



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
Código: 32526  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico / **Computational Techniques and Numerical Calculations**

### 1.1. Código / **Course number**

32526

### 1.2. Materia / **Content area**

Módulo 2. Métodos / **Module 2. Methods**

### 1.3. Tipo / **Course type**

Obligatoria / **Compulsory subject**

### 1.4. Nivel / **Course level**

Máster / **Master**

### 1.5. Curso / **Year**

1º / **1<sup>st</sup>**

### 1.6. Semestre / **Semester**

Anual / **Annual**

### 1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / **5 ECTS credits**

### 1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / **There are no previous prerequisites**

### 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / **Attendance is mandatory**



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
Código: 32526  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jon Mujika (Coordinador / **Coordinator**)  
Facultad de Química / **Faculty of Chemistry**  
Universidad del País Vasco/ **University of the Basque Country**  
Teléfono / **Phone**: +34 943015341  
Correo electrónico/**Email**: joni.mujika@ehu.eus  
Páginaweb/**Website**:[http://www.ehu.eus/chemistry/theory/1\\_group/dr-joni-mujika/](http://www.ehu.eus/chemistry/theory/1_group/dr-joni-mujika/)  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Cristina Sanz  
Departamento de Química Física Aplicada / **Department of Applied Chemistry Physics**  
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**  
Universidad Autónoma de Madrid  
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 504  
Teléfono / **Phone**: 91 497 3922  
Correo electrónico/**Email**: cristina.sanz@uam.es  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contactar previamente por e-mail/  
**contact by email**

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Alicia Palacios Cañas  
Departamento de Química / **Department of Chemistry**  
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**  
Universidad Autónoma de Madrid  
Despacho - Módulo / **Office - Module**: 307B  
Teléfono / **Phone**: 91 497 3019  
Correo electrónico/**Email**: alicia.palacios@uam.es  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: L-V, 09:00-18:00 (contactar  
previamente por e-mail) (**contact by email**)

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pere Alemany i Cahner  
Departamento de Química Física/ **Department of Physical Chemistry**  
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**  
Correo electrónico/**Email**: [p.alemany@ub.edu](mailto:p.alemany@ub.edu)  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

### 1.11a. Resultados del aprendizaje

Formar a los alumnos en el manejo de las técnicas más usuales de programación en física y en química y familiarizarlo con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas. El alumno deberá ser capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
Código: 32526  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5 ECTS

#### 1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

#### **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.

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

#### **TRANSVERSALES**

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
Código: 32526  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5 ECTS

### ESPECÍFICAS

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE13 - Los estudiantes manejan las técnicas más usuales de programación en física y en química y está familiarizado con las herramientas de cálculo esenciales en estas áreas.

CE14 - Es capaz de desarrollar programas eficientes en Fortran con el fin de utilizar dichas herramientas en su trabajo cotidiano.

#### 1.11a. Learning objectives

To introduce the most usual programming techniques in physics and chemistry. The student will learn the essential computational tools and will learn to create efficient programs using the FORTRAN programming language.

#### 1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

#### BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women,



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
Código: 32526  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5 ECTS

b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

#### **CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS**

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.

#### **SPECIFIC SKILLS**

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE13 - Students handle the most common programming techniques in physics and chemistry and are familiar with the essential computational tools in these areas.

CE14 - Students are able to develop efficient programs in FORTRAN in order to use such tools in their daily work.

## **1.12. Contenidos del programa / Course contents**

Algoritmos y Programación.  
Programación FORTRAN.  
Cálculo matricial.  
Cálculo Integral.  
Búsqueda de ceros y optimización de funciones.  
Análisis multivariante.

Programming and Algorithms.  
Fortran programming.  
Matrix calculations.  
Integrals.  
Function optimization.  
Multivariate analysis.



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
Código: 32526  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5 ECTS

### 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Química Teórica y Computacional. J.Andrés y J.Bertrán, Eds. Publ Univ.Jaime I (Castellón) 2000

Ingeniería del software: Diseño estructurado. J.A. Calco Manzasno y L.Fernández Sanz. Univ. Politécnica de Madrid (Madrid) 1995

Structured FORTRAN-77 for Engineers and Scientists, D.M. Etter. Addison Wesley Longman (Menlo Park) 1977

S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran (second edition, Univ. Press, Cambridge, 2003)

A. R. Krommer and C. W. Ueberhuber, Numerical integration on Advance Computer Systems (Springer-Verlag Berlín, Heidelberg, 1994)

P. J. Davis and P. Rabinowitz, Methods of Numerical Integration (second edition, Academic Press, Inc., London, 1984)

C. A. Floudas and P. M. Pardalos, Optimization in Computational Chemistry and Molecular Biology - Local and Global Approaches (Springer, 1st edition, 2000)

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**Clases en aula de informática.** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales o por video conferencia de dos horas. La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos. Durante las sesiones en el aula de informática el estudiante tendrá que realizar distintos programas.

**Seminarios online.** Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

**Tutorías.** El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
 Código: 32526  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 5 ECTS

**Lecture classes in the computing lab:** The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. Teaching will be done in a computer lab, Two hours lectures will include an introduction, a theory to introduce the basic concepts and practical work. Student will learn through practicing. During the practical sessions the student will develop his own programs

**Online Seminars:** After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

**Tutoring sessions:** The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

**Network teaching:** All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

#### Presencial:

Clases teórico/prácticas en aula de informática.....20 horas  
 Tutorías.....8 horas  
 Seminarios.....7 horas

#### No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....40 horas  
 Preparación de seminarios.....20 horas  
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas

TOTAL (5 ECTS \* 25 horas/ECTS).....125 horas

#### Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom .....20 hours  
 Tutoring.....8 hours  
 Seminar.....7 hours

#### Independent study hours:

self-study or group study .....40 hours  
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours  
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours

TOTAL (5 ECTS \* 25 hours/ECTS).....125 hours



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
Código: 32526  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

### Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 60 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.

### Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

### Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% from the student report,
- 40% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.

### Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.



Curso 2018-2019



Asignatura: Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico  
Código: 32526  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 5. Cronograma\* / **Course calendar**

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.  
[Please, check the official schedule posted on the master website.](#)

\*Este cronograma tiene carácter orientativo

[\\*This course calendar is orientative](#)