrolla investigación en investigación fundamental y aplicada en el campo científico de la simulación molecular.

CONEXIÓN DEL TÍTULO CON ESTUDIOS DE GRADOS Y DOCTORADOS.

La Universidad de Huelva posee una Escuela Técnica Superior de Ingeniería y una Facultad de Ciencias Experimentales cuyos egresados podrían ser potenciales alumnos de este máster, especialmente los graduados en Química, Geología e Ingeniería Química Industrial. Además, y en base a la experiencia previa en la organización de las Escuelas de Simulación Molecular coordinadas a través de la Red Española de Simulación Molecular, una parte importante de los alumnos podrían provenir (como ha sucedido hasta ahora) de los grupos de investigación de los miembros que componen la Red. Por último, y no menos importante, el hecho de que la UNIA participe activamente en la impartición de este máster permitirá que alumnos de las universidades de Sudamérica que tienen convenios dentro del marco del **Grupo de Universidades Iberoamericanas La Rábida** participen de manera natural en este título. De este modo, es muy previsible que se incremente el número de alumnos potenciales del máster. Para facilitar aún más esto, se ha contado con la participación explícita en este máster de reputados investigadores a nivel internacional en este campo de diferentes universidades iberoamericanas. La elección de este profesorado latinoamericano no ha sido casual. Se ha contado con profesorado procedente de universidades que colaboran regularmente con investigadores miembros de la Red Española de Simulación Molecular, como las Universidades de Concepción y Bio-Bio (Chile), Universidad de La Plata (Argentina), Guanajuato (México) o Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (México). El hecho de que el **máster sea a distancia con teledocencia**, como se explicará detalladamente en los apartados 5. Planificación de las enseñanzas, 6. Personal académico y 7. Recursos materiales y servicios, le confiere un atractivo mayor a potenciales alumnos de diferentes universidades españolas e iberoamericanas, sin encarecer el coste de sus estudios demasiado. Todo ello hace esperar una demanda razonable de estudiantes que deseen matricularse en este máster.

Además, la UHU tiene vigente un único programa de doctorado para las ramas de Ciencias Experimentales, Tecnología e Ingeniería denominado "Ciencias y Tecnología Industrial y Ambiental"

(CyTIA). Los alumnos de la UNIA y de la UHU que realizaran este máster podrían acceder directamente a este programa de doctorado. Por otro lado, siempre será posible que muchos alumnos opten por realizar una tesis doctoral en sus respectivas universidades, bien sean españolas o del espacio universitario iberoamericano, que adolecen de un máster de estas características.

Un aspecto altamente atractivo, que no ha sido comentado previamente, son los posibles beneficios que conllevaría la consolidación de un Máster Interuniversitario en Simulación Molecular en nuestro país. Sin duda alguna permitiría atraer talentos de países de América Latina. Basta recordar aquí que muchos de los programas de cooperación entre Instituciones de la Unión Europea y América Latina han tenido como consecuencia directa la incorporación de estudiantes de doctorado de estos países a grupos de investigación españoles, y este caso no sería una excepción.

RELACIÓN DE LA PROPUESTA CON EL ENTORNO DEL MERCADO LABORAL Y SITUACIÓN DEL A I+D+i EN EL SECTOR ACADÉMICO.

El Máster Interuniversitario en Simulación Molecular pretende formar a graduados en las Ramas de Ciencias y de Ingeniería y Arquitectura principalmente, y también de la Rama de Ciencias de la Salud, de nuestras Universidades y en Latinoamérica, para que puedan realizar con más garantías de éxito un doctorado en el ámbito de la Simulación Molecular. Este Máster ofrece al alumnado una formación especializada y multidisciplinar que ofrece una formación completa e integral en este campo, permitiéndole aumentar sus capacidades y competencias en orden a mejorar sus índices de empleabilidad como investigador.

Al tratarse de un Máster a distancia con teledocencia, la consecución de estas competencias necesariamente tiene que ser planteada en términos geográficos amplios pues, como ya se ha indicado, no sólo se aspira a formar alumnado procedente de Andalucía, sino también del resto de España o Iberoamérica.

Sin ánimo de ser exhaustivo, sintetizaremos los puntos que constituyen la mayor fortaleza del título que se propone, que lo diferencia de la mayoría de la oferta revisada:

- Es el único Máster Interuniversitario en Simulación Molecular **a distancia con teledocencia**, en el Sistema Universitario Andaluz y a nivel nacional.
- Cuenta con la colaboración del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), una Infraestructura Tecnológica Singular de España (ICTS), a través del convenio firmado con las Universidades de Huelva e Internacional de Andalucía, para que los alumnos del título tengan acceso a tiempo de computación en el que realizarán su formación.
- Dispone asimismo de la infraestructura de software de la Red Española de Simulación Molecular, subvencionada por el Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO) en diferentes convocatorias competitivas de proyectos de investigación nacionales.
- Está dirigido a una población de egresados básicamente de España y Latinoamérica, siendo una oferta intercultural en el que la Universidad Internacional de Andalucía, con su amplia e innovadora experiencia en el uso de **teledocencia**, en combinación con el uso de plataformas virtuales de docencia, resulta un valor añadido de gran importancia. Debe recordarse aquí que la UNIA ha desarrollado durante los últimos años Másteres Oficiales en formato on-line, con docencia a distancia a través de la teledocencia y semipresenciales.
- Es un máster muy atractivo para estudiantes procedentes de otros países, especialmente los nombrados en el punto anterior, donde existe poca formación especializada en este campo. En este sentido, el liderazgo de la Universidad Internacional de Andalucía en el seno del **Grupo La Rábida**, que aglutina cerca de setenta universidades iberoamericanas, augura una difusión y captación de potenciales alumnos nada desdeñable.
- Cuenta con una plantilla de profesionales de la investigación, especialistas en técnicas de Simulación Molecular a nivel nacional, procedentes de la Red Española de Simulación Molecular.
- El uso de las nuevas tecnologías, y en particular la **teledocencia**, permite abordar una formación integral y óptima de los estudiantes, con especialistas en el campo de la Simulación Molecular a un bajo coste para el sistema, ya que hace posible la impartición de la docencia sin que

alumnado y profesorado tengan que desplazarse de sus lugares de residencia y trabajo, respectivamente.

- Finalmente, conforma especialistas egresados universitarios preparados para afrontar la realización de una tesis doctoral en el ámbito de la simulación, promoviendo la responsabilidad y el compromiso social del mismo (aumento de la empleabilidad del posgraduado), facilitando al alumnado la incorporación al mercado laboral como contratado predoctoral.

EN SU CASO, NORMAS REGULADORAS DEL EJERCICIO PROFESIONAL

No procede habilitación profesional

2.2. REFERENTES EXTERNOS A LA UNIVERSIDAD PROPONENTE QUE AVALEN LA ADECUACIÓN DE LA PROPUESTA A CRITERIOS NACIONALES O INTERNACIONALES PARA TÍTULOS DE SIMILARES CARACTERÍSTICAS ACADÉMICAS

Para el diseño de este Máster, tanto en lo relativo a su estructura como a su formato y sus contenidos, se ha tratado de seguir un proceso previo de conocimiento exhaustivo de la oferta en Másteres y cursos especializados similares que se pueden encontrar en la actualidad, tanto a escala internacional como a escala nacional. Este conocimiento exhaustivo de la oferta existente ha permitido detectar qué campos de la oferta académica quedaban por cubrir, pero también qué contenidos de los Másteres y cursos especializados podían servir como modelos al presentar una estructura y unos contenidos innovadores, así como unas tasas de éxito elevado. Este estudio ha sido llevado a cabo inicialmente por una Comisión de Expertos de la Red Española de Simulación Molecular y posteriormente por la Comisión de Verificación del Máster (véase sección 2.3 para más detalles sobre las Comisiones y procedimientos).

Las conclusiones principales fueron:

1. Escasa oferta de másteres dedicados a la Simulación Molecular en general. Prácticamente, salvo una excepción que se comenta en esta sección (aunque su extensión es más amplia y ligeramente más generalista que la que aquí se presenta), **no existe ningún máster dedicado única y exclusivamente al ámbito de la Simulación Molecular clásica en nuestra Comunidad Autónoma y en nuestro país**. Esta es una de las principales razones por las que se propone este título.
2. La gran mayoría de los másteres y cursos especializados analizados existentes en el ámbito europeo y norteamericano son presenciales. Este predominio de una oferta en másteres de estas características ha propiciado optar por un **formato a distancia con teledocencia**. Teniendo en cuenta que existe la infraestructura necesaria y que los medios materiales para llevar a cabo este tipo de docencia, con una alta calidad, está disponible incluso para gran parte de la población, incluidos investigadores y potenciales alumnos (*Skype, Adobe Connect* y *software* similar), se ha estimado oportuno optar por este **formato a distancia con teledocencia**.
3. Escasa oferta de másteres de carácter interuniversitario, lo cual hace depender los contenidos temáticos de las trayectorias investigadoras de los profesores de una sola universidad. Esto, junto con los puntos anteriores, ha permitido plantear un máster completamente novedoso por su temática, su formato a la hora de impartir docencia, y la elección del profesorado altamente especializado y con un prestigioso nivel investigador a nivel internacional. De este modo, se ofrece un Máster interuniversitario que aprovecha la especialización y complementariedad de un amplio profesorado, y en este caso concreto, que forman parte de una sólida Red de Simulación Molecular a nivel nacional, reconocido no sólo por su experiencia investigadora y docente, sino por la experiencia profesional a nivel nacional e internacional.
4. Aunque ya se ha mencionado de manera implícita en los puntos anteriores, **la oferta de másteres oficiales en la Comunidad Autónoma Andaluza no incluyen ningún máster de este**

tipo de características, ni siquiera por los contenidos impartidos.

Referentes internacionales evaluados:

A nivel europeo existen pocos másteres en el ámbito de la Simulación Molecular clásica. Existen cursos especializados ofertados por el CECAM, que se imparte en Holanda, y el CCP5 del Reino Unido, que se imparte en distintas sedes dependiendo del año concreto. En primer lugar se detallan los dos cursos especializados en Simulación Molecular más relevantes en Europa y seguidamente se mencionan algunos másteres europeos con relación en este ámbito.

Principales cursos especializados en Simulación Molecular en Europa:

- **CCP5 Summer School** (UK, patrocinado por el CECAM). Escuela de verano ofertada en el grupo especializado del EPSRC del Reino Unido, el CCP5, que se imparte durante 5 días cada año. Está patrocinada por el CECAM, pero no constituye un Máster en sí misma. El enlace es el siguiente: https://www.ccp5.ac.uk/summer_school_2017.
- **MolSim: Understanding Molecular Simulation** (Holanda, patrocinado por el CECAM). Escuela que se celebra generalmente a principios de cada año en la Universidad de Amsterdam y está organizada por el *Amsterdam Centre for Multiscale Modelling*. Tiene una duración de 10 días y se imparten los contenidos más importantes en el ámbito de la Simulación Molecular. El enlace es el siguiente: <http://www.acmm.nl/molSim/molSim2017>.

A continuación, se detallan algunos másteres europeos relacionados con la Simulación Molecular clásica. El primero de la lista contempla contenidos más amplios que los desarrollados en el título que se pretende verificar. En particular, además de la Simulación Molecular clásica se abarcan contenidos relacionados con el modelado multiescala, incluyendo una descripción mesoscópica de los sistemas, analizando no solo sistemas clásicos sino también cuánticos, propios de ámbitos diferentes como la Química Teórica y la Química Computacional. Puesto que está orientado a diferentes disciplinas, incluyendo la Física, la Química y la Bioquímica, oferta una gran cantidad de asignaturas optativas, a diferencia de lo que ocurre en el título de esta Memoria, que se centra únicamente en problemas del ámbito de la Simulación Molecular clásica. El resto de másteres contienen alguna asignatura relacionada con la Simulación Molecular o con técnicas de computación por lo que no pueden considerarse másteres en Simulación Molecular estrictamente hablando.

Algunos ejemplos de másteres que contienen contenidos parciales en Simulación Molecular:

- **AtoSIM Master of Science** (Erasmus Mundus: Ecole Normal Supérieur de Lyon, Universiteit van Amsterdam, Vrije Universiteit Amsterdam and Università degli studi di Roma).
<http://www.erasmusmundus-atosim.cecama.org/>
- **MCs Molecular Modelling** (University College London).
https://www.ucl.ac.uk/chemistry/postgraduate/masters/courses/molecular_modelling
- **MPhil in Computational Methods for Material Science** (University of Cambridge).
<https://www.graduate.study.cam.ac.uk/courses/directory/pcphpdcms>
- **MSc program Computer Simulation in Science** (Bergische Universität Weppertal).
<https://www.csis.uni-wuppertal.de/en/>
- **Simulation Sciences M.Sc.** (RWTH Aachen University)

<http://www.rwth-aachen.de/cms/root/Studium/Vor-dem-Studium/Studiengaenge/Liste-Aktuelle-Studiengaenge/Studiengangbeschreibung/~bnzu/Simulation-Sciences-M-Sc/?lidx=1>

- **Master in Computational Science** (Università della Svizzera Italiana).
<https://www.usi.ch/en/node/1144>
- **Master Advanced Chemical Engineering with Process Systems Engineering** (Imperial College London).
<http://www.imperial.ac.uk/chemical-engineering/courses/undergraduate/course-details/modules/ce4-33/>
- **Master' track in Chemistry, track Molecular Simulation and Photonics** (Universiteit van Amsterdam).
http://studiegids.uva.nl/web/uva/sgs/en/p/1123_130249.html
- **Master in Molecular Sciences – Spectroscopy and Simulation** (Ruhr-Universität Bochum).
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/imos/>
- **Master Programme in Computational Science** (Uppsala Universitet).
<http://www.uu.se/en/admissions/master/selma/program/?pKod=TBV2M>
- **Applied Physics, M.Sc.** (Chalmers University of Technology).
<https://www.mastersportal.com/studies/94/applied-physics.html?attempt=1>
- **Modelling and Simulation** (Universiteit van Utrecht). (7.5 créditos optativos en el máster en nanomaterials-science de la Universidad de Utrecht)
<https://colloid.nl/people/marjolein-dijkstra/?tab=education>
- **MSc Computational Science** (Vrije Universiteit Amsterdam).
<http://masters.vu.nl/en/programmes/computational-science-uva/index.aspx>

Referentes nacionales evaluados:

A nivel nacional, existe únicamente un Máster que guarda una importante relación con los contenidos de la Simulación Molecular en general. Además, existen en el contexto nacional una gran variedad de estudios de posgrado en el ámbito de la Química Teórica y Modelización Computacional. Aunque son másteres de una extraordinaria calidad y contenido científico, técnico y formativo, sus contenidos no deben confundirse con los propios de la Simulación Molecular clásica. Puesto que la lista de estos másteres es extensa, y dado que están únicamente algo relacionados con el nuestro, únicamente se comentan algunas de las particularidades del Máster Interuniversitario en Química Teórica y Modelización Computacional, coordinado por la Universidad Autónoma de Madrid, en el que participan 14 universidades españolas. Además, se menciona también el **Master's Degree in Theoretical Chemistry and Computational Modelling** de la Universitat de Valencia, muy similar al anterior.

- **Máster Interuniversitario en Modelización Computacional Atomística y Multiescala en Física, Química y Bioquímica, por la Universidad Politécnica de Catalunya y la Universidad de Barcelona.** Se trata de un máster presencial interuniversitario impartido por estas dos universidades. Como se ha mencionado previamente, este Máster es el único que existe en España en Simulación Molecular. Sus contenidos son similares a los impartidos en el **AtoSIM**

Master of Science descrito anteriormente. Pese a ello, el diseño general para la formación del alumno es, como no puede de ser de otro modo, similar dada la naturaleza de las habilidades, capacidades y conocimientos perseguidos. Se puede consultar este Máster en el enlace: <http://www.upc.edu/aprender/estudios/masteres-universitarios/modelizacion-computacional-atomistica-y-multiescala-en-fisica-quimica-y-bioquimica>.

- **Máster Interuniversitario en Química Teórica y Modelización Computacional, coordinado por la Universidad Autónoma de Madrid.** Máster interuniversitario de referencia en la Química computacional, impartido por 14 universidades españolas, con la Universidad Autónoma de Madrid como centro superior coordinador. Una de las ventajas que presenta este Máster es que hace uso de tecnologías para impartir clases en la modalidad de teledocencia a distancia, similar a la planteada en este título. Desafortunadamente, las similitudes desaparecen en este punto. El Máster está centrado fundamentalmente en los formalismos utilizados para el estudio de sistemas de interés químicos, como procesos catalíticos, mecanismos de reacción, etc. Únicamente se imparte una asignatura de 5 ECTS sobre los fundamentos de la Mecánica Estadística, haciendo especial hincapié en la descripción cuántica de sistemas moleculares. Además de eso, se imparte una asignatura de 9 ECTS en la que en una parte de la misma se describen los principios elementales, a nivel básico, de la Dinámica Molecular, y completamente orientados hacia estudios mecanísticos de reacción. Consideramos que este Máster es completamente inadecuado para una formación integral en Simulación Molecular clásica necesaria para afrontar la realización de una tesis doctoral en Simulación Molecular. El enlace al Máster es el siguiente: https://tccm.qui.uam.es/?page_id=1419.

- **Master's Degree in Theoretical Chemistry and Computational Modelling** (Universitat de Valencia). Máster muy similar al anterior, de los que existen algunos en otras universidades españolas.

<https://www.uv.es/uvweb/college/en/university-valencia/master-s-degree-theoretical-chemistry-computational-modelling-1285845048380/Titulacio.html?id=1285874593010&plantilla=UV/Page/TPGDetall&p2=2>

Finalmente, se enumeran a modo de ejemplo, algunos másteres de otras disciplinas en las que existe una asignatura relacionada con la disciplina de la Simulación Molecular. Este listado no pretende ser un compendio exhaustivo ni detallado, sino mostrar la escasez de enseñanzas a nivel de Máster en nuestro país en el ámbito de la Simulación Molecular:

- **Máster Universitario en Ciencia y Tecnología de Nuevos Materiales** (Universidad de Sevilla). Este Máster contiene dos asignaturas relacionadas con la Simulación Molecular: *"Modelización Aplicada a la Caracterización Estructural de Medios Continuos"* y *"Computación en Ciencia de Materiales"*. Sus enlaces respectivos son:

http://www.us.es/estudios/master/master_M056/asignatura_50560017/proyecto_988284

http://www.us.es/estudios/master/master_M056/asignatura_50560001/proyecto_936463

- **Máster Universitario en Estudios Avanzados en Química (Universidad de Sevilla).** Este Máster contiene una asignatura relacionada con la Simulación Molecular: *"Modelización Molecular"*.

http://www.us.es/estudios/master/master_M075/asignatura_50750012/proyecto_937276

2.3. DESCRIPCIÓN DE LOS PROCEDIMIENTOS DE CONSULTA INTERNOS Y EXTERNOS UTILIZADOS PARA LA ELABORACIÓN DEL PLAN DE ESTUDIOS

PROCEDIMIENTOS INTERNOS

El Plan de Estudios se ha elaborado tomando como referencia la experiencia de las diferentes Escuelas de Simulación Molecular organizadas por la Red Española de Simulación Molecular desde septiembre de 2012, haciendo uso de los temarios de las diferentes asignaturas cursadas en las diferentes escuelas previa. La Red Española de Simulación Molecular, que aglutina a la mayor parte de simuladores españoles, se forma a raíz de dos proyectos competitivos financiados por el Ministerio de Economía y Competitividad del Gobierno de España, como se ha mencionado previamente. Una Comisión de Expertos de la Red, creada a tal efecto el 12/12/2016, solicitó la aprobación del Máster interuniversitario, más adelante establecida como Comisión de Verificación del Máster por los órganos universitarios competentes, elaborando la propuesta que aquí se presenta. Ha sido sometida a información pública, antes de su aprobación por las comisiones de postgrado de ambas Universidades y de su ratificación por los respectivos Consejos de Gobierno.

El procedimiento completo de elaboración de la propuesta es el siguiente:

1. Creación de la Comisión de Expertos de la Red Española de Simulación Molecular para la elaboración de una expresión de interés para la propuesta, ante la Junta de Centro, de creación de un nuevo Título de Máster Oficial (Simulación Molecular) y aprobación de la misma por todos sus miembros.
2. Aprobación de la expresión de interés de la propuesta por la Junta de Centro y de la Comisión de Verificación del Máster en Simulación Molecular.
3. Elaboración, por parte de la Comisión de elaboración del plan de estudios (en este caso la Comisión de Verificación del Máster), de la Memoria de Verificación del Máster en Simulación Molecular, y aprobación de la misma por todos sus miembros.
4. Aprobación en Junta de Centro de la Memoria de Verificación y ratificación de la Comisión de Verificación del Máster.
5. Aprobación en la Comisión de Posgrado de las Universidades de Huelva e Internacional de Andalucía.
6. Apertura de trámite de información pública (plazo de 15 días).
7. Aprobación en Consejo de Gobierno de las Universidades de Huelva e Internacional de Andalucía.
8. Aprobación por el Consejo Social de la Universidad de Huelva.

En relación a las consultas internas, desde el principio del proceso, se ha hecho partícipe a todos los sectores implicados en dicho proceso, de tal forma que no sólo se encuentren puntualmente informados de los acuerdos tomados en la elaboración del plan de estudios del Máster en Simulación Molecular a implantar en la Facultad de Ciencias Experimentales, sino que se articulan mecanismos para que cualquier profesor, personal de administración y servicio (PAS) o estudiante, puedan realizar la alegaciones o sugerencias que crean oportunas a lo largo de dicho proceso. Entre estos mecanismos articulados se encuentran:

- Estudio en la Comisión de Expertos de la Red Española de Simulación Molecular, en base a estudios en el ámbito nacional e internacional y a su propia formación como investigadores de renombrado prestigio, de los contenidos adecuados para un Título de Máster de estas características en Simulación Molecular.
- Comisión de Verificación del Máster en Simulación Molecular de la Universidad de Huelva.
- Realización de manera constante, a través de los correspondientes representantes, de consultas a las áreas de conocimiento implicadas en el título.
- Comunicación e información a los directores de los departamentos implicados en el título mediante correo electrónicos de los acuerdos y decisiones tomados durante el proceso de elaboración del plan de estudios.

- Información al alumnado a través de su representante en la comisión.

Por tanto, a lo largo de todo el proceso, la apertura de las distintas etapas se ha puesto en conocimiento de la Comunidad Universitaria del Centro.

Previo a la remisión de la memoria para la verificación por parte del Consejo de Universidades, la solicitud fue previamente autorizada por la Consejería competente en la materia, la Consejería de Economía y Conocimiento de la Junta de Andalucía. **La solicitud ante la Dirección General de Universidades se presentó con fecha 30 de septiembre de 2017.**

Se hace constar que existe diferenciación de títulos dentro de la misma universidad. En concreto, **no hay ningún Master Oficial especializado en Simulación Molecular en la Universidad Internacional de Andalucía ni en la Universidad de Huelva.**

PROCEDIMIENTOS EXTERNOS

De un modo similar al llevado a cabo en el caso de los Procedimientos Internos, la Comisión de Expertos de la Red Española de Simulación Molecular, y más adelante la Comisión de Verificación del Máster, ha sido la encargada de contactar y realizar las consultadas con diferentes agentes externos: antiguos alumnos de diferentes Escuelas de Simulación, miembros de la propia Red Temática de Excelencia del MINECO "Red Española de Simulación Molecular" que son colegas docentes de otras universidades, nacionales y extranjeras, algunos de ellos referentes mundiales en el ámbito de la Simulación Molecular y órganos colegiados españoles pertenecientes a las Reales Sociedades de Física y Química, entre otros. La mayor parte de las consultas se han realizado por correo electrónico, pero también a reuniones presenciales, telefónicas o por videoconferencia, especialmente en los casos de algunos profesores extranjeros, tanto de Sudamérica como del Reino Unido. Especialmente interesante fue la reunión mantenida con la mayor parte de los miembros de la Red Española de Simulación Molecular mantenida durante la celebración del III Workshop de la Red Española de Simulación, celebrada en junio de 2017 en Baiona (Pontevedra, <https://rdsimulacion.iqfr.csic.es/es/>). En todos los casos, se recibieron respuestas muy positivas ante la posibilidad de creación de un Título de Grado de estas características. Asimismo, se recibieron sugerencias técnicas sobre los contenidos a impartir y organización de determinadas actividades de programación que fueron incorporadas al plan de estudios. En concreto, se indican a continuación todos los agentes externos:

- Antiguos alumnos de las diferentes Escuelas de Simulación Molecular organizadas por la Red Española de la Red de Simulación Molecular, desde enero hasta julio de 2017.
- Reunión con los docentes e investigadores involucrados en la docencia de la Red Española de Simulación Molecular, desde enero de 2017 hasta junio de 2017.
- Reuniones con responsables de instituciones públicas vinculadas muy directamente con los contenidos del máster:
 - **Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM,** <https://www.cecama.org>), organización europea de la que forman parte los principales países de la **Unión Europea**, incluyendo España (a través del **MINECO**), dedicada a la promoción de la investigación fundamental en métodos computacionales avanzados y sus aplicaciones a problemas importantes en diferentes áreas de la Ciencia y la Tecnología. En particular, se ha contactado con su **director, el Profesor Ignacio Pagonabarraga Mora, Catedrático en la Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne**, en junio de 2017 a través de e-mail, quien ha mostrado su apoyo al presente título, indicando la idoneidad de la propuesta.
 - **Real Sociedad Española de Física**, y en particular, con el **presidente, el Profesor José Adolfo de Azcárraga Feliu**, con quien se contactó en julio de 2017 vía telefónica. Éste mostró su apoyo a la solicitud del presente título.
 - **Grupo Especializado de Termodinámica de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química**, en concreto, con su **presidente, el Profesor José Ramón Solana Quirós**, con quien se contactó en junio de 2017 personalmente durante al III Workshop de la Red Española de Simulación Molecular celebrada en Baiona (Pontevedra). El Profesor Solana es un experto en Simulación Molecular y mostró su más firme apoyo a la solicitud del presente título.

- **Sección Local de Galicia de la Real Sociedad Española de Física**, con su **presidente, el Profesor José Luis Legido Soto**, con quien se contactó en mayo de 2017, mostrando su apoyo incondicional al presente título. El Prof. Legido es miembro de uno de los Grupos de Investigación que forman parte de la Red Española de Simulación Molecular, por lo que el contacto se llevó a cabo directamente en persona.
- **Sección Local de Sevilla de la Real Sociedad Española de Física**, con su **presidente, el Profesor Luis F. Rull Fernández**, con quien se contactó en junio de 2017. El Profesor Rull, experto en Simulación Molecular, mostró su apoyo a la solicitud del presente título. Se contactó con el Prof. Rull personalmente durante al III Workshop de la Red Española de Simulación Molecular celebrada en Baiona (Pontevedra).

En un plano más internacional, la comisión de trabajo nombrada para la elaboración de esta propuesta ha realizado consultas en algunas universidades iberoamericanas con el objeto de conocer las potencialidades de la demanda por parte de alumnos iberoamericanos. En particular, se han realizado consultas puntuales a determinados especialistas pertenecientes a distintas universidades americanas, la mayoría de los cuales han mostrado su interés en participar en el presente título. Entre otros, las consultas se realizaron, vía e-mail y/o telefónica, con:

- **Dr. José Alejandro** (Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, México), en mayo de 2017.
- **Dr. Alejandro Gil-Villegas** y la **Dra. Ana Laura Benavides** (Universidad de Guanajuato, México), en mayo de 2017.
- **Drs. Andrés Mejía** y **José Matías Garrido** (Universidad de Concepción, Chile), en abril de 2017.

Asimismo, se ha recabado información a especialistas a nivel mundial en Simulación Molecular. En particular, se ha pedido una revisión de los contenidos del Título, constatando la idoneidad de los contenidos y estructura del título solicitado, mostrando su apoyo al mismo. En concreto, se ha contactado vía e-mail con los siguientes profesores e investigadores de gran reputación científica en el ámbito de la simulación molecular en el plano internacional:

- **Professor Keith E. Gubbins** (North Carolina State University).
<https://gubbins.wordpress.ncsu.edu/members/keith-e-gubbins-pi/>
- **Professor Thanasis Z. Panagiotopoulos** (Princeton University).
<http://www.princeton.edu/cbe/people/faculty/panagiotopoulos/>
- **Professor Peter T. Cummings** (Vanderbilt University).
<https://engineering.vanderbilt.edu/bio/peter-cummings>
- **Professor Amparo Galindo** (Imperial College London).
<https://www.imperial.ac.uk/people/a.galindo>
- **Professor Erich A. Müller** (Imperial College London).
<https://www.imperial.ac.uk/people/e.muller>

La información recabada ha servido, en especial, para terminar de perfilar los contenidos académicos del Máster, y sobre todo para evaluar el posible interés de los alumnos por los contenidos del mismo, así como por un formato a distancia con teledocencia. Como se ha mencionado previamente, la mayor parte de las consultas se han realizado por correo electrónico, pero también a reuniones presenciales, telefónicas o por videoconferencia, especialmente en los casos de algunos profesores extranjeros, tanto de Sudamérica como del Reino Unido.

En otro orden de cosas, dado el carácter a distancia con teledocencia de este Máster, ha sido imprescindible disponer del asesoramiento permanente del Área de Innovación Digital de la UNIA (coordinadora del Máster), responsable del manejo de su Campus Virtual y de la formación en este ámbito de alumnos y profesores. Por su especialización y larga experiencia en este campo, las recomendaciones de sus técnicos han sido de una valiosa ayuda en todo momento.

3.- COMPETENCIAS

3.1.- COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES

CB6	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
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
CB8	Que los 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
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
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.

COMPETENCIAS GENERALES

CG1	Comprender, analizar, evaluar y seleccionar teorías científicas adecuadas y metodologías precisas para formular juicios a partir de los datos disponibles, bien sean experimentales y/o teóricos, en los ámbitos de la Termodinámica, la Mecánica Estadística y la Simulación Molecular.
CG2	Demostrar dominio en la utilización de bibliografía científica y bases de datos, así como en el análisis de documentos científico-técnicos, en los ámbitos de la Termodinámica, la Mecánica Estadística y la Simulación Molecular.
CG3	Comprender y ser capaz de elaborar informes, presentaciones y/o publicaciones científicas en el ámbito de la Simulación Molecular.
CG4	Comprender y ser capaz de concebir y planificar un proceso de investigación en el ámbito de la Simulación Molecular.

3.2.- COMPETENCIAS TRANSVERSALES

CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.
CT3	Gestionar la información y el conocimiento.
CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.
CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.
CT6	Sensibilización en temas medioambientales.

3.3.- COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE1	Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular
CE2	Ser capaz de desarrollar scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo

CE3	Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel
CE4	Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular
CE5	Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional
CE6	Comprender las leyes macroscópicas físicas y químicas de sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y mezclas
CE7	Comprender los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas
CE8	Comprender las técnicas básicas de Monte Carlo y Dinámica Molecular basadas en potenciales de interacción molecular y ser capaz de desarrollar subrutinas y programas en el contexto de la simulación molecular
CE9	Comprender las técnicas avanzadas de Monte Carlo y Dinámica Molecular y ser capaz de crear programas que permitan determinar el comportamiento de sistemas complejos en el contexto de la simulación molecular
CE10	Dado un material, fenómeno físico o químico o sistema complejo cuyo comportamiento se quiera simular, ser capaz de analizar, valorar y decidir cuáles son las técnicas de simulación más adecuadas para predecir sus propiedades macroscópicas
CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones

4.- ACCESO Y ADMISIÓN DE ESTUDIANTES

4.1.- SISTEMA DE INFORMACIÓN PREVIO

PERFIL DE INGRESO RECOMENDADO

El Perfil de Ingreso general para el acceso al máster vendrá determinado por el reconocimiento, en el aspirante, de una serie de cualidades académicas y personales que permitan el desarrollo de las competencias contempladas en el programa de estudios. Así, dicho perfil contempla una doble vertiente de capacidades e intereses que se manifiestan del siguiente modo.

Perfil personal: El máster está diseñado para acoger a estudiantes interesados en adquirir conocimientos teóricos y prácticos en el ámbito de la Simulación Molecular clásica. En particular, el objetivo último del título es formar a estos estudiantes para que puedan afrontar con éxito la realización de una tesis doctoral en Simulación Molecular, por lo que claramente el título está orientado a futuros investigadores. Es por ello que este máster está dirigido hacia alumnos con una curiosidad innata por conocer cómo una descripción microscópica de sistemas complejos en materia condensada es capaz de predecir el comportamiento macroscópico de éstos, con espíritu crítico e innovador para desarrollar nuevas teorías y algoritmos para resolver problemas complejos en el ámbito de la Simulación Molecular, y con capacidad de trabajo y habilidad para trabajar en el seno de un grupo de investigación.

Perfil académico: Éste vendrá determinado por la posesión de estudios universitarios previos, Licenciados, Graduados o Diplomados en titulaciones de las ramas de Ciencias e Ingeniería y Arquitectura. Eventualmente, también podrá considerarse como perfil de ingreso el de licenciados, graduados o diplomados procedentes de algunas titulaciones de la rama de Ciencias de la salud. Tal y como recoge la Normativa en vigor, para acceder a las enseñanzas oficiales de Máster será necesario estar en posesión de un título universitario oficial español u otro expedido por una institución de educación superior perteneciente a otro Estado integrante del Espacio Europeo de Educación Superior que faculte en el mismo para el acceso a enseñanzas de Máster, según se contempla en el Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre, por el que se establece la ordenación de las enseñanzas universitarias oficiales, así como los Reales Decretos 861/2010, de 2 de julio y 43/2015, por los que se modifica el anterior.

SISTEMAS DE INFORMACIÓN PREVIA A LA MATRICULACIÓN

Los destinatarios de todos los sistemas de información serán siempre los estudiantes potenciales interesados en la realización de un programa formativo concreto. En particular, estos sistemas de información serán de ámbito local, nacional e internacional. Para ello, la Universidad Internacional de Andalucía y la Universidad de Huelva, a través de las Oficinas de Posgrados, han establecido, desarrollado y consolidado diferentes acciones y procedimientos para informar, difundir y orientar a los diferentes colectivos en varios campos:

1. Creación y mantenimiento de una página web.

- a. **Web específica para la oferta de títulos de posgrados.** En esta web, se dispondrá de información acerca de la oferta, el acceso la matrícula, becas y ayudas, calendario, precios públicos, documentación necesaria y el enlace a la web de Distrito Único Andaluz (DUA), en ambas universidades, tanto la UHU como la UNIA.
- b. **Web específica del Master.** El Master Interuniversitario en Simulación Molecular generará una página web propia, alojada en el servidor de la Universidad Internacional de Andalucía y con acceso desde los portales de la otra universidad participante (UHU). Esta página web se concibe principalmente como un mecanismo de difusión e información, pero también como una vía de comunicación entre los

estudiantes y los responsables académicos del Máster. Esta página informará sobre los siguientes aspectos: (i) descripción del título, (ii) objetivos y competencias, (iii) profesorado, (iv) estructura académica del master, (v) explicación del proceso de enseñanza –aprendizaje, especialmente en el entorno a distancia pero con teledocencia de *Adobe Connect* y en el uso del Campus Virtual *Moodle*, (vi) criterios de acceso y admisión, (vii) calendario del Máster, indicando exactamente el período de las clases a distancia con teledocencia, (viii) Preinscripción y matrícula, (ix) reconocimiento de créditos, (x) sugerencias, reclamaciones, (xi) calidad y seguimiento, (xii) resultados académicos, (xiii) memoria del plan de estudios, y (xiv) folleto informativo del master. Adicionalmente, la URL del Distrito Único Andaluz (DUA) también proporciona los criterios de admisión de todos los Másteres Oficiales.

2. **Publicidad.** Aparte de la página web el Máster, también se anunciará el título a través de folletos publicitarios y cartelería, que incluirán la información más importante y remitirán a la citada página web. Este material publicitario se distribuirá entre las dos universidades participantes y resto de universidades andaluzas, nacionales y extranjeras (en particular de Iberoamérica). No obstante, en aras de la sostenibilidad y la eficiencia económica, se tratará de reducir al máximo la producción de materiales publicitarios en papel y, en cambio, se potenciará la difusión on-line. Para ello se utilizarán las siguientes vías de difusión:
 - a. Portales de difusión digital.
 - b. Listados y *mailings* a futuros alumnos que los hayan autorizado en virtud del cumplimiento de las actuales leyes de protección de datos (Ley Orgánica 15/1999, de 13 de diciembre de Protección de Datos de Carácter Personal).
 - c. *Mailing* a las universidades miembros del Grupo de Universidades Iberoamericanas La Rábida.
 - d. Participación en ferias educativas dentro y fuera de España, de acuerdo con las directrices del Vicerrectorado de Estudiantes y el de Internacionalización de ambas universidades (Europosgrado en Chile, Argentina, Perú, México, ...).
3. **Redes sociales.** De acuerdo con la filosofía de inmersión en el mundo de las Tecnologías y la Comunicación, este Máster también utilizará como vías de difusión las redes sociales, y en particular, Facebook y Twitter.
4. **Oficinas de información y atención a los estudiantes.** En el caso de la Universidad de Huelva sería el Servicio de Atención a la Comunidad Universitaria (SACU) y en la Universidad Internacional de Andalucía a través del Servicio de alumnos que está ubicado en cada uno de los 4 campus de la UNIA (Sevilla, La Rábida –Huelva-, Málaga y Baeza –Jaén-).

Independientemente del medio utilizado para difundir, el principal objetivo de estos sistemas de información será proporcionar de forma clara y atractiva, a cualquier estudiante potencial, la mayor información posible sobre el Master en cuestión y las Universidades que lo promueven. En particular, se especificará claramente que el Master es de carácter a distancia con teledocencia, indicando el período del calendario docente. Asimismo, se describirán minuciosamente las enseñanzas y servicios ofertados y los métodos docentes utilizados, así como los criterios evaluadores y los procedimientos establecidos para garantizar una alta calidad de los resultados. La Comisión Académica del Máster asumirá los mecanismos de apoyo y orientación a los estudiantes previos a su matriculación, adscribiendo cada alumno/a preinscrito en el título a un Tutor para que éste se encargue de su asesoramiento y orientación tanto en aspectos académicos como administrativos.

Además de lo anterior, toda la información relacionada con la preinscripción y matrícula en el Máster Interuniversitario en Simulación Molecular, así como los plazos establecidos estará regulado, en sus aspectos generales, por el Acuerdo de la Comisión del DUA (Distrito Único Andaluz) por el que se

establece el procedimiento para el ingreso en los Másteres Universitarios. Al respecto, pueden consultarse los siguientes enlaces web:

<http://distritounicoandaluz.cica.es/>

y

<http://www.juntadeandalucia.es/innovacioncienciayempresa/sguit/>.

Ambos enlaces están disponibles para todos los estudiantes que desean acceder a la universidad en sus distintos niveles, incluido el Máster Universitario Oficial. En ellos se proporciona información completa sobre los requisitos que deben reunir los solicitantes, así como la forma de obtenerlos, y sobre los procedimientos de admisión y de cómo se ordenan las solicitudes. Durante el plazo de los distintos procesos de admisión, el estudiante puede acceder a la presentación telemática de solicitudes, a los resultados de las diversas adjudicaciones y, en su caso, puede hacer reserva de plaza, desistimiento o participar en las listas de resultados.

En lo que se refiere a la accesibilidad de los sistemas de información, cada una de las universidades participantes dispone de una página web donde se recoge, de forma pormenorizada, toda la información relativa a esta cuestión, incluyendo información académico-administrativa, estudios, recursos, formación y servicios complementarios, movilidad, etc. Las webs de la Universidad Internacional de Andalucía y de la Universidad de Huelva se pueden encontrar en los siguientes enlaces:

Universidad de Huelva:

<http://www.uhu.es/mastersoficiales/>

Universidad Internacional de Andalucía:

<http://unia.es/oferta-academica/masteres-oficiales>

4.2.- REQUISITOS DE ACCESO Y CRITERIOS DE ADMISIÓN

REQUISITOS GENERALES DE ACCESO

Los requisitos generales de acceso a los másteres oficiales son los que se establecen en el artículo 16 del Real Decreto 1393/2007, modificado por el Real Decreto 861/2010, según los cuales quienes deseen ser admitidos, deberán encontrarse en alguna de las siguientes situaciones:

1. Estar en posesión de un título de Grado, o de Arquitecto, Ingeniero, Licenciado, Arquitecto Técnico, Diplomado, Ingeniero Técnico o Maestro, u otro expresamente declarado equivalente.
2. Estar en posesión de un título universitario extranjero expedido por una institución de educación superior del Espacio Europeo de Educación Superior que facultan en el país expedidor del título para el acceso a enseñanzas de máster.
3. Estar en posesión de un título universitario extranjero, equivalente al nivel de grado en España, pero que no ha sido homologado por el Ministerio de Educación Español y que faculte en su país de origen para cursar estudios de posgrado. El acceso por esta vía no implicará, en ningún caso, la homologación del título previo de que esté en posesión el interesado, ni su reconocimiento a otros efectos que el de cursar las enseñanzas de máster.

De acuerdo con las previsiones del art. 75 de la Ley Andaluza de Universidades, Texto Refundido aprobado por Decreto legislativo 1/2013, de 8 de enero, a los únicos efectos del ingreso en los centros universitarios, todas las Universidades públicas andaluzas se constituyen en un distrito único, encomendando la gestión del mismo a una comisión específica, constituida en el seno del Consejo Andaluz de Universidades. La composición de dicha comisión quedó establecida por el Decreto 478/1994, de 27 de diciembre, que sigue actuando tras la publicación del citado Texto Refundido de la ley Andaluza de universidades. Puede consultarse el sistema del Distrito Único Andaluz en el siguiente enlace:

<http://www.juntadeandalucia.es/innovacioncienciayempresa/sguit/>.

Sobre los requisitos de acceso y admisión, puede consultarse:

http://www.juntadeandalucia.es/innovacioncienciayempresa/sguit/mo_requisitos_procedimiento.php

Además de los requisitos de acceso generalmente establecidos en el artículo 16 RD 1393/2007, los solicitantes deberán cumplir, en su caso, los requisitos específicos que requiera cada Máster en el que desee ser admitido. En su caso, estos requisitos específicos se hacen públicos desde el comienzo del plazo de presentación de solicitudes hasta la finalización del proceso en la respectiva universidad. En cualquier caso, siempre están disponibles en el punto de acceso electrónico:

<http://www.juntadeandalucia.es/economiainnovacioncienciayempleo>

Al margen de esta normativa, no existen condiciones o pruebas de acceso especiales para la admisión a esta titulación autorizada por la administración competente. En todo caso, el acceso a la Universidad se realizará desde el pleno respeto a los derechos fundamentales y a los principios de igualdad, mérito y capacidad. Igualmente, se tendrán en cuenta los principios de accesibilidad universal y diseño para todos según lo establecido en el R. D. Legislativo 1/2013, de 29 de noviembre, por el que se aprueba el Texto refundido de la Ley General de derechos de las personas con discapacidad y de su inclusión social.

CRITERIOS DE ADMISIÓN

El Máster está diseñado para que puedan acceder directamente los alumnos que cuenten con formación fundamentalmente en la Rama de Ciencias. No obstante, y dado el carácter multidisciplinar y a la vez específico del Título, también se permitirá el acceso de alumnos con formación en las Ramas de Ingeniería y Arquitectura y de Ciencias de la Salud. Para llevar a cabo esta adscripción, y tratándose de un máster de especialización hemos recogido en primer lugar como titulaciones preferentes, aquellas de grado superior que por su ubicación en la Rama de Conocimiento de Ciencias tendrán mayor preferencia:

- Grado en Física.
- Grado en Química.
- Grado en Ciencias Experimentales.
- Grado en Ciencias Ambientales.
- Grado en Geología.
- Licenciado en Física.
- Licenciado en Química.
- Licenciado en Ciencias Ambientales.
- Licenciado en Geología.

No obstante, como ya se ha mencionado previamente y dada la transversalidad del máster propuesto, podrá valorarse la admisión de alumnos con titulaciones equivalentes o afines, así como las Diplomaturas y las titulaciones extranjeras equivalentes o afines.

Los alumnos solicitarán su preinscripción en una o ambas universidades participantes, garantizando de este modo la igualdad de oportunidades. Esta información estará disponible para los alumnos interesados en el momento en que se abra el periodo de preinscripción de acuerdo con la normativa vigente del Distrito Único Andaluz. Los admitidos en el máster se matricularán en la Universidad por la que solicitaron su admisión. Si lo hubieran hecho en ambas, podrá matricularse libremente por aquella que desee.

Cada Universidad comunicará a la otra los estudiantes matriculados para que sean considerados a efectos académicos posteriores. El alumnado estará vinculado, a efectos académicos y administrativos, a la Universidad en la que se haya matriculado. Cada Universidad asumirá las tareas de tramitación, custodia y emisión de certificados de los expedientes de los estudiantes relativos a este Título Oficial,

de conformidad con lo dispuesto en el Art. 3 del Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre (modificado por el Real Decreto 861/2010, de 2 de julio), por el que se establece la ordenación de las enseñanzas universitarias oficiales. Igualmente, cada universidad emitirá el correspondiente título de Máster, que será firmado por el Rector de la Universidad en la que se ha matriculado el alumno en representación de los Rectores de las universidades participantes, indicándose esta situación junto al carácter interuniversitario del Máster y las universidades participantes.

El sistema de admisión, atendiendo a la oferta de plazas disponibles, se concretará en fases sucesivas de preinscripción y matrícula. El número máximo de estudiantes en el master será de 30 y el periodo lectivo de los cursos estará comprendido entre noviembre de 2018 hasta 30 de noviembre de 2019. A la hora de la admisión, se tendrán en cuenta los criterios siguientes de ponderación y se ordenarán los estudiantes según la puntuación obtenida:

- Expediente académico: 60%
- Currículum Vitae: 30%
- Conocimiento de idiomas: 10%

No se prevé la inclusión de pruebas de acceso especiales, sin embargo, tratándose de estudiantes de países cuya lengua materna sea diferente al español, será necesario acreditar, junto a la solicitud, el conocimiento suficiente de nuestra lengua (B2 Marco Común Europea de Referencia para las Lenguas).

En el caso de que se llegue a producir una situación de acceso competitivo en un curso académico, al haber más solicitudes que plazas disponibles, la Comisión Académica del Máster atenderá la admisión en base a los criterios antes recogidos, idénticos para ambas instituciones. Dichos criterios serán publicados y revisados para cada curso académico. En todo caso, se asegurarán los principios de igualdad de género y raza, capacidad y mérito en el proceso de selección.

En caso de que un alumno no obtuviera la admisión en una de las universidades y no hubiera solicitado admisión en la otra universidad, se articularán los mecanismos precisos para que éste pueda solicitar, y en su caso, llevar a cabo un cambio en la matriculación en la otra universidad. Este procedimiento permitirá, en la medida de lo posible y siempre respetando los requisitos generales del Distrito Único Andaluz y asegurando la igualdad de oportunidades entre todos los candidatos, que todos los alumnos preinscritos tengan opción de matricularse en el Título en alguna de las universidades que ofertan el Título, siempre que existan plazas disponibles.

Se arbitrarán elementos específicos para facilitar y garantizar el acceso a la información de las personas con discapacidad. La web del master cumplirá los parámetros de accesibilidad y los espacios físicos empleados para la docencia y las prácticas serán igualmente accesibles (R. D. Legislativo 1/2013, de 29 de noviembre, por el que se aprueba el Texto refundido de la Ley General de derechos de las personas con discapacidad y de su inclusión social).

El órgano que llevará a cabo el proceso de admisión será la Comisión de Ordenación Académica del Máster, que estará formada por el director del Máster, el coordinador del mismo que ejercerá como secretario/a, tres representantes de los profesores, un estudiante y un miembro del personal de administración y servicios. Esta Comisión decidirá si los méritos acreditados en el currículum vitae por los estudiantes se ajustan al perfil del Máster y si éstos deben ser admitidos. Asimismo, ponderarán y ordenarán a los estudiantes según la puntuación obtenida con arreglo a los criterios expresados anteriormente.

Todos los aspectos relativos al proceso de preinscripción y matrícula serán objeto de información pública, integrada y coordinada a través de las páginas web del Distrito Universitario Único Andaluz, la Oficina de Posgrado de la Universidad Internacional de Andalucía y el resto de los servicios correspondientes a las universidades participantes. En todo caso, regirán las normativas sobre acceso y admisión de cada una de las universidades participantes:

Universidad de Huelva:

http://www.uhu.es/gestion.academica/matricula/documentacion/normas_matricula.pdf

Universidad Internacional de Andalucía

<http://unia.es/images/normativa/general/reglamento-regimen-academico.pdf>

<http://unia.es/images/normativa/general/reglamento-estudios-posgrado-unia-2013.pdf>

4.3.- SISTEMAS DE APOYO Y ORIENTACIÓN

Según establece la Ley Orgánica 6/2001, de 21 de diciembre, de Universidades, en su artículo 46.2.e), uno de los derechos de los estudiantes hace referencia al “asesoramiento y asistencia por parte de los profesores y tutores en el modo que se determine”. En este marco se reconoce la importancia de las labores de orientación y tutorización dentro del sistema universitario actual. Este Máster incide particularmente en la necesidad, dentro de una universidad moderna y cada vez mejor orientada en su labor de proyección social, de procurar medios de atención a los usuarios, tanto reales como potenciales, para con ello potenciar la cercanía a los estudiantes mediante la tutorización curricular y el apoyo académico personalizado, así como establecer mecanismos para su orientación profesional hacia el ámbito de la investigación. Para ello, se pretenden implicar a los distintos agentes de la universidad para de este modo conseguir una formación lo más integral del alumno.

Antes de pasar a la orientación que el alumno recibirá una vez esté matriculado, el personal de administración y servicios, tanto de la UNIA y como de la UHU, proporcionará al estudiante todo el apoyo administrativo necesario para realización óptima del proceso de admisión y matriculación por medio de atención presencial en el campus universitario, telefónica y por correo electrónico, con información guiada en la red para la matriculación on-line.

Una vez matriculado el alumnado, la Comisión Académica del Máster desarrollará anualmente dos actividades conjuntas para orientar al alumnado. A continuación, se describen estas dos actividades cruciales para el adecuado encauzamiento del nuevo alumnado hacia la consecución de su título de máster.

- **Sesión de acogida.** Se trata de una reunión con todos los estudiantes de nuevo ingreso que se llevará a cabo a distancia mediante videoconferencia haciendo uso de la tecnología *Adobe Connect*. En esta primera sesión, se informará de la estructura y características del título, indicando los principales aspectos que deben tener en cuenta al inicio del mismo. En particular, se hará especial hincapié en los principales cambios que experimentarán con respecto a los estudios de Grado y se informará al alumnado de aspectos directamente relacionados con los estudios escogidos, tales como:
 - Presentación General del Máster.
 - Estructura del mismo.
 - Metodología de desarrollo.
 - Sistema de evaluación.
 - Consejos prácticos para el estudiante.

El Master dispondrá de una guía docente detallada, publicada telemáticamente a través del Campus Virtual *Moodle*, con toda la información referida al programa y a cada una de las asignaturas. En ella se detallarán muy claramente los objetivos, la metodología, los materiales que han de ser usados y los criterios de evaluación. Debe tenerse en cuenta que, una vez matriculados los estudiantes, éstos obtienen su cuenta de correo electrónico, su acceso a la Plataforma Moodle y sus cuentas de computación en el Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), como se explica detalladamente en el apartado 7 de esta memoria.

- **Procedimientos de enseñanza.** Se trata de una reunión más técnica en la que la Comisión Académica informa a todos los alumnos sobre los procedimientos de enseñanza que se emplean

durante la impartición del título. Fundamentalmente, se trata de mostrar al alumnado el funcionamiento de la teledocencia mediante el uso de la tecnología *Adobe Connect*, del Campus Virtual *Moodle* de la UNIA y del sistema empleado, haciendo uso de estos dos importantes recursos, para las tutorías específicas del Máster. El Campus Virtual de la UNIA, que es donde se desarrolla una parte no presencial del Máster (plataforma Moodle), pone a disposición del estudiante varias herramientas TICs que facilitarán el proceso de aprendizaje individual y colectivo durante todo el desarrollo del Máster. En el apartado de recursos informáticos de esta memoria se detalla con mayor precisión el contenido de esta plataforma <http://campusvirtual.unia.es>. Debe mencionarse que, además de todo ello, esta misma información puede ser proporcionada en las Oficinas de Posgrado de ambas universidades. En cualquier caso, el alumno será informado detalladamente de los siguientes instrumentos y aspectos metodológicos que se emplearán regularmente durante la impartición de este título:

- Uso de correo electrónico profesor-alumno y alumno-profesor integrado dentro de la plataforma.
- Creación de listas de distribución.
- Uso de tableros de anuncios para proporcionar información relevante.
- Utilización del chat de la plataforma, tanto *Moodle* como *Adobe Connect*.
- Servicio de consulta a disposición del alumno.
- Material didáctico recomendado.
- Planificación y calendario propuesto para afrontar las acciones formativas.
- Información sobre las sesiones a distancia, objetivos, metodología y sistemas de evaluación de los talleres.
- Mecanismos de coordinación interna del Máster: papel y composición de la Comisión Académica, función del director/a, cometido de los tutores/orientadores y función de los coordinadores de cada asignatura y del coordinador de cada universidad participante.
- Requisitos para la elaboración y presentación del TFM, así como de su obligación de realizar una lectura pública del mismo (mediante el uso de la tecnología *Adobe Connect*).

El objetivo fundamental de estas actividades es la prevención del abandono y el fracaso académico. Para ello, se persigue orientar y guiar al nuevo estudiante desde el inicio de los estudios, proporcionándole conocimientos y entrenamiento necesarios en cuanto a las competencias y medios de apoyo y en particular, sobre las competencias necesarias para ser un estudiante lo más autónomo posible.

La figura del director/a del Máster tendrá, además, la función de apoyar y procurar en todo momento la mejor integración y aprovechamiento académico por parte de los estudiantes, sin perjuicio de la posibilidad de establecer, conforme a la decisión que en cada caso se pueda tomar, programas individualizados o personalizados de tutorización para cada estudiante o grupo de estudiantes a cargo de los responsables de cada módulo formativo.

Con el fin de promover la orientación profesional a los estudiantes, el director/a se mantendrá informado e informará, a través de los estudios de egresados que lleven a cabo los servicios correspondientes de las Universidades u otros entes públicos o privados, sobre las posibles opciones de realizar al finalizar sus estudios de máster una tesis doctoral. En este caso, su papel será ante todo el de dinamizador y orientador. De esta forma se consigue que el alumno tenga un buen conocimiento de su candidatura, de las posibilidades de realizar una tesis doctoral en su Universidad o en universidades a las que pertenecen los profesores del propio máster u otros colaboradores, para de este modo realice una búsqueda de grupo de investigación en el que realizar su doctorado planificada, organizada y eficaz, utilizando las herramientas y recursos de forma adecuada.

Cada una de las universidades proponentes dispone de sistemas de apoyo completo para los estudiantes. Aunque la estructura organizativa de estos sistemas varía en función de la universidad, los servicios que prestan son esencialmente los mismos.

Las páginas web de los servicios de apoyo de cada universidad son las siguientes:

Universidad de Huelva:

<http://www.uhu.es/sacu/>

<http://www.uhu.es/soipea/>

Universidad Internacional de Andalucía:

<http://www.unia.es/oferta-academica/guia-orientacion>

La Oficina de apoyo a la enseñanza virtual de ambas instituciones servirá de enlace de los estudiantes con el con el profesorado y velará por la calidad de las comunicaciones.

De forma resumida, sintetizamos los principales servicios de atención al alumnado que ofrece cada universidad participante teniendo en cuenta la modalidad de docencia a distancia con teledocencia de este Máster.

SERVICIO DE ATENCIÓN AL ALUMNO DE LA UNIVERSIDAD INTERNACIONAL DE ANDALUCÍA.

Dentro de la Orientación de acceso la Universidad Internacional de Andalucía incluirá acciones encaminadas a la acogida y orientación del alumnado. Debemos señalar que el alumnado que accede a esta universidad proviene de diferentes sistemas universitarios. Este hecho exige realizar Jornadas de Acogida que favorezcan el conocimiento y adaptación del estudiante. Dichas Jornadas tendrán una fase general y otra específica.

FASE GENERAL. En esta fase se procederá a reunir alumnado de diferentes titulaciones con la finalidad de informarles sobre aspectos tales como:

- El Sistema Universitario Español y su integración en el Espacio Europeo de Educación Superior.
- La Universidad Internacional de Andalucía: presentación general.
- Procedimientos académicos relacionados con sus estudios.
- Presentación de los diferentes servicios que les ofrece la UNIA, así como de los procedimientos para hacer uso de ellos.
- Consejos útiles para el desarrollo de su vida cotidiana en las diferentes sedes de la UNIA
- Orientarles sobre los principales cambios que experimentarán con respecto a los estudios de grado y que pueden suponer un importante cambio en la forma de abordar sus estudios.
- Procedimientos para la comunicación entre los estudiantes.

Esta fase será desarrollada por personal de los Servicios Generales de la UNIA y de las distintas Sedes Universitarias. En el caso de este Máster se realizará con la tecnología *Adobe Connect* desde el Campus Virtual de la UNIA.

FASE ESPECÍFICA. Esta fase se desarrollará con el alumnado de cada titulación por separado. En la misma se informará al alumnado de aspectos directamente relacionados con los estudios escogidos tales como:

- Presentación general de la titulación.
- Estructura de la titulación.
- Metodología de desarrollo.
- Sistema de evaluación.
- Consejos prácticos para el estudiante: servicios disponibles, fechas más relevantes en el desarrollo de los estudios.

Estas Jornadas se desarrollarán tanto en modalidad a distancia con teledocencia (*Adobe Connect*) como virtual haciendo uso de la página web y su plataforma virtual de docencia. El Campus Virtual de la UNIA

(plataforma *Moodle*) pone a disposición del estudiante varias herramientas TIC's que facilitarán este proceso. En el apartado de recursos informáticos de esta memoria se detalla con mayor precisión el contenido de esta plataforma: <http://campusvirtual.unia.es>.

Una vez que el alumno está matriculado, la UNIA implementa, además, tres sistemas de ORIENTACIÓN DE DESARROLLO:

1. APOYO Y ORIENTACIÓN EN TEMAS NO ESTRICTAMENTE ACADÉMICOS: Esta labor será desarrollada por el personal de los diferentes servicios de la UNIA. Para ello se dispone de mecanismos de atención a distancia, telefónica y telemática. Dentro de esta última modalidad se ofertará al alumnado mediante la plataforma de campus virtual un enlace denominado INFORMACIÓN Y ORIENTACIÓN. En dicho enlace el alumnado podrá consultar todas aquellas cuestiones que considere oportunas en diferentes categorías: gestión académica, orientación profesional, becas y ayudas, vida estudiantil, etc. Dichas cuestiones serán remitidas a los responsables de cada categoría para su pronta respuesta. La Universidad Internacional de Andalucía recogerá dichas cuestiones para la elaboración de un glosario de preguntas frecuentes que servirá para favorecer el acceso más rápido a la información. De igual modo la UNIA determinará en función del número de consultas y sus temáticas la posibilidad de poner en marcha acciones encaminadas a dar respuesta a las cuestiones con mayor demanda. Acciones tales como cursos complementarios, charlas, etc.

Por otro lado, el campus virtual de la UNIA permite al alumnado hacer uso de dicha plataforma para desarrollar foros, wikis y charlas haciendo uso por ejemplo de su cafetería virtual. Dichos mecanismos permiten el intercambio y comunicación de información, experiencias, problemática similar, creación de grupos y por consiguiente la integración de dicho alumnado.

2. APOYO Y ORIENTACIÓN EN TEMAS ACADÉMICOS: Esta labor será desarrollada por el profesorado de las diferentes titulaciones en las tutorías específicas destinadas para tal finalidad haciendo así mismo uso de la plataforma virtual de docencia.

3. APOYO Y ORIENTACIÓN EN SALIDAS PROFESIONALES: La UNIA desarrollará estrategias específicas que favorezcan el conocimiento del mercado laboral y la inserción profesional de nuestros egresados. Ya sea por iniciativa propia o mediante convenio de colaboración con los Servicios de Empleo de la Junta de Andalucía u otros entes públicos y privados se potenciará:

- Orientación vocacional.
- Orientación laboral.
- Conocimientos del mercado laboral.
- Prácticas.
- Redes de empleo.
- Emprendedores.
- Postgrados: salidas profesionales, perfiles específicos y competencias.

Para ello, trabajamos tanto de forma individual como de forma grupal, dando a los usuarios/as la oportunidad de conocer distintas perspectivas y competencias en la búsqueda de empleo. Principalmente, analizamos las siguientes áreas:

De forma individual:

- Autoconocimiento y posicionamiento en el mercado laboral.
- Definición del perfil ocupacional.
- Orientación vocacional.
- Ayuda y asesoramiento en toma de decisiones para la inserción profesional.
- Información sobre recursos para el empleo: formación, prácticas, etc.
- Búsqueda activa de empleo.

De forma grupal:

- Elaboración de currículum vitae.
- Búsqueda de empleo en Internet.
- Seminario Informativo de prácticas en empresas. Seguimiento de prácticas.
- Habilidades Sociales.
- Entrevistas de selección individuales y grupales.
- Programa de becas en el extranjero.
- Oposiciones.
- Psicotécnicos.
- Red Eures.

De esta forma, se consigue que el usuario tenga un buen conocimiento de su candidatura, de las nuevas tendencias del mercado laboral y que realice una búsqueda de empleo planificada, organizada y eficaz, utilizando las herramientas y recursos de forma adecuada, lo que en definitiva favorece su incorporación laboral.

SERVICIO DE ATENCIÓN AL ALUMNO DE LA UNIVERISDAD DE HUELVA.

La Universidad de Huelva responde a las necesidades, demandas e intereses de su alumnado. Para ello, cuenta con una serie de servicios de atención al estudiante, que tratan de lograr dicha meta. De forma complementaria, el SACU, como Servicio de Atención a la Comunidad Universitaria (<http://www.uhu.es/sacu/>) y el SOIPEA como Servicio de Orientación, Información, Prácticas, Empleo y Autoempleo de la Universidad de Huelva (<http://www.uhu.es/soipea/>), a través de diversas secciones que desglosamos a continuación desarrollan el servicio de orientación y atención a nuestros estudiantes.

Por parte del SACU, se disponen de los servicios que se enumeran seguidamente.

Oficina de Atención a Extranjeros/as. Gracias al apoyo institucional de la Consejería para la Igualdad y Bienestar social de la Junta de Andalucía, mediante la convocatoria de “Subvenciones Institucionales en materia de Servicios Sociales” bajo la modalidad de Emigrantes e Inmigrantes; se hace realidad, desde el año 2006, una atención especializada al crearse la “Oficina de Atención al Extranjero/a” (<http://www.uhu.es/sacu/extranjeros/index.html>). Ubicada en el Servicio de Atención a la Comunidad Universitaria –SACU– dentro del Vicerrectorado de Estudiantes, en esta oficina se comienza a centralizar la creciente demanda de solicitudes de información sobre procesos varios (acceso a instituciones educativas, orientación sobre otras instituciones educativas, sociales, laborales, etc.). Su objetivo fundamental es proporcionar a las personas extranjeras aquella información más relevante en cuanto al acceso y permanencia en las instituciones educativas y sus respectivos niveles; así como cualquier otra información (formativa, educativa, social y legal) que facilite su integración en nuestra sociedad. Esta labor de orientación se realiza mediante una atención personal –en ubicación física del servicio en las instalaciones universitarias establecidas para dicha oficina-, telefónica o mediante correo electrónico. Las acciones que se desarrollan son, entre otras, proporcionar asesoramiento e información sobre legislación, recursos y procedimientos en general, en cuanto a: las vías de acceso a la Universidad, ayudas y/o becas ofertadas para los distintos estudios, homologación de títulos universitarios cursados en países extranjeros, convalidación parcial de estudios no superados en el país de origen (Primaria, Secundaria, Universitarios...), prácticas, etc.

Además, se ha elaborado una “Guía de extranjeros/as”. El contenido de dicha guía se refiere a toda aquella información que, de manera personal, telefónica o vía Internet se ha ido facilitando según demanda, y que básicamente se refiere a las normativas, procesos etc. descritos en los apartados anteriores. Igualmente se incluyen recursos sociales de interés de Huelva y su provincia.

Unidad de Igualdad de Género. La Universidad de Huelva es una institución comprometida con la defensa de la igualdad en todos los niveles y ámbitos, de ahí que cuente con la Unidad para la Igualdad de Género, la Oficina de atención al discapacitado y la Oficina de Atención al Extranjero.

La Unidad para la Igualdad de Género entró en funcionamiento el 17 de junio de 2008, tras ser aprobada en Consejo de Gobierno y siguiendo las directrices del nuevo Plan Estratégico de la Universidad de Huelva, vigente desde el 1 de enero de 2008. Con esta Unidad la Universidad pretende contar con un centro de información y asesoramiento sobre género que persigue promover y visibilizar las actividades y acciones actualmente en curso, y otras futuras. En esta línea, la Unidad tiene como objetivo apoyar la igualdad en el ámbito universitario, en colaboración con instituciones de diverso ámbito (local y provincial en primera instancia, pero también autonómico y nacional). Las actividades que la Unidad para la Igualdad de Género lleva a cabo en la actualidad aparecen recogidas en el nuevo Plan Estratégico 2012-2015 de la Universidad de Huelva, particularmente en:

- Mejorar la presencia de la unidad de igualdad y realizar un estudio que diagnostique la situación en materia de género.
- Elaboración de un plan de igualdad para la comunidad universitaria; puesta en marcha de acciones para favorecer la igualdad.
- Impulsar la paridad de género en los órganos de gestión/dirección de la universidad.
- Impulsar la formación en género.
-

Todo ello puede encontrarse en la página web <http://www.uhu.es/sacu/igualdad/index.html>, junto a otras informaciones sobre Normativas de la Universidad de Huelva, Andalucía, España y Europa que recogen las leyes para la igualdad entre hombres y mujeres, especialmente en materia de educación; agenda y noticias sobre formación y actividades realizadas en la Universidad de Huelva, enlaces con otras Universidades e instituciones, cursos a celebrar en el año académico, así como un buzón de sugerencias donde se recogen todos los comentarios de la comunidad universitaria.

Promover el voluntariado. Con el fin de fomentar las acciones de voluntariado, la UHU cuenta también con la Oficina de Voluntariado: <http://www.uhu.es/sacu/voluntariado/index.html>
Cinco son los ejes que rigen su funcionamiento:

1. El primero se centra en mantener en funcionamiento del Aula de Voluntariado, en la que se registran aquellos alumnos y alumnas interesados en realizar actividades de voluntariado en los distintos ámbitos. Así se cuenta con una base de datos para desarrollar diversas acciones.
2. El segundo eje es la formación, concienciación y difusión de actividades de voluntariado. Así cada año se organizan diversos eventos con formato de jornadas y seminarios permanentes.
3. El tercer eje de trabajo concentra su labor en la elaboración de un mapa del voluntariado para contar con una fuente de datos actualizada en la que consultar las tendencias y direcciones que el movimiento de participación ciudadana tiene articulado en torno al fenómeno del voluntariado en la provincia de Huelva.
4. El cuarto, tratando de ser flexible y abierto al medio, se centra en recoger aquellas iniciativas interesantes que necesiten de apoyo y colaboración.
5. El quinto y último, trata de la atención directa a todas aquellas personas que vienen directamente a las oficinas del SACU, sean miembros de la comunidad universitaria o no, solicitando información acerca del Aula de voluntariado y las funciones que desempeña. Dicha atención puede ser personal, telemática o telefónica.

Servicio de orientación para el empleo. Por su parte, el Servicio de Empleo SOIPEA se concibe como un servicio de empleo integral y personalizado, para ayudar a la población estudiantil y titulados/as en situación de desempleo o de mejora de empleo a afrontar, desde la mejor posición posible, la búsqueda activa de empleo o la creación de su propia empresa. Igualmente, teniendo en cuenta la responsabilidad de esta institución en el entorno que le rodea, nos configuramos como un espacio de interconexión entre el empresariado provincial y nuestros universitarios en la búsqueda de los perfiles profesionales idóneos para una eficaz intermediación en el mercado laboral. El desarrollo e impulso de este servicio, resulta por otra parte trascendental en la línea marcada por el Plan Estratégico Institucional de la Universidad de Huelva, por cuanto su labor está directa e indirectamente relacionada con algunos de los “objetivos estratégicos” marcados en dicho plan:

- Satisfacción de empleadores (privados y públicos), organizaciones sindicales y otros agentes sociales implicados.

- Intensificar el seguimiento del alumnado egresado, su situación laboral y sus necesidades formativas.
- Adecuar la oferta formativa al mercado de trabajo, con nuevos productos educativos y culturales.
- Impulsar el desarrollo local a través de la formación de emprendedores/as y la creación de EBTs.

El Servicio de Empleo de la Universidad de Huelva (SOIPEA) basa sus procedimientos de trabajo en las normas establecidas por el Sistema de Gestión de la Calidad ISO 9001. Igualmente cuenta con la Carta de Servicios publicada en el BOJA número 148 de 27 de julio de 2007. En ella se define “Nuestra Misión”; ésta es ofrecer a estudiantes de últimos cursos y titulados universitarios la posibilidad de incorporarse al mercado de trabajo con mayores posibilidades de éxito a través del desarrollo de diversas acciones coordinadas, planificadas y definidas que integran:

- La información.
- La formación complementaria.
- La orientación para la búsqueda de empleo o autoempleo.
- Las prácticas en empresas.

Así, resulta inexcusable el mantenimiento de un vínculo permanente con el tejido empresarial que permita detectar y dar respuesta a sus necesidades con agilidad, exactitud, eficacia y eficiencia. Para ello, se trabaja comprometidamente buscando la mejor organización de las tareas, las sinergias entre las mismas, mejorando día a día la comunicación interna y tratando de crear el clima de trabajo que permita el cumplimiento de la misión organizativa a través de un buen trabajo en equipo.

Unidad de Orientación Laboral. A través del programa Andalucía Orienta de la Consejería de Empleo de la Junta de Andalucía, asesoramos y ayudamos a la población universitaria a mejorar su empleabilidad y favorecer su inserción laboral, mediante la atención personalizada y partiendo de las necesidades reales y concretas de cada persona dentro de un Itinerario Personal de Inserción (IPI). El conocimiento de los perfiles profesionales de las diferentes titulaciones es nuestro principal valor. Esta unidad tiene por objetivo apoyar a la población activa andaluza para su inserción en el Mercado Laboral, asesorándola en su búsqueda de empleo. En el caso concreto de la UHU, está especialmente dedicada a la población universitaria en general y a titulados y tituladas; ofreciéndole una atención personalizada según las necesidades y características de cada universitario/a en relación a su inserción laboral. Para ello, se consensua un Itinerario Personal de Inserción, entre la técnica de Orientación y el usuario/a del servicio, a través del cual se van realizando las diversas actividades que puedan mejorar su empleabilidad.

De esta forma se ofrecen, entre otras acciones:

- Información y asesoramiento: Salidas profesionales, oposiciones, entrevistas de selección, contratos, autoempleo, etc.
- Seguimiento de prácticas profesionales.
- Técnicas de búsqueda activa de empleo.
- Derivaciones y traslados a otros Servicios de Orientación u otros Programas de Empleo del Servicio Andaluz de Empleo (SAE).
- Formar en estrategias para búsqueda activa de empleo.

La tarea realizada por la Unidad de Orientación Laboral anteriormente citada, está inexcusablemente ligada con su función de formar a los estudiantes en las estrategias adecuadas para una búsqueda activa de empleo. Se trata de una labor continua, que forma parte del día a día y en atención individualizada a los estudiantes. Sin embargo, junto a ello, se articulan sendos seminarios específicos de “búsqueda de empleo” en cada uno de los cuatrimestres del curso académico, y que se enmarcan dentro del catálogo de libre configuración de la Universidad de Huelva.

El servicio de empleo (SOIPEA) de la Universidad de Huelva, se configura como Entidad Colaboradora de la Junta de Andalucía para desarrollar cursos de Formación Profesional Ocupacional (FPO) para nuestros usuarios desempleados/as e inscritos/as como Demandante de Empleo en el Servicio Andaluz de Empleo, suponiendo ésta una de las acciones específicas y permanentes en la mejora de la “empleabilidad universitaria”.

El SOIPEA cuenta, además, con un área de autoempleo que tiene la función de asesorar a toda la comunidad universitaria en su conjunto, en materia de autoempleo y creación de empresas en las diferentes modalidades que marca nuestro ordenamiento jurídico. El área de autoempleo realiza sus funciones de una manera activa, a través de diversas acciones de fomento del mismo entre sus alumnos y titulados principalmente. Se pretende fomentar el espíritu emprendedor entre los universitarios para que se visualice el empleo por cuenta propia como una opción de futuro con la misma naturalidad que por cuenta ajena. Así, y teniendo en cuenta las importantes modificaciones normativas llevadas a cabo en los últimos tiempos, se realizarán acciones concretas encaminadas al fomento de la modalidad del trabajo autónomo.

Entre las acciones de fomento del espíritu emprendedor por parte del área de Autoempleo, cabe destacar el programa “Atrévete a Empezar”, que se desarrolla tanto en el primer como en el segundo cuatrimestre de cada curso.

El alumnado con necesidades específicas de apoyo educativo asociadas a discapacidad merecerá una especial atención en esos procesos. Todas las universidades participantes en el Máster disponen de la correspondiente unidad o servicio encargado de dar información, asesoramiento y apoyo a todas las personas pertenecientes a la comunidad universitaria que tengan algún tipo de **discapacidad** o necesidad específica. Los objetivos que pretende cumplir son los siguientes:

- Facilitar la integración educativa y social de los estudiantes con necesidades educativas especiales.
- Contribuir a crear actitudes y expectativas favorecedoras para la integración de estudiantes con necesidades educativas especiales asociadas a una discapacidad.
- Facilitar, en la medida de lo posible, los recursos materiales, personales y funcionales de apoyo a la integración educativa y social.
- Fomentar una educación más integradora y plural en la que se contempla la diversidad como valores educativos, y que toma como referente el principio de igualdad de oportunidades.

La **Universidad de Huelva**, por ejemplo, dispone de una **Oficina de Atención a Personas con Discapacidad** que pretende hacer real y efectivo, desde un papel activo, los derechos fundamentales de las personas con discapacidad y especialmente el derecho a la igualdad de oportunidades. Derechos reconocidos y recogidos en la Declaración Universal de los Derechos Humanos, la Constitución Europea, la Constitución Española de 1978, el R. D. Legislativo 1/2013, de 29 de noviembre, por el que se aprueba el Texto refundido de la Ley General de derechos de las personas con discapacidad y de su inclusión social y la Ley 13/1982 de 7 de abril, de Integración Social de los Minusválidos. En relación al ámbito en el que se sitúa la Oficina, el de la educación, la Ley Orgánica de Universidades 6/2001 de 21 de diciembre recoge en su artículo 46.2 el derecho a “la igualdad de oportunidades y no discriminación por circunstancias personales o sociales, incluida la discapacidad, en el acceso a la Universidad, ingreso en los centros, permanencia en la Universidad y ejercicio de sus derechos académicos”.

La Universidad de Huelva y concretamente la Oficina de Atención a Personas con Discapacidad, subvencionada por la Consejería para la Igualdad y Bienestar Social, se esfuerza por luchar contra todo tipo de discriminaciones y por potenciar la accesibilidad, la autonomía, la autorrealización, la participación y la igualdad de oportunidades de las personas con discapacidad dentro de la comunidad universitaria. Se pretende adoptar medidas preventivas que impidan la aparición de consecuencias sociales que repercutan de forma negativa, así como trabajar con aquellas que ya hayan emergido. Las acciones que desarrolla para ello son: elaboración de un protocolo de actuación de todas las oficinas a nivel nacional (que se desarrolló en el II Workshop en Alicante; abril, 2008); atención a usuarios ofreciéndoles formación e información complementaria, dando a conocer ayudas y becas específicas para este colectivo; trabajar en colaboración con entidades específicas de atención a la discapacidad

(como FEAP, Adecco o Telesor); elaboración y difusión de la Guía de Acceso para alumnado con necesidades educativas específicas, y resolución de carencias en recursos humanos o materiales. Además, la oficina desarrolla actividades de sensibilización acerca de la problemática relacionada con la discapacidad y atiende directamente en el SACU las necesidades planteadas por personas con discapacidad en la Universidad.

La **Universidad Internacional de Andalucía** adapta sus sistemas de acogida y orientación para atender al alumnado con necesidades específicas de apoyo educativo asociadas a la discapacidad. Para ello se elabora un censo específico de este alumnado en el que se determinen las necesidades de acceso y adaptación que requiere cada caso, las cuales serán transmitidas a los responsables de los diferentes títulos con sus pertinentes orientaciones. Así mismo se mantendrá un contacto frecuente con ellos haciendo uso de plataformas telefónicas y digitales para comprobar que dichas medidas son efectivas y colaboran en el buen desarrollo de su vida académica. En cualquier caso, como parte de la política de apoyo a las personas con discapacidad existen mecanismos de adaptación en la página web, que facilitan el acceso a la información sin limitación alguna por razones de discapacidad.

4.4.- SISTEMAS DE TRANSFERENCIA Y RECONOCIMIENTO DE CRÉDITOS

El Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre, por el que se establece la ordenación de las enseñanzas universitarias oficiales (modificado por Real Decreto 861/2010, de 2 de julio), indica en su artículo 6 que, con objeto de hacer efectiva la movilidad de estudiantes, tanto dentro del territorio nacional como fuera de él, las universidades elaborarán y harán pública su normativa sobre el sistema de reconocimiento y transferencia de créditos, con sujeción a los criterios generales establecidos en el mismo.

Atendiendo a estos criterios generales, podrán ser objeto de reconocimiento de créditos: (a) los créditos cursados en otras enseñanzas superiores oficiales o en enseñanzas universitarias conducentes a la obtención de otros Títulos, y (b) la experiencia laboral y profesional acreditada.

Transferencia. La transferencia de créditos consiste en incluir, en los documentos académicos oficiales del o la estudiante relativos a las enseñanzas en curso, la totalidad de los créditos obtenidos en enseñanzas oficiales cursadas con anterioridad, en la misma u otra universidad, que no hayan conducido a la obtención de un título oficial y que no puedan ser reconocidos en la titulación a la que accede.

Los módulos, las materias o asignaturas transferidas al expediente académico de los nuevos títulos no se tendrán en cuenta para el cálculo de la baremado del expediente.

En los supuestos de simultaneidad de estudios, no serán objeto de transferencia los créditos obtenidos en los mismos, salvo que estos sean objeto de reconocimiento o el estudiante renuncie a dicha simultaneidad, por abandono de dichos estudios.

Reconocimiento. El reconocimiento de créditos supone la aceptación por una universidad de los créditos que, habiendo sido obtenidos en unas enseñanzas oficiales, en la misma u otra universidad, son computados en otras distintas a efectos de la obtención de un título oficial.

Particularmente, en este título de Máster podrán ser objeto de reconocimiento los créditos cursados en otras enseñanzas universitarias conducentes a la obtención de otros títulos a que hace referencia el artículo 34.1 de la Ley Orgánica 6/2001, de 21 de diciembre, de Universidades. Podrán obtener reconocimiento de créditos por materias previamente cursadas en función de la adecuación entre las competencias y conocimientos asociados a las materias superadas y los previstos en el plan de estudios de las enseñanzas del Máster Interuniversitario en Simulación Molecular.

De la misma manera, la experiencia laboral y profesional acreditada podrá ser también reconocida en forma de créditos que computarán a efectos de la obtención de un título oficial, siempre que dicha experiencia esté relacionada con las competencias inherentes a dicho título.

El número de créditos que sean objeto de reconocimiento a partir de experiencia profesional o laboral y de enseñanzas universitarias no oficiales no podrá ser superior, en su conjunto, al **15 por ciento del total**

de créditos que constituyen el plan de estudios. El reconocimiento de estos créditos no incorporará calificación de los mismos por lo que no computarán a efectos de baremado del expediente. En todo caso no podrán ser objeto de reconocimiento los créditos correspondientes al Trabajo de Fin de Máster.

La Resolución de Reconocimiento y Transferencia de créditos reflejará el acuerdo de reconocimiento y transferencia de los créditos objeto de solicitud por parte del alumno. En ella deberán constar los créditos reconocidos y transferidos y, en su caso, las asignaturas o materias que deberán ser cursadas y las que no por considerar adquiridas las competencias de esas asignaturas en los créditos reconocidos, que emitirá la comisión nombrada a tal efecto para el reconocimiento y transferencia de créditos.

Todos los créditos obtenidos por el estudiante en enseñanzas oficiales cursadas en cualquier Universidad, los transferidos, los reconocidos y los superados para la obtención del correspondiente título serán incluidos en su expediente académico y reflejados en el Suplemento Europeo al Título.

Cada universidad establecerá de forma anual los periodos de solicitud para el Reconocimiento y Transferencia de créditos.

Las solicitudes de reconocimiento de créditos serán informadas por la Comisión Académica del Máster y por la Comisión delegada del Consejo de Gobierno con competencias en másteres universitarios de la universidad en la que el alumno haya realizado su matrícula.

La Resolución de Reconocimiento y Transferencia de créditos reflejará el acuerdo de reconocimiento y transferencia de los créditos objeto de solicitud por parte del alumno. En ella deberán constar los créditos reconocidos y transferidos y, en su caso, las asignaturas o materias que deberán ser cursadas y las que no por considerar adquiridas las competencias de esas asignaturas en los créditos reconocidos.

En consecuencia, cada una de las universidades que realizan esta propuesta ha elaborado y publicado la normativa de reconocimiento y transferencia de créditos atendiendo a esta encomienda para sus títulos oficiales. Según el convenio firmado, las solicitudes de reconocimiento y transferencia de créditos serán atendidas de acuerdo con la normativa de cada Universidad, de acuerdo a los reglamentos que se detallan a continuación:

La Universidad Internacional de Andalucía establece su mecanismo de reconocimiento de créditos en los artículos 35 a 37 de su reglamento:

<http://unia.es/images/normativa/general/reglamento-regimen-academico.pdf>

La Universidad de Huelva establece su mecanismo de reconocimiento y transferencia de créditos de estudios de másteres oficiales en su Reglamento aprobado por Consejo de Gobierno de 29 de abril 2011:

http://www.uhu.es/mastersoficiales/documentos/Reconocimiento_Creditos.pdf

Con base a esta normativa, proponemos para el Master Interuniversitario de Simulación Molecular por la Universidad Internacional de Andalucía y Universidad de Huelva, un reconocimiento máximo del 15 por ciento de los créditos en tanto en cuanto la Comisión Académica del Master, reunida al efecto considere que tantos los contenidos como las competencias a desarrollar coincidan, al menos en un 75 por ciento con los cursos con los que se propone el reconocimiento, y que como establece la normativa provengan de títulos oficiales, que en este caso deberán ser Másteres Oficiales y/o títulos propios dentro de la misma rama de conocimiento, es decir Ciencias e Ingeniería y Arquitectura. Eventualmente, también podrá considerarse como perfil de ingreso el de licenciados, graduados o diplomados procedentes de algunas titulaciones de la rama de Ciencias de la salud. El mismo número de créditos máximo se reconocerán por la experiencia laboral en el ámbito de la Simulación Molecular, cuyo perfil coincida con los contenidos del máster.

En cuanto al procedimiento de solicitud queda expuesto en la normativa de ambas universidades.

Reconocimiento de créditos cursados en Enseñanzas Superiores Oficiales No Universitarias	Mínimo	0	Máximo	0
Reconocimiento de créditos cursados en Títulos Propios	Mínimo	0	Máximo	9
Reconocimiento de créditos cursados por acreditación de experiencia laboral y profesional	Mínimo	0	Máximo	9

4.5.- COMPLEMENTOS FORMATIVOS

No se contempla la necesidad de realizar complementos formativos; una vez que el alumno ha sido admitido en el programa se supone el nivel de conocimientos suficiente para el correcto desarrollo de su plan de estudio.

5.- PLANIFICACIÓN DE LAS ENSEÑANZAS

5.1.- DESCRIPCIÓN DEL PLAN DE ESTUDIOS

DISTRIBUCIÓN DEL PLAN DE ESTUDIOS EN CRÉDITOS ECTS SEGÚN TIPOLOGÍA DE MATERIAS

Obligatorias	40 ECTS
Optativas	0 ECTS
Prácticas Externas	0 ECTS
Trabajo Fin de Máster	20 ECTS
CRÉDITOS TOTALES:	60 ECTS

EXPLICACIÓN GENERAL DE LA PLANIFICACIÓN DEL PLAN DE ESTUDIOS

Breve descripción general de la estructura del plan de estudios.

El Título que se presenta para su acreditación tiene como objetivo fundamental formar estudiantes de grado de algunas titulaciones de la Rama de Ciencias, de la Ingeniería y Arquitectura y de la de Ciencias de la Salud para que éstos adquieran conocimientos avanzados en técnicas y metodologías en el ámbito de la simulación molecular clásica.

Como ya se ha mencionado en el apartado 2 de esta memoria (2. Justificación, adecuación de la propuesta y procedimientos), se trata de un título extremadamente especializado cuyos contenidos íntegros permitirán a los alumnos egresados realizar una tesis doctoral en el ámbito de la simulación molecular. Para ello, se han elegido cuidadosamente los contenidos de todos los temas para que el plan de estudios no contenga asignaturas optativas. Esto supone que se imparten todos los contenidos necesarios, incluyendo fundamentos, metodologías y técnicas, para que los estudiantes puedan realizar un Trabajo Fin de Máster o Trabajo de Investigación, que les capacite para iniciar su tesis doctoral en un grupo de investigación. En dicha etapa posterior, los estudiantes habrán adquirido las competencias y habilidades precisas, de acuerdo a las competencias y resultados de aprendizaje descritos en los apartados 3 y 5 de esta memoria, respectivamente, para dirigir su actividad investigadora al campo concreto de la Simulación Molecular que ellos elijan.

Para ello, se definen claramente tres etapas formativas a lo largo del curso que deben recibir los alumnos en este Título. En la primera de ellas, los alumnos reciben una formación íntegra en diferentes disciplinas fundamentales y metodológicas que incluyen conocimientos de Termodinámica, Mecánica Estadística, dominio de técnicas matemáticas y numéricas avanzadas, uso de sistemas operativos basados en el estándar UNIX/Linux y dominio en algoritmia y programación de lenguajes de programación de alto nivel, entre otros. Ello les permitirá afrontar una segunda parte del Título en el que adquirirán las capacidades y habilidades necesarias para conocer, utilizar y desarrollar las técnicas de simulación básicas y avanzadas, disponibles en la literatura dentro del campo de la simulación molecular, así como el dominio en el uso de paquetes comerciales de simulación molecular de libre distribución. Finalmente, una vez superadas estas fases formativas esenciales para el futuro simulador, el estudiante afrontará la realización, bajo la supervisión de su tutor, de un Trabajo Fin de Máster (TFM) en el que utilizará los conocimientos y habilidades adquiridas durante los primeros meses para resolver un trabajo de investigación en el campo de la simulación molecular. Nótese que el trabajo propuesto se llevará a cabo en el seno de alguno de los grupos de investigación a los que está adscrito el director del trabajo, que realiza tareas de investigación de reconocido prestigio internacional (véase el apartado 6. Personal Académico del Título de esta memoria). Las diferentes asignaturas y módulos que conforman el Título se muestran en la tabla incluida en el apartado 5.2 de la presente memoria.

La división en los diferentes módulos que conforman el presente plan de estudios no es casual. Para entenderlo, se muestra en la Figura 1 una representación de los módulos que conforman este Título: (a) un **Módulo de FUNDAMENTOS físicos y químicos**, en el que los estudiantes adquieren las bases

físicas y químicas de la Termodinámica y de la Mecánica Estadística en las que se fundamentan todos los métodos de simulación clásicos, tanto Monte Carlo como Dinámica Molecular; (b) un **Módulo de METODOLOGÍAS computacionales**, en el que los futuros egresados reciben una sólida formación en el uso avanzado de Sistemas Operativos y Programación, así como las técnicas matemáticas y numéricas avanzadas; y finalmente, (c) un **Módulo de TÉCNICAS de Simulación**, en el que los estudiantes adquieren las técnicas y métodos básicos y avanzados de simulación Monte Carlo y Dinámica Molecular, así como formación en el uso de paquetes de software comercial de simulación.

El triángulo representa la formación de los estudiantes al cursar el Título, siendo los vértices del triángulo de la figura los pilares sobre los que se sustenta toda la formación (conocimientos, habilidades y capacidades) que los estudiantes adquieren como paso previo a la realización del Trabajo Fin de Máster (TFM), formación culmen para abordar una formación doctoral en el campo de la Simulación Molecular. Aunque todos los vértices son equivalentes, los situados en la base del triángulo representan la formación en los módulos de **Fundamentos** y **Metodologías Computacionales**, paso previo para conseguir una sólida formación. Una vez adquirida dicha formación, los estudiantes conocen y aprenden a utilizar y desarrollar las diferentes **Técnicas de Simulación**, tanto básicas como avanzadas, ocupando el vértice en la cúspide del triángulo. Todos ellos proporcionan los fundamentos, las metodologías y las técnicas necesarias para llevar a cabo el TFM, último requisito para adquirir la formación íntegra precisa para desarrollar una tesis doctoral en la siguiente etapa formativa del investigador. En este caso, el acrónimo **TFM** se puede utilizar en este Título también como acrónimo de Técnicas de Simulación, **T**, Fundamentos físicos y químicos, **F**, y Metodologías computacionales, **M**, que conforman los conocimientos, habilidades y capacidades que los alumnos deben adquirir para finalizar el Máster con la presentación y defensa del TFM, Trabajo Fin de Máster.

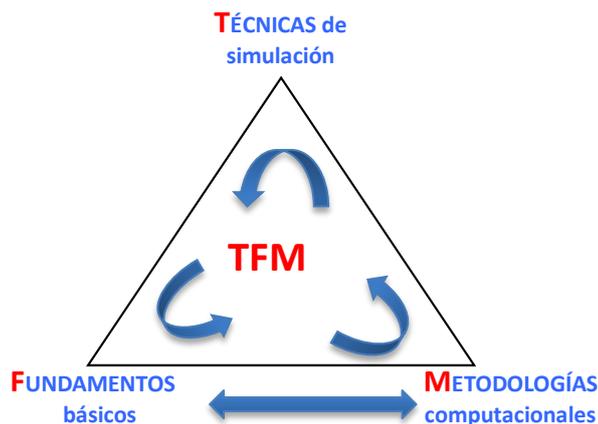


Figura 1. Representación de los módulos del Título.

Breve descripción de la distribución temporal del plan de estudios.

La elección de la posición de los módulos de fundamentos y metodologías no es casual. Constituyen la base sobre la que se construye la formación del estudiante y así éste pueda adquirir con posterioridad las diferentes técnicas de simulación. De un modo similar se conforma la distribución temporal del Título, programada para que el Máster pueda ser completado en 12 meses, de noviembre del primer año a noviembre del siguiente año. La Tabla 5.1 muestra una distribución temporal aproximada de las asignaturas. Las enseñanzas se organizan del siguiente modo:

- **Módulo de Fundamentos básicos** (8 semanas). Se imparte en 8 semanas, desde principios de noviembre a mediados de enero. Durante las 7 primeras se imparte docencia en las siguientes asignaturas, empleando la última para actividades de evaluación:

- Bases físicas y químicas de la Termodinámica.
- Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística.

- **Módulo de Metodologías computacionales** (8 semanas). Se imparte en 8 semanas, desde mediados de enero a mediados de marzo. Durante las 7 primeras se imparte la docencia en las siguientes asignaturas y la última se emplea para actividades de evaluación:

- Sistemas Operativos y Programación.
- Métodos numéricos.

- **Módulo de Técnicas de simulación** (16 semanas): Se imparte en 16 semanas, desde mediados de enero a mediados de julio. Se sigue un esquema similar al empleado durante las primeras 16 semanas, con docencia de las siguientes asignaturas en bloques de 7 semanas, dejando una semana libre para actividades de evaluación:

- Métodos básicos de simulación molecular.
- Dinámica Molecular avanzada.
- Monte Carlo avanzado.
- Paquetes de simulación molecular.

La información completa de todas las 8 asignaturas que componen el presente Título se detalla a modo de tabla en la sección 5.2 del presente apartado, donde se incluyen los descriptores de las mismas, así como en cada una de las fichas individuales de las asignaturas.

PRIMER CUATRIMESTRE (INICIO NOVIEMBRE - MEDIADOS MARZO)																																								
	SEMANA 1				SEMANA 2				SEMANA 3				SEMANA 4				SEMANA 5				SEMANA 6				SEMANA 7				SEMANA 8											
	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V
16-17	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM																																	
17-18	TERM	TERM	TERM	MEC	MEC	TERM	MEC	MEC	TERM	MEC	TERM	MEC	MEC	TERM	MEC	TERM	MEC	MEC	TERM	MEC	TERM	MEC	MEC	TERM	MEC	TERM	MEC	MEC	TERM	MEC	TERM	MEC	MEC	TERM	MEC					
18-30-19-30	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC																																	
19-30-20-30	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC																																	

SEGUNDO CUATRIMESTRE (MEDIADOS MARZO - FIN JUNIO)																																								
	SEMANA 9				SEMANA 10				SEMANA 11				SEMANA 12				SEMANA 13				SEMANA 14				SEMANA 15				SEMANA 16											
	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V
16-17	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO					
17-18	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO					
18-30-19-30	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU					
19-30-20-30	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU					

	SEMANA 1				SEMANA 2				SEMANA 3				SEMANA 4				SEMANA 5				SEMANA 6				SEMANA 7				SEMANA 8											
	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V
16-17	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM																																	
17-18	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM					
18-30-19-30	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD																																	
19-30-20-30	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD																																	

	SEMANA 9				SEMANA 10				SEMANA 11				SEMANA 12				SEMANA 13				SEMANA 14				SEMANA 15				SEMANA 16											
	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V
16-17	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC	MC					
17-18	MC	MC	MC	PAQ	MC	MC	PAQ	MC	MC	MC	MC	PAQ	MC	MC	MC	MC	PAQ	MC	MC	MC	MC	PAQ	MC	MC	MC	MC	PAQ	MC	MC	MC	MC	PAQ	MC	MC	MC					
18-30-19-30	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ					
19-30-20-30	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ					

TERM	SO	SIMU	MD
MEC	NUM	MC	PAQ

Tabla 5.1. Distribución temporal aproximada preliminar de las diferentes asignaturas que componen el Título. Se han denotado como TERM (Bases físicas y químicas de la Termodinámica), MEC (Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística), SO (Sistemas Operativos y Programación), NUM (Métodos numéricos), SIMU (Métodos básicos de simulación molecular), MD (Dinámica Molecular avanzada), MC (Monte Carlo avanzado) y PAQ (Paquetes de simulación molecular).

Coordinación docente del máster.

Para conseguir los objetivos docentes marcados en esta memoria y garantizar que los estudiantes adquieran las competencias previstas en el Título, es necesaria una correcta coordinación entre la Dirección del Máster, la Comisión Académica del mismo, los coordinadores de cada Universidad participante, los coordinadores de módulos y asignaturas, el tutor orientador y el director del Trabajo Fin de Máster. Para ello, se prevén los mecanismos de coordinación que se detallan a continuación:

1. **Comisión Académica del Máster.** Estará constituida por un representante de cada una de las universidades participantes en el Máster, un representante externo y un representante de los alumnos, y presidida por el director del Máster. La Comisión Académica del Máster asumirá la responsabilidad académica del mismo, encargándose de supervisar el desarrollo de los contenidos de materias y asignaturas. Para ello, coordinará el trabajo entre los distintos coordinadores de módulos y los coordinadores de cada asignatura, dentro de los mismos módulos y en diferentes. Del mismo modo, también supervisará el desarrollo de los procesos básicos de la enseñanza a distancia con teledocencia y del uso del Moodle del Campus Virtual de la UNIA. Para ello, recabará los preceptivos informes al Área de Innovación Docente y Digital de la UNIA, para conocer el ritmo de entradas y participación en el Campus Virtual de profesores y alumnos. Además, asumirá los procesos de admisión del alumnado y realizará la adscripción de un Tutor orientador para cada alumno matriculado en el programa.
2. **Coordinador de la Universidad.** Cada universidad designará a un profesor que representará a su Universidad en la Comisión Académica y que actuará como coordinador de los profesores procedentes de la misma y como mediador en los asuntos relacionadas con la aplicación de las normativas correspondientes a su Universidad, atendiendo particularmente a los alumnos matriculados en ella. Por carecer de una plantilla propia de profesores, la representación de la UNIA, a estos efectos, será ejercida por el director del Máster.
3. **Coordinadores de módulo.** Cada módulo dispondrá de un coordinador que supervisará el desarrollo de los temarios de las asignaturas del módulo conforme a los descriptores previstos de cada asignatura, coordinando los contenidos entre los distintos profesores de las asignaturas del mismo módulo para evitar superposiciones o carencias de contenido. Cada coordinador de módulo se reunirá con los responsables de cada asignatura entre tres momentos: (1) Al inicio de cada asignatura (semanas 1 y 9 del cuatrimestre correspondiente); (2) en la semana intermedia de impartición de las asignaturas correspondientes (semanas 4 y 12 del cuatrimestre correspondiente); y (3) al finalizar la docencia correspondiente (semanas 8 y 16 correspondientes). Asimismo, los coordinadores de cada módulo se coordinarán entre sí para que los objetivos de cada uno de ellos se cumplan y de este modo asegurar la correcta impartición de todos los contenidos previstos. Asimismo, los coordinadores de los módulos se reunirán también entre sí en los mismos momentos (semanas 1, 4 y 8 de cada asignatura), para que, no solo la coordinación horizontal, sino también la vertical sea adecuada para la correcta impartición del Título en todo momento.
4. **Coordinadores de asignatura.** Cada asignatura dispondrá de un coordinador que supervisará el desarrollo de los temarios conforme a los descriptores previstos de cada asignatura, actuando como coordinador de los distintos profesores que intervendrán en la asignatura para evitar superposiciones o carencias de contenido. El coordinador se reunirá con los profesores de la asignatura que coordina en tres momentos, de modo similar a como lo hará cada coordinador de módulo con los responsables de las asignaturas: (1) Al inicio de cada asignatura (semanas 1 y 9 del cuatrimestre correspondiente); (2) en la semana intermedia de impartición de las asignaturas correspondientes (semanas 4 y 12 del cuatrimestre correspondiente); y (3) al finalizar la docencia correspondiente (semanas 8 y 16 correspondientes). El coordinador de la asignatura mediará en la resolución de potenciales conflictos entre los estudiantes y el profesorado, y proporcionará información puntual sobre los mecanismos de evaluación de la asignatura.
5. **Tutores orientadores.** Una vez efectuada la admisión y preinscripción de los estudiantes, la Comisión Académica les asignará un Tutor para que asuma funciones básicas de asesoramiento, orientación e información personalizada acerca de la estructura académica del Máster y los contenidos de la oferta formativa.

Procedimientos para la organización de la movilidad de los estudiantes propios y de acogida

Como se ha indicado en los apartados anteriores, el Máster se ha diseñado para que el estudiante pueda cursar las enseñanzas de Máster a distancia haciendo uso de la teledocencia. Se ha adoptado esta opción para paliar la limitación actual de la escasa o nula oferta de ayudas a la movilidad. No obstante, en caso que la situación en lo referente a ayudas a la movilidad mejore, se facilitará al

estudiante su desplazamiento entre las universidades participantes para que curse la especialidad que más le interese, dentro de las distintas opciones que oferta el Máster.

En este ámbito, ambas universidades mantienen una propuesta decidida por reforzar las conexiones y los programas de movilidad y cooperación con otros sistemas universitarios, en especial en el entorno europeo y latinoamericano. Entre los objetivos de los programas de movilidad está el que los estudiantes que se acojan a ellos puedan beneficiarse de la experiencia social y cultural, mejorar su currículum de cara a la incorporación laboral, etc. Además, la participación de los estudiantes en estos programas fortalece la capacidad de comunicación, cooperación, adaptación y comprensión de otras culturas.

La Universidad de Huelva tiene centralizada la gestión de los programas de intercambio y movilidad en el Servicio de Relaciones Internacionales (SRI, <http://www.uhu.es/sric/>). Esta Oficina, dependiente del Vicerrectorado de Relaciones Internacionales, tiene como misión dar respuesta a las necesidades de estudiantes, profesores y PAS en el ámbito de la movilidad nacional e internacional con objeto de coordinar la acción de todos los agentes que participan en los programas de movilidad la Universidad de Huelva aprobó la Normativa de la universidad de Huelva sobre movilidad estudiantil en el marco de programas y convenios nacionales e internacionales mediante el cual se ofrece una información precisa a los estudiantes y personal que participan en los programas, y además se facilita y ordena el control del procedimiento administrativo que mejora toda la gestión de estos programas. Esta normativa se puede consultar en la página: http://www.uhu.es/sric/normativa/normativa_movilidad18-02-03.pdf.

Por otra parte, teniendo en cuenta que la Universidad Internacional de Andalucía se define como una universidad de cooperación internacional, especialmente con países hispanoamericanos, y que la Simulación Molecular está experimentando un gran auge en muchos países de Latinoamérica en los que no existe suficiente formación reglada universitaria sobre estos temas, la adecuación de las acciones de movilidad encaminadas a fomentar la presencia de alumno/as de Latinoamérica, también quedan justificadas.

En este sentido desarrolla un intenso programa de becas y ayudas que facilita la movilidad de alumno/as de muy diversa procedencia, especialmente de países hispanoamericanos (<https://www.unia.es/estudiantes/becas-y-ayudas>) y dado su carácter transversal y con una explícita tendencia a la internacionalización, muestra una amplia gama de acciones para fomentar este carácter entre sus alumno/as (<https://www.unia.es/component/k2/movilidad-internacional>; <https://unia.es/oferta-academica/movilidad-internacional>).

Por lo que, en ambas universidades existen varias acciones de las universidades participantes y convenios de cooperación, además de contar con las convocatorias de movilidad de estudiantes para Másteres oficiales del Ministerio (<http://www.mecd.gob.es/servicios-al-ciudadano-mecd/catalogo/educacion/estudiantes/becas-ayudas/para-estudiar/universidad/master.html>); las becas de estancia (alojamiento y manutención) que ofrece la Universidad Internacional de Andalucía (<https://www.unia.es/estudiantes/becas-y-ayudas/convocatorias-abiertas>) y ayudas de estancia, para alumno/as españoles, latinoamericanos y del EEES que ofrece la Universidad de Huelva (<http://www.uhu.es/mastersoficiales/becas-y-convocatorias>).

Así mismo, en ambas universidades está contemplada la movilidad dentro del programa Erasmus, tanto para alumno/as propios como para recibir alumno/as. En el caso de las Universidades participantes, para completar su formación los/as estudiantes pueden optar por realizar un periodo de sus estudios en una universidad nacional o extranjera a través de programas de movilidad gestionados por el Servicio de Relaciones Internacionales. Para ello, cuentan con las siguientes opciones:

A. Movilidad Internacional: Programa Erasmus +. El programa Erasmus tiene como objetivo atender a las necesidades de enseñanza y aprendizaje de todos los participantes en educación superior, así como a las instituciones que imparten este tipo de formación. Al igual que en la movilidad nacional, el/la estudiante que participa en un programa de movilidad internacional tiene plena garantías de reconocimiento académico siguiendo la normativa de la Universidad de Huelva. En este momento, se

está desarrollando la acción KA103 (movilidad entre países del programa) y la KA107 (movilidad con países asociados).

Básicamente, esta opción consiste en la realización de un período de estudios en una institución de educación superior de otro país europeo. Al final del mismo, la institución de origen del/la estudiante reconocerá académicamente los estudios realizados. Durante este periodo, el/la estudiante estará exento de pagar tasas académicas en la institución de acogida. La Universidad de Huelva tiene firmados convenios con numerosas universidades extranjeras para diversas áreas de conocimiento. El listado más actualizado está disponible a través de la web del Servicio de Relaciones Internacionales <http://www.uhu.es/sric/erasmusplus/index.htm>.

En la actualidad, la Facultad de Ciencias Experimentales coordina un importante número de convenios bilaterales ERASMUS/SÓCRATES en diferentes países para las diferentes titulaciones adscritas al Centro (<http://www.uhu.es/fexp/movilidad.htm>).

B. Movilidad Internacional: Programas y becas con Sudamérica. Teniendo en cuenta que la Universidad Internacional de Andalucía se define como una universidad de cooperación internacional, especialmente con países hispanoamericanos, existen programas y becas específicas para la movilidad entre estos países y universidades andaluzas. He aquí algunos de los más interesantes.

- **Becas de la Asociación Universitaria Iberoamericana de Posgrado (AUIP).** Forman parte de la actuación programática de fomento de los estudios de postgrado y doctorado, incluida en el Plan de Acción de la AUIP (<http://www.auiip.org/es/>). El programa está patrocinado por el Consejo Andaluz de Universidades y la Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía. Este Programa financia becas de movilidad internacional entre universidades andaluzas y latinoamericanas asociadas a la AUIP. La finalidad fundamental de estas becas es la de fomentar todas aquellas propuestas que ayuden a la cooperación universitaria iberoamericana en el postgrado y faciliten el establecimiento real de un “espacio iberoamericano de educación superior” con una importante presencia de las universidades andaluzas. Dentro de las distintas modalidades existen becas para estudiantes interesados en cursar másteres y doctorados en España.

- **Programa PIMA.** Programa marco de Intercambio y Movilidad Académica (PIMA, <http://www.oei.es/historico/pima/>) de la Organización de Estados Iberoamericanos y la Junta de Andalucía, y al cual los estudiantes de Máster pueden acogerse. Este programa es financiado por la Junta de Andalucía, así como por la Organización de Estados Iberoamericanos.

c. Movilidad Internacional: Otros Programas. Por otra parte, ambas universidades tienen convenios de colaboración específicos para el intercambio de estudiantes con diversas universidades de Estados Unidos, Canadá, todos los países iberoamericanos, China, Japón, Rusia, Taiwán, etc.

Para el seguimiento del resultado de las estancias, desde la universidad se realiza un cuestionario de satisfacción, elaborado para tal fin, cuyos destinatarios son, por un lado, los estudiantes, y por otro lado los coordinadores de centro. Con ello se trata de recopilar información que sirva de base para la introducción de cambios y mejoras.

Respecto al sistema de “acogida” de este alumnado al inicio del curso, ha sido expuesto en la sección 4.3 del apartado 4 de esta Memoria.

En cuanto al **sistema de reconocimiento y acumulación de créditos ECTS** será de aplicación el sistema propuesto por la Universidad de Huelva en el Reglamento de reconocimiento y transferencia de créditos de la Universidad de Huelva, aprobado por el Consejo de Gobierno el 29 de Abril de 2011 (http://www.uhu.es/sec.general/Normativa/Texto_Normativa/REGLAMENTO%20RECONOCIMIENTO%20DE%20MOFs%20DEFINITIVO.pdf) y los mecanismos recogidos en los artículos comprendidos entre el 7 y el 10 de la normativa de la Universidad de Huelva sobre la movilidad estudiantil en el marco de programas y convenios nacionales e internacionales, que se puede consultar en:

5.2.- DESCRIPCIÓN DE LOS MÓDULOS, MATERIAS Y ASIGNATURAS

La siguiente tabla contiene un resumen de la organización del plan de estudios, indicando los módulos, las asignaturas, los créditos de cada una de ellas, la tipología y los descriptores. Como se ha comentado previamente en apartados anteriores, el Título contiene únicamente 8 asignaturas, todas ellas obligatorias, sin la presencia de asignaturas optativas. Ello obedece, como se ha comentado previamente, a la naturaleza y objetivos que persigue este Máster.

Módulos	Créditos ECTS	Materias o asignaturas	Créditos ECTS	Tipología (OB, OP)	Descriptores
Fundamentos básicos	10	Bases físicas y químicas de la Termodinámica	5	OB	Primer Principio de la Termodinámica. Segundo Principio de la Termodinámica. Formulaciones alternativas de la Termodinámica. Regla de las fases de Gibbs. Diagramas de fase. Equilibrio de fase de sistemas puros y mezclas.
		Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística	5	OB	Descripción de sistemas físicos utilizando estadística matemática. Relación de la descripción estadística con la Termodinámica clásica. Fuerzas intermoleculares. Descripción de distintos colectivos según las variables termodinámicas de interés. Fluidos clásicos. Sistemas fuera del equilibrio.
Metodologías computacionales	10	Sistemas Operativos y Programación	5	OB	Sistemas operativos Unix/Linux. Herramientas de análisis y presentación de datos. Lenguajes de programación: intérpretes y compiladores. Python y Fortran90/2008.

		Métodos numéricos	5	OB	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
--	--	--------------------------	---	----	---

Módulos	Créditos ECTS	Materias o asignaturas	Créditos ECTS	Tipología (OB, OP)	Descriptor
Técnicas de simulación	20	Métodos básicos de simulación molecular	5	OB	Mecánica clásica. Simulación por ordenador. Programación de alto nivel. Método de Dinámica Molecular. Método de Monte Carlo. Mecánica estadística. Líquidos y sólidos. Campos de fuerza: all-atoms y united-atoms.
		Dinámica Molecular avanzada	5	OB	Mecánica analítica. Dinámica Molecular en distintos colectivos: NVE, NVT, NpT. Simulaciones moleculares de no-equilibrio. Coeficientes de transporte. Simulación de sistemas arrestados. Introducción a la simulación molecular cuántica de sistemas condensados. Simulación multiescala.
		Monte Carlo avanzado	5	OB	Monte Carlo en diferentes colectivos (NVT, NpT, μVVT). Simulación de moléculas rígidas y

					flexibles. Cálculo de energías libres y diagrama de fases. Métodos para sesgar el muestro. Simulación de eventos poco frecuentes.
		Paquetes de simulación molecular	5	OB	Gromacs. Termostatos en Dinámica Molecular. Barostatos en Dinámica Molecular. Sistemas de ficheros de Gromacs. Determinación de propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas con Gromacs. Cálculo de equilibrios de fase con Gromacs.
Trabajo Fin de Máster	20	Trabajo Fin de Máster	20	TFM	TFM.

Breve descripción de las metodologías, actividades y sistemas de evaluación.

Todas las metodologías docentes, actividades docentes y sistemas de evaluación empleados en la impartición del Título se han condensado en las tablas incluidas este apartado (véase más adelante). En esta sección únicamente se describen someramente cómo se prevé integrar todos estos aspectos para que los alumnos adquieran las competencias y habilidades pretendidas en este Máster.

Las actividades docentes, la metodología a emplear y los sistemas de evaluación han sido elegidas cuidadosamente para que puedan encajar a la perfección en un **sistema de docencia a distancia con teledocencia**. Esto es posible gracias al uso de las TICs, principal instrumento al servicio de una enseñanza-aprendizaje innovadora acorde con los principios del modelo europeo de Educación Superior. En particular, el Campus Tecnológico de la UNIA cuenta con un entorno digital, basado en *Moodle*, que permite al profesorado del Título el diseño de contenidos, la puesta en marcha de actividades académicamente dirigidas, la tutorización y la evaluación de los estudiantes de un modo a distancia, pero basado en la teledocencia. En particular, la UNIA cuenta con un servicio de videoconferencias para la creación de aulas virtuales, basado en *Adobe Connect*, que se puede combinar con su Campus Virtual para llevar a cabo la enseñanza-aprendizaje sin que sea preciso desplazamiento de profesores y alumnado a una universidad física determinada. Además de todo ello, y en virtud del convenio firmado por la UNIA, la Universidad de Huelva y el Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), los alumnos dispondrán durante cada curso académico de acceso a los nodos de supercomputación del CESGA, teniendo a su disposición cuentas con los servicios del Centro, *cores* o CPUs para computación, así como memoria para realizar cálculos masivos y almacenamiento para llevar a cabo todas las actividades propuestas en el Máster, incluyendo la realización del Trabajo Fin de Máster. Una descripción detallada de todos los recursos disponibles se puede encontrar en el apartado 7 de esta memoria (7. Recursos, Materiales y Servicios). A continuación, se detallan los recursos fundamentales con los que cuenta este título para que sea posible son los siguientes:

1. Tecnología *Adobe Connect* del Campus Tecnológico de la UNIA para la impartición de docencia remota, que permite disponer de aulas virtuales en las que uno o varios profesores pueden

impartir clases remotas de hasta 50 alumnos, incluyendo recursos como cámaras, pizarras digitales, chat síncrono, etc.

2. Campus Virtual de la UNIA, basado en *Moodle*, que permite ofrecer a los alumnos guías docentes, contenidos y recursos complementarios, actividades individuales y/o colaborativas, sistemas de tutorización y seguimiento en red, que se pueden combinar con la tecnología *Adobe Connect* para conseguir una formación a distancia pero con la potencialidad de la teledocencia.
3. Finalmente, en virtud del Convenio firmado entre la UNIA, la UHU y el CESGA, todos los alumnos matriculados en el Título disponen durante todo el periodo lectivo de cuentas individuales, almacenamiento y tiempo de computación en los nodos de la Infraestructura Singular de Computación gallega. Esto permitirá que, en combinación con los dos recursos anteriores, puedan desarrollar plenamente su formación práctica en las técnicas y metodologías computacionales de la simulación molecular.

Para impartir el Título, por tanto, se hará uso de la tecnología *Adobe Connect* para **impartir clases expositivas con teledocencia**, realizar problemas en las pizarras digitales, realizando talleres de programación, etc., **en las que todas ellas están dirigidas por el profesor y todo ello de un modo síncrono a tiempo real**. Asimismo, las tutorías tanto individuales como colectivas, se realizarán haciendo uso de *Adobe Connect*, lo que garantiza el contacto directo con el alumnado, **de manera síncrona en estas actividades**. Esto permitirá resolver dudas de problemas propuestos y de los programas que los alumnos deben realizar, revisar trabajos tutelados, etc. Todas estas actividades podrán ser complementadas con el uso del Campus Virtual de la UNIA, basado en *Moodle*, permitiendo entregar problemas, trabajos propuestos o realización de programas de computación por escrito, resolver cuestionarios y/o tests de evaluación por parte de los alumnos, llevar a cabo presentaciones orales de trabajos de las asignaturas, incluyendo también la presentación y defensa del Trabajo Fin de Máster del Título.

Partiendo de la estructura expuesta en los párrafos anteriores, se proponen los tres tipos de actividades formativas para los alumnos que se describen a continuación:

1. **Actividades dirigidas (AF1):** Son actividades de enseñanza-aprendizaje a distancia con teledocencia, síncronas en el aula virtual creada mediante *Adobe Connect* desde el Campus Tecnológico de Málaga de la UNIA. Todas ellas son lideradas por el profesor y se desarrollan en grupo. Responden claramente a una programación horaria determinada que requiere la dirección síncrona de un docente. Ejemplo de metodologías que se pueden adscribir a este tipo de actividades son las clases expositivas, la realización de problemas, la realización de programas a través de talleres, etc., en todos los casos, haciendo uso de aulas virtuales creadas mediante *Adobe Connect* para asegurar la conexión síncrona, mediante cámaras y micrófonos, pero a distancia en todo momento.
2. **Actividades supervisadas (AF2):** Son actividades de enseñanza-aprendizaje que, aunque se pueden desarrollar de manera autónoma dentro o fuera del aula, requieren la supervisión y seguimiento, más o menos puntual, de un docente. Las tutorías, tanto individuales como colectivas, y la dirección de trabajos tutelados, son ejemplos de metodologías docentes que encajan perfectamente en este tipo de actividades.
3. **Actividades autónomas (AF3):** Son actividades en las que el estudiante se organiza el tiempo y el esfuerzo de forma autónoma, ya sea individualmente o en grupo. Todas aquellas metodologías que involucren un trabajo y estudio personal del alumno, como lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios y tests preparatorios a través de *Moodle* del Campus Virtual de la UNIA, estudio de códigos de simulación accesibles por alumno, etc., constituyen las principales metodologías docentes que pueden catalogarse como actividades autónomas.

Finalmente, y de un modo similar, se llevarán a cabo una serie de actividades de evaluación que pretenden valorar el grado de consecución de los objetivos y de las competencias por parte del

estudiante. La valoración y calificación de las diferentes asignaturas se establecen dentro de un sistema de evaluación continuada, que culminan en unas pruebas formales al final de un periodo o la realización y/o representación de trabajos tutelados, o incluso la realización y/o presentación de un trabajo fin de curso o Trabajo Fin de Máster. Este tipo de actividad, cuando no requiere un tiempo acotado para la realización de pruebas concretas (exámenes, presentaciones, etc.), puede superponerse con actividades autónomas (trabajos fin de curso, programas computacionales a realizar, etc.) o supervisadas (trabajos fin de curso, estudio personal, etc.).

La relación de todas las actividades formativas, las diferentes metodologías docentes utilizadas y los sistemas de evaluación empleados para comprobar que todos los conocimientos, habilidades y competencias han sido adquiridos adecuadamente por los alumnos en el presente Título se exponen más adelante en forma de tabla.

Garantía de identificación del estudiante en los sistemas de evaluación.

Para la correcta identificación de los estudiantes que cursan el presente Título, a la hora de aplicar rigurosamente los sistemas de evaluación del Título, es preciso contar con una serie de garantías que permitan verificar de un modo seguro y objetivo a todos y cada uno de los estudiantes que accedan al máster. Para ello, se utilizan los procedimientos que se enumeran a continuación:

- 1. Métodos de identificación directa (a distancia con teledocencia).** La comprobación de la identidad del estudiante en este Título sólo es posible de forma directa mediante videoconferencia. El sistema *Adobe Connect*, del que la UNIA dispone de conexiones fiables y garantías de calidad a través de su Campus Tecnológico y que está coordinado y gestionado por el Área de Innovación Docente y Digital de la Universidad coordinadora, es un procedimiento que garantiza la conexión síncrona a distancia, como se ha comentado previamente. Asimismo, permite identificar a los estudiantes que participan en las diferentes actividades formativas, incluyendo las clases expositivas, pasando por la realización de problemas y trabajos a distancia con teledocencia, y para finalmente la exposición de trabajos individuales y/o en grupo, así como para la presentación y defensa del TFM. En particular, se prevé utilizar este método (*Adobe Connect*) en todas aquellas metodologías docentes, actividades formativas y sistemas de evaluación que permitan hacer uso de esta herramienta (véase tabla de las páginas 33 y 34 de esta memoria).
- 2. Métodos de identificación indirecta.** Muchas metodologías docentes empleadas en el Título, un importante número de actividades formativas realizadas por los estudiantes y algunos sistemas de evaluación empleados por los profesores del Título se realizan de modo no presencial, como realización de problemas, pequeños proyectos, trabajos individuales y/o en grupo, etc. Nótese que todas estas actividades también se realizan en otros Títulos con presencialidad real. Sin embargo, y para garantizar la identidad de la persona que envía registros de las actividades formativas en las que no hay contacto directo y visual, se emplearán adicionalmente mecanismos para asegurar este proceso del modo más efectivo. Como se ha comentado previamente, la tecnología de *Adobe Connect* permite asegurar que una determinada actividad realmente ha sido llevada a cabo por el estudiante firmante. Para ello, se realizarán entrevistas individualizadas con los estudiantes a lo largo de la impartición de los cursos para validar los conocimientos adquiridos en las diferentes actividades realizadas. Este procedimiento, en combinación con el anterior, permitirá asegurar de un modo fiable el sistema de identificación de estudiantes que cursan el Título.

Breve descripción de los métodos empleados para la atención del alumnado (tutorías).

Pese a que la atención al alumno (tutorías) constituye en sí misma una metodología docente utilizada en el Título para la correcta asimilación de conocimiento, competencias y habilidades que precisa el alumno para adquirir los objetivos propuestos en el Título, es preciso hacer especial hincapié en ésta y justificar plenamente su adecuado planteamiento dada su importancia en la formación del alumno, así como en la especial forma de impartir docencia en este Título. Como se ha mencionado ya previamente, en este Título se hace uso de un **sistema de docencia a distancia con teledocencia**,

gracias al uso de las TICs de las que dispone el Campus Tecnológico de Málaga de la UNIA. El uso de aulas virtuales posibilita la realización de videoconferencias en tiempo real entre el profesor y sus alumnos. Esto no solo permite una comunicación fluida entre ambos, así como identificar a cada alumno, tanto en el caso de una tutoría individual como en una tutoría colectiva entre profesor y un grupo de alumnos, sino que además hace posible combinar este potente sistema con otras herramientas TIC, como el uso de recursos tan variados y sofisticados como una pizarra digital, compartir pantalla, o chat síncrono, entre otros. Véase para más detalles el apartado 7 de esta memoria (7. Recursos, Materiales y Servicios).

El presente Título contempla la realización, por parte de los alumnos, de una enorme cantidad de talleres de programación en los que éstos deben literalmente realizar programas de computación basados en conceptos de simulación molecular. El sistema de *Adobe Connect* permite, además de resolver las dudas que puedan surgir y tutelar y guiar al alumno a lo largo del desarrollo de cada asignatura, utilizar recursos vitales en estos casos, como una pizarra digital, la herramienta de compartir pantalla para visualizar códigos de computación, o el uso de un chat síncrono que complementa la conversación oral y visual con la verbal. Todo ello permite asegurar con absoluta confianza que este aspecto tan relevante y condicionante a la hora de aprender nuevos conocimientos y metodologías es ideal para la impartición de este Título.

Actividades formativas, metodologías docentes y sistemas de evaluación.

A continuación, se detallan los listados generales de todas las actividades formativas, metodologías docentes y sistemas de evaluación del presente Título.

Código	LISTADO DE ACTIVIDADES FORMATIVAS Denominación
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)

Código	LISTADO DE METODOLOGÍAS DOCENTES Denominación
MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>
MD2	Clases de problemas utilizando <i>Adobe Connect</i>
MD3	Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i>
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)
MD6	Realización de problemas propuestos
MD7	Realización de programas computacionales
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)

Código	LISTADO DE SISTEMAS DE EVALUACIÓN
--------	-----------------------------------

	Denominación
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)
SE2	Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura
SE3	Pruebas escritas de evaluación mediante el uso del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)
SE5	Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura
SE6	Realización, presentación y defensa pública del Trabajo Fin de Master

A continuación, se detallan las fichas de cada una de las asignaturas que componen este Título de Máster.

Asignatura 1	Bases físicas y químicas de la Termodinámica				
Carácter	obligatoria	ECTS	5	Duración	1º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano				
Resultados de aprendizaje.					
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer los conceptos básicos, definiciones y magnitudes más relevantes de la Termodinámica. • Ser capaz de aplicar los dos primeros principios de la Termodinámica. • Conocer y utilizar la ecuación fundamental de la Termodinámica. • Relacionar las diferentes representaciones con las que se puede describir el estado termodinámico de un sistema macroscópico. • Reconocer los diferentes elementos que conforman un diagrama de fases. • Ser capaz de utilizar la regla de las fases de Gibbs, incluyendo en caso de sistemas reactivos. • Conocer la ecuación de van der Waals y relacionarla con el principio de los estados correspondientes. • Identificar las principales funciones de mezclas termodinámicas y el comportamiento de las mezclas ideales. 					
Contenidos.	<p>Tema 1. Conceptos básicos y definiciones. El sistema y el exterior. Tipos de paredes y ligaduras. Paredes adiabáticas. Sistemas simples y sistemas compuestos. Estado termodinámico. Estados de equilibrio. Procesos termodinámicos. Propiedades derivadas.</p> <p>Tema 2. Primer principio de la Termodinámica. Trabajo. Calor. Energía interna. Primer principio de la Termodinámica. Aplicaciones del primer principio. Ecuación del gas ideal.</p> <p>Tema 3. Segundo principio de la Termodinámica. Procesos cuasiestáticos. Procesos reversibles e irreversibles. Máquinas térmicas. El teorema de Clausius. El ciclo de Carnot. Entropía. Ecuación fundamental de la Termodinámica. Ecuación de Euler. Relación de Gibbs-Duhem.</p> <p>Tema 4. El formalismo termodinámico. Postulados de la Termodinámica. Representación energética. Principio extremal de la energía. Representación entrópica. Principio extremal de la entropía. Propiedades extensivas e intensivas. Transformadas de Legendre. Formulaciones de la Termodinámica alternativas. Relaciones de Maxwell. Método de los jacobianos.</p>				

	<p>Tema 5. Criterios de estabilidad. Introducción. El criterio de estabilidad. Sustancias puras. Sistemas binarios. Sistemas ternarios. Estados críticos.</p> <p>Tema 6. Equilibrio de fase y estabilidad. Transiciones de fase de primer orden. Discontinuidad del volumen: regla de la palanca. Discontinuidad de la entropía: calor latente. Estados metaestables. Ecuación de Clausius-Clapeyron. Regla de las fases de Gibbs. Diagramas de fase. Componentes puros. Mezclas binarias.</p> <p>Tema 7. Aplicaciones a sistemas puros y mezclas. Ecuación de van der Waals. Principio de los estados correspondientes. Ecuaciones de estado PVTN para fluidos. Relaciones PVTN para mezclas. Propiedades de mezcla. Mezclas de gases ideales y disoluciones ideales. Reacciones químicas y equilibrio químico. Grado de reacción. Reacciones simultáneas. Calor de reacción. Estabilidad y principio de Le Châtelier. Regla de las fases de Gibbs para sistemas químicos. Reacciones químicas en gases ideales.</p> <p>Bibliografía.</p> <ul style="list-style-type: none"> • H. B. Callen, Termodinámica (Ed. AC, Madrid, 1981). • J. W. Tester y M. Modell, Thermodynamics and Its Applications (Prentice Hall, New Jersey, 1997). 																		
	En el caso de esta asignatura desarrolle competencias propias, se incluirán en este apartado. Ver punto 3 (COMPETENCIAS)																		
Competencias. Para indicirlas, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).																			
• Básicas y generales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10 CG1, CG2, CG3, CG4																		
• Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6																		
• Específicas	CE6, CE7, CE11																		
Actividades formativas.																			
<table border="1"> <thead> <tr> <th data-bbox="256 1312 355 1364">Id</th> <th data-bbox="355 1312 711 1364">Denominación</th> <th data-bbox="711 1312 908 1364">Horas*</th> <th data-bbox="908 1312 1302 1364">Presencialidad %</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="256 1364 355 1525">AF1</td> <td data-bbox="355 1364 711 1525">Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)</td> <td data-bbox="711 1364 908 1525">35h</td> <td data-bbox="908 1364 1302 1525">100%</td> </tr> <tr> <td data-bbox="256 1525 355 1682">AF2</td> <td data-bbox="355 1525 711 1682">Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)</td> <td data-bbox="711 1525 908 1682">30h</td> <td data-bbox="908 1525 1302 1682">50%</td> </tr> <tr> <td data-bbox="256 1682 355 1839">AF3</td> <td data-bbox="355 1682 711 1839">Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)</td> <td data-bbox="711 1682 908 1839">60h</td> <td data-bbox="908 1682 1302 1839">0%</td> </tr> </tbody> </table>				Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %	AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	35h	100%	AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	30h	50%	AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	60h	0%
Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %																
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	35h	100%																
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	30h	50%																
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	60h	0%																
*El número de horas, por crédito, será de 25.																			
Metodologías docentes.																			
Código	Denominación																		

MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>
MD2	Clases de problemas utilizando <i>Adobe Connect</i>
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)
MD6	Realización de problemas propuestos
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)

Sistemas de evaluación.

Los sistemas de evaluación se han seleccionado, **única y exclusivamente**, del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:

Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0%	20%
SE2	Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	20%	40%
SE3	Pruebas escritas de evaluación mediante el uso del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	30%	50%
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	10%	30%

Asignatura 2	Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística				
Carácter	obligatoria	ECTS	5	Duración	1º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano				
Resultados de aprendizaje.					
<ul style="list-style-type: none"> Comprender la descripción estadística de un sistema macroscópico a partir de consideraciones de su estructura microscópica constituida por partículas individuales sometidas a las leyes de la Mecánica Clásica. Entender la compatibilidad de esta descripción estadística con la formulación de la Termodinámica. Comprender la diferencia entre los posibles colectivos estadísticos para describir un sistema macroscópico dependiendo de las variables determinadas. Aplicar una descripción estadística formal a la descripción de la estructura y propiedades de un fluido clásico. 					

	<ul style="list-style-type: none"> • Conocer la descripción que aplica en el marco de la Mecánica Estadística a un sistema fuera del equilibrio. • Derivar de las condiciones de no equilibrio de un fluido la descripción estadística de propiedades de correlación temporal.
<p>Contenidos.</p>	<p>Tema 1. Introducción. Límite de validez de la aproximación clásica. Macro y microestados. Método de Gibbs. Densidad de probabilidad en el espacio de fases. Ecuación de Liouville. Postulados básicos. Equilibrio Estadístico.</p> <p>Tema 2. Fuerzas intermoleculares y modelos de potencial. Introducción a las fuerzas intermoleculares. Interacciones atractivas. Interacciones carga-carga y dipolo-dipolo. Dipolos inducidos. Momentos eléctricos de orden superior. Puentes de hidrógeno. Interacciones repulsivas. Modelos de potencial. Aproximación de interacciones por pares. Modelos sencillos: esfera dura, pozo cuadrado, Lennard-Jones, Mie, Yukawa, etc.</p> <p>Tema 3. Colectivo microcanónico. Volumen de fases. Sistemas normales. Definición estadística de entropía. Entropía y probabilidad. Gas monoatómico ideal. Paradoja de Gibbs. Definición correcta de entropía.</p> <p>Tema 4. Colectivo canónico. Densidad de probabilidad. Fluctuaciones de energía. Equivalencia con el colectivo microcanónico. Función de partición. Conexión con la Termodinámica. Teorema de equipartición de la energía.</p> <p>Tema 5. Colectivo gran canónico. Densidad de probabilidad. Función de partición generalizada. Conexión con la Termodinámica. Fluctuaciones de densidad. Equivalencia con el colectivo canónico.</p> <p>Tema 6. Fluidos clásicos. Promedios en el espacio de fases. Funciones de distribución. Cálculo e propiedades termodinámicas a partir de $g(r)$. Solvatación y equilibrio químico en líquidos. Líquidos moleculares.</p> <p>Tema 7. Sistemas fuera del equilibrio. Sistemas cerca del equilibrio. Funciones de correlación temporal. Difusión. Propiedades de transporte: viscosidad y conductividad térmica. Conductividad eléctrica. Funciones de respuesta. Teorema de fluctuación-Disipación. Movimiento Browniano.</p> <p>Bibliografía.</p> <ul style="list-style-type: none"> • D. Chandler, <i>Introduction to Modern Statistical Mechanics</i>, Oxford University Press (New York, 1987). • J. de la Rubia, J. Brey, <i>Mecánica Estadística. Cuadernos UNED</i> (Madrid, 2001). • K. Huang, <i>Introduction to Statistical Physics</i> (Taylor and Francis, New York, 2001). • R. Kubo, <i>Statistical Mechanics</i>. North-Holland (Amsterdam, 1974). • L. D. Landau, E. M. Lifshitz, <i>Física Estadística. Vol. 5. Curso de física teórica</i> (Reverté. Barcelona, 1988). • D. A. McQuarrie, <i>Statistical Mechanics</i> (Univ. Sci. Books, 2000) • F. W. Sears, G. L. Salinger, <i>Termodinámica, teoría cinética y Mecánica Estadística</i> (Reverté, Barcelona, 1980). • R. C. Tolman, <i>Principles of Statistical Mechanics</i> (Oxford, 1938). • R. Zwanzig, <i>NonEquilibrium Statistical Mechanics</i> (Oxford, 2001)
	<p>En el caso de esta asignatura desarrolle competencias propias, se incluirán en este apartado. Ver punto 3 (COMPETENCIAS)</p>

Competencias. Para indicarlas, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).

• **Básicas y generales** CB6, CB7, CB8, CB9, CB10
CG1, CG2, CG3, CG4

• **Transversales** CT2, CT3, CT4, CT5, CT6

• **Específicas** CE6, CE7, CE11

Actividades formativas.

Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	35h	100%
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	30h	50%
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	60h	0%

*El número de horas, por crédito, será de 25.

Metodologías docentes.

Código	Denominación
MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>
MD2	Clases de problemas utilizando <i>Adobe Connect</i>
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)
MD6	Realización de problemas propuestos
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)

Sistemas de evaluación.

Los sistemas de evaluación se han seleccionado, **única y exclusivamente**, del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:

Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe</i>	0%	20%

	Connect) y Campus Virtual (Moodle) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)		
SE2	Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	20%	40%
SE3	Pruebas escritas de evaluación mediante el uso del Campus Virtual (Moodle)	30%	50%
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (Moodle)	10%	30%

Asignatura 3	Sistemas operativos y programación				
Carácter	obligatoria	ECTS	5	Duración	1º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano				
Resultados de aprendizaje.					
<ul style="list-style-type: none"> Familiarizarse con los elementos básicos de sistemas operativos <i>UNIX/Linux</i>, tanto en entornos gráficos como en la línea de comandos. 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. Conocer las herramientas básicas en Linux para el tratamiento de datos y su presentación gráfica. Conocer los elementos fundamentales de los lenguajes de programación, en particular <i>Fortran90</i> y <i>Python</i>. Ser capaz de construir scripts básicos en <i>Python</i> usando bibliotecas numéricas y gráficas, para resolver problemas científicos y presentar resultados. Ser capaz de reducir un problema físico a su forma algorítmica y programarlo en <i>Fortran90</i>. Familiarizarse con algún entorno gráfico de desarrollo. 					
Contenidos.	<p>Tema 1. Introducción a los sistemas operativos: <i>UNIX/Linux</i>. Funciones de los sistemas operativos. Organización de sistemas de ficheros. Comandos básicos en Linux.</p> <p>Tema 2. Intérpretes de comandos: <i>bash/csh</i>. Funciones del intérprete. Programación de scripts.</p> <p>Tema 3. Utilidades básicas. Editores en línea y visuales. Tuberías (pipes). <i>Grep/awk</i> y otros elementos en el procesado de información.</p> <p>Tema 4. Paquetes básicos de presentación y análisis de resultados en <i>UNIX/Linux</i>. <i>Grace. Gnuplot</i>.</p> <p>Tema 5. Lenguajes de programación I. Intérpretes: <i>Python</i> básico. Estructuras de datos. Bucles y control de flujo. Estructuras de entrada/salida. Herramientas básicas de procesado de cadenas.</p> <p>Tema 6. Bibliotecas científicas en <i>Python</i>. <i>Numpy/Scipy</i>: rutinas de cálculo numérico vectorial/matricial y escalar. <i>sciplo/matplotlib</i>: rutinas representación gráfica.</p> <p>Tema 7. Lenguajes de programación II. Compiladores: <i>Fortran 90- Fortran 2008</i>. Tipos de datos y datos estructurados. Programación estructurada y programación orientada a objetos en <i>Fortran</i>: módulos, funciones,</p>				

	<p>subrutinas. Control de flujo e iteradores. Vectores, matrices, punteros y operaciones matriciales intrínsecas. Entrada/salida y operaciones con cadenas de caracteres. Bibliotecas científicas: <i>Atlas/MathKernel</i>, <i>FFTW</i>.</p> <p>Tema 8. Entornos gráficos de desarrollo. Eclipse.</p> <p>Bibliografía.</p> <ul style="list-style-type: none"> • D. J. Barret, <i>Linux Pocket Guide, 3rd Edition, Essential Commands</i> (O'Reilly Media, 2016). • P. Cobbaur, <i>Linux Fundamentals</i>, http://linux-training.be/linuxfun.pdf • Python Crash Course, Eric Matthes (Nostarch Press, 2015). • E. Bressert, <i>SciPy and NumPy</i> (O'Reilly Media, 2012). • R.J. Hanson y T. Hopkins, <i>Numerical Computing with Modern Fortran</i>, (SIAM, 2013). 																
	En el caso de esta asignatura desarrolle competencias propias, se incluirán en este apartado . Ver punto 3 (COMPETENCIAS)																
Competencias. Para indicarla, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).																	
• Básicas y generales	CB6, CB7, CB9, CB10 CG2																
• Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6																
• Específicas	CE1, CE2, CE3, CE4, CE11																
Actividades formativas.																	
	<table border="1"> <thead> <tr> <th style="text-align: center;">Id</th> <th style="text-align: center;">Denominación</th> <th style="text-align: center;">Horas*</th> <th style="text-align: center;">Presencialidad %</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">AF1</td> <td>Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)</td> <td style="text-align: center;">30h</td> <td style="text-align: center;">100%</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">AF2</td> <td>Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)</td> <td style="text-align: center;">40h</td> <td style="text-align: center;">50%</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">AF3</td> <td>Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)</td> <td style="text-align: center;">55h</td> <td style="text-align: center;">0%</td> </tr> </tbody> </table>	Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %	AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	30h	100%	AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	40h	50%	AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	55h	0%
Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %														
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	30h	100%														
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	40h	50%														
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	55h	0%														
*El número de horas, por crédito, será de 25.																	
Metodologías docentes.																	
	<table border="1"> <thead> <tr> <th style="text-align: center;">Código</th> <th style="text-align: center;">Denominación</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">MD1</td> <td>Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i></td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">MD3</td> <td>Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i></td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">MD4</td> <td>Tutorías individuales y/o colectivas programadas</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">MD5</td> <td>Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">MD7</td> <td>Realización de programas computacionales</td> </tr> </tbody> </table>	Código	Denominación	MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>	MD3	Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i>	MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas	MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)	MD7	Realización de programas computacionales				
Código	Denominación																
MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>																
MD3	Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i>																
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas																
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)																
MD7	Realización de programas computacionales																

MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)		
Sistemas de evaluación.			
Los sistemas de evaluación se han seleccionado, única y exclusivamente , del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:			
Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0%	20%
SE2	Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	20%	40%
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	20%	40%
SE5	Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura	20%	40%
Asignatura 4 Técnicas básicas de simulación molecular			
Carácter	obligatoria	ECTS	5
Duración	1º cuatrimestre		
Lenguas en las que se imparte	Castellano		
Resultados de aprendizaje.			
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer los aspectos históricos y las perspectivas futuras de la simulación molecular. • Conocer las técnicas básicas para la evaluación de interacciones en sistemas volumétricos sencillos. • Conocer las técnicas de integración de ecuaciones diferenciales acopladas por elementos finitos en Dinámica Molecular • Familiarizarse con procedimientos de muestreo aleatorio de distribuciones estadísticas. • Determinar propiedades termodinámicas y dinámicas básicas mediante simulación. • Conocer y comprender las ventajas de los distintos métodos de aceleración de cálculo de energías y fuerzas. • Saber identificar las ventajas y desventajas de las técnicas de simulación molecular. • Alcanzar un hábito de programación modular aplicada a problemas de simulación molecular. 			
Contenidos.	Tema 1. Introducción. Pasado, presente y futuro de las simulaciones (breve resumen de hitos en computación).		

	<p>Tema 2. Revisión de Mecánica básica. Leyes de Newton. Conservación de la energía. Conservación del momento. Reversibilidad. Ejemplos sencillos. Cálculo de fuerzas pares.</p> <p>Tema 3. Simulación Molecular. Condiciones de contorno periódicas. Condición de imagen mínima. Truncamiento de potenciales. Esquemas de truncamiento. Correcciones al truncamiento.</p> <p>Tema 4. Método de Dinámica Molecular. Discretización de las ecuaciones de Newton. Algoritmos de Leapfrog, Verlet y Velocity-Verlet. Estabilidad del algoritmo y monitorización. Termostatación sencilla. Efecto impulsivo del truncamiento.</p> <p>Tema 5. Método de Monte Carlo. Números aleatorios. Muestreo aleatorio. Muestreo de importancia. Método de Metropolis.</p> <p>Tema 6. Cálculo de propiedades. Ecuación de estado. Correlaciones espaciales. Función de autocorrelación. Coeficiente de difusión. Otras propiedades de transporte.</p> <p>Tema 7. Optimización de los cálculos. Lista de vecinos de Verlet. Lista de Celdas. Proyecto: Implementar lista de vecinos en códigos.</p> <p>Tema 8. Aplicaciones de la simulación molecular. Equilibrado. Cálculo de propiedades de ecuación de estado. Cálculo de propiedades espaciales. Cálculo de propiedades dinámicas. Cálculo de diagramas de fase.</p> <p>Tema 9. Campos de fuerza. Introducción. Modelos de todos los átomos (<i>all-atoms</i>), átomos unidos (<i>united-atoms</i>) y <i>coarse-grained</i>. Interacciones no enlazadas (non-bonded). Interacciones enlazadas (bonded). Potenciales de enlace (<i>bonding</i>), de flexión (<i>bending</i>) y de torsión (<i>torsional</i>). Familias de modelos TraPPE. Otros campos de fuerza utilizados en la literatura.</p> <p>Bibliografía.</p> <ul style="list-style-type: none"> • M. Allen and D. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i> (Clarendon Press, Oxford, 1987). • D. Frenkel and B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation</i>, 2nd Edition (Academic Press, San Diego, 2002). • D. C. Rapaport, <i>The art of of molecular dynamics simulations</i>, 2nd Edition (Cambridge University Press, Cambridge, 2011). 		
	<p>En el caso de esta asignatura desarrolle competencias propias, se incluirán en este apartado. Ver punto 3 (COMPETENCIAS)</p>		
<p>Competencias. Para indicarlas, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).</p>			
<ul style="list-style-type: none"> • Básicas y generales 	<p>CB6, CB7, CB9, CB10 CG1, CG2, CG3, CG4</p>		
<ul style="list-style-type: none"> • Transversales 	<p>CT2, CT3, CT4, CT5, CT6</p>		
<ul style="list-style-type: none"> • Específicas 	<p>CE1, CE2, CE3, CE4, CE5, CE6, CE7, CE8, CE10, CE11</p>		
<p>Actividades formativas.</p>			
<p>Id</p>	<p>Denominación</p>	<p>Horas*</p>	<p>Presencialidad %</p>
<p>AF1</p>	<p>Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de</p>	<p>30h</p>	<p>100%</p>

	problemas y talleres de programación)		
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	40h	50%
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	55h	0%

*El número de horas, por crédito, será de 25.

Metodologías docentes.

Código	Denominación
MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>
MD3	Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i>
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)
MD7	Realización de programas computacionales
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)

Sistemas de evaluación.

Los sistemas de evaluación se han seleccionado, **única y exclusivamente**, del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:

Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0%	20%
SE2	Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	20%	40%
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	20%	40%
SE5	Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura	20%	40%

Asignatura 5	Métodos numéricos				
Carácter	obligatoria	ECTS	5	Duración	2º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano				
Resultados de aprendizaje.					
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer los algoritmos básicos necesarios para formular numéricamente problemas físico-matemáticos, incluyendo interpolación, diferenciación, integración, resolución de ecuaciones algebraicas y diferenciales, etc. • Familiarizarse con la bibliografía básica de métodos numéricos. • Ser capaz de formular un problema físico en términos algorítmicos y plantear el método numérico adecuado para su resolución. • Conocer los principios básicos de la programación en paralelo. • Analizar las ventajas/inconvenientes de la paralelización de un algoritmo para la resolución de problema físico determinado. 					
Contenidos.	<p>Tema 1. Métodos básicos de interpolación y diferenciación.</p> <p>Tema 2. Métodos de integración. Métodos de intervalo regular. Métodos gaussianos.</p> <p>Tema 3. Integración multidimensional. Integración regular. Integración estocástica.</p> <p>Tema 4. Resolución de sistemas lineales por métodos iterativos.</p> <p>Tema 5. Resolución de ecuaciones y sistemas no lineales.</p> <p>Tema 6. Ecuaciones diferenciales ordinarias y sistemas de ecuaciones. Elementos de análisis de estabilidad. Métodos numéricos de solución de sistemas de ecuaciones.</p> <p>Tema 7. Ejemplos de modelización de sistemas dinámicos con ecuaciones diferenciales. Dinámica de poblaciones. Dinámica de N-cuerpos.</p> <p>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</p> <p>Tema 9. Elementos de programación en paralelo. Paradigmas de programación: MPI/OpenMP/CUDA. Elementos básicos de MPI</p> <p>Bibliografía.</p> <ul style="list-style-type: none"> • 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 By William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery, (Cambridge Univ. Press, 2007). 				
	En el caso de esta asignatura desarrolle competencias propias, se incluirán en este apartado. Ver punto 3 (COMPETENCIAS)				
Competencias. Para indicirlas, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).					

• Básicas y generales	CB6, CB7, CB9, CB10 CG2		
• Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6		
• Específicas	CE1, CE2, CE3, CE4, C5, CE11		
Actividades formativas.			
Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	30h	100%
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	40h	50%
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	55h	0%
*El número de horas, por crédito, será de 25.			
Metodologías docentes.			
Código	Denominación		
MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>		
MD3	Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i>		
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas		
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)		
MD7	Realización de programas computacionales		
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)		
Sistemas de evaluación.			
Los sistemas de evaluación se han seleccionado, única y exclusivamente , del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:			
Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe</i>	0%	20%

	Connect) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)		
SE2	Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	20%	40%
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	20%	40%
SE5	Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura	20%	40%

Asignatura 6	Dinámica Molecular Avanzada				
Carácter	obligatoria	ECTS	5	Duración	2º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano				
Resultados de aprendizaje.					
<ul style="list-style-type: none"> Entender los fundamentos de la mecánica clásica de sistemas conservativos en su formulación lagrangiana y hamiltoniana. Conocer distintos métodos de resolución numérica de las ecuaciones de evolución de la mecánica clásica. Entender la conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de un sistema molecular. Determinar las propiedades de equilibrio de sistemas moleculares en distintos colectivos. Determinar las propiedades de transporte en sistemas moleculares. Caracterizar computacionalmente el comportamiento de sistemas moleculares fuera del equilibrio. Profundizar en las habilidades de programación necesarias para implementar y ejecutar códigos de Dinámica Molecular. Saber identificar la metodología más apropiada para la obtención de cada propiedad de interés de un sistema molecular. 					
Contenidos.	<p>Tema 1. Introducción. El formalismo de la mecánica analítica. La descripción de Lagrange: el espacio configuracional y las ecuaciones de Euler-Lagrange. La descripción de Hamilton: el espacio de las fases y las ecuaciones de Hamilton. Transformaciones canónicas. La ecuación de Liouville.</p> <p>Tema 2. Esquemas numéricos. Introducción a los métodos de diferencias finitas. El método predictor-corrector. Los métodos simplécticos en sistemas hamiltonianos: el algoritmo de Verlet. Aplicación a sistemas moleculares: dinámica molecular de moléculas rígidas no esféricas y en presencia de ligaduras (algoritmo SHAKE). Dinámica molecular de sistemas duros.</p> <p>Tema 3. Dinámica Molecular en diferentes colectivos. Dinámica molecular a temperatura constante: el colectivo isocinético, el termostato de Andersen y el termostato de Nosé-Hoover. Cadenas de Nosé-Hoover. Dinámica Molecular en el colectivo isoterma-isobaro: el algoritmo de Hoover, de Melchionna-Ciccoti-Holian y de Martyna-Tobias-Klein. El método de Rahman-Parrinello.</p> <p>Tema 4. Tópicos avanzados. Cálculo de coeficientes de transporte. Relaciones de Green-Kubo. Dinámica Molecular de No Equilibrio. Factores de estructura dinámica. Sistemas cuánticos: el algoritmo de Car-Parrinello.</p>				

	<p>Tema 5. Introducción a la simulación multiescala. Introducción. Modelos mecánico cuánticos. Formulación de <i>Path integral</i>. Modelos <i>coarse-grained</i>. Modelos mesoscópicos. Métodos de Lattice-Boltzmann y Dissipative Particle Dynamics. Modelos continuos. Las ecuaciones de Navier-Stokes.</p> <p>Bibliografía</p> <ul style="list-style-type: none"> • M. Allen and D. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i>, Clarendon Press, Oxford, 1987. • D. Frenkel and B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation</i>, 2nd Edition, Academic Press, San Diego, 2002. • D. C. Rapaport, <i>The art of of molecular dynamics simulations</i>, 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2011. • M. Griebel, S. Knapek and G. Zumbusch, <i>Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications</i> • B. D. Todd and P. J. Davis, <i>Nonequilibrium Molecular Dynamics. Theory, algorithms and applications.</i> 																		
	En el caso de esta asignatura desarrolle competencias propias, se incluirán en este apartado . Ver punto 3 (COMPETENCIAS)																		
Competencias. Para indicarla, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).																			
• Básicas y generales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10 CG1, CG2, CG3, CG4																		
• Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6																		
• Específicas	CE1, CE2, CE3, CE4, CE5, CE6, CE7, CE8, CE9, CE10, CE11																		
1Actividades formativas.																			
<table border="1"> <thead> <tr> <th data-bbox="256 1122 357 1182">Id</th> <th data-bbox="357 1122 715 1182">Denominación</th> <th data-bbox="715 1122 908 1182">Horas*</th> <th data-bbox="908 1122 1305 1182">Presencialidad %</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="256 1182 357 1339">AF1</td> <td data-bbox="357 1182 715 1339">Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)</td> <td data-bbox="715 1182 908 1339">30h</td> <td data-bbox="908 1182 1305 1339">100%</td> </tr> <tr> <td data-bbox="256 1339 357 1496">AF2</td> <td data-bbox="357 1339 715 1496">Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)</td> <td data-bbox="715 1339 908 1496">40h</td> <td data-bbox="908 1339 1305 1496">50%</td> </tr> <tr> <td data-bbox="256 1496 357 1653">AF3</td> <td data-bbox="357 1496 715 1653">Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)</td> <td data-bbox="715 1496 908 1653">55h</td> <td data-bbox="908 1496 1305 1653">0%</td> </tr> </tbody> </table>				Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %	AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	30h	100%	AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	40h	50%	AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	55h	0%
Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %																
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	30h	100%																
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	40h	50%																
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	55h	0%																
*El número de horas, por crédito, será de 25.																			
Metodologías docentes.																			
<table border="1"> <thead> <tr> <th data-bbox="256 1787 373 1843">Código</th> <th data-bbox="373 1787 1334 1843">Denominación</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="256 1843 373 1906">MD1</td> <td data-bbox="373 1843 1334 1906">Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i></td> </tr> <tr> <td data-bbox="256 1906 373 1968">MD3</td> <td data-bbox="373 1906 1334 1968">Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i></td> </tr> <tr> <td data-bbox="256 1968 373 2029">MD4</td> <td data-bbox="373 1968 1334 2029">Tutorías individuales y/o colectivas programadas</td> </tr> </tbody> </table>				Código	Denominación	MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>	MD3	Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i>	MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas								
Código	Denominación																		
MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>																		
MD3	Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i>																		
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas																		

MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)
MD7	Realización de programas computacionales
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)

Sistemas de evaluación.

Los sistemas de evaluación se han seleccionado, **única y exclusivamente**, del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:

Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0%	20%
SE2	Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	20%	40%
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	20%	40%
SE5	Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura	20%	40%

Asignatura 7	Monte Carlo avanzado				
Carácter	obligatoria	ECTS	5	Duración	2º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano				
Resultados de aprendizaje.					
<ul style="list-style-type: none"> • Conocer los distintos colectivos termodinámicos, comprender su fundamento teórico y ser capaz de valorar cual es el más adecuado para cada problema. • Conocer y comprender el fundamento de métodos para sesgar y acelerar el muestreo en simulaciones Monte Carlo. • Conocer y comprender los métodos de simulación para el cálculo de diagrama de fases. • Familiarizarse con diversos métodos para muestrear eventos poco frecuentes. • Ser capaz de programar un código Monte Carlo complejo que utilice métodos avanzados. • Ser capaz de analizar datos y extraer la información relevante de una simulación. 					
Contenidos.	<p>Tema 1. Revisión del método de Monte Carlo. Algoritmo Monte Carlo básico Movimientos rotacionales: ángulos de Euler y/o cuaterniones.</p> <p>Tema 2. Monte Carlo en el colectivo isobárico-isotérmico (NpT). Derivación de la probabilidad de aceptación. Implementación de los movimientos de volumen. Utilización de coordenadas de caja. Extensión a cajas anisótropas (Parrinello-Rahman). Definición de la matriz de caja y unidades de caja. Ejemplos de aplicabilidad: ecuaciones de estado de fluidos y sólidos.</p>				

	<p>Tema 3. Monte Carlo en el colectivo gran canónico (μVT). Derivación de la probabilidad de aceptación. Implementación de las inserciones/borrado de partículas. Ejemplos de aplicabilidad: ecuaciones de estado y adsorción en medios confinados. Mezclas: colectivo semi gran canónico, derivación e implementación.</p> <p>Tema 4. Métodos Monte Carlo con muestreos sesgados. Idea general del muestreo sesgado. Muestreo de conformaciones de polímeros: “<i>Configurational bias</i>”. Derivación del método e implementación. Otros métodos de sesgado: sesgo en los movimientos rotacionales, en la inserción de partículas, etc.</p> <p>Tema 5. Cálculo de equilibrio de fases. Introducción: ¿por qué son necesarios métodos especiales? Fenómenos de histéresis en las transiciones de fase. Derivación e implementación del colectivo de Gibbs. Integración termodinámica (en isotermas, isóbaras e isocoras). Cálculo del potencial químico con el método de Widom. Evaluación de energía libre de sólidos: método del cristal de Einstein. Trazado de líneas de coexistencia: método Gibbs-Duhem.</p> <p>Tema 6. Métodos para mejorar el muestreo. Introducción: ejemplos donde Monte Carlo proporciona muestreos poco eficientes. Superficies de energía potencial rugosas. Mejora del muestreo mediante intercambio de simulaciones a diferentes temperaturas (“<i>replica-exchange</i>”). Método Wang-Landau: cálculo de la densidad de estados. Análisis de resultados con el método de <i>histogram-reweighting</i>.</p> <p>Tema 7. Muestreo de eventos poco frecuentes. Introducción: nucleación del sólido como ejemplo. Método “<i>umbrella-sampling</i>”, definición de coordenadas de reacción. Nociones básicas de “<i>Transition Path Sampling</i>”.</p> <p>Bibliografía.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Frenkel y Smit, <i>Understanding molecular simulation</i>. • Newman y Barkema, <i>Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i>. • Tuckerman, <i>Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation</i>. • Curso de David Kofke (http://www.eng.buffalo.edu/~kofke/ce530/). • Curso MolSim (http://www.acmm.nl/molsim/molsim2015/index.html). 		
	En el caso de esta asignatura desarrolle competencias propias, se incluirán en este apartado . Ver punto 3 (COMPETENCIAS)		
Competencias. Para indicarlas, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).			
• Básicas y generales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10 CG1, CG2, CG3, CG4		
• Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6		
• Específicas	CE1, CE2, CE3, CE4, CE5, CE6, CE7, CE8, CE9, CE10, CE11		
Actividades formativas.			
Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de	30h	100%

	problemas y talleres de programación)		
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	40h	50%
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	55h	0%

*El número de horas, por crédito, será de 25.

Metodologías docentes.

Código	Denominación
MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>
MD3	Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i>
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)
MD7	Realización de programas computacionales
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)

Sistemas de evaluación.

Los sistemas de evaluación se han seleccionado, **única y exclusivamente**, del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:

Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0%	20%
SE2	Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	20%	40%
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	20%	40%

SE5	Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura	20%	40%	
Asignatura 8 Paquetes de simulación molecular				
Carácter	obligatoria	ECTS	5	Duración 2º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano			
Resultados de aprendizaje.				
<ul style="list-style-type: none"> Entender los fundamentos de la mecánica clásica de sistemas conservativos en su formulación lagrangiana y hamiltoniana. Conocer distintos métodos de resolución numérica de las ecuaciones de evolución de la mecánica clásica. Entender la conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de un sistema molecular. Determinar las propiedades de equilibrio de sistemas moleculares en distintos colectivos. Determinar las propiedades de transporte en sistemas moleculares. Caracterizar computacionalmente el comportamiento de sistemas moleculares fuera del equilibrio. Profundizar en las habilidades de programación necesarias para implementar y ejecutar códigos de Dinámica Molecular. Saber identificar la metodología más apropiada para la obtención de cada propiedad de interés de un sistema molecular. 				
Contenidos.	<p>Tema 1. Introducción a los paquetes de simulación molecular. Gromacs. LAMMPS, DL_POLY. NAMD. HoomD-Blue.</p> <p>Tema 2. Termostatos y baróstatos en Dinámica Molecular. Formulación lagrangiana de la Dinámica Molecular. Concepto de termostato. Termostato de Berendsen. Termostato de Nosé-Hoover. Termostato de reescalado estocástico. Concepto de barostato. Barostato de Berendsen. Barostato de Parrinello-Rahman.</p> <p>Tema 3. Dinámica Molecular con GROMACS I. Introducción. Manejo de ficheros de entrada y salida. Visualización de resultados. Aspectos prácticos de la Dinámica Molecular en GROMACS. Elección de los parámetros de simulación: paso de tiempo, truncamiento del potencial, elección del campo de fuerzas, dimensiones del sistema simulado y geometría de las condiciones de contorno periódicas.</p> <p>Tema 4. Dinámica Molecular con GROMACS II. Termostatos y barostatos. Análisis de trayectorias. Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales. Cálculo de propiedades dinámicas. Funciones de autocorrelación. Propiedades de transporte. Aplicaciones a sólidos y líquidos.</p> <p>Tema 4. Aplicaciones con GROMACS. Determinación del equilibrio de fases. Métodos de coexistencia directa. Determinación de la presión de vapor de un líquido. Cálculo de la tensión interfacial. Coexistencia directa sólido-líquido.</p> <p>Bibliografía</p> <ul style="list-style-type: none"> M. Allen and D. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i>, Clarendon Press, Oxford, 1987. 			

	<ul style="list-style-type: none"> • D. Frenkel and B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation</i>, 2nd Edition, Academic Press, San Diego, 2002. • J. M. Haile, <i>Molecular Dynamics simulations</i>, John Wiley and sons, 1997. • A. R. Leach, <i>Molecular modelling. Principles and applications</i>, Prentice Hall, 2001. • T. Schlick, <i>Molecular modelling and simulation</i> (Springer, 2006). 																
	COMPETENCIA ESPECÍFICA DE LA ASIGNATURA: Dominar distintos paquetes informáticos disponibles en la literatura especializada y discriminar cuáles son los óptimos para realizar simulaciones moleculares mediante diferentes técnicas.																
Competencias. Para indicirlas, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).																	
• Básicas y generales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10 CG1, CG2, CG3, CG4																
• Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6																
• Específicas	CE1, CE2, CE3, CE6, CE7, CE8, CE9, CE10, CE11																
Actividades formativas.																	
	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Id</th> <th>Denominación</th> <th>Horas*</th> <th>Presencialidad %</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>AF1</td> <td>Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)</td> <td>20h</td> <td>100%</td> </tr> <tr> <td>AF2</td> <td>Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)</td> <td>60h</td> <td>50%</td> </tr> <tr> <td>AF3</td> <td>Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)</td> <td>45h</td> <td>0%</td> </tr> </tbody> </table>	Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %	AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	20h	100%	AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	60h	50%	AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	45h	0%
Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %														
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	20h	100%														
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	60h	50%														
AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	45h	0%														
*El número de horas, por crédito, será de 25.																	
Metodologías docentes.																	
	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Código</th> <th>Denominación</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>MD1</td> <td>Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i></td> </tr> <tr> <td>MD4</td> <td>Tutorías individuales y/o colectivas programadas</td> </tr> <tr> <td>MD5</td> <td>Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)</td> </tr> <tr> <td>MD8</td> <td>Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)</td> </tr> </tbody> </table>	Código	Denominación	MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>	MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas	MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)	MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)						
Código	Denominación																
MD1	Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i>																
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas																
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)																
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)																
Sistemas de evaluación.																	
Los sistemas de evaluación se han seleccionado, única y exclusivamente , del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:																	

Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0%	20%
SE4	Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	20%	40%
SE5	Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura	50%	70%

Asignatura 9	Trabajo Fin de Máster				
Carácter	obligatoria	ECTS	20	Duración	Desde junio de 2019 a noviembre de 2019
Lenguas en las que se imparte	Castellano				
Resultados de aprendizaje.					
<ul style="list-style-type: none"> Diseñar, desarrollar, presentar y defender un trabajo de investigación en simulación molecular. En particular, se espera que el alumno sea capaz de presentar sus resultados por escrito y defenderlo en una exposición pública, incidiendo en los resultados obtenidos y las principales conclusiones del alumno. 					
Contenidos.	TFM.				
Competencia propia	Dominar distintos paquetes informáticos disponibles en la literatura y discriminar cuáles son los óptimos para realizar simulación molecular mediante diferentes técnicas.				
Competencias. Para indicarlas, hacer referencia al código correspondiente. Ver punto 3 (COMPETENCIAS).					
• Básicas y generales	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10 CG1, CG2, CG3, CG4				
• Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6				
• Específicas	CE11				
Actividades formativas.					
Id	Denominación	Horas*	Presencialidad %		
AF1	Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	0h	100%		
AF2	Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	140h	50%		

AF3	Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	360h	0%
-----	--	------	----

***El número de horas, por crédito, será de 25.**

Metodologías docentes.

Código	Denominación
MD4	Tutorías individuales y/o colectivas programadas
MD5	Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.)
MD7	Realización de programas computacionales
MD8	Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorias vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)

Sistemas de evaluación.

Los sistemas de evaluación se han seleccionado, **única y exclusivamente**, del listado facilitado con anterioridad. La ponderación máxima y mínima se asignará conforme al siguiente esquema cada comienzo de curso:

Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE6	Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura	100%	100%

6.- PERSONAL ACADÉMICO

El Máster Interuniversitario en Simulación Molecular constituye un título novedoso dentro del mapa de titulaciones de posgrado a nivel andaluz y nacional existente en la actualidad. A continuación, se exponen las ideas claves de este título, así como los indicadores más relevantes del personal académico que lo compone.

La génesis de este máster surge de la conjunción de dos ideas fundamentales, cuyo desarrollo ha permitido engendrar el presente Título. En primer lugar, se trata de un máster que nace de una estrategia sinérgica entre dos universidades andaluzas, la Universidad de Huelva y la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA), con experiencia sobradamente contrastada en la impartición de másteres interuniversitarios entre las dos instituciones. Por un lado, la Universidad de Huelva es una universidad tradicional de pequeña dimensión que cuenta con profesorado propio y que posee una plantilla docente e investigadora de calidad para la impartición de este máster. Por otro lado, la UNIA es una universidad excepcional por impartir exclusivamente docencia de posgrados y no contar con plantilla docente propia. Esto permite disponer, vía UNIA, de profesorado de reconocido prestigio procedente de diferentes universidades y centros de investigación, tanto en el panorama nacional como internacional. Es precisamente la participación de la UNIA como universidad coordinadora lo que ya de por sí hace de este Máster un ejemplo atípico dentro del marco de la formación de futuros investigadores en el ámbito de la Simulación Molecular.

En segundo lugar, este máster pretende formar a estudiantes de Grado procedentes de las Ramas de Ciencias, Ingeniería y Arquitectura y Ciencias de la Salud para la realización de una tesis doctoral en el ámbito de la Simulación Molecular clásica. Para ello se ha contado con un elenco de profesores, tanto de la Universidad de Huelva como de la UNIA, con una elevada experiencia en este campo de la investigación y la docencia, a nivel de grado y posgrado, y muy especialmente en la formación de estudiantes a nivel doctoral. Estas dos ideas básicas han permitido aglutinar en este título a un conjunto de 27 profesores, todos ellos doctores, con dedicación a tiempo completo, y que en conjunto acreditan aproximadamente 80 sexenios de investigación y 77 quinquenios de docencia. En términos globales, el Máster involucra a un total de 17 grupos de investigación diferentes, tanto españoles como extranjeros, de universidades y centros de investigación de reconocido prestigio. En particular, el máster cuenta con profesores procedentes de las Universidades españolas de Vigo, Cantabria, Sevilla, Huelva, Complutense de Madrid y Pablo de Olavide (Sevilla). Además, cuenta con investigadores adscritos al Instituto de Química-Física Rocasolano de Madrid, perteneciente al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Aglutinar este equipo docente ha sido posible gracias a la Red Española de Simulación Molecular, coordinada desde la Universidad de Huelva, y que aglutina a prácticamente todos los grupos de investigación españoles cuyas líneas de investigación se enmarcan dentro del ámbito de la Simulación Molecular clásica. Véase el apartado 2 de esta memoria ([2. Justificación, adecuación de la propuesta y procedimientos](#)). La Tabla 6.1 muestra el conjunto total de profesores asociados al Título.

Nombre y apellidos	Categoría académica o profesional	Universidad o institución	Departamento	Área de conocimiento
Alejandro Ramírez, José	Catedrático Univ.	Univ. Autónoma Metropolitana Iztapalapa (México)	Química	Química
Benavides Obregón, Ana Laura	Catedrático Univ.	Univ. Guanajuato (México)	Ingeniería Física	Ingeniería Física
Bresme, Fernando	Catedrático Univ.	Imperial College London (UK)	Química	Química-Física
Cuetos Menéndez, Alejandro	Titular Univ.	Univ. Pablo de Olavide	Sistemas Físicos, Químicos y Naturales	Química-Física
de Miguel Agustino, Enrique	Catedrático Univ.	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada
Garrido Acuña, José Matías	Titular Univ.	Univ. de Concepción (Chile)	Ingeniería Química	Ingeniería Química

Gil-Villegas, Alejandro	Catedrático Univ.	Univ. Guanajuato (México)	Ingeniería Física	Ingeniería Física
González Noya, Eva	Científico Titular	CSIC	Instituto de Química Rocasolano	Química-Física
González MacDowell, Luis	Titular Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física
González Salgado, Diego	Titular Univ.	Univ. Vigo	Física Aplicada	Física Aplicada
Gómez Álvarez, Paula	Ayud. Doctor	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada
Jackson, George	Catedrático Univ.	Imperial College London (UK)	Ingeniería Química	Ingeniería Química
Jiménez Blas, Felipe	Catedrático Univ.	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada
Largo Maeso, Julio	Titular Univ.	Univ. Cantabria	Física Aplicada	Física Aplicada
Lomba García, Enrique	Prof. Investigación	CSIC	Instituto de Química Rocasolano	Química-Física
Martínez Piñeiro, Manuel	Titular Univ.	Univ. Vigo	Física Aplicada	Física Aplicada
Mejía Matallana, Andrés	Catedrático Univ.	Univ. de Concepción (Chile)	Ingeniería Química	Ingeniería Química
Meyra, Ariel	Investigador	Consejo Nacional de Investigación Científicas y Técnicas CONICET (Argentina)	Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos	Física
Míguez Díaz, José Manuel	Ayud. Doctor	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada
Moreno-Ventas Bravo, Ignacio	Titular Univ.	UHU	Ciencias de la Tierra	Petrología y Geoquímica
Romero Enrique, José Manuel	Titular Univ.	Univ. Sevilla	Física Atómica, Molecular y Nuclear	Física Teórica
Rozas Cárdenas, Roberto	Titular Univ.	Univ. del Bío-Bío (Chile)	Física	Física
Sanz García, Eduardo	Titular Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física
Solana Quirós, José Ramón	Catedrático Univ.	Univ. Cantabria	Física Aplicada	Física Aplicada
Valeriani, Chantal	Ramón y Cajal	Univ. Complutense	Física Aplicada	Física Aplicada
Vega de las Heras, Carlos	Catedrático Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física
Zarragoicoechea, Guillermo	Catedrático Univ.	Universidad Nacional de La Plata y Consejo Nacional de Investigación Científicas y Técnicas CONICET (Argentina)	Física e Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos	Física

Tabla 6.1. Listado completo de todo el profesorado que participa en el Título. Se indica su categoría, Universidad de procedencia, Departamento de adscripción y área de conocimiento.

Además de contar con profesores de universidades nacionales y del propio CSIC, las diferentes colaboraciones que mantienen los investigadores españoles con otros investigadores de prestigio en el extranjero, por un lado, y la estrecha relación que existe entre la UNIA y el Grupo de Universidades Iberoamericanas La Rábida, que cooperan desde el punto de vista académico, científico, tecnológico y cultural, incluyendo la organización de posgrados regionales con reconocimiento pleno de sus miembros, por otro, han permitido contar con un importante grupo de profesores procedentes de la Universidad Metropolitana-Iztapalapa y la Universidad de Guanajuato, ambas de México, la Universidad de Concepción y la del Bío-Bío, de Chile, la Universidad Nacional de la Plata y el Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, de Argentina. Además, el máster cuenta con la presencia de dos importantes investigadores de reconocido prestigio internacional adscritos al Imperial College London (Reino Unido).

Es importante destacar que NO TODOS LOS PROFESORES QUE APARECEN EN LA TABLA 6.1 IMPARTIRÁN CARGA DOCENTE (CLASES) EN EL MÁSTER. Es decir, únicamente los profesores adscritos a la Universidad de Huelva impartirán docencia mientras el Título esté vigente cada curso académico, como se indica en el Convenio de Colaboración entre la Universidad de Huelva y la Universidad Internacional de Andalucía. Esto significa que los profesores de la Universidad de Huelva asumen 14 ECTS de carga docente (clases), un 35% sobre los créditos de las 8 asignaturas que componen el Título

(57% de ECTS sobre el total del Título, incluyendo los créditos del TFM). Por el contrario, aquellos profesores externos financiados por la UNIA que imparten docencia en un curso académico asumen 26 ECTS de carga docente, un 65% sobre los créditos de las 8 asignaturas del Título (43% de ECTS sobre el total del Título). Finalmente, destacar que se prevé que el profesorado externo financiado por la UNIA pueda ir rotando para que todos ellos, en la medida de lo posible, puedan impartir docencia en alguna de las 8 asignaturas que configuran el Título a lo largo de diferentes cursos académicos, siempre teniendo en cuenta el reparto docente UHU-UNIA mencionado previamente.

Para mayor claridad, la Tabla 6.2 muestra el reparto de profesorado para el primer curso académico en el que implante el Título. Como se puede apreciar, todas las asignaturas de los Módulos de “Fundamentos Físicos y Químicos” y de “Metodologías”, así como la asignatura “Técnicas básicas de Simulación Molecular” cuentan con dos profesores asignados cada una de ellas. El resto de asignaturas, Dinámica Molecular Avanzada, Monte Carlo avanzado y Paquetes de Simulación Molecular, cuentan con tres profesores cada una de ellas. Entendemos que esta distribución evita la fragmentación de las mismas, favoreciendo de este modo al alumnado para que se cree una imagen global de la materia tratada. En cualquier caso, los mecanismos de coordinación establecidos en esta Memoria (véase sección “Coordinación docente del máster” en el apartado 5 Planificación de las enseñanzas) aseguran precisamente esta coherencia unificada de cada una de las asignaturas, así como compenetrada entre las mismas.

Módulos/Itinerarios		Profesorado	Universidad			
MODULO/ASIGNATURA	ECTS	Profesorado	Créditos impartidos	Créditos UHU	Créditos UNIA	Observaciones
BASES FÍSICAS Y QUÍMICAS DE LA TERMODINÁMICA	5	JOSÉ MANUEL MÍGUEZ DÍAZ	3,0	3,0	0	UHU
		JULIO LARGO MAESO	2,0	0	2,0	UNIA
BASES FÍSICAS Y QUÍMICAS DE LA MECÁNICA ESTADÍSTICA	5	FELIPE JIMÉNEZ BLAS	3,0	3,0	0	UHU
		JOSÉ MANUEL ROMERO ENRIQUE	2,0	0	2,0	UNIA
SISTEMAS OPERATIVOS Y PROGRAMACIÓN	5	ENRIQUE LOMBA GARCÍA	2,0	0	2,0	UNIA (CSIC)
		IGNACIO MORENO-VENTAS BRAVO	3,0	3,0	0	UHU
MÉTODOS NUMÉRICOS	5	ENRIQUE LOMBA GARCÍA	2,0	0	2,0	UNIA (CSIC)
		ENRIQUE DE MIGUEL AGUSTINO	3,0	3,0	0	UHU
TÉCNICAS BÁSICAS DE SIMULACIÓN MOLECULAR	5	MANUEL MARTÍNEZ PIÑEIRO	3,0	0	3,0	UNIA (UVIGO)
		PAULA GÓMEZ ÁLVAREZ	2,0	2,0	0	UHU
DINÁMICA MOLECULAR AVANZADA	5	LUIS GONZÁLEZ MACDOWELL	2,0	0	2,0	UNIA(UCM)
		JOSÉ ALEJANDRE	1,5	0	1,5	UNIA (UAMA)
		ANDRÉS MEJÍA MATAALLANA	1,5	0	1,5	UNIA (UCON)
MONTE CARLO AVANZADO	5	EVA GONZÁLEZ NOYA	2,0	0	2,0	UNIA (CSIC)
		ALEJANDRO CUETOS MENÉNDEZ	1,5	0	1,5	UNIA (UPO)
		ARIEL MEYRA	1,5	0	1,5	UNIA (CONICET)
PAQUETES DE SIMULACIÓN MOLECULAR	5	CHANTAL VALERIANI	2,0	0	2,0	UNIA (UCM)
		DIEGO GONZÁLEZ SALGADO	1,5	0	1,5	UNIA (UVIGO)
		JOSÉ MATÍAS GARRIDO ACUÑA	1,5	0	1,5	UNIA (UCON)
RESUMEN						
CRÉDITOS DOCENTES	40			14 (35%)	26 (65%)	
PORCENTAJES TOTAL DEL MÁSTER	100%			57%	43%	

Tabla 6.2. Relación de asignaturas que se imparten en el Título y profesorado asignado para el primer curso académico de implantación del Título. Se indican los créditos ECTS impartidos por cada profesor, así como si éstos son profesores de la Universidad de Huelva o profesorado externo financiado por la Universidad Internacional de Andalucía. En la última columna, en Observaciones, en éste último caso se indica entre paréntesis la institución de origen a la que pertenece, que también aparece en la Tabla 6.1.

El nexo común de todos los docentes que participan en esta propuesta es la investigación en el ámbito de la Simulación Molecular clásica desde prácticamente el inicio de sus carreras investigadoras. Pese al nexo común, las áreas de conocimiento y/o la formación básica del profesorado es muy variada, lo que le confiere un carácter multidisciplinar aún más amplio si cabe. Entre otras, caben destacar las áreas de Física, Química-Física, Ingeniería Química, Química Cuántica, Petrología y Geoquímica y Física Teórica. Todo ello les ha permitido publicar un enorme número de publicaciones en revistas internacionales de reconocido prestigio, presentar resultados de investigación en un sinnúmero de congresos nacionales e internacionales, y quizás más importante, dirigir un elevado número de trabajos fin de grado (TFG), trabajos fin de máster (TFM), trabajos de investigación y, por supuesto, tesis

doctorales. Para dar una idea del orden de magnitud de la producción científica y formativa del equipo docente del Máster, baste señalar que en su conjunto han publicado más de 1500 artículos en revistas Q1 de reconocido prestigio internacional, han presentado otro tanto de contribuciones a congresos y han dirigido más de 180 tesis doctorales. Aunque todo ello son apreciaciones numéricas, conviene incidir en detalle en este aspecto, ya que precisamente la calidad de la investigación desarrollada por el conjunto de profesores adscritos al Título permite garantizar, sin lugar a dudas, una excelente calidad docente, y por tanto, una también excelente formación de nuevos investigadores en el campo de la simulación. La Tabla 6.3 muestra algunos de los indicadores globales científicos más importantes del profesorado.

Ítem	Número
Artículos Q1	1600
Presentaciones congresos	1900
Proyectos I+D+i	400
Tesis dirigidas	180
Sexenios de investigación	80
Quinquenios de docencia	77

Tabla 6.3. Relación aproximada de indicadores de investigación y docentes global del equipo de profesores. En el caso de profesores extranjeros, los sexenios y los quinquenios equivalen a 6 y 5 años de investigación y docencia impartida, respectivamente.

Seguidamente, y para clarificar la experiencia investigadora de todo el profesorado adscrito al Título, se relacionan las líneas de investigación que desarrollan cada uno de ellos.

Líneas de investigación asociadas al Máster.

- **Universidad de Huelva (De Miguel Agustino, Enrique; Gómez Álvarez, Paula; Jiménez Blas, Felipe; Míguez Díaz, José Manuel; Moreno-Ventas Bravo, Ignacio).**
 - Simulación de propiedades interfaciales.
 - Simulación de hidratos clatratos de interés industrial.
 - Teoría de interfaces.
 - Fotometría estelar.
 - Evolución de sistemas estelares cataclísmicos.
 - Simulación Molecular: Monte Carlo y Dinámica Molecular.
 - Metalurgia del Cobre.
 - Petrología y Geoquímica.
 - Determinación de propiedades interfaciales de fluidos complejos puros y mezclas mediante Simulación Molecular.
 - Estudio de equilibrios de fases de fluidos complejos mediante la ecuación de estado SAFT-VR.
 - Predicción del equilibrio de fases y propiedades estructurales de los hidratos de gas.
 - Efecto del enlace de hidrogeno en la estructura y termodinámica de sustancias asociadas.
 - Adsorción y difusión de fluidos en materiales porosos: estudio fundamental y aplicado.

- **Instituto de Química-Física Rocasolano, CSIC (González Noya, Eva; Lomba García, Enrique).**
 - Simulación de ensamblado de coloides anisótropos.
 - Simulación de mezclas de agua alcoholes.
 - Simulación de adsorción en medios confinados.
 - Fluidos confinados y procesos de adsorción.
 - Comportamiento anómalo en agua/alcoholes.
 - Fenómenos de autoensamblaje mediante simulación.
 - Desarrollo de métodos numéricos en GPUs.

- **Universidad Complutense (González MacDowell, Luis; Sanz García, Eduardo; Valeriani, Chantal; Vega de las Heras, Carlos).**
 - Mecánica Estadística.
 - Simulación Molecular.
 - Interfases.
 - Ondas Capilares.
 - Nucleación.
 - Equilibrio de fases mediante Simulación Molecular.
 - Cinética de transiciones de fases.
 - Nucleación.
 - Cristalización.
 - Materia condensada.
 - Materia Activa.
 - Propiedades anómalas del agua.
 - Vidrios coloidales por Simulación Molecular.
 - Equilibrio líquido-sólido.
 - Modelos de simulación de agua.
 - Fluidos inhomogéneos.
 - Agua supercrítica.

- **Universidad de Sevilla (Romero Enrique, José Manuel).**
 - Transiciones de fase y fenómenos críticos.
 - Cristales líquidos.
 - Fenómenos interfaciales y de mojado.
 - Fluidos cargados.
 - Materia condensada blanda.

- **Universidad Pablo de Olavide (Cuetos Menéndez, Alejandro).**
 - Modelización y simulación por ordenador de cristales líquidos.
 - Modelización y simulación por ordenador de líquidos complejos.

- **Universidad de Concepción, Chile (Garrido Acuña, José Matías; Mejía Matallana, Andrés).**
 - Equilibrio de fases crítico y subcrítico.
 - Modelamiento con ecuaciones de estado.
 - Cálculos de energía libre.
 - Propiedades interfaciales de mezclas.
 - Generación y cuantificación de modelos Coarse-Grained.
 - Termodinámica de fases e interfaces.
 - Simulación Molecular de fases e interfaces.
 - Termodinámica experimental de equilibrio de fases.
 - Termodinámica experimental de tensiometría.
 - Ecuaciones de estado.

- **Imperial College London, UK (Bresme, Fernando; Jackson, George).**
 - Simulaciones moleculares de equilibrio y de no equilibrio.
 - Transporte térmico mediante simulación.
 - Soft Matter.
 - Interfases.
 - Conversión de energía.
 - Simulación molecular de cristales líquidos.

- **Universidad del Bío-Bío, Chile (Rozas Cárdenas, Roberto).**
 - Equilibrio e interfaces.
 - Cinética de transformaciones de fases.
 - Transporte en medios desordenados (flujo y percolación).
 - Implementación óptima de algoritmos para GPU.
 - Métodos de simulación (MD, MC y SPH).

- Fases metálicas vítreas.
- **Universidad de Cantabria (Largo Maso, Julio; Solana Quirós, José Ramón).**
 - Teoría y simulación de las propiedades termodinámicas y estructurales de fluidos.
 - Avances en teoría y simulación de fluidos complejos.
 - Modelado de potenciales efectivos de interacción (course-grained).
 - Teoría y simulación de las propiedades termodinámicas y estructurales de fluidos.
- **Universidade de Vigo (González Salgado, Diego; Martínez Piñeiro, Manuel).**
 - Termodinámica de disoluciones acuosas de alcoholes.
 - Termodinámica de disoluciones acuosas de proteínas.
- **Universidad de Guanajuato, México (Benavides Obregón, Ana Laura; Gil-Villegas, Alejandro).**
 - Mecánica Estadística de Equilibrio.
 - Termodinámica molecular de sistemas de interés energético.
 - Simulación computacional de sistemas de materia condensada blanda.
 - Física Estadística de sistemas con entropía no extensiva.
- **Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, México (Alejandre Ramírez, José).**
 - Desarrollo y aplicación de métodos de simulación molecular.
 - Desarrollo de campos de fuerza de solventes orgánicos.
 - Simulación molecular de co-cristales de interés farmacéutico.
- **Universidad Nacional de La Plata, Argentina (Zarragoicoechea, Guillermo).**
 - Potenciales SALR y sistemas auto-organizados.
 - Sistemas confinados.
 - Nanopartículas magnéticas.
- **Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas CONICET, Argentina (Meyra, Ariel).**
 - Fluidos Confinados.
 - Ecosistemas auto-organizados.
 - Nanopartículas magnéticas.
 - Mezclas binarias confinadas.

Al margen de los números y las líneas particulares de investigación, todas ellas en el ámbito de la Simulación Molecular, la Termodinámica y la Mecánica Estadística, nos interesa resaltar algunos aspectos que consideramos sustantivos a la hora de valorar la capacidad de estos recursos humanos para la impartición del Máster. En primer lugar, queremos señalar que muchos de estos profesores están ya familiarizados con los **mecanismos de la enseñanza on-line**, bien a través del uso de plataformas virtuales como *Moodle* para la impartición de las titulaciones de Grado, o bien a través del uso de estas mismas plataformas para el desarrollo de su participación en otros Másteres semipresenciales. Asimismo, algunos de ellos también han utilizado la tecnología *Adobe Connect* o alguna similar para llevar a cabo tutorías o **teledocencia**. No obstante, todo este profesorado está a punto de realizar los cursos de formación del Campus Virtual de la UNIA, que dispone de una potente aula de formación del profesorado de esta universidad. Véase el apartado 7. Recursos materiales y servicios para más detalles. Ello permitirá afrontar con confianza la impartición del Título cuando corresponda.

Además, en lo que se refiere al profesorado de la Universidad de Huelva, ésta apostó por la Enseñanza Virtual como herramienta adecuada para encarar los retos que se planteaban con la Convergencia al nuevo esquema educativo de enseñanza-aprendizaje dentro del nuevo Espacio Europeo de Educación Superior (EEES). Es por ello que está centrada en la formación del profesorado para poder ofrecer una formación de calidad a los/las estudiantes, con el complemento de la teleformación y las posibilidades pedagógicas que ofrecen las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC), para contribuir a la

mejora de los procesos de enseñanza-aprendizaje con la utilización didáctica-pedagógica y comunicativa de las mismas, de forma que se les facilite el trabajo a distancia, tutorías con teledocencia, etc. No obstante, es importante remarcar de nuevo que todo el profesorado cuenta con la ayuda continua del personal de apoyo del Área de Innovación docente y Digital de la UNIA. Los detalles de este aspecto tan importante se describen con mayor profusión en el siguiente epígrafe de este apartado.

El cuadro que se muestra a continuación contiene el profesorado involucrado en el Título, aunque no necesariamente todos imparten carga docente en el Máster durante cada curso académico.

6.1.- PROFESORADO Y OTROS RECURSOS HUMANOS

PROFESORADO DE LA UNIVERSIDAD DE HUELVA (TODOS)

Categoría académica	Número de profesores/as	% Doctor	Experiencia docente (quinquenios reconocidos)	Experiencia investigadora (sexenios reconocidos)	Áreas o ámbitos de conocimiento
Catedrático Universidad	2	100%	9	7	Física
Titular Universidad	1	100%	5	3	Petrología y Geoquímica
Ayudante Doctor	2	100%	1	2	Física
PROFESORADO DE LA UNIVERSIDAD INTERNACIONAL DE ANDALUCÍA (TODOS)					
Catedrático Universidad	9	100%	44	37	Física, Química-Física, Ingeniería Química y Química Cuántica
Titular Universidad	9	100%	17	21	Física, Química-Física, Ingeniería Química, Química, Química Cuántica y Física Teórica
Profesor de Investigación (CSIC)	1	100%	0	5	Química-Física
Científico Titular (CSIC)	1	100%	0	2	Química-Física, Química, Física
Investigador (CONICET)	1	100%	1	1	Química-Física, Química, Física
Ramón y Cajal	1	100%	0	2	Física

La tabla 6.4 que se muestra el profesorado involucrado en el Título y que imparte docencia durante cada curso académico. En ella se indica su procedencia (Universidad de Huelva o Universidad Internacional de Andalucía), categoría, dedicación docente de cada categoría respecto a la carga total del Título (incluyendo el TFM), el porcentaje de doctores docentes y el porcentaje de horas de dedicación.

Universidad	Categoría	Total %	Doctores %	Horas %
Universidad de Huelva	Catedrático de Universidad	23,3	100	23,3
Universidad de Huelva	Titular de Universidad	11,7	100	11,7
Universidad de Huelva	Ayudante Doctor	21,7	100	21,7
Universidad Internacional de Andalucía	Catedrático de Universidad	5	100	3
Universidad Internacional de Andalucía	Titular de Universidad	22,5	100	22,5
Universidad Internacional de Andalucía	Profesor de Investigación (CSIC)	6,7	100	6,7
Universidad Internacional de Andalucía	Científico Titular (CSIC)	3,3	100	3,3
Universidad Internacional de Andalucía	Investigador (CONICET)	2,5	100	2,5
Universidad Internacional de Andalucía	Investigador Ramón y Cajal	3,3	100	3,3

Tabla 6.4. Porcentaje de la carga de créditos y de horas, por categorías de profesorado y universidades. Se incluye también el porcentaje de doctores.

6.2. OTROS RECURSOS HUMANOS (PAS, técnicos de laboratorios, etc.)

Vinculación con la Universidad	Categoría dentro de la institución	Experiencia profesional	Adecuación a los ámbitos de conocimiento vinculados al Título
PAS (UNIA)	Jefe de Servicio de Ordenación Académica	10 años	Labores técnicas y administrativas en el ámbito de la ordenación académica. Gestión de equipo de trabajo
PAS (UNIA)	Jefa de Sección de Alumnos	15 años	Labores técnicas y administrativas relacionadas con los estudiantes
PAS (UNIA)	Puestos base (8)	Media de 10 años	Labores administrativas relacionadas con los estudiantes y en el ámbito de la ordenación académica
PAS (UNIA)	Responsable del área de innovación docente.	15 años	Coordinación de la docencia en el campus virtual
PAS (UNIA)	Responsable técnico de Enseñanza Virtual	15 años	Aplica nuevas metodologías a los mecanismos de enseñanza virtual del espacio virtual de aprendizaje, así como de todo tipo de nuevas herramientas de comunicación y aplicaciones informáticas
PAS (UHU)	Administrador	20 años	Administración y Gestión de la Secretaría
PAS (UHU)	Puestos base (4)	Media de 10 años	Labores administrativas relacionadas con los estudiantes y en el ámbito de la ordenación académica
PAS (UHU)	Técnico de campo y laboratorio	10 años	Especialista en procesamiento de material de campo y en instrumental de análisis en laboratorio.
PAS (UHU)	Técnico de campo y laboratorio	6 años	Especialista en procesamiento de material de campo y en instrumental de análisis en laboratorio.
PAS (UHU)	Técnico de laboratorio	14 años	Especialista en instrumental de análisis en laboratorio.
PAS (UHU)	Jefe de Negociado	20 años	Especialista en tareas administrativas y de gestión
PAS (UHU)	Jefe de Negociado	20 años	Especialista en tareas administrativas y de gestión
PAS (UHU)	Jefe de Unidad	20 años	Especialista en tareas administrativas y de gestión
PAS (UHU)	Puesto base	20 años	Especialista en tareas administrativas y de gestión

La oferta docente no sería posible sin el personal de apoyo que atenderán las labores administrativas y de gestión imprescindibles para el correcto desarrollo de las actividades docentes.

Tanto la Facultad de Ciencias Experimentales de la UHU como El Campus Santa María de La Rábida de la UNIA cuenta con Personal de Administración y Servicios (PAS) con dedicación exclusiva cuyas funciones son las tareas administrativas y de gestión de las infraestructuras que se derivan de la actividad académica y que son imprescindibles para el correcto desarrollo de la labor docente. En el cuadro anterior aparecen especificados estos recursos humanos, de carácter administrativo, incluyendo su categoría administrativa o laboral, dependiendo del caso, así como el número de ellos.

Por otro lado, el título cuenta con personal de apoyo del Área de Innovación docente y Digital de la UNIA, con dedicación a tiempo completo para las sesiones virtuales:

- **María Sánchez González, personal de apoyo de la UNIA en el Campus Virtual.** Coordinación docente enseñanza virtual. Área de Innovación Docente y Digital de la UNIA. Desde diciembre de 2007 desempeña labores de coordinación del profesorado en programas de enseñanza virtual y en proyectos de innovación docente dentro del área de innovación docente y digital de la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA). Perfil: Doctora en Periodismo por la Universidad de Málaga e investigadora en temas de nuevas tecnologías y comunicación en red. El currículum completo puede consultarse en:

http://www.cibermarikiya.com/cv_maria_sanchez_enero10_sd.pdf.

- **Ildefonso Martínez Marchena, responsable técnico de la enseñanza virtual de la UNIA.** Área de Innovación Docente y Digital de la UNIA. Ingeniero informático que permite que en la UNIA se puedan aplicar nuevas metodologías a los mecanismos de enseñanza virtual del espacio virtual de aprendizaje, así como de todo tipo de nuevas herramientas de comunicación y aplicaciones informáticas. Es el responsable de la UNIA en el Campus Andaluz Virtual del proyecto Universidad Digital.

Enseñanza virtual La Universidad de Huelva apuesta por la enseñanza virtual y semipresencial como instrumento para afrontar los retos que plantea el nuevo modelo educativo de enseñanza-aprendizaje, proporcionando a toda la comunidad universitaria recursos de teleformación para la mejora de la calidad de la enseñanza y la comunicación entre profesores/as y alumnos/as. En la actualidad, el Vicerrectorado de Tecnologías e Infraestructuras gestiona el Campus Virtual de la UHU en una plataforma que utiliza la aplicación de software libre Moodle. Moodle es un software diseñado para ayudar a los profesores, investigadores o personal de administración y servicios a crear entornos de aprendizaje virtuales como apoyo a la docencia o a la formación presencial. A la misma vez que proporciona un conjunto poderoso de herramientas centradas en el estudiante y ambientes de aprendizaje colaborativo, que facilitan, tanto a la enseñanza como al aprendizaje. La Facultad de Ciencias Experimentales hace un uso mayoritario de las herramientas de docencia semipresencial a través del Campus Virtual. Dicha plataforma es utilizada por la casi totalidad de las asignaturas de las titulaciones de la Facultad consiguiendo una notable mejora en el proceso de enseñanza-aprendizaje.

Al igual que la Universidad Internacional de Andalucía, la Universidad de Huelva dispone de un Servicio de Videoconferencias a disposición de todas sus titulaciones. El Servicio dispone de 3 salas físicas, ubicadas en el Pabellón Juan Agustín de Mora Negro y Garrocho (Campus El Carmen), dotadas tecnológicamente para acoger eventos multimedia como videoconferencias, ponencias, reuniones, clases o exámenes, con una capacidad máxima de entre 10 y 25 personas según la sala. Además, dispone también de la posibilidad de realizar la videoconferencia sin necesidad de trasladarse a través de la tecnología *Adobe Connect*. También se dispone de 3 platós para la grabación de audiovisuales con fondos en chroma y de licencias del siguiente software para videoconferencias y grabación y edición de video y audio: *Adobe Connect*, *Adobe Premiere Pro*, *AccessGrid* y *Polycom*. Así mismo, la Universidad de Huelva dispone una plataforma de vídeo on-line (<http://video.uhu.es>) que permite crear, procesar, almacenar y transmitir los vídeos que previamente han sido administrados por la propia plataforma. Además de tener características similares a otros portales de vídeo como *Youtube* o *Vimeo*, <http://video.uhu.es> proporciona tanto a profesores como alumnos un lugar de participación para la creación y difusión de archivos multimedia (audio y/o vídeo). Está integrada con la plataforma *eLearning* de la Universidad de Huelva, Moodle, por lo que fácilmente cualquier docente puede acceder a los vídeos propios, almacenados en el portal.

Como complemento al personal de apoyo del Área de Innovación docente y Digital de la UNIA, la Universidad de Huelva cuenta con el Servicio de Enseñanza Virtual, como se ha mencionado anteriormente. Dicho servicio fue creado con la intención de dar apoyo a la docencia universitaria tradicional y facilitar la integración y el uso de las nuevas tecnologías en las clases presenciales. Sin embargo, poco a poco fue ganando importancia y aceptación entre la comunidad universitaria, lo que impulsó la creación de nuevos espacios que permitieran cubrir las distintas necesidades que comenzaban a surgir. En la actualidad, el Servicio a través de la plataforma e-Learning permite complementar la educación que los alumnos/as reciben en las aulas presenciales y dotar al profesorado, estudiantes y personal de administración y servicios de herramientas que amplían y

mejoran los procesos de enseñanza-aprendizaje. En resumen, nuestro Servicio proporciona un espacio de teleformación para la comunidad universitaria, cuenta con una elevada oferta académica y da soporte a un gran número de usuarios. El Servicio de Enseñanza Virtual, en colaboración con el [Servicio de Informática y Comunicaciones](#), mantiene el equipamiento técnico necesario y los servidores telemáticos que soportan las herramientas virtuales.

En el caso concreto del presente Título, el [Servicio de Enseñanza Virtual](#) de la UHU supone un grupo de trabajo que apoyará, cuando sea preciso, al Área de Innovación docente y Digital de la UNIA, en tareas de gestión y mantenimiento técnico de las salas de videoconferencias, tanto físicas como virtuales de las que dispone la Universidad de Huelva. En concreto, el Servicio cuenta con el siguiente personal: una directora y un subdirector del Servicio, una administrativa y gestora, y cinco técnicos dedicados todos ellos a dar soporte a los miembros de la comunidad universitaria si precisan atención técnica de los servicios ofrecidos por el Servicio.

6.3.- Mecanismos para asegurar la igualdad entre hombres y mujeres y la no discriminación de personas con discapacidad.

La Universidad Internacional de Andalucía y la Universidad de Huelva cumplen rigurosamente el marco normativo europeo y español sobre igualdad y no discriminación en materia de contratación, acceso al empleo público y provisión de puestos de trabajo, y en particular de lo previsto en:

- La Ley Orgánica de Universidades 6/2001 de 21 de diciembre, en su redacción modificada por la ley orgánica 4/2007 de 12 de abril, que contempla específicamente estos aspectos en:
- El artículo 48.3 respecto al régimen de contratación del profesorado, que debe realizarse conforme a los principios de igualdad, mérito y capacidad.
- Disposición adicional 24ª en relación con los principios de igualdad y la no discriminación a las personas con discapacidad.
- El Estatuto Básico del Empleado Público.
- La Ley Orgánica 3/2007 de 23 de marzo, para la igualdad de mujeres y hombres
- R. D. Legislativo 1/2013, de 29 de noviembre, por el que se aprueba el Texto refundido de la Ley General de derechos de las personas con discapacidad y de su inclusión social.

A tal efecto y como ya se ha comentado anteriormente en esta memoria (véase el apartado [4. Acceso y admisión de estudiantes](#)), las Universidades cuentan con un servicio de atención y apoyo a las personas con discapacidad, así como las unidades de igualdad de género a la que le corresponde la elaboración de propuestas y el desarrollo de proyectos dirigidos al aseguramiento de la igualdad y a la mejora de la calidad de vida de todos los colectivos implicados en la UNIA y UHU.

7.- RECURSOS MATERIALES Y SERVICIOS

7.1.- JUSTIFICACIÓN DE QUE LOS MEDIOS MATERIALES DISPONIBLES SON ADECUADOS

El Máster Interuniversitario en Simulación Molecular constituye, como se ha mencionado a lo largo de esta memoria, un Título singular en el panorama autonómico y nacional por dos razones fundamentales. Por un lado, su contenido formativo es singular, ya que se trata del único Máster en España dedicado única y exclusivamente a la formación en Simulación Molecular clásica. Su objetivo es formar estudiantes que puedan afrontar la realización de una tesis doctoral en este ámbito de la investigación, por lo que todas las actividades formativas han sido cuidadosamente planificadas para alcanzar esta meta. Por otro lado, la forma de impartición también nos parece novedosa en un Máster de estas características: **a distancia con teledocencia**. Esta modalidad docente, dadas las características de los contenidos a impartir, invita a utilizar este tipo de metodologías TIC de manera casi obligada para conseguir los objetivos propuestos. Precisamente la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA) es un referente andaluz y nacional en este tipo de docencia. En este Título se hace uso de recursos disponibles desde hace años en casi todas las universidades y centros de investigación de nuestro país y de nuestro entorno para formar potenciales estudiantes de doctorado (mediante la realización de este Máster) sin necesidad de desplazarse de sus lugares de origen. Asimismo, los docentes que imparten el Título tampoco tendrán la necesidad de desplazamientos, lo que sin lugar a dudas redundará en un abaratamiento de costes innecesarios de un lado y otro. En este apartado se justifica que la Universidad de Huelva, la Universidad Internacional de Andalucía (UNIA) y el Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), gracias al convenio firmado por las tres instituciones, disponen de los recursos materiales y servicios necesarios para llevar a cabo todas las actividades formativas propuestas, asegurando de este modo la impartición del Título con sobradas garantías ([Convenio UHU + UNIA + CESGA](#)).

Las universidades participantes poseen la suficiente dotación material para el correcto desarrollo de diferentes planes de estudios, como lo demuestran la importante cantidad de Grados, Másteres y Programas de Doctorado Oficiales activos en las dos instituciones. Ello incluye un gran número de instalaciones, que se detallan únicamente de manera somera. Dado que todas las actividades presenciales, aunque a distancia, se llevarán a cabo a través de **teledocencia** haciendo uso de la tecnología *Adobe Connect*, prácticamente ninguno de estos recursos no se utilizará en este Título. Pese a ello, se citan a continuación únicamente los más importantes. Por un lado, la UNIA, en el Campus Santa María de La Rábida ubicado en el término municipal de Palos de la Frontera (Huelva) de la Universidad Internacional de Andalucía, cuenta con un importante número de instalaciones para la impartición de sesiones presenciales, como aularios, residencia universitaria, biblioteca y un importante servicio audiovisual. Por otro lado, la Universidad de Huelva también cuenta con un gran número de recursos materiales e infraestructura para el desarrollo de las sesiones presenciales, tales como seminarios con medios audiovisuales, salas de conferencias con medios audiovisuales, aulas de grados, de informática, salas de lecturas, etc.

Sin embargo, la infraestructura más importante puesta a disposición de los docentes de este Título se resumen en los siguientes recursos materiales y servicios que se enumeran a continuación:

1. Tecnología *Adobe Connect* para la impartición de docencia remota, mantenida por el Área de Innovación Docente y Digital de la UNIA (Campus Tecnológico de Málaga).
2. Entorno Virtual de Aprendizaje de la UNIA basado en Moodle (Campus Tecnológico de Málaga).
3. Infraestructura de computación de alto rendimiento del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA).
4. Biblioteca de la Universidad de Huelva.
5. Biblioteca de Técnicas Avanzadas de Simulación de los grupos de investigación del cuerpo docente de profesores del Máster.

A continuación, se detallan pormenorizadamente los recursos materiales y servicios más importantes de toda la infraestructura disponible para la impartición de este Máster.

1. Tecnología Adobe Connect para la impartición de docencia remota, mantenida por el Servicio de Innovación Docente y Digital de la UNIA (Campus Tecnológico de Málaga). La base sobre la que se fundamenta la impartición de **docencia a distancia con teledocencia** se basa en el uso de aulas virtuales síncronas construidas sobre el sistema de videoconferencia *Adobe Connect*. Esta tecnología permite impartir clase a un número ilimitado de alumnos, conectados remotamente mediante el acceso a través de una URL proporcionada por el Área de Innovación Docente y Digital de la UNIA, permitiendo desarrollar prácticamente todas las actividades propias de una docencia presencial clásica. En particular, *Adobe Connect* dispone de los siguientes recursos por defecto y que están contemplados en el **Campus Tecnológico de la UNIA**. Es importante mencionar que cada uno de estos recursos se pueden utilizar simultáneamente, al mismo tiempo que el profesor imparte su clase:

- **Videoconferencia del profesor.** El profesor explica los diferentes contenidos y es visualizado por todos los alumnos al mismo tiempo.
- **Activación del video de cada alumno.** El profesor puede verificar en tiempo real la presencia del alumno, llegando a poder realizar *in situ* una visión del mismo.
- **Chat síncrono.** Esta tecnología permite disponer en todo instante, además del resto de recursos, de un chat síncrono con el que los alumnos pueden realizar preguntas a las que el profesor puede responder directamente, tanto por videoconferencia como a través del propio chat.
- **Presentación de transparencias.** Otra de las herramientas clave de esta tecnología es que tanto el profesor como cualquier alumno puede presentar en pantalla, al mismo tiempo, una presentación tipo *Power Point*. Esto permite, sin lugar a dudas, emular a la perfección la docencia impartida en un aula presencial tradicional, no solo por parte del profesor, sino también por parte del alumno, lo que permitirá también que éste realizara una presentación de un trabajo si fuera preciso.
- **Compartir pantalla.** Finalmente, otra de las posibilidades funcionalidades que ofrece esta tecnología es la posibilidad de compartir pantalla, tanto por parte del profesor como por parte del alumno. Esto confiere a la docencia con videoconferencia, en el caso particular de este Máster, de una enorme potencialidad ya que hace posible que el profesor muestre directamente los contenidos de programas computacionales que están siendo escritos/programados y ejecutados en tiempo real en cualquier nodo de computación del CESGA (véase apartado 3 más adelante).

2. Entorno Virtual de Aprendizaje de la UNIA basado en Moodle. A pesar de que este Título es eminentemente a distancia, aunque síncrono gracias a la teledocencia, como se comenta en el punto anterior, el Campus Virtual suponen un importante apoyo y refuerzo al método de enseñanza-aprendizaje propuesto en el Máster. Está en funcionamiento desde 2004/5 y basado, desde 2006-07, en la plataforma *open source Moodle*. Además, todos los posgrados lo emplean, bien como entorno donde acontece la formación (programas virtuales), bien de forma combinada o como **complemento a la enseñanza a distancia**, como sucede en este Título. El Campus cumple una serie de requisitos mínimos relativos tanto al diseño como a la impartición de acciones formativas, recogidos en el Plan de Innovación Docente y Digital de la UNIA. *Moodle* es una aplicación web de tipo Ambiente Educativo Virtual, un sistema de gestión de cursos, de distribución libre, que ayuda a los educadores a crear comunidades de aprendizaje en línea siguiendo un modelo constructivista de enseñanza. Al ser una aplicación web, el cliente puede ser cualquier navegador web moderno, siendo recomendable *Mozilla Firefox* o *Google Chrome*. Se debe contar con las extensiones necesarias para visualizar los vídeos, audio y demás material multimedia que un curso pueda contener. La instalación requiere una plataforma que soporte PHP y la disponibilidad de una base de datos. Moodle tiene una capa de abstracción de bases de datos por lo que soporta los principales sistemas gestores de bases de datos. Moodle tiene una base numerosa de

usuarios: hay 67.000 sitios registrados (muchos más sin registrar), que ofrecen 5,5 millones de cursos, en los que participan 54 millones de usuarios en todo el mundo. La plataforma está traducida a 86 idiomas (versiones 1.6 a 3.0). En España el número de sitios registrados es de 5888, estando establecido en la gran mayoría de universidades. En el mismo Campus Virtual se ponen a disposición de los estudiantes herramientas de comunicación (síncrona y asíncrona) y se facilita también el acceso a aulas virtuales con material adicional para cada una de las asignaturas, permitiendo organizar todos los contenidos del máster y todas las actividades de distinto tipo propuestas por los profesores. Hay también, en cada materia, cuestionarios de autoevaluación y de evaluación. Además, los profesores cuentan con el Aula Virtual de profesores, que contiene recursos para la preparación de materiales, tutorización, etc.

3. Infraestructura de computación de alto rendimiento del Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA). CESGA dispone de infraestructuras avanzadas destinadas a incrementar la capacidad investigadora y tecnológica de la comunidad científica y la industria. La alta calidad de las infraestructuras disponibles, así como su singularidad en el conjunto del Estado Español, han motivado el reconocimiento de la instalación como **Infraestructura Científico Tecnológica Singular de España (ICTS)**. Las infraestructuras más significativas están destinadas a proporcionar grandes potencias de cálculo computacional en entornos científico-tecnológicos por medio de diferentes arquitecturas, así como las redes avanzadas de comunicaciones que permiten a la comunidad científico-tecnológica gallega acceder a las redes académico-científicas nacionales e internacionales por medio de grandes anchos de banda. Existen también otras infraestructuras relacionadas con las tecnologías de la información que proporcionan una amplia variedad de servicios complementarios. Con la firma del convenio entre las tres instituciones, la Universidad Internacional de Andalucía, la Universidad de Huelva y el CESGA, los estudiantes del Máster matriculados tendrán garantizado durante el periodo de matriculación de un curso el acceso a recursos de procesadores de cálculo, memoria de almacenamiento y memoria para cálculo, así como a los servicios de ayuda y gestión por parte del personal del CESGA, tal y como se indica en el convenio firmado a tal efecto ([Convenio UHU + UNIA + CESGA](#)). CESGA dispone de servidores de cálculo de diferentes arquitecturas para permitir al investigador elegir siempre la arquitectura que mejor se adecúe a sus necesidades de cálculo. Los dos sistemas de computación instalados en el CESGA, además de otros de Cloud, Big Data, Grid y Aplicaciones, son Finis Terrae II y SVG. En todos los casos, las comunicaciones internas del Centro se realizan sobre redes GIGABIT ETHERNET. Las Figuras 7.1 y 7.2 muestran las capacidades de cálculo y almacenamiento aproximadas existentes en la actualidad en los dos sistemas de computación.

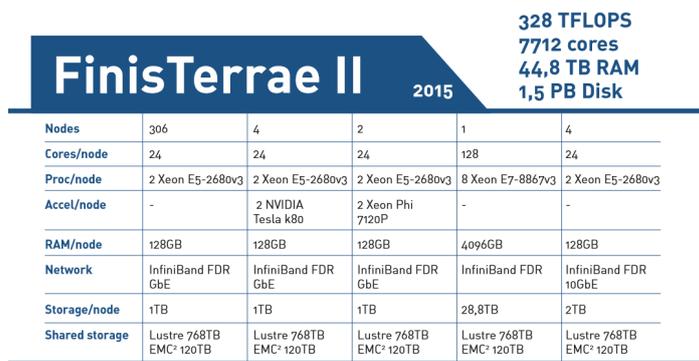
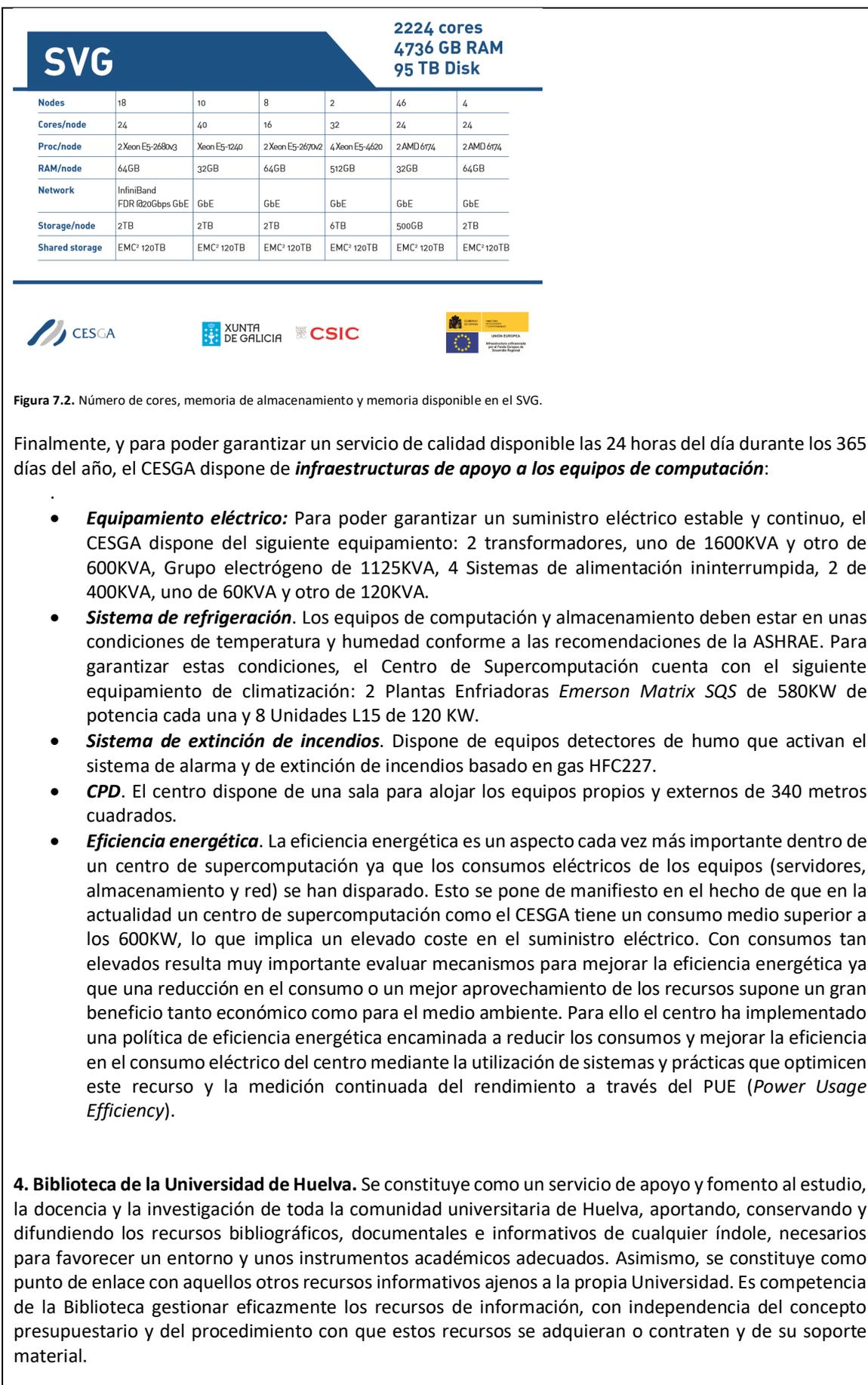


Figura 7.1. Número de cores, memoria de almacenamiento y memoria disponible en el Finis Terrae II.



La Biblioteca Central, ubicada en el Campus El Carmen, aparte de acoger el fondo bibliográfico más cuantioso y el mayor número de puestos de lectura, centraliza y canaliza toda la gestión administrativa y técnica, además de los servicios especializados más significativos, como el préstamo inter bibliotecario, la información bibliográfica, etc. Le corresponde la dirección y coordinación técnica y administrativa de las Bibliotecas de Campus y Salas de Lectura que dependen de ella, estableciendo, bajo las directrices del Vicerrectorado de Extensión Universitaria, la política bibliotecaria a seguir. La BUH cuenta con la siguiente dotación: 338 puestos de lectura, 79 puestos de lectura informatizados, servicio de préstamo de 40 ordenadores portátiles, 18 lectores y reproductores diversos, 7 servidores, 2 aparatos de proyección. Para una información más detallada de todos los servicios y recursos disponibles puede consultarse la Web de la Biblioteca: <http://www.uhu.es/biblioteca/>.

5. Biblioteca de Técnicas Avanzadas de Simulación de los grupos de investigación del cuerpo docente de profesores del Máster.

La Red Española de Simulación Molecular, como se ha detallado en la sección 2.1. Justificación del título: interés académico, científico y/o profesional, conforma una unión de investigadores y profesores universitarios y de Centros de Investigación de reconocido prestigio internacional que, bajo la financiación del Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO), desarrollan, aplican y enseñan nuevas metodologías computacionales en el ámbito de la Simulación Molecular clásica. Fruto de esta colaboración sinérgica, durante los últimos 6 años han aglutinado, entre otros recursos, una biblioteca de software conformada por códigos de ordenador y subrutinas para llevar a cabo cálculos complejos mediante técnicas avanzadas de simulación aplicables a la resolución de problemas complejos. **Se adjunta el compromiso escrito de los diversos profesores adscritos al Máster asegurando la disponibilidad de la Biblioteca de Técnicas Avanzadas en Simulación para la docencia del Título.** Seguidamente se enumeran los códigos, programas, algoritmos y técnicas más destacadas de las que dispone la Red y que estarían a disposición de la formación integral de los alumnos del título:

- Códigos para simulación de fluidos de partículas de distinta geometría (discóticas, prolatas, cuboidales y esféricas) usando modelos de grano grueso. Esto incluye códigos de Monte Carlo, Dinámica Molecular y Dinámica Browniana en distintos colectivos y escenarios, para el cálculo de propiedades estructurales, termodinámicas y de transporte, tanto en fluidos monocomponentes como mezclas.
- Subrutina para el cálculo de la distancia mínima entre dos discos en 3D.
- Códigos para combinar y repesar histogramas de parámetro de orden usando el método de Ferrenberg-Swendsen, de utilidad en técnicas de finite-size scaling cerca de puntos críticos.
- Códigos de análisis de funciones de scattering temporal, tales como la función de scattering propia intermedia o la función de van Hove (estudios de transición vítrea).
- Códigos para la simulación de partículas coloidales cargadas en el modelo primitivo, incluyendo de forma explícita los contraiones.
- Algoritmo para calcular potenciales efectivos utilizando Umbrella Sampling.
- Códigos para la simulación de los primeros estadios de la formación de colonias celulares.
- Códigos MC NVT y NPT en Fortran para sistemas potenciales centrales en bulk y confinados, puros y mezclas: SW, LJ, Wolf, Ewald, Reaction Field, sistemas semiclásicos Wigner-Kirkwood, Yoon-Sheraga.
- Códigos MC NVT y NPT en Fortran para sistemas moléculas cadena SW con sitios, sistemas semiclásicos Path Integral diferentes propagadores.
- Códigos MC NVT y NPT para sistemas anisotrópicos no cargados, cargados o polares: hard spherocylinders, rods, disks.
- Códigos en Fortran para cálculo de propiedades termodinámicas-diagramas de coexistencia usando SAFT-VR diferentes modalidades (bulk, confinado, clásico, semiclásico).
- Código MC, en colectivos NVT, NpT y muVT (cajas anisotrópicas) con subrutinas para calcular la energía libre con el método de cristal de Einstein y celdas de vecinos, preparado para modelos sencillos (esferas duras, patchy models, etc.).
- Código para hacer integración Gibbs-Duhem con modelos de potencial sencillos.

- Código Monte Carlo en el colectivo gran canónico para estudiar adsorción de modelos sencillos (LJ) en medios porosos (zeolitas). Incluye la posibilidad de hacer una grid de potencial así como modelos flexibles de zeolitas.
- Código Reverse Monte Carlo (implementado en GPU).
- Código de inverse Monte Carlo.
- Path integral Monte Carlo preparado para con modelos rígidos y flexibles.
- Código para realizar estadística sobre clusters en función de la distancia de conectividad (sobre un número arbitrario de fotos de configuraciones del sistema se puede estimar distribución de tamaños de clusters, tamaño medio, tamaño medio en función de la distancia de conectividad, etc.).
- Código de simulación numérica Monte Carlo en el Gibbs Ensemble para potenciales de corto alcance.
- Código para cálculo del factor de estructura.
- Código de simulación de polímeros e hidrocarburos por MC.
- Código de cálculo de coeficientes del virial de polímeros por MC.
- Código de muestreo de redes de hidrogeno por MC.
- Código de cálculo de ecuación de estado de fluidos moleculares.
- Código de análisis de ondas capilares.
- Código para simulación de dinámica molecular en Fortran (serie) y CUDA C+ (paralelo), actualmente para potenciales de pares, potencial Embedded Atom Method (EAM) y United Atom Model (UAM).
- Códigos para la determinación de coeficientes de transporte y estructura a partir de configuraciones generadas mediante simulación. Estas rutinas incluyen el cálculo de coeficiente de difusión, función de distribución radial y factor de estructura estático.
- Código para el cómputo de barreras de nucleación mediante Umbrella Sampling Monte Carlo en Fortran MPI (paralelo).
- Código para la simulación de crecimiento en sistemas sólido-líquido en Fortran (serie) y CUDA C+ (paralelo). Mediante este código es posible medir velocidades de crecimiento y coeficiente cinético de crecimiento.
- Código para determinar perfiles de tensor de esfuerzo (método Irving Kirkwood) y tensión interfacial en sistemas fluido-fluido.
- Método para el análisis de ondas capilares y determinación de tensión interfacial en sistemas sólido-líquido. El método incluye la determinación de parámetros de orden local.
- Código para simulación (escala de continuo) mediante Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH).

Servicios a disposición del Máster.

El Área de Innovación Docente y Digital de la UNIA, a cargo de su personal PAS, se encarga de gestionar técnicamente tanto la tecnología *Adobe Connect*, para la impartición de la docencia a distancia con teledocencia, como del Campus Virtual. A continuación, se relacionan los medios materiales y recursos didácticos disponibles para la impartición del Título:

a) Para profesores:

1. Aula Virtual de teledocencia de Profesores (*Adobe Connect*). Espacio donde se concentran múltiples tutoriales acerca del manejo del campus, de las pautas que deben guiar el diseño de guías, materiales y actividades on-line tanto desde el punto de vista técnico como didáctico... así como modelos y plantillas de documentos para trabajar y herramientas de comunicación con el Servicio de Innovación Docente y Digital de la UNIA y con otros docentes.
2. Asistencia técnica a través del Centro de Atención al Usuario, vía teléfono o email (cau.virtual@unia.es).
3. Asistencia didáctico-pedagógica a través de teléfono o email (cau.virtual@unia.es).

b) Para alumnos:

1. Centro de Atención al Usuario, también disponible para alumnos vía teléfono o email en caso de consultas o incidencias técnicas sobre el uso del Campus Virtual de la UNIA y del Aula Virtual de teledocencia.
2. Recursos de ayuda, comunicación y guía accesibles a través del Campus Virtual puestos en marcha por el Servicio de Innovación Docente y Digital de la UNIA. Entre ellos:
 - *Foro de novedades*, accesible desde el bloque 0 de la columna central de cada curso, a través del cual los profesores realizarán un seguimiento del grupo a lo largo del módulo o materia y les informarán de los eventos más destacados de éste.
 - *Calendario*, donde, en conexión con el foro de novedades, irán anotando los principales hitos del curso (chats programados, fecha de entrega de actividades, etc.).
 - *Foro de tutorías y Bloque de mensajes*, a través del cual los alumnos podrán hacer llegar sus consultas de interés para el resto de alumnos (en el primer caso), o aquellas de carácter privado (en el segundo caso).
 - *Documentación de ayuda* para el uso del Campus Virtual, accesible también desde dicho bloque, a través de la cual hallará respuesta a las principales cuestiones relacionadas, entre otros, con la navegación por el Campus o los contenidos, herramientas de comunicación y evaluación de los cursos. Su consulta puede ser útil, por tanto, para conocer cómo publicar mensajes en los foros, enviar tareas, etc.

Los estudiantes también dispondrán de *recursos de aprendizaje y comunicación*, como son el sistema de mensajería instantánea, foros, chats, actividades de grupo, tareas, objetos de aprendizaje (formato SCORM), cuestionarios digitales, autoevaluaciones, etc.

Junto a estos recursos, también se le dará acceso al alumnado a servicios comunitarios para usuarios del Campus Virtual: por ejemplo, la conexión con las distintas **bibliotecas** de las universidades participantes y, en especial, los enlaces con sus fondos de monografías y revistas en formato digital, así como el fondo digital del Consorcio de Bibliotecas de Andalucía (CBUA), bases de datos y repositorios documentales en *open acces* (colecciones de Tesis Doctorales, Tesis de Licenciatura y Trabajos Fin de Máster, etc.). Igualmente, los estudiantes tendrán acceso al OpenCourseWare de la UNIA (<http://ocw.unia.es>) y a los recursos audiovisuales de su canal audiovisual (<http://www.unia.es/uniatv>).

Planes para realizar o garantizar la revisión y mantenimiento de los materiales y los servicios disponibles.

El Área de Innovación Docente y Digital de la UNIA realizará una serie de actuaciones de formación, apoyo y asesoramiento al profesorado del Máster, impartidas también a través del Campus Virtual. Dichas actuaciones, en coherencia con el Plan de Innovación Docente y Digital de la UNIA y los principios del Espacio Europeo de Educación Superior, persiguen garantizar la calidad en el proceso de enseñanza-aprendizaje mediante una mejora de la calidad de todos sus elementos y potenciando el uso de las TIC para lograr la consecución de una serie de **objetivos** específicos:

- Desarrollo de estrategias y técnicas didácticas adecuadas a nuevos contenidos y a intereses, competencias y capacidades de los estudiantes y que favorezcan el aprendizaje.
- Desarrollo de materiales y recursos didácticos de calidad y adaptados a la formación en Red, autosuficientes, motivadores y que promuevan un aprendizaje.
- Desarrollo pleno de sistema de seguimiento y tutorización de acuerdo a comunicaciones mínimas y haciendo uso de herramientas de comunicación del propio Campus Virtual.
- Diseño y experimentación de nuevos métodos e instrumentos de evaluación de los estudiantes.
- Potenciación de motivación del estudiante (apoyo tutorial) a través del Campus Virtual y del uso de las Aulas Virtuales (teledocencia) de la UNIA.

En concreto, se desarrollarán las siguientes **actuaciones formativas**:

- Sesión informativo-formativa inicial. Para garantizar la puesta en marcha de la primera edición del máster se celebrará una sesión informativo-formativa a distancia con teledocencia a la que asistirá todo el profesorado mediante el Aula Virtual de teledocencia.
- Acceso al Programa de Formación Online (Aula Virtual de Profesores) a todos los docentes participantes en el programa.
- Coordinación y comunicación proactiva con el profesorado para garantizar el desarrollo de las materias del programa conforme a unos mínimos.
- Asesoramiento en cuanto a las posibilidades del Campus Virtual y el Aula Virtual (teledocencia), incentivando la inclusión de actividades grupales/colaborativas como wikis, glosarios, etc.
- Apoyo en la preparación de materiales básicos de estudio, guías docentes, etc.
- Asistencia en el manejo del Campus Virtual y el Aula Virtual (teledocencia) y resolución de incidencias técnicas.
- Apoyo y asesoramiento durante la impartición (tutorización on-line, evaluación de actividades, seguimiento del alumno, etc.).
- Comprobación de resultados a través del Informe de Actividad del Campus Virtual elaborado por el coordinador de cada materia y remitido al Área de Innovación Docente y Digital al finalizar la misma.

7.2.- PREVISIÓN DE ADQUISICIÓN DE LOS RECURSOS MATERIALES Y SERVICIOS NECESARIOS

No procede.

8.- RESULTADOS PREVISTOS

8.1.- ESTIMACIÓN DE VALORES CUANTITATIVOS

INDICADORES	VALOR (%)
Tasa de graduación <i>Porcentaje de estudiantes que finalizan la enseñanza en el tiempo previsto en el plan de estudios o en un año académico más en relación con su cohorte de entrada.</i>	90%
Tasa de abandono <i>Relación porcentual entre el número total de estudiantes de nuevo ingreso que debieron obtener el título el año académico anterior y que no se han matriculado ni en ese año académico ni en el posterior.</i>	5%
Tasa de eficiencia <i>Relación porcentual entre el número total de créditos teóricos del plan de estudios a los que debieron haberse matriculado el conjunto de estudiantes y el número total de créditos en los que realmente se han matriculado.</i>	100%
Tasa de rendimiento <i>Relación porcentual entre el número de créditos aprobados por los estudiantes matriculados en un curso académico y el número total de créditos matriculados en dicho curso.</i>	95%

JUSTIFICACIÓN DE LOS INDICADORES PROPUESTOS

Conforme a lo establecido en la Guía de Apoyo para la Elaboración de la Memoria de Verificación de Títulos Universitarios Oficiales, los indicadores propuestos y sus valores cuantitativos estimados, se establecerán de la siguiente forma:

- **Tasa de Graduación:** “Porcentaje de estudiantes matriculados por primera vez en el curso académico y que finalizan la enseñanza en el tiempo previsto en el plan de estudios (1 año académico)”.
- **Tasa de abandono:** “Relación porcentual entre el número total de estudiantes de una cohorte de nuevo ingreso que debieron obtener el título el año académico anterior y que no se han matriculado en ese año académico ni en el posterior”.
- **Tasa de eficiencia:** “Relación porcentual entre el número total de créditos del plan de estudios a los que se debieron haber matriculado a lo largo de sus estudios el conjunto de graduados en un determinado año académico y el número total de créditos en los que realmente se han matriculado”.
- **Tasa de rendimiento:** “Relación porcentual entre el número de créditos ordinarios superados en un Título (T) y el número total de créditos ordinarios matriculados en un Título (T)”.

Desafortunadamente, no existen valores históricos de los indicadores anteriores puesto que no ha existido un Título similar en ninguna de las universidades proponentes. Tampoco ha existido un Máster Propio de esta índole. Los únicos indicios que existen de experiencias previas han sido las Escuelas de Simulación Molecular organizadas por la Red Española de Simulación Molecular coordinada a nivel nacional por la Universidad de Huelva. La Tabla 8.1 muestra las diferentes tasas obtenidas en cada uno de los apartados. Como se puede apreciar, existen pocos datos, y la variabilidad de los indicadores anteriores entre los diferentes cursos considerados en la serie histórica que se ha mostrado hace compleja la tarea de establecer unos datos previstos para los citados indicadores. No obstante, establecemos los siguientes objetivos planteados en el cuadrante de esta memoria.

En el caso de la tasa de abandono, se han considerado como datos los proporcionados por las diferentes Escuelas de Simulación Molecular organizadas hasta la fecha. Se ha tratado de tener en cuenta datos del

Máster Interuniversitario en Modelización Computacional Atomística y Multiescala en Física, Química y Bioquímica, por la Universidad Politécnica de Catalunya y la Universidad de Barcelona, pero dicha información no está disponible su página web oficial.

Año	Nº matriculados	Tasa graduación	Tasa Abandono	Tasa eficiencia
2012	21	90%	5%	100%
2015	34	100%	0%	100%
2017	34	100%	0%	100%

Tabla 8.1. Datos disponibles de número de alumnos matriculados y diferentes tasas en los años en los que se organizó la Escuela de Simulación Molecular de la Red Española de Simulación Molecular (<https://rdsimulacion.iqfr.csic.es/es/>).

8.2.- PROCEDIMIENTO GENERAL PARA VALORAR EL PROGRESO Y LOS RESULTADOS

El Sistema de Garantía de Calidad del Máster incluye los mecanismos para evaluar de manera continuada el progreso y los resultados del aprendizaje. En dicho Sistema, además de la creación de la Comisión de Garantía de Calidad del Título, se establecen diversos mecanismos de evaluación y satisfacción de los estudiantes, así como la elaboración periódica de propuestas de mejora del plan de estudios.

La Comisión de Garantía de Calidad (CGC) tiene entre otras funciones, la de «garantizar la evaluación, el seguimiento, el control y la mejora continua de los procesos del título del Máster», propiciando así la mejora continua del plan de estudios del mismo. Para ello, elaborará anualmente un Informe de resultados de cada uno de los procesos y del conjunto de los mismos, reflejando, entre otros aspectos, el progreso de los estudiantes en el logro de los resultados de aprendizaje previstos en el Título. La CGC es el órgano principal implicado en la calidad del programa formativo y en el seguimiento del desarrollo de la enseñanza, y tendrá en cuenta para su estudio, análisis y valoración, los resultados de las calificaciones del alumnado por materias (aparte del Trabajo Fin de Máster), tasas de éxito, fracaso, abandono y duración media de los estudios.

Pese a proponer este Título docencia a distancia (**teledocencia**), las actividades formativas, las metodologías docentes y los sistemas de evaluación permiten adelantar que los resultados del aprendizaje de los alumnos de la titulación deben ser similares al obtenido en titulaciones similares en las que la presencialidad es físicamente real. En cualquier caso, para valorar el progreso y los resultados del buen aprendizaje de los estudiantes de la titulación se cuenta con los siguientes instrumentos:

- **Encuestas.** En primer lugar, se realizan encuestas cuatrimestralmente a todos los estudiantes, donde valoran, entre otros aspectos, su propio nivel de preparación previo para poder seguir la asignatura de forma adecuada. En ellas también valoran la utilidad de la materia y la metodología empleada para el aprendizaje y comprensión de los diferentes aspectos de la misma.
- **Informe-cuestionario.** Junto a éste, otro instrumento para pulsar los resultados del aprendizaje es el informe-cuestionario que realizarán cuatrimestralmente los profesores sobre sus grupos de docencia, donde indicarán su percepción sobre el nivel de los alumnos, y si han participado en las diferentes actividades propuestas en la materia.
- **Evaluaciones continuadas.** Por otro lado, resultan esenciales las evaluaciones continuadas y directas del profesor de los conocimientos adquiridos por el estudiante durante el período docente, y cuyos sistemas se han detallado ya en esta memoria en cada una de las materias que conforma el plan de estudio.

- **Sistema de seguimiento.** Finalmente, también se establecerá un sistema de seguimiento de resultados académicos que se analizarán anualmente por la Comisión Académica del Título, proponiendo medidas de mejora en los casos en los que no se alcancen las tasas mínimas establecidas por cada universidad.

Adicionalmente, las Unidades para la Calidad de las ambas Universidades proporcionarán de forma periódica los siguientes datos cuantitativos a la Comisión de Calidad del Título, con el fin de evaluar el rendimiento general de los estudiantes de sus titulaciones oficiales a través de los siguientes indicadores de rendimiento:

- **Tasa de rendimiento.** Relación porcentual entre el número total de créditos superados (excluidos adaptados, convalidados, y reconocidos) por el alumnado en un estudio y el número total de créditos matriculados.
- **Tasa de éxito.** Relación porcentual entre el número total de créditos superados (excluidos adaptados, convalidados, y reconocidos) por el alumnado de un estudio y el número total de créditos presentados a examen.
- **Tasa de abandono.** Relación porcentual entre el número total de estudiantes de una cohorte de nuevo ingreso que debieron obtener el título el año académico anterior y que no se han matriculado ni en ese año académico ni en el posterior.
- **Duración media de los estudios.** Duración media (en años) que los estudiantes tardan en superar los créditos correspondientes al plan de estudios (exceptuando el proyecto fin de carrera, si es el caso).
- **Tasa de graduación.** Porcentaje de estudiantes que finalizan la enseñanza en el tiempo previsto en el plan de estudios o en año académico más en relación con su cohorte de entrada.
- **Tasa de eficiencia.** Relación porcentual entre el número total de créditos teóricos del plan de estudios a los que debieron haberse matriculado a lo largo de sus estudios el conjunto de estudiantes graduados en un determinado curso académico y el número total de créditos en los que realmente han tenido que matricularse.

Además de los resultados obtenidos a través de estas tasas, en todas las asignaturas se realiza un procedimiento de evaluación tanto de conocimientos, como de competencias, que reflejan la evolución y resultados de aprendizaje. Todo el procedimiento de evaluación se reflejará en las guías docentes de cada asignatura.

El Máster arbitrará medidas específicas para la evaluación de todas las materias mediante el sistema de evaluación de la satisfacción del alumnado de la Universidad de Huelva.

Los resultados académicos del Máster se establecerán, en parte, en función de los valores que tomen los indicadores que se detallan a continuación: tasa de graduación, tasa de abandono y tasa de eficiencia.

9.- SISTEMA DE GARANTÍA DE CALIDAD

9.1.- RESPONSABLES DEL SISTEMA DE GARANTÍA DE CALIDAD

Tal y como se consigna en el Convenio Interuniversitario que respalda esta solicitud, el Sistema de Garantía de Calidad que se utilizará será el de la Universidad Internacional de Andalucía, en tanto Universidad coordinadora.

<http://www.unia.es/planificacion-y-calidad/sistema-de-garantia-de-calidad>

RESPONSABLES DEL SISTEMA DE GARANTÍA DE LA CALIDAD DEL PLAN DE ESTUDIOS

La estructura de la calidad de los estudios de posgrado de la UNIA, tiene como elementos fundamentales a la Comisión de Posgrado (CP) y a las Comisiones de Garantía de Calidad de los Títulos de Posgrado (CGC).

COMISIÓN DE POSGRADO (CP)

Según recoge la normativa interna vigente, la Comisión de Posgrado es el órgano encargado de proponer, coordinar y supervisar la política estratégica de la UNIA en relación a los títulos de Posgrado, tanto oficiales como propios.

En materia de calidad, las **competencias específicas** de la Comisión de Posgrado son:

- Definir y articular los objetivos y política de calidad de los Estudios de Posgrado con el Plan Estratégico Institucional y con los objetivos de mejora del mismo.
- Participar, de manera consultiva, en el proceso de diseño y revisión del SGCEP de la Universidad Internacional de Andalucía.
- Asegurar y coordinar la implantación efectiva del SGCEP, a través de las respectivas Comisiones de Garantía de Calidad.
- Proponer la composición de las distintas Comisiones de Garantía de Calidad.
- Convocar, de manera extraordinaria, una determinada Comisión de Garantía de Calidad.
- Liderar el proceso de comunicación entre las distintas Comisiones de Garantía de calidad con el Consejo de Gobierno y viceversa, emitiendo un informe agregado final sobre las enseñanzas de Posgrado y elevando las propuestas de mejora oportunas.
- Asegurar que la rendición de cuentas a los grupos de interés se lleva a cabo de forma uniforme, transparente y oportuna.
- Elaborar propuestas concretas al Consejo de Gobierno de la Universidad Internacional de Andalucía sobre la oferta formativa, así como la suspensión de títulos, si procede.

COMISIÓN DE GARANTÍA DE CALIDAD (CGC).

La Comisión de Garantía de Calidad del Título de Posgrado es un órgano que participa en las tareas de implantación y seguimiento del SGCEP, actuando, además, como uno de los vehículos de comunicación interna de la política, objetivos, planes, programas, responsabilidades y logros de este sistema. Es nombrada por el Rector, a propuesta de la Comisión Académica, previo informe de la Comisión de Posgrado, y su composición será la siguiente:

- *Presidente*: El director académico del curso o persona en quien delegue.
- *Vocales*: Un representante del alumnado.
- Un representante del PAS.
- Un representante de los egresados, sólo en aquellos Programas que se hayan impartido, al menos, en los dos cursos académicos inmediatamente anteriores.
- *Secretario*: será designado por el presidente de entre los propios miembros de la Comisión y cesará por decisión del Presidente.

En el caso de Programas Interuniversitarios, se garantizará la representación de, al menos, un representante del Profesorado por cada una de las Universidades participantes.

El nombramiento se realizará por un período de cuatro años, siempre que el título tenga continuidad en el tiempo y sus miembros no pierdan la condición por la que fueron elegidos. En el caso del representante de los estudiantes, deberá procederse a su renovación para cada curso académico.

Entre las funciones de la Comisión de Garantía Interna de Calidad de un título de Posgrado se encuentran las siguientes:

- Implantar el SGCEP al título de posgrado en particular, de modo que se asegure el cumplimiento de los requisitos generales del Manual del SGC, de la política y objetivos de calidad de los estudios de posgrado y de los requisitos contemplados en las guías de verificación y certificación correspondientes.
- Planificar los objetivos de calidad del posgrado y realizar el seguimiento de su ejecución.
- Realizar el seguimiento de la eficacia de los procesos a través de los indicadores asociados a los mismos.
- Controlar, en lo que respecta al Posgrado al que pertenecen, la ejecución de las acciones correctivas y/o preventivas, de las actuaciones derivadas de la revisión del Sistema y de las acciones de respuesta a las quejas, sugerencias y felicitaciones (QSF).
- Asegurar la implantación de las propuestas de mejora del SGC sugeridas por la Comisión de Posgrado (CP).
- Analizar los resultados de encuestas de satisfacción de los grupos de interés del Posgrado del que forman parte. Una vez finalizado el programa, la CGC realizará una Memoria escrita de sus actividades durante ese curso académico, que remite a la Comisión de Posgrado (CP) y se difunde en la página Web del título. La CGC informa a la Comisión de Posgrado (CP) de todas sus actuaciones relativas al seguimiento del mismo, para que ésta, a su vez, informe puntualmente al Consejo de Gobierno, quien decide cualquier actuación en relación a los Estudios de Posgrado que se derivase como propuesta de los informes de calidad de sus titulaciones.

La administración del SGC de un Título de Posgrado se realizará electrónicamente, siendo también electrónico el archivo de la documentación. La custodia de los documentos del SGC de cada título concreto corresponde al secretario de la Comisión de Garantía de Calidad del mismo.

REGLAMENTO INTERNO DE LA CGC.

La CGC se regirá por las siguientes pautas de regulación interna:

Reuniones:

- Las reuniones ordinarias de la CGC serán convocadas por el presidente de la misma, al menos, con cuarenta y ocho horas de antelación mediante comunicación personalizada a todos sus miembros, en la que se especificará el orden del día y se acompañará, si procede, de documentación de interés.
- Las reuniones extraordinarias también serán convocadas por el presidente, esta vez, con antelación mínima de 24 horas.
- En cualquier caso, la frecuencia mínima de las reuniones será de dos durante el período académico.
- La iniciativa de convocatoria podrá partir del propio presidente de la CGC, por un tercio de los integrantes de la misma o por solicitud de la Comisión de Posgrado.
- El secretario levantará un acta de cada reunión, que será remitida a sus miembros, para su aprobación definitiva. Dicho documento constituye una evidencia documental que será pública para toda la comunidad universitaria en la Web del título.

Acuerdos:

- Los acuerdos de la CGC serán tomados por la mayoría de los asistentes a la reunión. El presidente tendrá un voto de calidad en el caso de dirimir un posible empate.
- Los acuerdos de la CGC tendrán carácter no ejecutivo. Serán remitidas a la Comisión de Posgrado (CP) para que se tomen las medidas oportunas en aras del aseguramiento y mejora continua de la calidad.

9.2.- PROCEDIMIENTOS DE EVALUACIÓN Y MEJORA DE LA CALIDAD DE LA ENSEÑANZA Y EL PROFESORADO

La UNIA, en su Sistema de Garantía de Calidad, presenta un procedimiento denominado “Evaluación y mejora de la calidad de la enseñanza y el profesorado” que se propone:

- Obtener información para la mejora y el perfeccionamiento de las actuaciones realizadas por el profesorado.
- Proporcionar resultados sobre la labor docente.
- Obtener indicadores sobre la calidad de la enseñanza que puedan servir de guía para la toma de decisiones.

El Área de Gestión Académica de la UNIA, con el apoyo técnico del Área de Planificación y Calidad, será la encargada de activar el proceso de encuestado telemático, dando de altas a las encuestas y enviándolas a los estudiantes a través de correo electrónico. Cumplimentadas las encuestas, los resultados estarán disponibles para los distintos usuarios: profesores, coordinadores, dirección académica.

La Comisión de Garantía de Calidad elaborará un informe anual de resultados (en el que se expresarán los puntos fuertes y débiles, así como las propuestas de mejora) trasladándolo a la Comisión de Postgrado, que finalmente la remitirá al Consejo de Gobierno de la UNIA, quién finalmente tomará las decisiones que correspondan.

9.3.- PROCEDIMIENTO PARA GARANTIZAR LA CALIDAD DE LAS PRÁCTICAS EXTERNAS Y LOS PROGRAMAS DE MOVILIDAD

No procede en este Título ya que no se contemplan ni prácticas externas ni programas de movilidad.

9.4.- PROCEDIMIENTOS DE ANÁLISIS DE LA INSERCIÓN LABORAL DE LOS GRADUADOS Y DE LA SATISFACCIÓN CON LA FORMACIÓN RECIBIDA

La UNIA, en su Sistema de Garantía de Calidad, presenta un procedimiento denominado “Inserción laboral y satisfacción con la formación recibida” que se propone medir, analizar y utilizar estas cuestiones.

Para la recogida de datos, La Comisión de Garantía de Calidad del Título recabará del Área de Gestión Académica –Secretariado de Estudiantes– los resultados del estudio de empleabilidad. Para ello, existe un cuestionario previsto – P05- compuesto por 5 variables:

- Título.
- Trayectoria laboral y situación actual.
- Organización en la que trabaja.
- Competencias (conocimientos, habilidades y destrezas).
- Información personal.

El cuestionario será distribuido a los egresados, de forma telemática, desde la UNIA, transcurridos 2 años desde la finalización el título. Complimentadas, los resultados podrán ser utilizados por la Comisión de Garantía de Calidad del Título.

La Comisión de Garantía de Calidad procederá a analizar los datos, comparando, entre otras cosas, los resultados obtenidos con el resto de postgrados ofertados por la institución.

Finalmente, en el supuesto de que no se cumplieran las expectativas mínimas de empleabilidad, la Comisión deberá elaborar un plan de mejora encaminado a subsanar las deficiencias detectadas con el fin de alcanzar los índices de inserción previstos.

9.5.- PROCEDIMIENTO PARA EL ANÁLISIS DE LA SATISFACCIÓN DE LOS DISTINTOS COLECTIVOS IMPLICADOS (ESTUDIANTES, PERSONAL ACADÉMICO Y DE ADMINISTRACIÓN Y SERVICIOS) Y DE ATENCIÓN A LAS SUGERENCIAS Y RECLAMACIONES

a) Procedimiento para el análisis de la satisfacción de los distintos colectivos implicados (estudiantes, personal académico y de administración y servicios, etc.).

La UNIA, en su Sistema de Garantía de Calidad, presenta un procedimiento denominado “P06. Evaluación global del título” que se propone conocer el nivel de satisfacción de los distintos colectivos implicados en dicho título (PDI y alumnado), relacionado con la orientación y acogida, la planificación, el desarrollo y los resultados del mismo.

Para la recogida de datos, están previstas la distribución de una encuesta de opinión para cada uno de los colectivos implicados (P06-I en el caso de los estudiantes y P06-II en el correspondiente al PDI). Ambas encuestas se ocupan de las mismas cuestiones al objeto de poder contrastar adecuadamente las distintas opiniones y cuentan con 18 ítems.

El cuestionario será distribuido a la finalización del curso por el Área de Ordenación Académica de la UNIA, de forma telemática. Complimentadas, los resultados podrán ser utilizados por la Comisión de Garantía de Calidad del Título.

La Comisión de Garantía de Calidad procederá a analizar los datos, comparando, entre otras cosas, los resultados obtenidos en cada uno de las cuestiones consultadas con el resto de postgrados ofertados por la institución. A partir de dicha información, la Comisión elaborará un informe con las propuestas de mejora, sugerencias y recomendaciones sobre el Título.

Finalmente, los resultados serán remitidos a la Comisión de Postgrado, quién, tras incluir las enmiendas oportunas, remitirá la memoria final al Consejo de Gobierno de la UNIA, quién tomará las decisiones que correspondan.

b) Procedimiento de atención a las sugerencias y reclamaciones.

La UNIA, en su Sistema de Garantía de Calidad, presenta un procedimiento denominado “P07. Gestión del Buzón de Quejas, Sugerencias y Felicitaciones (QSF)” que se propone establecer la sistemática a aplicar en la gestión y revisión de este asunto.

Además, tendrá como finalidad mejorar la eficacia, eficiencia y calidad de los Estudios de Postgrado de la UNIA, pero también incrementar la satisfacción de estudiantes, profesorado, personal de apoyo y otros colectivos.

Para la recogida de datos, los Títulos de Postgrado disponen de un canal de atención de QSF a través del buzón creado a tal efecto en el portal institucional. Igualmente se encuentra publicado en la web el procedimiento escrito y la normativa de funcionamiento del citado buzón.

Con carácter general, para poder formular una QSF, será necesario aportar los datos personales que se solicitan en el correspondiente formulario, si bien en el caso de una felicitación o sugerencia, el usuario podrá solicitar una tramitación anónima. Además, bajo ningún concepto la UNIA admitirá descalificaciones personales ni juicios de valor que no estén debidamente justificadas y se acojan a la dignidad personal y profesional de comunidad universitaria. En este caso, no se procederá a la tramitación.

El procedimiento para la conclusión de la QSF estará sometido a los criterios de transparencia, celeridad y eficacia, impulsándose de oficio en todos sus trámites y respetando la normativa general que tiene establecida la UNIA sobre QSF.

El área de Planificación y Calidad de la UNIA es responsable de la coordinación y seguimiento del buzón, mientras que el responsable de Calidad del Título implicado deberá gestionar en tiempo y forma las QSF. El plazo de respuesta será de 1 mes y deberá remitir copia de la respuesta al Área de Calidad.

El Área de Planificación y Calidad gestionará un sistema de registro de control que mantendrá actualizado con todas las quejas, sugerencias y felicitaciones recibidas, enviando un extracto a los responsables de Calidad de los Títulos para que, una vez finalizado el programa académico sean analizadas por la correspondiente Comisión de Garantía de Calidad del Título. Éstas, en los 2 meses siguientes a la recogida de datos, emitirán un informe que será enviado a la Comisión de Postgrado.

Finalmente, la Comisión de Garantía de Calidad recabará del Área de Planificación y Calidad la información sobre las QSF tramitadas. Posteriormente, la Comisión acordará las recomendaciones pertinentes encaminadas a la mejora del título, tratando especialmente aquellas incidencias que se repitan con frecuencia

c) Criterios específicos en el caso de extinción del título.

La UNIA, en su Sistema de Garantía de Calidad, presenta un procedimiento denominado “P09. Suspensión del título” que se propone establecer los criterios contemplados por la UNIA para la extinción de un título de postgrado.

Para la recogida de datos, el proceso consta de 2 partes:

1) Criterios para la extinción del título (en lo que afecta a al título propio):

- Incumplimiento de lo previsto en la memoria del título de postgrado.
- Número de estudiantes de nuevo ingreso inferior a lo establecido.
- Insuficiencia de Recursos Humanos (profesores) para ofrecer una enseñanza de calidad.
- Escasa cualificación del profesorado. Deficiencias en la calidad docente según los resultados del programa DOCENTIA-ANDALUCIA.
- Escasez o insuficiencia de recursos materiales, inadecuación de las instalaciones o infraestructuras.
- Incumplimiento de los resultados académicos previstos reflejados en la memoria académica.

En definitiva, los criterios podrán estar relacionados con:

- Posible existencia de cambios apreciables en la naturaleza y objetivos del título.
- Escasa demanda de nueva matrícula.
- Inadecuada relación entre oferta y demanda de formación al título.
- Incumplimiento reiterado de importantes criterios reflejados en la memoria y que pueden provocar un funcionamiento no adecuado en la titulación.
-

2) Procedimiento, plazos y responsables para la toma de decisión de la extinción:

2.1. El máster quedará en situación de suspensión si no se alcanza el número mínimo de alumnos matriculados durante dos cursos académicos consecutivos. Y quedará prorrogado si es solicitado por la Comisión Académica del Título y autorizado por la Comisión de Posgrado de ambas universidades participantes.

2.2. Si durante dos cursos académicos consecutivos el Título estuviera en situación de suspensión o prórroga, la Comisión de Posgrado de ambas universidades participantes elevarán a sus Consejos de Gobierno respectivos la propuesta de extinción de dicho Título.

2.3. Los órganos responsables del Título en ambas universidades (reflejados en el convenio suscrito para la impartición del mismo), podrán solicitar la extinción del programa a la Comisión de Posgrado de sus respectivas universidades, mediante informe razonado a propuesta de la Comisión Académica del Máster.

3.4. Corresponde al Consejo de Gobierno de ambas universidades participantes la declaración de extinción del Título.”

3) Procedimiento para salvaguardar los derechos del alumnado.

En la página web y cuantos otros medios se estime oportuno deberá figurar detalladamente:

- Un cronograma que recoja la implantación del título.
- El procedimiento de adaptación de los estudiantes de estudios existentes al nuevo plan de estudios.
- Un mecanismo que permita a los estudiantes la superación de las enseñanzas una vez extinguidas, durante un número (a determinar) de años académicos posteriores a la extinción.
- La definición de las enseñanzas que se extinguen por la implantación del título propuesto.

Desde el Área de Ordenación Académica de la UNIA se establecerán mecanismos de información individualizada sobre la situación académica de cada estudiante afectado por la suspensión, temporal o definitiva, del título, salvaguardando los derechos y compromisos adquiridos con el alumnado, y planteando alternativas viables a los estudiantes que estén cursando la enseñanza.

10.- CALENDARIO DE IMPLANTACIÓN

10.1.- CRONOGRAMA DE IMPLANTACIÓN

Curso de inicio

2018/2019

CRONOGRAMA

El Título se impartirá durante el curso 2018/2019.

10.2.- PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN, EN SU CASO, DE LOS ESTUDIANTES DE LOS ESTUDIOS EXISTENTES AL NUEVO PLAN DE ESTUDIOS.

No procede.

10.3.- ENSEÑANZAS QUE SE EXTINGUEN POR LA IMPLANTACIÓN DEL TÍTULO PROPUESTO, EN CASO DE QUE PROCEDA

No procede.

11.- PERSONAS ASOCIADAS A LA SOLICITUD Y TABLAS

11.1 RESPONSABLE DEL TÍTULO

Incluir los datos del Decano/a de la Facultad o director/a del Centro responsable del título

Nombre	Encarnación	DNI	52272132D
1^{er} Apellido	Mellado		
2^o Apellido	Durán		
Cargo que ocupa	Vicerrectora de Formación Reglada y Títulos Propios		
Dirección postal	Monasterio Santa María de las Cuevas, C/Américo Vespucio nº2		
Municipio	Sevilla	Provincia	Sevilla
		Código postal	41092
Teléfono		FAX	
		E-mail	e.mellado@unia.es

11.2 REPRESENTANTE LEGAL DE LA UNIVERSIDAD

Datos del Rector de la Universidad

Nombre:	José	DNI	74792642T
1^{er} Apellido	Sánchez		
2^o Apellido	Maldonado		
Cargo que ocupa	Rector		
Dirección postal	Monasterio Santa María de las Cuevas, C/Américo Vespucio nº2		
Municipio	Sevilla	Provincia	Sevilla
		Código postal	41092
Teléfono		FAX	
		E-mail	rector@unia.es

11.3 SOLICITANTE

El solicitante del título es el responsable del título

Nombre	Felipe	DNI	29481367J
1^{er} Apellido	Jiménez		
2^o Apellido	Blas		
Cargo que ocupa	Catedrático de Universidad		
Dirección postal	Avda. de las Fuerzas Armadas, Facultad de Ciencias Experimentales, Campus de El Carmen, Universidad de Huelva		
Municipio	Huelva	Provincia	Huelva
		Código postal	21007
Teléfono	959219796	FAX	959219777
		E-mail	felipe@uhu.es

ANEXO
INFORMACIÓN ADICIONAL

ASIGNATURAS

Asignaturas / Materias	Carácter (OB/OP)	TOTAL Créditos ECTS	Créditos de Teoría	Créditos de Prácticas*	Área de conocimiento
Bases físicas y químicas de la Termodinámica	OB	5	3,5	1,5 (A)	Todas las áreas
Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística	OB	5	3,5	1,5 (A)	Todas las áreas
Sistemas Operativos y Programación	OB	5	3,0	2,0 (A)	Todas las áreas
Métodos numéricos	OB	5	3,0	2,0 (A)	Todas las áreas
Métodos básicos de simulación molecular	OB	5	3,0	2,0 (A)	Todas las áreas
Dinámica Molecular avanzada	OB	5	3,0	2,0 (A)	Todas las áreas
Monte Carlo avanzado	OB	5	3,0	2,0 (A)	Todas las áreas
Paquetes de simulación molecular	OB	5	2,0	3,0 (A)	Todas las áreas
Trabajo Fin de Máster	OB	20	0	20 (A)	Todas las áreas

* A (aula); L (laboratorio); C (campo)

PROFESORADO

La tabla que se muestra más abajo incluye todo el profesorado que participa en el presente Título. En ella se indican nombre y apellidos, categoría profesional, Universidad o Centro al que pertenece, Departamento al que está adscrito, su área de conocimiento, así como el número de créditos que impartirá durante el curso 2018-2019. Como se puede apreciar, **no todos los profesores impartirán docencia en cada curso académico**. Es de esperar que en sucesivos años los docentes que impartan clases se vayan turnando. Obviamente, todos ellos ofertan Trabajos Fin de Máster para que los alumnos puedan realizar su correspondiente TFM bajo su tutela. Véase apartado 6 de la Memoria para más detalle.

Nombre y apellidos	Categoría académica o profesional	Universidad o institución	Departamento	Área de conocimiento	TOTAL Créditos ECTS	Créditos Teoría	Créditos Prácticas
Alejandro Ramírez, José	Catedrático Univ.	Univ. Autónoma Metropolitana a Iztapalapa (México)	Química	Química	1,5	1,5	0
Benavides Obregón, Ana Laura	Catedrático Univ.	Univ. Guanajuato (México)	Ingeniería Física	Ingeniería Física	0	0	0
Bresme, Fernando	Catedrático Univ.	Imperial College London (UK)	Química	Química-Física	0	0	0
Cuetos Menéndez, Alejandro	Titular Univ.	Univ. Pablo de Olavide	Sistemas Físicos, Químicos y Naturales	Química-Física	1,5	1,5	0
de Miguel Agustino, Enrique	Catedrático Univ.	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada	3,0	3,0	0
Garrido Acuña, José Matías	Titular Univ.	Univ. de Concepción (Chile)	Ingeniería Química	Ingeniería Química	1,5	1,5	0
Gil-Villegas, Alejandro	Catedrático Univ.	Univ. Guanajuato (México)	Ingeniería Física	Ingeniería Física	0	0	0

González Noya, Eva	Científico Titular	CSIC	Instituto de Química Rocasolano	Química-Física	2,0	2,0	0
González MacDowell, Luis	Titular Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física	2,0	2,0	0
González Salgado, Diego	Titular Univ.	Univ. Vigo	Física Aplicada	Física Aplicada	1,5	1,5	0
Gómez Álvarez, Paula	Ayud. Doctor	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada	2,0	2,0	0
Jackson, George	Catedrático Univ.	Imperial College London (UK)	Ingeniería Química	Ingeniería Química	0	0	0
Jiménez Blas, Felipe	Catedrático Univ.	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada	3,0	3,0	0
Largo Maeso, Julio	Titular Univ.	Univ. Cantabria	Física Aplicada	Física Aplicada	2,0	2,0	0
Lomba García, Enrique	Prof. Investigación	CSIC	Instituto de Química Rocasolano	Química-Física	4,0	4,0	0
Martínez Piñeiro, Manuel	Titular Univ.	Univ. Vigo	Física Aplicada	Física Aplicada	3,0	3,0	0
Mejía Matallana, Andrés	Catedrático Univ.	Univ. de Concepción (Chile)	Ingeniería Química	Ingeniería Química	1,5	1,5	0
Meyra, Ariel	Investigador	Consejo Nacional de Investigación Científicas y Técnicas CONICET (Argentina)	Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos	Física	1,5	1,5	0
Míguez Díaz, José Manuel	Ayud. Doctor	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada	3,0	3,0	0
Moreno-Ventas Bravo, Ignacio	Titular Univ.	UHU	Ciencias de la Tierra	Petrología y Geoquímica	3,0	3,0	0
Romero Enrique, José Manuel	Titular Univ.	Univ. Sevilla	Física Atómica, Molecular y Nuclear	Física Teórica	2,0	2,0	0
Rozas Cárdenas, Roberto	Titular Univ.	Univ. del Bío-Bío (Chile)	Física	Física	0	0	0
Sanz García, Eduardo	Titular Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física	0	0	0
Solana Quirós, José Ramón	Catedrático Univ.	Univ. Cantabria	Física Aplicada	Física Aplicada	0	0	0
Valeriani, Chantal	Ramón y Cajal	Univ. Complutense	Física Aplicada	Física Aplicada	2,0	2,0	0
Vega de las Heras, Carlos	Catedrático Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física	0	0	0
Zarragoicoechea, Guillermo	Investigador	Consejo Nacional de Investigación Científicas y Técnicas CONICET (Argentina)	Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos	Física	0	0	0

DIRECCIÓN Y ORDENACIÓN ACADÉMICA

DIRECTOR/A					
Profesor/a doctor/a con vinculación permanente con la UHU					
Nombre y apellidos	Felipe Jiménez Blas			DNI	29481367J
Categoría académica	Catedrático de Universidad				
Departamento	Ciencias Integradas (Área de Física Aplicada)				
Facultad o Centro	Ciencias Experimentales				
Teléfono	959219796	Fax	959219777	E-mail	felipe@uhu.es

COMISIÓN ACADÉMICA			
Profesores responsables de las asignaturas o materias, un representante del órgano responsable y un representante de los estudiantes			
Cargo	Nombre y apellidos	Categoría académica	Departamento / Facultad o Centro
Presidente	<i>Felipe Jiménez Blas</i>	C.U.	Ciencias Experimentales, UHU
Secretario	Manuel Martínez Piñeiro	T.U.	UNIA/Física Aplicada, Univ. Vigo
Vocal	Enrique Lomba García	Prof. Inv.	UNIA/Instituto de Química-Física Rocasolano, CSIC
Vocal	José Manuel Romero Enrique	T.U.	UNIA/Física Atómica, Molueclar y Nuclear, Univ. Sevilla
Vocal	Luis González MacDowell	T.U.	UNIA/Química-Física, Univ. Complutense