

MÁSTER UNIVERSITARIO EN SIMULACIÓN MOLECULAR

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL DE ANDALUCÍA
(coordinadora)

UNIVERSIDAD DE HUELVA

Memoria para la modificación del Máster Universitario adaptada al Real Decreto 822/2021, de 28 de septiembre, por el que se establece la organización de las enseñanzas universitarias y del procedimiento de aseguramiento de su calidad.



CONTENIDO

1. Descripción, objetivos formativos y justificación del título (ESG 1.2)	4
1.1. Descripción	4
1.2. Justificación del interés del título y contextualización	5
1.3. Objetivos formativos	18
1.4. Perfiles de egreso	19
2. Resultados del proceso de formación y de aprendizaje (ESG 1.2)	20
2.1. Conocimientos o contenidos	20
2.2. Habilidades o destrezas	20
2.3. Competencias	20
3. Admisión, reconocimiento y movilidad (ESG 1.4).....	21
3.1. Requisitos de acceso y procedimientos de admisión	21
3.2. Criterios para el reconocimiento y transferencias de créditos	23
3.3. Procedimientos para la organización de la movilidad de estudiantes propios y de acogida	24
4. Planificación de las enseñanzas (ESG 1.3)	25
4.1. Estructura del plan de estudios	25
4.2. Actividades y metodologías docentes	53
4.3. Sistemas de evaluación.....	54
4.4. Estructuras curriculares específicas.....	54
5. Personal académico y de apoyo a la docencia (ESG 1.5)	55
5.1. Descripción de los perfiles de profesorado y otros recursos humanos	55
5.2. Perfil básico de otros recursos de apoyo a la docencia necesarios	64
6. Recursos para el aprendizaje: materiales e infraestructurales, prácticas y servicios (ESG 1.6)	67
6.1. Justificación de la adecuación de los medios materiales y servicios disponibles	67
6.2. Gestión de las prácticas externas	67
6.3. Previsión de dotación de recursos materiales y servicios	75
7. Calendario de implantación.....	76
7.1. Cronograma de implantación del título.....	76
7.2. Procedimiento de adaptación.....	76
7.3. Enseñanzas que se extinguen	76
8. Sistema Interno de Garantía de la Calidad (esg 1.1/1.7/1.8/1.9/1.10)	77
8.1. Sistema Interno de Garantía de la Calidad	77
8.2. Medios para la información pública	77
8.3. Anexos	77

Revisión	Fecha	Justificación
01-0	04/05/2018	Memoria informada favorablemente por DEVA.
01-1	31/05/2021	La Comisión Académica del Máster propone llevar a cabo pequeñas modificaciones en dos aspectos del Título: (1) criterios de admisión; y (2) cambio en el orden de impartición de dos asignaturas del Título.
01-2	09/06/2021	Revisión técnica de la Memoria por la Oficina de Estudios de Postgrado de la UNIA, para actualización de la normativa y la información general, así como para la inclusión de las recomendaciones formuladas por la DEVA en el informe final de verificación de fecha 04/05/2018 y en el informe de seguimiento de fecha 31/07/2020.
01-3	11/06/2021	La Dirección del Máster describe en el apartado 6.1 el procedimiento para la eventual sustitución de profesores.
01-4	11/06/2021	Se eleva versión con todos los cambios resaltados para informe por Comisión de Postgrado y aprobación, si procede, por Consejo de Gobierno.
01-5	21/01/2022	Se corrige, durante el proceso de carga de la solicitud en la sede electrónica del Ministerio, varias URLs que habían dejado de funcionar tras la publicación de la nueva web UNIA, las personas vinculadas a la solicitud y se homogeneizan los ECTS mínimos y máximos de los que se deben matricular los estudiantes en el primer año y los siguientes.
01-6	31/01/2023	Adaptación de la Memoria a la nueva estructura establecida por el Real Decreto 822/2021.
01-7	08/02/2023	Cambios requeridos por la UHU en los apartados 3.2. Criterios para el reconocimiento y transferencias de créditos, 4.1. Estructura del plan de estudios (contenidos de las asignaturas) y 5.1 Descripción de los perfiles de profesorado y otros recursos humanos (anonimización del profesorado).
01-8	20/02/2023	Ajustes realizados durante la carga de la Memoria MODIFICADA en la aplicación SOLRUCT para presentar la solicitud al Consejo de Universidades: - Se corrige en las tablas 2a y 2b los créditos de matrícula mínima para el resto de cursos (5 tanto a tiempo completo como parcial).
01-9	16/03/2023	Se realizan los cambios necesarios para atender el requerimiento de subsanación, de 8 de marzo, del Ministerio de Universidades relativos a: - La normativa vigente para el reconocimiento y transferencia de créditos. - Enlaces a la web de la Universidad de Huelva en la que se encuentra publicada información sobre ayudas de movilidad y reconocimiento de créditos. - Descripción de los sistemas de evaluación, metodologías docentes y actividades formativas. - Enlaces al perfil profesional del personal del Área de Innovación de la UNIA.
01-10	19/06/2023	Se realizan los cambios derivados de las alegaciones al informe provisional de ACCUA correspondiente a la evaluación de la solicitud de modificación del título oficial.
02-0	21/07/2023	Se consolidan, tras consultar el alcance del informe desfavorable a la solicitud de modificación, los cambios aceptados por ACCUA.

1. DESCRIPCIÓN, OBJETIVOS FORMATIVOS Y JUSTIFICACIÓN DEL TÍTULO (ESG 1.2)

1.1. Descripción

TABLA 1. Descripción del título

1.1. Denominación del título:	Simulación Molecular
1.2. Nivel MECES:	3 - Máster
1.3. Rama:	Ciencias
1.4. Ámbito de conocimiento:	Interdisciplinar
1.5. Universidad responsable:	Universidad Internacional de Andalucía
1.5.a) Centro de impartición responsable del título (denominación y código RUCT):	Oficina de Estudios de Posgrado (Código RUCT: 41015548)
1.5.b) Centro acreditado institucionalmente:	No
1.6. Título conjunto:	Sí
1.6.a) Tipo de título conjunto:	<input checked="" type="checkbox"/> Nacional <input type="checkbox"/> Internacional
1.6.b) Convenio:	https://unia.es/images/MU_Simulaci%C3%B3n_Molecular_2022-23/MSM-20230222-CONVENIO-UNIA-UHU-Simulacion-Molecular-CON-023_23.pdf
1.6.c) Universidades participantes:	Universidad de Huelva
1.6.d) Centros de impartición (denominación y código RUCT)	Oficina de Estudios de Posgrado (Código RUCT: 41015548) Facultad de Ciencias Experimentales (Código RUCT: 21004522)
1.7. Especialidades (denominación y ECTS):	--
1.8. Mención dual:	<input type="checkbox"/> Sí. <input checked="" type="checkbox"/> No
1.9. Duración y número total de créditos:	1 curso, 60 ECTS.
1.10. Modalidad de enseñanza:	<input type="checkbox"/> Presencial. <input type="checkbox"/> Híbrida (Semipresencial). <input checked="" type="checkbox"/> Virtual (No presencial). Núm. Plazas: 30
1.11. Número total de plazas de nuevo ingreso:	30
1.12. Idiomas de impartición:	<input checked="" type="checkbox"/> Español <input type="checkbox"/> Inglés Otros:

Centros en los que se imparten las enseñanzas:

TABLA 2a. Centro de impartición en la Universidad Internacional de Andalucía

Centro:	Oficina de Estudios de Posgrado (Código RUCT: 41015548)
Modalidad de enseñanza del Centro:	<input type="checkbox"/> Presencial. <input type="checkbox"/> Híbrida (Semipresencial). <input checked="" type="checkbox"/> Virtual (No presencial). Núm. Plazas: 20.
Especialidades:	--
Idiomas de impartición:	<input checked="" type="checkbox"/> Español <input type="checkbox"/> Inglés Otros:
Normativa de permanencia:	https://unia.es/images/normativa/acuerdos-resoluciones-normativa/Reglamentos/REGLAMENTO_DE_REGIMEN_ACADEMICO-consolidado.pdf

Matrícula mínima y máxima	ESTUDIANTE A TIEMPO COMPLETO		ESTUDIANTE A TIEMPO PARCIAL	
	ECTS matrícula mínima	ECTS matrícula máxima	ECTS matrícula mínima	ECTS matrícula máxima
Primer curso	60	60	20	45
Resto de cursos	5	60	5	45

TABLA 2b. Centro de impartición en la Universidad de Huelva

Centro:	Facultad de Ciencias Experimentales (Código RUCT: 21004522)			
Modalidad de enseñanza del Centro:	<input type="checkbox"/> Presencial. <input type="checkbox"/> Híbrida (Semipresencial). <input checked="" type="checkbox"/> Virtual (No presencial). Núm. Plazas: 10.			
Especialidades:				
Idiomas de impartición:	<input checked="" type="checkbox"/> Español <input type="checkbox"/> Inglés Otros:			
Normativa de permanencia:	https://www.uhu.es/secretaria-general/sites/secretaria-general/files/2021-11/normativa_permanencia2.pdf			
Matrícula mínima y máxima	ESTUDIANTE A TIEMPO COMPLETO		ESTUDIANTE A TIEMPO PARCIAL	
	ECTS matrícula mínima	ECTS matrícula máxima	ECTS matrícula mínima	ECTS matrícula máxima
Primer curso	60	60	20	45
Resto de cursos	5	60	5	45

1.2. Justificación del interés del título y contextualización

(El texto de este apartado se incluirá en la solicitud de verificación mediante un enlace a documento pdf)

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.iqfr.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 esto 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.

1.2.1. REFERENTES EXTERNOS QUE AVALAN LA ADECUACIÓN DEL TÍTULO OFICIAL 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, Blackboard Collaborate 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 clásico. 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 Supérieure de Lyon, Universiteit van Amsterdam, Vrije Universiteit Amsterdam and Università degli studi di Roma).
<http://www.erasmusmundus-atosim.cecam.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 Atómica 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/TPGDetail&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

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

PROCEDIMIENTO 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 las 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 Máster 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.cecaml.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.

1.3. Objetivos formativos

1.3.1. Principales objetivos formativos del título

El título 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.

Por ello, el Máster Universitario en Simulación Molecular tiene por objeto facilitar la adquisición de las siguientes 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.
------------	--

1.3.2. Objetivos formativos de las menciones o especialidades

No procede

1.3.3. Estructuras curriculares específicas y estrategias metodológicas de innovación docente específicas y justificación de sus objetivos

No procede

1.4. Perfiles de egreso

1.4.1. Perfiles fundamentales de egreso a los que se orientan las enseñanzas

Perfil de egreso investigador: 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.

1.4.2. Profesión regulada para la que habilita el título

Habilita para profesión regulada:	No
Profesión regulada:	--
Acuerdo del Consejo de Ministros:	--
Norma (Orden ministerial):	--
Condición de acceso para título profesional:	No
Título profesional:	--

2. RESULTADOS DEL PROCESO DE FORMACIÓN Y DE APRENDIZAJE (ESG 1.2)

(Los resultados del aprendizaje esperados deberán corresponderse con los especificados para el nivel de máster universitario. Dichos resultados se concretarán en conocimientos o contenidos, habilidades o destrezas y competencias asumidos por el estudiantado. Para facilitar su redacción puede consultarse la “Guía de apoyo para la redacción, puesta en práctica y evaluación de Resultados de Aprendizaje” en el siguiente enlace: <http://www.aneca.es/Programas-de-evaluacion/Evaluacion-de-titulos/VERIFICA/Verificacion-de-Grado-y-Master/Documentacion-y-herramientas>)

2.1. Conocimientos o contenidos

C01	Comprende los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional
C02	Comprende las leyes macroscópicas físicas y químicas de sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y mezclas
C03	Comprende los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas

2.2. Habilidades o destrezas

HD01	Trabaja en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular
HD02	Desarrolla scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo
HD03	Crea estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel
HD04	Desarrolla programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular

2.3. Competencias

COM01	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.
COM02	Gestionar la información y el conocimiento.
COM03	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.
COM04	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.
COM05	Sensibilización en temas medioambientales.
COM06	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
COM07	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
COM08	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
COM09	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones
COM10	Dominar distintos paquetes informáticos disponibles en la literatura especializada y discriminar cuáles son los óptimos para realizar simulaciones moleculares mediante diferentes técnicas.

3. ADMISIÓN, RECONOCIMIENTO Y MOVILIDAD (ESG 1.4)

3.1. Requisitos de acceso y procedimientos de admisión

Son de aplicación los requisitos de acceso establecidos en la legislación vigente.

La información sobre los requisitos generales de acceso y el procedimiento de admisión en la Comunidad Autónoma Andaluza puede consultarse en:

https://www.juntadeandalucia.es/economiaconocimientoempresasyuniversidad/sguit/?q=masteres&d=mo_requisitos_procedimiento.php

3.1.1. Requisitos de acceso

Además de los se establecen los siguientes requisitos específicos:

Al margen de los requisitos generales de acceso establecidos en el artículo 18 Real Decreto 822/2021, de 28 de septiembre, 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.

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).

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.

En todo 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, estando siempre disponibles en el enlace al catálogo de Másteres del Portal del Distrito Único Andaluz:

https://www.juntadeandalucia.es/economiaconocimientoempresasyuniversidad/sguit/?q=masteres&d=mo_catalago_top.php

3.1.2. Procedimiento y criterios de admisión

(El texto de este apartado se incluirá en la solicitud de verificación mediante un enlace a documento pdf)

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. 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 máster será de 30 y el periodo lectivo de los cursos estará comprendido entre noviembre del año en curso hasta el 30 de noviembre del año siguiente. A la hora de la admisión, se tendrá únicamente en cuenta la calificación de las titulaciones de acceso (expediente académico) y se ordenarán los estudiantes según la puntuación obtenida.

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 máster 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 curriculum 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:

https://www.uhu.es/gestion-academica/sites/gestion-academica/files/2022-10/TR_Reglamento_Procesos_Academicos.pdf

Universidad Internacional de Andalucía

https://unia.es/images/normativa/acuerdos-resoluciones-normativa/Reglamentos/REGLAMENTO_DE_REGIMEN_ACADEMICO-consolidado.pdf

3.2. Criterios para el reconocimiento y transferencias de créditos

Tipos de reconocimiento	Mínimo	Máximo	Documento
Créditos cursados en Centros de formación profesional de grado superior	0	0	
Créditos cursados en Títulos propios	0	0	
Créditos cursados por Acreditación Experiencia Laboral y Profesional	0	0	

El artículo 10 del Real Decreto 822/2021, de 28 de septiembre, por el que se establece la organización de las enseñanzas universitarias y del procedimiento de aseguramiento de su calidad, establece los procedimientos de reconocimiento y transferencias de créditos académicos en los títulos universitarios oficiales.

La **Universidad Internacional de Andalucía** establece su procedimiento específico para el reconocimiento y transferencia de créditos en el Título VIII “Del reconocimiento y transferencia de créditos” (artículos 52 a 59) de su Reglamento de Régimen Académico, aprobado por Consejo de Gobierno de 19 de diciembre de 2018 y modificado por Consejo de Gobierno de 23 de julio de 2019, disponible en el siguiente enlace:

https://unia.es/images/normativa/normativa_secretaria_general/Normativa_Propia/1_Ordenaci%C3%B3n_acad%C3%A9mica/Reglamento_de_R%C3%A9gimen_Acad%C3%A9mico_Modif_C_Gob_23_julio_2019.pdf

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

<https://www.uhu.es/secretaria-general/sites/secretaria-general/files/2021-02/REGLAMENTO%20RECONOCIMIENTOS%20DE%20MOFs%20DEFINITIVO.pdf>

No obstante, en base a la experiencia desde la implantación del título y teniendo en cuenta el alto grado de especialización de las enseñanzas, no se considera la posibilidad de reconocimiento de créditos que exima de cursar una o varias asignaturas del plan de estudios.

3.3. Procedimientos para la organización de la movilidad de estudiantes propios y de acogida

La información relativa a la organización de la movilidad de estudiantes propios y de acogida del Máster Universitario en Simulación Molecular está disponible en:

https://unia.es/images/MU_Simulación_Molecular_2022-23/MSM-Memoria-v01-9-apdo-3-3-movilidad.pdf

4. PLANIFICACIÓN DE LAS ENSEÑANZAS (ESG 1.3)

4.1. Estructura del plan de estudios

(El texto de este apartado se incluirá en la solicitud de verificación mediante un enlace a documento pdf)

Tabla 4.1.1. Estructura del plan de estudios

Créditos obligatorios	40
Créditos optativos	0
Créditos de prácticas académicas externas	0
Créditos de Trabajo Fin de Máster	20
Total Créditos ECTS	60

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.

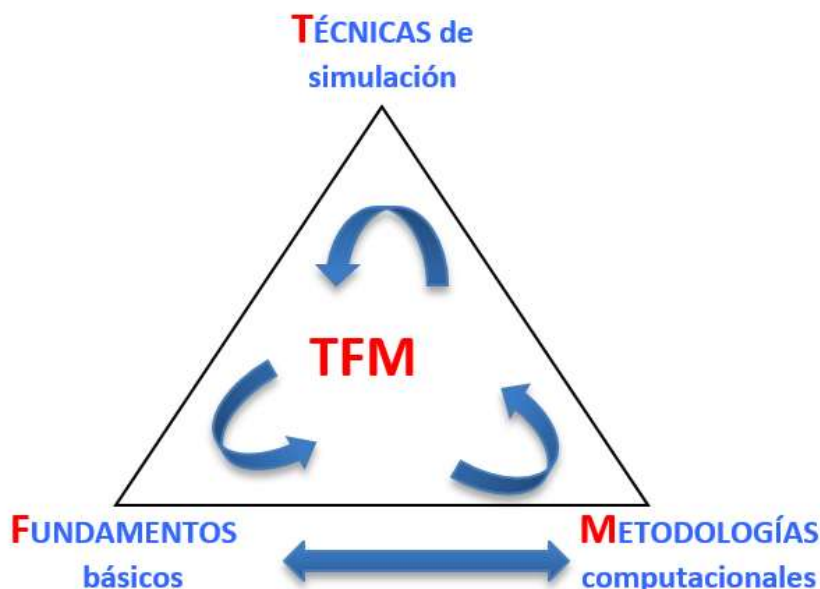


Figura 1. Representación de los módulos del Título.

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 4.1.2 muestra una distribución temporal aproximada de las asignaturas. Las enseñanzas se organizan temporalmente en cuatro bloques:

- **Bloque I.** Se imparte desde principios de noviembre hasta mediados de diciembre. Durante este periodo se imparte docencia en las siguientes asignaturas, empleando los últimos días para actividades de evaluación:
 - o Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística.
 - o Sistemas operativos y programación.
- **Bloque II.** Se imparte desde finales de diciembre hasta principios de febrero, siguiendo un esquema similar al bloque I. Durante este periodo se imparte docencia en las siguientes asignaturas:
 - o Bases físicas y químicas de la Termodinámica.
 - o Métodos numéricos.
- **Bloque III.** Se imparte desde mediados de febrero hasta finales de marzo, siguiendo un esquema similar al bloque I. Durante este periodo se imparte docencia en las siguientes asignaturas:
 - o Métodos básicos de simulación molecular.
 - o Paquetes de simulación molecular.
- **Bloque IV.** Se imparte desde finales de marzo hasta mediados de mayo, siguiendo un esquema similar al bloque I. Durante este periodo se imparte docencia en las siguientes asignaturas:
 - o Monte Carlo avanzado.
 - o Dinámica molecular avanzada.

La información completa de todas las 8 asignaturas que componen el presente Título se detalla a modo de tabla en la sección 4.1.3 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	L	M	X	J	V
16-17	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM						
17-18	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM						
18:30-19:30	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC						
19:30-20:30	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	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	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	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	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	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	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	L	M	X	J	V
16-17	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM						
17-18	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM						
18:30-19:30	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD						
19:30-20:30	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	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	L	M	X	J	V
16-17	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC						
17-18	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC						
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	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	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ	PAQ						



Tabla 4.1.2. Distribución temporal aproximada preliminar de las diferentes asignaturas que componen el Título. Se han denotado como BT (Bases físicas y químicas de la Termodinámica), BME (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 supervisaré 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.

4.1.3. Resumen del plan de estudios (estructura cuatrimestral)

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, la modalidad de enseñanza y la lengua empleada en las enseñanzas. 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.

Curso 1 (total de créditos: 60 ECTS)

Módulo	Asignatura	Ubicación temporal	ECTS	Carácter	Modalidad	Lengua
I. Fundamentos básicos		1 ^{er} cuatrimestre	10	Obligatorio	Virtual	Castellano
	Bases físicas y químicas de la Termodinámica	1 ^{er} cuatrimestre	5	Obligatoria	Virtual	Castellano
	Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística	1 ^{er} cuatrimestre	5	Obligatoria	Virtual	Castellano
II. Metodologías computacionales		1 ^{er} y 2 ^o cuatrimestre	10	Obligatorio	Virtual	Castellano
	Sistemas operativos y programación	1 ^{er} cuatrimestre	5	Obligatoria	Virtual	Castellano
	Métodos básicos de simulación molecular	2 ^o cuatrimestre	5	Obligatoria	Virtual	Castellano
III. Técnicas de simulación		1 ^{er} y 2 ^o cuatrimestre	20	Obligatorio	Virtual	Castellano
	Métodos numéricos	1 ^{er} cuatrimestre	5	Obligatoria	Virtual	Castellano
	Dinámica Molecular avanzada	2 ^o cuatrimestre	5	Obligatoria	Virtual	Castellano
	Monte Carlo avanzado	2 ^o cuatrimestre	5	Obligatoria	Virtual	Castellano
	Paquetes de simulación molecular	2 ^o cuatrimestre	5	Obligatoria	Virtual	Castellano
IV. Trabajo Fin de Máster		Anual	20	TFM	Virtual	Castellano
	Trabajo Fin de Máster	Anual	20	TFM	Virtual	Castellano

Breve descripción de las actividades formativas.

De acuerdo a los recursos docentes para el aprendizaje detallados en la sección 6 de esta memoria, “Justificación de la adecuación de los medios materiales y servicios disponibles” (Tecnología Blackboard Collaborate, Campus Virtual de la UNIA y recursos computacionales del CESGA), se proponen los tres tipos de actividades formativas para los alumnos, enumeradas en la sección 4.2.1 de esta memoria, 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 Blackboard Collaborate 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 *Blackboard Collaborate* 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.

Breve descripción de las metodologías docentes

Para impartir el Título, por tanto, se hará uso de la tecnología *Blackboard Collaborate* 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 *Blackboard Collaborate*, 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. Los recursos docentes disponibles están detallados en la sección 6 de la memoria y un resumen de las metodologías docentes se pueden encontrar en la sección 4.2.2 de esta memoria.

Breve descripción de los sistemas de evaluación

Finalmente, 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 totalidad de los sistemas de evaluación están enumerados en la sección 4.3 de esta memoria.

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 *Blackboard Collaborate*, 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 (*Blackboard Collaborate*) 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 *Blackboard Collaborate* 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 6 de esta memoria ([6. Recursos para el aprendizaje](#)).

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 *Blackboard Collaborate* 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.

4.1.4. Estructura de las especialidades

No procede

4.1.5. Plan de estudios detallado

Denominación del módulo	I. FUNDAMENTOS BÁSICOS
Nº de créditos ECTS	10
Tipología	Obligatorio
Organización temporal	1º cuatrimestre
Modalidad	Virtual

Asignatura 1	Bases físicas y químicas de la Termodinámica																																										
Carácter	Obligatoria	ECTS	5	Duración	1º cuatrimestre																																						
Lenguas en las que se imparte	Castellano		Modalidad	Virtual																																							
Resultados del proceso de formación y de aprendizaje.																																											
<p>En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los resultados del proceso de formación y del aprendizaje se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las <i>Competencias transversales</i> y las <i>Competencias específicas</i>.</p>																																											
<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">Código</th> <th rowspan="2">Descripción</th> <th rowspan="2">Tipo</th> </tr> <tr> <th>Nuevo</th> <th>Antiguo</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>C02</td> <td>CE6</td> <td>Comprende las leyes macroscópicas físicas y químicas de sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y mezclas</td> <td>Conocimiento o contenido</td> </tr> <tr> <td>C03</td> <td>CE7</td> <td>Comprende los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas</td> <td>Conocimiento o contenido</td> </tr> <tr> <td>COM01</td> <td>CT2</td> <td>Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.</td> <td>Competencia</td> </tr> <tr> <td>COM02</td> <td>CT3</td> <td>Gestionar la información y el conocimiento.</td> <td>Competencia</td> </tr> <tr> <td>COM03</td> <td>CT4</td> <td>Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.</td> <td>Competencia</td> </tr> <tr> <td>COM04</td> <td>CT5</td> <td>Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.</td> <td>Competencia</td> </tr> <tr> <td>COM05</td> <td>CT6</td> <td>Sensibilización en temas medioambientales.</td> <td>Competencia</td> </tr> <tr> <td>COM09</td> <td>CE11</td> <td>Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones</td> <td>Competencia</td> </tr> </tbody> </table>						Código		Descripción	Tipo	Nuevo	Antiguo	C02	CE6	Comprende las leyes macroscópicas físicas y químicas de sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y mezclas	Conocimiento o contenido	C03	CE7	Comprende los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas	Conocimiento o contenido	COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia	COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia	COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia	COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia	COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia	COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia
Código		Descripción	Tipo																																								
Nuevo	Antiguo																																										
C02	CE6	Comprende las leyes macroscópicas físicas y químicas de sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y mezclas	Conocimiento o contenido																																								
C03	CE7	Comprende los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas	Conocimiento o contenido																																								
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia																																								
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia																																								
COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia																																								
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia																																								
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia																																								
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia																																								
Contenidos.	<p>Conceptos básicos y definiciones.</p> <p>Primer principio de la Termodinámica.</p> <p>Segundo principio de la Termodinámica.</p> <p>El formalismo termodinámico.</p> <p>Criterios de estabilidad.</p>																																										

<p>Equilibrio de fase y estabilidad.</p> <p>Aplicaciones a sistemas puros y mezclas.</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). 																			
<p>Actividades formativas.</p> <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>35h</td> <td>100%</td> </tr> <tr> <td>AF2</td> <td>Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)</td> <td>30h</td> <td>50%</td> </tr> <tr> <td>AF3</td> <td>Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)</td> <td>60h</td> <td>0%</td> </tr> </tbody> </table> <p>*El número de horas, por crédito, será de 25.</p>				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%																
<p>Metodologías docentes.</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Código</th> <th>Denominación</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>MD1</td> <td>Clases expositivas mediante <i>Blackboard Collaborate</i></td> </tr> <tr> <td>MD2</td> <td>Clases de problemas utilizando <i>Blackboard Collaborate</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>MD6</td> <td>Realización de problemas propuestos</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>Blackboard Collaborate</i>	MD2	Clases de problemas utilizando <i>Blackboard Collaborate</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.)		
Código	Denominación																		
MD1	Clases expositivas mediante <i>Blackboard Collaborate</i>																		
MD2	Clases de problemas utilizando <i>Blackboard Collaborate</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.)																		
<p>Sistemas de evaluación.</p> <p>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:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Id</th> <th>Denominación</th> <th>Ponderación Mínima</th> <th>Ponderación Máxima</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>SE1</td> <td>Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Blackboard Collaborate</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)</td> <td>0%</td> <td>20%</td> </tr> </tbody> </table>				Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima	SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Blackboard Collaborate</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0%	20%								
Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima																
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Blackboard Collaborate</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		Modalidad	Virtual	

Resultados del proceso de formación y de aprendizaje.

En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los **resultados del proceso de formación y del aprendizaje** se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las *Competencias transversales* y las *Competencias específicas*.

Código	Descripción		Tipo
	Nuevo	Antiguo	
C02	CE6	Comprende las leyes macroscópicas físicas y químicas de sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y mezclas	Conocimiento o contenido
C03	CE7	Comprende los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas	Conocimiento o contenido
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia
COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia

Contenidos.	<p>Introducción a la Mecánica Estadística.</p> <p>Fuerzas intermoleculares y modelos de potencial.</p> <p>Colectivo microcanónico.</p> <p>Colectivo canónico.</p> <p>Colectivo gran canónico.</p> <p>Fluidos clásicos.</p> <p>Sistemas fuera del equilibrio.</p>
--------------------	---

Bibliografía.			
<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) 			
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>Blackboard Collaborate</i>		
MD2	Clases de problemas utilizando <i>Blackboard Collaborate</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>Blackboard Collaborate</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%

Denominación del módulo	II. METODOLOGÍAS COMPUTACIONALES
Nº de créditos ECTS	10
Tipología	Obligatorio
Organización temporal	1º cuatrimestre (5 ECTS) / 2º cuatrimestre (5 ECTS)
Modalidad	Virtual

Asignatura 3	Sistemas operativos y programación				
Carácter	Obligatoria	ECTS	5	Duración	1º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano		Modalidad	Virtual	

Resultados del proceso de formación y de aprendizaje.

-En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los **resultados del proceso de formación y del aprendizaje** se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las *Competencias transversales* y las *Competencias específicas*.

Código		Descripción	Tipo
Nuevo	Antiguo		
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia
COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia
HD01	CE1	Trabaja en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza

HD02	CE2	Desarrolla scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo	Habilidad o destreza
HD03	CE3	Crea estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel	Habilidad o destreza
HD04	CE4	Desarrolla programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza
Contenidos.	<p>Introducción a los sistemas operativos: <i>UNIX/Linux</i>.</p> <p>Intérpretes de comandos: <i>bash/csh</i>.</p> <p>Utilidades básicas.</p> <p>Paquetes básicos de presentación y análisis de resultados en <i>UNIX/Linux</i>.</p> <p>Lenguajes de programación I. Intérpretes: <i>Python</i> básico.</p> <p>Bibliotecas científicas en <i>Python</i>.</p> <p>Lenguajes de programación II. Compiladores: <i>Fortran 90- Fortran 2008</i>.</p> <p>Entornos gráficos de desarrollo.</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). 		
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>Blackboard Collaborate</i>		
MD3	Talleres de programación a través de <i>Blackboard Collaborate</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>Blackboard Collaborate</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	2º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano		Modalidad	Virtual	
Resultados del proceso de formación y de aprendizaje.					
-En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los resultados del proceso de formación y del aprendizaje se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las <i>Competencias transversales</i> y las <i>Competencias específicas</i> .					
Código		Descripción	Tipo		
Nuevo	Antiguo				
C01	CE5	Comprende los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional	Conocimiento o contenido		
C02	CE6	Comprende las leyes macroscópicas físicas y químicas de sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y mezclas	Conocimiento o contenido		
C03	CE7	Comprende los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas	Conocimiento o contenido		
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia		
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia		

COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia
COM06	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	Competencia
COM08	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	Competencia
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia
HD01	CE1	Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza
HD02	CE2	Ser capaz de desarrollar scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo	Habilidad o destreza
HD03	CE3	Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel	Habilidad o destreza
HD04	CE4	Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza
Contenidos.	<p>Introducción.</p> <p>Revisión de Mecánica básica.</p> <p>Simulación Molecular.</p> <p>Método de Dinámica Molecular.</p> <p>Método de Monte Carlo.</p> <p>Cálculo de propiedades.</p> <p>Optimización de los cálculos.</p> <p>Aplicaciones de la simulación molecular.</p> <p>Campos de fuerza.</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). 		
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>Blackboard Collaborate</i>
MD3	Talleres de programación a través de <i>Blackboard Collaborate</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>Blackboard Collaborate</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%

Denominación del módulo	III. TÉCNICAS DE SIMULACIÓN
Nº de créditos ECTS	20
Tipología	Obligatorio
Organización temporal	1º cuatrimestre (5 ECTS) / 2º cuatrimestre (15 ECTS)
Modalidad	Virtual

Asignatura 5	Métodos numéricos				
Carácter	Obligatoria	ECTS	5	Duración	1º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano		Modalidad	Virtual	
Resultados de aprendizaje.					
<p>-En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los resultados del proceso de formación y del aprendizaje se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las <i>Competencias transversales</i> y las <i>Competencias específicas</i>.</p>					
Código		Descripción	Tipo		
Nuevo	Antiguo				
C01	CE5	Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional	Conocimiento o contenido		
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia		
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia		
COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia		
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia		
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia		
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia		
HD01	CE1	Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza		
HD02	CE2	Ser capaz de desarrollar scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo	Habilidad o destreza		
HD03	CE3	Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel	Habilidad o destreza		
HD04	CE4	Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza		
Contenidos.	Métodos básicos de interpolación y diferenciación. Métodos de integración. Integración multidimensional.				

	<p>Resolución de sistemas lineales por métodos iterativos.</p> <p>Resolución de ecuaciones y sistemas no lineales.</p> <p>Ecuaciones diferenciales ordinarias y sistemas de ecuaciones.</p> <p>Ejemplos de modelización de sistemas dinámicos con ecuaciones diferenciales. Transformadas de Fourier.</p> <p>Elementos de programación en paralelo.</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). 			
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>Blackboard Collaborate</i>		
	MD3	Talleres de programación a través de <i>Blackboard Collaborate</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.				
<p>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:</p>				

Id	Denominación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Blackboard Collaborate</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 6	Dinámica molecular avanzada				
Carácter	Obligatoria	ECTS	5	Duración	2º cuatrimestre
Lenguas en las que se imparte	Castellano		Modalidad	Virtual	
Resultados de aprendizaje.					
<p>En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los resultados del proceso de formación y del aprendizaje se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las <i>Competencias transversales</i> y las <i>Competencias específicas</i>.</p>					
Código		Descripción	Tipo		
Nuevo	Antiguo				
C01	CE5	Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional	Conocimiento o contenido		
C02	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	Conocimiento o contenido		
C03	CE7	Comprender los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas	Conocimiento o contenido		
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia		
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia		
COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia		
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia		
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia		
COM06	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	Competencia		

COM07	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	Competencia
COM08	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	Competencia
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia
HD01	CE1	Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza
HD02	CE2	Ser capaz de desarrollar scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo	Habilidad o destreza
HD03	CE3	Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel	Habilidad o destreza
HD04	CE4	Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza
Contenidos.	<p>Introducción a la dinámica molecular.</p> <p>Esquemas numéricos.</p> <p>Dinámica Molecular en diferentes colectivos.</p> <p>Tópicos avanzados.</p> <p>Introducción a la simulación multiescala.</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. Daivis, <i>Nonequilibrium Molecular Dynamics. Theory, algorithms and applications.</i> 		

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>Blackboard Collaborate</i>
MD3	Talleres de programación a través de <i>Blackboard Collaborate</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>Blackboard Collaborate</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		Modalidad	Virtual	
Resultados de aprendizaje.					
<p>En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los resultados del proceso de formación y del aprendizaje se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las <i>Competencias transversales</i> y las <i>Competencias específicas</i>.</p>					
<p>Código</p> <p>Nuevo Antigo</p>		Descripción	Tipo		
C01	CE5	Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional	Conocimiento o contenido		
C02	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	Conocimiento o contenido		
C03	CE7	Comprender los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas	Conocimiento o contenido		
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia		
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia		
COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia		
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia		
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia		
COM06	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	Competencia		
COM07	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	Competencia		
COM08	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	Competencia		
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia		
HD01	CE1	Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza		
HD02	CE2	Ser capaz de desarrollar scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo	Habilidad o destreza		
HD03	CE3	Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel	Habilidad o destreza		

HD04	CE4	Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza
Contenidos.	<p>Revisión del método de Monte Carlo.</p> <p>Monte Carlo en el colectivo isobárico-isotérmico (NpT).</p> <p>Monte Carlo en el colectivo gran canónico (μVT).</p> <p>Métodos Monte Carlo con muestreos sesgados.</p> <p>Cálculo de equilibrio de fases.</p> <p>Métodos para mejorar el muestreo.</p> <p>Muestreo de eventos poco frecuentes.</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). 		
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>Blackboard Collaborate</i>		
MD3	Talleres de programación a través de <i>Blackboard Collaborate</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>Blackboard Collaborate</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		Modalidad	Virtual	

Resultados de aprendizaje.

-En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los **resultados del proceso de formación y del aprendizaje** se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las *Competencias transversales* y las *Competencias específicas*.

Código		Descripción	Tipo
Nuevo	Antiguo		
C01	CE5	Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional	Conocimiento o contenido
C02	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	Conocimiento o contenido
C03	CE7	Comprender los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas	Conocimiento o contenido
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia
COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia

COM06	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	Competencia
COM07	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	Competencia
COM08	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	Competencia
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia
COM10	--	Dominar distintos paquetes informáticos disponibles en la literatura especializada y discriminar cuáles son los óptimos para realizar simulaciones moleculares mediante diferentes técnicas.	Competencia
HD01	CE1	Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza
HD02	CE2	Ser capaz de desarrollar scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo	Habilidad o destreza
HD03	CE3	Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel	Habilidad o destreza
HD04	CE4	Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular	Habilidad o destreza
Contenidos.	<p>-Introducción a los paquetes de simulación molecular.–Termostatos y baróstatos en Dinámica Molecular.–Dinámica Molecular con GROMACS I.–Dinámica Molecular con GROMACS II.–Aplicaciones con GROMACS.</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. • 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). 		
Observaciones			

Actividades formativas.			
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.	
Código	Denominación
MD1	Clases expositivas mediante <i>Blackboard Collaborate</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>Blackboard Collaborate</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%

Denominación del módulo	IV. TRABAJO FIN DE MÁSTER
Nº de créditos ECTS	20
Tipología	Trabajo Fin de Máster
Organización temporal	Anual
Modalidad	Virtual

Asignatura 9	Trabajo Fin de Máster				
Carácter	TFM	ECTS	20	Duración	Anual
Lenguas en las que se imparte	Castellano		Modalidad	Virtual	

Resultados de aprendizaje.

En el nuevo modelo de Memoria implementado tras la entrada en vigor del Real Decreto 822/2021, los **resultados del proceso de formación y del aprendizaje** se corresponden con los conocimientos o contenidos (C), competencias (COM) y habilidades o destrezas (HD) que aparecen codificados como tales en los campos correspondientes a las *Competencias transversales* y las *Competencias específicas*.

Código		Descripción	Tipo
Nuevo	Antiguo		
COM01	CT2	Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.	Competencia
COM02	CT3	Gestionar la información y el conocimiento.	Competencia
COM03	CT4	Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.	Competencia
COM04	CT5	Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.	Competencia
COM05	CT6	Sensibilización en temas medioambientales.	Competencia
COM09	CE11	Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones	Competencia
COM10	--	Dominar distintos paquetes informáticos disponibles en la literatura especializada y discriminar cuáles son los óptimos para realizar simulaciones moleculares mediante diferentes técnicas.	Competencia

Contenidos.

El Trabajo Fin de Máster (TFM) tiene como objetivo la realización, presentación y defensa, de un trabajo de investigación realizado individualmente ante un tribunal académico sobre una temática enmarcada en la Simulación Molecular clásica. Dada la naturaleza integradora del TFM, éste contendrá diferentes aspectos de las habilidades y conocimientos adquiridos en las enseñanzas de las diferentes asignaturas del Título.

El TFM se diseñará de acuerdo a los objetivos planteados por el director o la directora del trabajo en el contexto de la investigación llevada a cabo en su grupo de investigación. El trabajo se enfocará en el contexto del estudio de sistemas condensados de interés teórico y/o aplicado en el ámbito de de la Simulación Molecular clásica,

El estudiante deberá haber adquirido las habilidades necesarias para poder resolver, mediante el conocimiento de los fundamentos de la simulación, el uso y la aplicación de

	las diferentes técnicas de simulación y las distintas metodologías computacionales para resolver el problema planteado por su director o directora dentro del contexto de la investigación desarrollada.		
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%

4.2. Actividades y metodologías docentes

4.2.1. Actividades formativas

Código	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)
-----	--

4.2.2. Metodologías docentes

Código	Denominación
MD1	Clases expositivas mediante <i>Blackboard Collaborate</i>
MD2	Clases de problemas utilizando <i>Blackboard Collaborate</i>
MD3	Talleres de programación a través de <i>Blackboard Collaborate</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.)

4.3. Sistemas de evaluación

Código	Denominación
SE1	Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Blackboard Collaborate</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 Máster

4.4. Estructuras curriculares específicas

No procede.

5. PERSONAL ACADÉMICO Y DE APOYO A LA DOCENCIA (ESG 1.5)

5.1. Descripción de los perfiles de profesorado y otros recursos humanos

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 1.2 de esta memoria ([1.2. Justificación del interés del título y contextualización](#)). La Tabla 5.1.1 muestra el conjunto total de profesores asociados al Título.

Id. Profesor/a	Categoría académica o profesional	Universidad o institución	Departamento	Área de conocimiento
PROF01	Catedrático Univ.	Univ. Autónoma Metropolitana	Química	Química

		Iztapalapa (México)		
PROF02	Catedrático Univ.	Univ. Guanajuato (México)	Ingeniería Física	Ingeniería Física
PROF03	Catedrático Univ.	Imperial College London (UK)	Química	Química-Física
PROF04	Titular Univ.	Univ. Pablo de Olavide	Sistemas Físicos, Químicos y Naturales	Química-Física
PROF05	Catedrático Univ.	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada
PROF06	Titular Univ.	Univ. de Concepción (Chile)	Ingeniería Química	Ingeniería Química
PROF07	Catedrático Univ.	Univ. Guanajuato (México)	Ingeniería Física	Ingeniería Física
PROF08	Científico Titular	CSIC	Instituto de Química Rocasolano	Química-Física
PROF09	Titular Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física
PROF10	Titular Univ.	Univ. Vigo	Física Aplicada	Física Aplicada
PROF11	Ayud. Doctor	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada
PROF12	Catedrático Univ.	Imperial College London (UK)	Ingeniería Química	Ingeniería Química
PROF13	Catedrático Univ.	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada
PROF14	Titular Univ.	Univ. Cantabria	Física Aplicada	Física Aplicada
PROF15	Prof. Investigación	CSIC	Instituto de Química Rocasolano	Química-Física
PROF16	Titular Univ.	Univ. Vigo	Física Aplicada	Física Aplicada
PROF17	Catedrático Univ.	Univ. de Concepción (Chile)	Ingeniería Química	Ingeniería Química
PROF18	Investigador	Consejo Nacional de Investigación Científicas y Técnicas CONICET (Argentina)	Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos	Física
PROF19	Ayud. Doctor	UHU	Ciencias Integradas	Física Aplicada
PROF20	Titular Univ.	UHU	Ciencias de la Tierra	Petrología y Geoquímica
PROF21	Titular Univ.	Univ. Sevilla	Física Atómica, Molecular y Nuclear	Física Teórica
PROF22	Titular Univ.	Univ. del Bío-Bío (Chile)	Física	Física
PROF23	Titular Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física
PROF24	Catedrático Univ.	Univ. Cantabria	Física Aplicada	Física Aplicada
PROF25	Ramón y Cajal	Univ. Complutense	Física Aplicada	Física Aplicada
PROF26	Catedrático Univ.	Univ. Complutense	Química-Física	Química-Física
PROF27	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 5.1.1. 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 5.1.2 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 4 Planificación de las enseñanzas) aseguran precisamente esta coherencia unificada de cada una de las asignaturas, así como penetrada entre las mismas.

Módulos/Itinerarios		Profesorado	Universidad			
MÓDULO/ASIGNATURA	ECTS	Profesorado	Créditos impartido	Créditos UHU	Créditos UNIA	Observaciones
BASES FÍSICAS Y QUÍMICAS DE LA TERMODINÁMICA	5	PROF19	3,0	3,0	0	UHU
		PROF14	2,0	0	2,0	UNIA
BASES FÍSICAS Y QUÍMICAS DE LA MECÁNICA ESTADÍSTICA	5	PROF13	3,0	3,0	0	UHU
		PROF21	2,0	0	2,0	UNIA
SISTEMAS OPERATIVOS Y PROGRAMACIÓN	5	PROF15	2,0	0	2,0	UNIA (CSIC)
		PROF20	3,0	3,0	0	UHU
MÉTODOS NUMÉRICOS	5	PROF15	2,0	0	2,0	UNIA (CSIC)
		PROF05	3,0	3,0	0	UHU

TÉCNICAS BÁSICAS DE SIMULACIÓN MOLECULAR	5	PROF16	3,0	0	3,0	UNIA (UVIGO)
		PROF11	2,0	2,0	0	UHU
DINÁMICA MOLECULAR AVANZADA	5	PROF09	2,0	0	2,0	UNIA(UCM)
		PROF01	1,5	0	1,5	UNIA (UAMA)
		PROF17	1,5	0	1,5	UNIA (UCON)
MONTE CARLO AVANZADO	5	PROF08	2,0	0	2,0	UNIA (CSIC)
		PROF04	1,5	0	1,5	UNIA (UPO)
		PROF18	1,5	0	1,5	UNIA (CONICET)
PAQUETES DE SIMULACIÓN MOLECULAR	5	PROF25	2,0	0	2,0	UNIA (UCM)
		PROF10	1,5	0	1,5	UNIA (UVIGO)
		PROF06	1,5	0	1,5	UNIA (UCON)
RESUMEN						
CRÉDITOS DOCENTES	40			14 (35%)	26 (65%)	
PORCENTAJES TOTAL DEL MÁSTER	100%			57%	43%	

Tabla 5.1.2. 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 5.1.1.

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 5.1.3 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 5.1.3. 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 (PROF05; PROF11; PROF13; PROF19; PROF20).**
 - 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 (PROF08; PROF15).**
 - 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 (PROF09; PROF23; PROF25; PROF26).**
 - 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 (PROF21).**
 - Transiciones de fase y fenómenos críticos.
 - Cristales líquidos.
 - Fenómenos interfaciales y de mojado.
 - Fluidos cargados.
 - Materia condensada blanda.
- **Universidad Pablo de Olavide (PROF04).**
 - Modelización y simulación por ordenador de cristales líquidos.
 - Modelización y simulación por ordenador de líquidos complejos.
- **Universidad de Concepción, Chile (PROF06; PROF17).**
 - 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 (PROF03; PROF12).**
 - 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 (PROF22).**
 - 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 (PROF14; PROF24).**
 - 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 (coarse-grained).
 - Teoría y simulación de las propiedades termodinámicas y estructurales de fluidos.
- **Universidad de Vigo (PROF10; PROF16).**
 - Termodinámica de disoluciones acuosas de alcoholes.
 - Termodinámica de disoluciones acuosas de proteínas.
- **Universidad de Guanajuato, México (PROF02; PROF07).**
 - 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 (PROF01).**

- 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 (PROF27).**
 - Potenciales SALR y sistemas auto-organizados.
 - Sistemas confinados.
 - Nanopartículas magnéticas.

- **Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas CONICET, Argentina (PROF18).**
 - Fluidos Confinados.
 - Ecosistemas auto-organizados.
 - Nanopartículas magnéticas.
 - Mezclas binarias confinadas.

Aunque el cuerpo docente de profesores adscritos al Título se prevé que sea estable, es necesario disponer de un procedimiento para llevar a cabo posibles sustituciones del profesorado en caso de que fuera preciso. Como se ha mostrado previamente, además de los profesores que imparte habitualmente docencia, existe un importante número de profesores e investigadores adscritos a la Red Española de Simulación Molecular, así como a grupos de investigación que colaboran con ella en las líneas de investigación del Título. Como ya se ha mencionado en diferentes ocasiones, prácticamente todos ellos están capacitados para la impartición de la docencia adscrita al máster, dada su dilatada experiencia en el campo de la Simulación Molecular. Por ello, y en caso de que se produjese alguna baja por parte de algún docente, la Comisión Académica del Máster propondría de entre el elenco de profesores e investigadores a los posibles sustitutos de un determinado profesor. Dicha elección sería tomada a sugerencia del Director del Máster, y aprobada y secundada por la mayoría de los miembros de la Comisión Académica.

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 *Blackboard Collaborate* 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 6. Recursos para el aprendizaje 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.

5.1.1. Resumen del profesorado asignado al título

Categoría académica	Número de profesores/as	% Doctor	Experiencia docente (quinquenios reconocidos)	Experiencia investigadora (sexenios reconocidos)	Áreas o ámbitos de conocimiento
PROFESORADO DE LA UNIVERSIDAD DE HUELVA (TODOS)					
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

En la tabla 5.1.4 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 5.1.4. Porcentaje de la carga de créditos y de horas, por categorías de profesorado y universidades. Se incluye también el porcentaje de doctores.

5.2. Perfil básico de otros recursos de apoyo a la docencia necesarios

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	15 años	Labores técnicas y administrativas en el ámbito de la ordenación académica. Gestión de equipo de trabajo
PAS (UNIA)	Jefa de Sección de Alumnos	20 años	Labores técnicas y administrativas relacionadas con los estudiantes
PAS (UNIA)	Puestos base (8)	Media de 15 años	Labores administrativas relacionadas con los estudiantes y en el ámbito de la ordenación académica
PAS (UNIA)	Responsable del Área de Innovación Docente y Digital	20 años	Coordinación de la docencia en el campus virtual
PAS (UNIA)	Jefe de Sección de Enseñanza Virtual	15 años	Responsable del soporte y mantenimiento del campus virtual
PAS (UNIA)	Técnico de Apoyo a la Docencia y la Investigación	20 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	25 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.

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 *Blackboard Collaborate*. 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: *Blackboard Collaborate*, *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 se comenta en esta memoria (véase el apartado [8.2. Medios para la información pública](#)), 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.

6. RECURSOS PARA EL APRENDIZAJE: MATERIALES E INFRAESTRUCTURALES, PRÁCTICAS Y SERVICIOS (ESG 1.6)

6.1. Justificación de la adecuación de los medios materiales y servicios disponibles

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 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 *Blackboard Collaborate*, 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. A continuación, se detallan los tres recursos fundamentales con los que cuenta este título:

1. Tecnología *Blackboard Collaborate* 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 *Blackboard Collaborate* 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 recursos computacionales:

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.

A continuación 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 *Blackboard Collaborate*, 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 *Blackboard Collaborate* 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 *Blackboard Collaborate* 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 *Blackboard Collaborate*. 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, *Blackboard Collaborate* 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 **eminente 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.

FinisTerrae II					2015	328 TFLOPS	7712 cores	44,8 TB RAM	1,5 PB Disk
Nodes	306	4	2	1	4				
Cores/node	24	24	24	128	24				
Proc/node	2 Xeon E5-2680v3	2 Xeon E5-2680v3	2 Xeon E5-2680v3	8 Xeon E7-8867v3	2 Xeon E5-2680v3				
Accel/node	-	2 NVIDIA Tesla k80	2 Xeon Phi 7120P	-	-				
RAM/node	128GB	128GB	128GB	4096GB	128GB				
Network	InfiniBand FDR GbE	InfiniBand FDR GbE	InfiniBand FDR GbE	InfiniBand FDR	InfiniBand FDR 10GbE				
Storage/node	1TB	1TB	1TB	28,8TB	2TB				
Shared storage	Lustre 768TB EMC ² 120TB	Lustre 768TB EMC ² 120TB	Lustre 768TB EMC ² 120TB	Lustre 768TB EMC ² 120TB	Lustre 768TB EMC ² 120TB				



Figura 6.1.1. Número de cores, memoria de almacenamiento y memoria disponible en el Finis Terrae II.

SVG

2224 cores

4736 GB RAM

95 TB Disk

Nodes	18	10	8	2	46	4
Cores/node	24	40	16	32	24	24
Proc/node	2Xeon E5-2680v3	Xeon E5-1240	2Xeon E5-2670v2	4Xeon E5-4620	2AMD 6174	2AMD 6174
RAM/node	64GB	32GB	64GB	512GB	32GB	64GB
Network	InfiniBand FDR @20Gbps GbE	GbE	GbE	GbE	GbE	GbE
Storage/node	2TB	2TB	2TB	6TB	500GB	2TB
Shared storage	EMC ² 120TB	EMC ² 120TB	EMC ² 120TB	EMC ² 120TB	EMC ² 120TB	EMC ² 120TB







Figura 6.1.2. Número de cores, memoria de almacenamiento y memoria disponible en el SVG.

Finalmente, y para poder garantizar un servicio de calidad disponible las 24 horas del día durante los 365 días del año, el CESGA dispone de **infraestructuras de apoyo a los equipos de computación**:

- **Equipamiento eléctrico:** Para poder garantizar un suministro eléctrico estable y continuo, el CESGA dispone del siguiente equipamiento: 2 transformadores, uno de 1600KVA y otro de 600KVA, Grupo electrógeno de 1125KVA, 4 Sistemas de alimentación ininterrumpida, 2 de 400KVA, uno de 60KVA y otro de 120KVA.
- **Sistema de refrigeración.** Los equipos de computación y almacenamiento deben estar en unas condiciones de temperatura y humedad conforme a las recomendaciones de la ASHRAE. Para garantizar estas condiciones, el Centro de Supercomputación cuenta con el siguiente equipamiento de climatización: 2 Plantas Enfriadoras *Emerson Matrix SQS* de 580KW de potencia cada una y 8 Unidades L15 de 120 KW.
- **Sistema de extinción de incendios.** Dispone de equipos detectores de humo que activan el sistema de alarma y de extinción de incendios basado en gas HFC227.
- **CPD.** El centro dispone de una sala para alojar los equipos propios y externos de 340 metros cuadrados.
- **Eficiencia energética.** La eficiencia energética es un aspecto cada vez más importante dentro de un centro de supercomputación ya que los consumos eléctricos de los equipos (servidores, almacenamiento y red) se han disparado. Esto se pone de manifiesto en el hecho de que en la actualidad un centro de supercomputación como el CESGA tiene un consumo medio superior a los 600KW, lo que implica un elevado coste en el suministro eléctrico. Con consumos tan elevados resulta muy importante evaluar mecanismos para mejorar la eficiencia energética ya que una reducción en el consumo o un mejor aprovechamiento de los recursos supone un gran beneficio tanto económico como para el medio ambiente. Para ello el centro ha implementado una política de eficiencia energética encaminada a reducir los consumos y mejorar la eficiencia en el consumo eléctrico del centro mediante la utilización de sistemas y prácticas que optimicen este recurso y la medición continuada del rendimiento a través del PUE (*Power Usage Efficiency*).

4. Biblioteca de la Universidad de Huelva. Se constituye como un servicio de apoyo y fomento al estudio, la docencia y la investigación de toda la comunidad universitaria de Huelva, aportando, conservando y difundiendo los recursos bibliográficos, documentales e informativos de cualquier índole, necesarios para favorecer un entorno y unos instrumentos académicos adecuados. Asimismo, se constituye como punto de enlace con aquellos otros recursos informativos ajenos a la propia Universidad. Es competencia de la Biblioteca gestionar eficazmente los recursos de información, con independencia del concepto presupuestario y del procedimiento con que estos recursos se adquieran o contraten y de su soporte material.

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 monoccomponentes 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 *Blackboard Collaborate*, 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 (*Blackboard Collaborate*). 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.

6.2. Gestión de las prácticas externas

No procede.

Información sobre Prácticas externas

Nº de créditos de prácticas académicas externas obligatorias:	0
Nº de créditos de prácticas optativas (de especialidad, mención o itinerario):	0

Nº total de plazas ofertadas (desglosadas en su caso, las plazas si se ofertan las prácticas en varios idiomas):	0
Nº total de plazas ofertadas (desglosadas en su caso, las plazas si se ofertan las prácticas en varios idiomas):	0

6.3. Previsión de dotación de recursos materiales y servicios

Las universidades participantes disponen de recursos suficientes para la impartición de este Máster.

7. CALENDARIO DE IMPLANTACIÓN

7.1. Cronograma de implantación del título

El Título se implantó durante el curso 2018/2019.

La modificación de los criterios de admisión, basada exclusivamente en el expediente académico (100%) y el cambio en el orden de impartición de las asignaturas "Métodos numéricos" y "Métodos básicos de simulación molecular", se implantarán en el curso 2023/2024.

Cronograma

Dado que el Máster está estructurado en 60 ECTS, la implantación de las modificaciones se llevará a cabo plenamente en un único curso conforme al siguiente calendario:

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	L	M	X	J	V		
16-17	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM	TERM					
17-18	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM	TERM	MEC	TERM	TERM								
18-30-19-30	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC					
19-30-20-30	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	MEC	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	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	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO	SO					
17-18	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	SO	SO	SO	SIMU	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	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	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU	SIMU									

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	L	M	X	J	V	L	M	X	J	V
16-17	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM	NUM								
17-18	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM	NUM	MD	NUM	NUM											
18-30-19-30	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD								
19-30-20-30	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD	MD								

TERM	MEC
SO	NUM
SIMU	MD
MC	PAQ

Distribución temporal aproximada preliminar de las diferentes asignaturas que componen el Título. Se han denotado como BT (Bases físicas y químicas de la Termodinámica), BME (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).

7.2 Procedimiento de adaptación

Dado que las modificaciones propuestas no afectan ni a los resultados del proceso de formación y de aprendizaje ni a la denominación, ni a las características de las asignaturas, salvo su ubicación temporal, no es necesaria adaptación alguna.

7.3 Enseñanzas que se extinguen

Ninguna

8. SISTEMA INTERNO DE GARANTÍA DE LA CALIDAD (ESG 1.1/1.7/1.8/1.9/1.10)

8.1. Sistema Interno de Garantía de la 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.

La información sobre el sistema de garantía de calidad del Máster está disponible en el siguiente enlace:

<https://unia.es/es/oferta-academica/oferta-rabida/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3#sistema-de-garantia-de-calidad>

8.2. Medios para la información pública

En el documento accesible a través del siguiente enlace se describen los medios disponibles para la información pública del Máster:

https://unia.es/images/MU_Simulación_Molecular_2022-23/MSM-Memoria-v01-8-apdo-8-2-informacion-publica.pdf

8.3. Anexos