

Cristalografía computacional y desarrollo de software cristalográfico

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y
CRISTALIZACIÓN**

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

Este documento puede utilizarse como documentación de referencia de esta asignatura para la solicitud de reconocimiento de créditos en otros estudios. Para su plena validez debe estar sellado por la Secretaría de Estudiantes UIMP.



DATOS GENERALES

Breve descripción

El **Módulo III - Cursos de especialización**, del que forma parte esta asignatura, incluye una selección de asignaturas en temas especializados que permitirán al alumno diseñar, con la ayuda de su tutor, el conjunto de conocimientos y habilidades que mejor se adapten a sus expectativas investigadoras o laborales. El alumno deberá cursar un total de 6 ECTS en este módulo.

Varias de las asignaturas ofertadas en este módulo se imparten en forma de cursos intensivos internacionales de una semana de duración abiertos a estudiantes no inscritos en el Máster, con el objetivo de diversificar y enriquecer el entorno de formación de los estudiantes con un mayor número y variedad de profesores y compañeros (futuros colegas y colaboradores).

Por la naturaleza de la enseñanza en este módulo, las asignaturas, en especial las que se corresponden con cursos internacionales, se impartirán en diferentes ubicaciones, incluyendo laboratorios extranjeros cuando la especificidad del tema así lo imponga (por ejemplo, la asignatura de "Cristalografía en grandes instalaciones"). La oferta de asignaturas, así como el número máximo de estudiantes en cada asignatura y el mínimo necesario (en su caso), se fijarán y comunicarán anualmente. Algunas de las asignaturas correspondientes a cursos internacionales tendrán periodicidad bianual.

La asignatura de **Cristalografía computacional y desarrollo de software cristalográfico** ofrece al estudiante un aprendizaje práctico de los abundantes aspectos computacionales de la cristalografía. A partir de la discusión de la representación numérica de las "propiedades" del sólido cristalino (celdilla unidad, simetría...) se introducen los algoritmos más frecuentes para el cálculo de posiciones atómicas, ángulos, etc., así como para la búsqueda de fases aproximadas y el refinamiento de las mismas para obtener una solución estructural.

El estudiante es introducido a los aspectos computacionales en la práctica mediante el desarrollo de programas usando lenguajes compilados e interpretados en conjunción con las librerías cristalográficas más populares y dedica una parte importante del tiempo al desarrollo de software bajo la supervisión del profesorado.

Finalmente también son introducidos los principales retos actuales y los temas de investigación de actualidad en cristalografía computacional, incluyendo nuevos algoritmos y aproximaciones a problemas no resueltos.

Título asignatura

Cristalografía computacional y desarrollo de software cristalográfico

Código asignatura

101182

Curso académico

2016-17

Planes donde se imparte

[MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN](#)

Créditos ECTS

3

Carácter de la asignatura

OPTATIVA

Duración

Anual

Idioma

Inglés

CONTENIDOS

Contenidos

Los contenidos de la asignatura se estructuran en los siguientes temas:

- Introducción al cálculo cristalográfico. Las matemáticas esenciales para la Cristalografía.
- Lenguajes de programación para el desarrollo de software numérico: Alto nivel frente a bajo nivel. Fortran frente a C o C++. Lenguajes de scripting: shell, Python. Uso de compiladores y depuradores.
- Introducción a la programación modular con Fortran.
- Lo esencial de Orientación a Objetos (OO): estructuras de datos, sobrecarga de funciones y operadores, encapsulado, ocultación de datos, herencia y polimorfismo. Cómo expresar OO en Fortran 95/2003.
- Uso de Internet para obtener código numérico útil en cristalografía: Netlib, TOMS, etc.
- Revisión de las librerías cristalográficas disponibles de forma pública. C CSL, CrysFML, cctbx.
- Programación de cálculos cristalográficos elementales.
- Creación de estructuras de datos para cristalografía: celdilla, átomos y grupos espaciales. Cálculos geométricos: distancias, ángulos de enlace, ángulos dihedros, etc. Cálculos de simetría. Generación de listas de reflexiones para una métrica y un grupo de simetría dados. Mapas de Fourier.
- Rutinas disponibles en CrysFML.
- Módulos matemáticos básicos. Tablas químicas y de dispersión. Utilidades. Módulo de Simetría. Tipos para celdillas y átomos. Utilidades para reflexiones: tipos para reflexiones, ausencias sistemáticas, generación de listas de reflexiones. Lectura de ficheros CIF y de patrones de difracción. Funciones de perfil de pico. Cálculo de factores de estructura. Técnicas de optimización.
- Programación usando CrysFML.
- Información sobre grupos espaciales. Comprobación de posibles grupos espaciales a partir del análisis de listas experimentales de reflexiones. Cálculo de factores de estructura a partir de los datos de un fichero CIF.
- Introducción a la programación de Interfases Gráficas.
- Métodos de programación de GUIs. Separando el código de cálculo intensivo de las interacciones con el usuario. Uso de librerías para la implementación de GUIs: Winteracter, GINO, MathFor. Software libre para la creación de GUIs.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE Y DE FORMACIÓN

Generales

CG1.- Capacidad de análisis y síntesis

CG2.- Resolución de problemas

CG3.- Trabajo en un equipo de carácter interdisciplinario

CG4.- Trabajo en un contexto internacional

CG5.- Aprendizaje y trabajo autónomos

CG6.- Capacidad de aplicar los conocimientos teóricos en la práctica

CG7.- Capacidad de elaboración y transmisión de ideas, proyectos, informes, soluciones y problemas

CG8.- Capacidad de organización y planificación

CG9.- Capacidad de entender el lenguaje y propuestas de otros especialistas

Transversales

CT1.- Comunicación oral y escrita

CT2.- Conocimiento de lenguas extranjeras

CT3.- Capacidad de gestión de la información

CT4.- Habilidades en las relaciones interpersonales

CT5.- Trabajo en equipo

CT6.- Razonamiento crítico

CT7.- Creatividad

CT8.- Uso de Internet como medio de comunicación y fuente de información

Específicas

CE4.- Entender y valorar artículos científico-técnicos de revistas especializadas en cristalografía y cristalización

CE35.- Ser capaz de solucionar problemas computacionales mediante el uso de librerías cristalográficas y lenguajes de scripting

CE36.- Ser capaz de desarrollar software cristalográfico básico para su utilización por terceros

PLAN DE APRENDIZAJE

Actividades formativas

AF1.- Clases presenciales activas: Combinación de teoría, problemas cortos, preguntas y discusión con los alumnos.

AF4.- Seminarios.

AF5.- Prácticas de computación y bases de datos.

AF6.- Tutoría individual o grupal.

AF7.- Evaluación.

AF8.- Clases prácticas en laboratorio.

AF9.- Planificación, realización y análisis de experimentos (tutelada).

AF10.- Trabajo autónomo.

AF11.- Visitas a empresa o centro de investigación.

AF12.- Trabajo en grupo.

Metodologías docentes

Esta materia se imparte como un curso internacional abierto a la participación de estudiantes no registrados en el Máster.

Dicho curso se denomina "Course on Software Development for Crystallography" y se imparte en Grenoble organizado por el Institut Laue-Langevin (ILL).

En la última edición en que participaron alumnos del máster, participaron 18 alumnos (2 de ellos del máster) y 4 profesores de reconocido prestigio en el campo.

Para más información ver la [página web del curso](#).

Resultados de aprendizaje

Los objetivos de aprendizaje a alcanzar en esta asignatura son:

- Aprendizaje de los rudimentos de métodos de programación modernos: programación modular, orientada a objetos, etc.
- Programas de tipo consola y desarrollo de interfaces gráficas para el usuario (GUI). Lenguajes de programación Fortran 95/2003 y Python.
- Aprendizaje de la utilización de librerías cristalográficas existentes: C CSL (Fortran), CrysFML (Fortran), cctbc (C++, Python), etc. Utilización de lenguajes de scripting para enlazar cálculos avanzados.
- Alcanzar el nivel suficiente para realizar programas de cálculo cristalográfico elementales: lectura de ficheros y transformación de formatos, generación de listas de reflexiones, cálculo de factores de estructura, etc.
- Alcanzar el nivel suficiente para la realización de un programa de resolución de estructuras cristalinas usando métodos de optimización global (simulated annealing) y local (gradiente) basado en librerías CrysFML o cctbx.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Descripción del sistema de evaluación

Sistema de evaluación (ponderación mínima y máxima %)

- Prueba escrita (0%-80%)
- Realización de prácticas y/o cuaderno de prácticas (0%-70%)
- Realización y presentación de trabajos e informes (0%-50%)
- Participación en seminarios (0%-30%)
- Participación en clase (0%-30%)

Calendario de exámenes

Asignatura no ofertada en el curso académico 2015-2016

PROFESORADO

Profesor responsable

García Granda, Santiago

Catedrático Universidad de Oviedo

Rodríguez Carvajal, Juan José

*Director de Investigación
Institut Laue-Langevin (ILL), Grenoble*

Profesorado

Profesor Responsable de la asignatura

BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

Bibliografía

Crystallographic Computing 5: From Chemistry to Biology. D. Moras, A.D. Podjarny and J.C. Thierry Eds. IUCr: Oxford Science Publications, Oxford University Press, 1991.

Python Scripting for Computational Science, Hans Petter Langtangen, Springer, 2004.

Fortran90 Programming, T.M.R. Ellis, Ivor R. Phillips and Thomas M. Lahey, Addison Wesley, 1994.