

**ANEXO I****Solicitud y aprobación de oferta de prácticas académicas externas de grado y/o TFG a realizar en el CSIC**

De conformidad con la cláusula cuarta, punto 1 del “Convenio entre la Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas, M.P. y la Universitat Autònoma de Barcelona para el desarrollo de prácticas académicas externas de Grado y/o TFG”, firmado con fecha 20 de octubre de 2021, se solicita la inclusión del CSIC en la oferta de prácticas académicas externas y TFG para alumno/s de esta Universidad, según se recoge a continuación.

UNIVERSIDAD	UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA
ESCUELA/FACULTAD QUE SOLICITA LAS PRÁCTICAS	ESCUELA DE INGENIERÍA
TITULACIÓN:	Grado en Ingeniería Informática
CURSO:	2022/2023
PERSONA RESPONSABLE DE PRÁCTICAS POR PARTE DE LA UNIVERSIDAD:	Jordi Pons Aróztegui
TELÉFONO Y CORREO ELECTRÓNICO DE LA PERSONA RESPONSABLE DE PRÁCTICAS DEL CENTRO DOCENTE (A EFECTOS DE COMUNICACIÓN):	Telf. 93 581 3490 Email: <a href="mailto:jordi.pons@uab.cat">jordi.pons@uab.cat</a>
ICU DEL CSIC EN EL QUE SE SOLICITA REALIZAR LAS PRÁCTICAS:	Instituto de Ciencias de Materiales de Barcelona- CSIC
Nº DE PLAZAS QUE SE SOLICITAN:	1
TIPO DE PRÁCTICA (CURRICULAR O TFG):	Trabajo Final de Grado
FECHA PREVISTA DE INICIO Y DURACIÓN:	30/01/2023 hasta 15/07/2023

Bellaterra (Cerdanyola del Vallès) a 18 de enero de 2023

El responsable de prácticas del Centro docente

Aprobado por el director/Responsable del  
(ICU) del CSIC

Fdo: Jordi Pons Aróztegui

Fdo: Xavier Obradors Berenguer

**ANEXO II****Comunicación de la relación de estudiantes que realizarán prácticas académicas externas de grado y/o TFG**

De conformidad con la cláusula cuarta, punto 3 del “Convenio entre la Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas, M.P. y la Universitat Autònoma de Barcelona para el desarrollo de prácticas académicas externas de Grado y/o TFG”, firmado con fecha 20 de octubre de 2021, teniendo en cuenta que con fecha 19 de octubre de 2021 fue aprobada la solicitud de inclusión del CSIC en la oferta de prácticas académicas externas y TFG de la Universidad en el Instituto de Ciencias de Materiales de Barcelona (ICU del CSIC), se comunica la relación de los/las alumnos/as del Centro docente Escuela de Ingeniería que realizarán las prácticas o TFG en dicho ICU, de acuerdo con los detalles del proyecto formativo que se prevén en el Anexo III para las prácticas de cada alumno/a.

NOMBRE Y APELLIDOS DEL ALUMNO	DNI/NIE	CURSO	TITULACIÓN
Joan Tibau Terma	46416454Q	2022/2023	Grado en Ingeniería Informática

Bellaterra (Cerdanyola del Vallès) a 18 de enero de 2023

El responsable de prácticas del Centro docente

Aprobado por el director Responsable del  
(ICU) del CSIC

Fdo: Jordi Pons Aróztegui

Fdo: Xavier Obradors Berenguer

### Anexo III

#### Detalles concretos del proyecto formativo de prácticas académicas externas de grado y/o TFG

De conformidad con la cláusula cuarta, punto 4 del “Convenio entre la Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas, M.P. y la Universitat Autònoma de Barcelona para el desarrollo de prácticas académicas externas de Grado y/o TFG”, firmado con fecha 20 de octubre de 2021, los detalles concretos del proyecto formativo a realizar por el/la alumno que se cita a continuación, autorizado para realizar prácticas curriculares en el Instituto de Ciencias de Materiales de Barcelona (ICU del CSIC), con fecha 19 de octubre de 2021, según el anexo II, son los siguientes:

<b>ALUMNO:</b>	JOAN TIBAU TERMA			<b>DNI/NIE:</b>	46416454Q
<b>DOMICILIO:</b>	C/ PROVIDÈNCIA, NÚM.5, 4T 2ª, BARCELONA (08024)			<b>TELÉFONO:</b>	656626055
<b>ESCUELA/FACULTAD:</b>	ESCUELA DE INGENIERÍA				
<b>TITULACIÓN:</b>	<b>GRADO EN INGENIERÍA INFORMÁTICA</b>			<b>CURSO:</b>	2022/2023
<b>ICU DEL CSIC:</b>	ICMAB-CSIC				
<b>FECHA DE INCORPORACIÓN:</b>	30/01/2023		<b>FECHA DE FINALIZACIÓN:</b>	15/07/2023	
<b>HORAS DIARIAS DE PRÁCTICAS:</b>	A convenir según el horario de clases de Joan Tibau Terma	<b>DÍAS DE LA SEMANA:</b>	LUNES VIERNES	<b>HORARIO:</b>	A convenir según el horario de clases de Joan Tibau Terma
<b>TUTOR DEL ICU DEL CSIC:</b>	JORDI FARAUDO GENER				
<b>TUTOR ACADÉMICO DE LA ESCUELA/FACULTAD:</b>	RAMON BALDRICH CASELLES				
<b>Título TFG:</b> (provisional) Modelización del comportamiento e interacciones de moléculas utilizando redes neuronales  Breve descripción/objetivo:  Entrenar una NN sencilla con datos de simulaciones moleculares para que sea capaz de predecir el comportamiento de moléculas.  <b>Plan de trabajo:</b>  - Seleccionar una base de datos de simulaciones de dinámica molecular, en caso de falta de datos o que las BD en cuestión no sean aptas para el proyecto construir alguna sencilla desde cero. - Idealmente deberían ser de interacciones entre moléculas muy simples para poder probar el funcionamiento base del modelo. - Entrenar la NN a partir de estos datos para cada tipo de molécula que se quiera simular. - Realizar las simulaciones de cada molécula de configuración instantánea paralelamente a partir de la imagen inicial y construir la siguiente con los resultados de cada una de las simulaciones. - Evaluar y comparar resultados. - Escalar el modelo a moléculas y simulaciones de mayor escala.					

El alumno abajo firmante, declara su conformidad para realizar el TFG, según los detalles anteriores, ateniéndose a las normas contempladas en el citado convenio.

Y, en prueba de conformidad, firman el presente documento, por triplicado ejemplar, en Bellaterra (Cerdanyola del Vallès), el 18 de enero de 2023.

El Tutor Académico de la Universidad    El Tutor del (ICU) del CSIC    El alumno

Fdo: Ramon Baldrich Caselles

Fdo: Jordi Faraudo Gener

Fdo: Joan Tibau Terma