

1. Asignatura	Monte Carlo avanzado				
Carácter:	obligatoria	ECTS	5	Temporal:	C2
Lenguas impartición	Castellano				
2. Resultados de aprendizaje:					
<ol style="list-style-type: none"> 1. Conocer los distintos colectivos termodinámicos, comprender su fundamento teórico y ser capaz de valorar cual es el más adecuado para cada problema. 2. Conocer y comprender el fundamento de métodos para sesgar y acelerar el muestreo en simulaciones Monte Carlo. 3. Conocer y comprender los métodos de simulación para el cálculo de diagrama de fases. 4. Familiarizarse con diversos métodos para muestrear eventos poco frecuentes. 5. Ser capaz de programar un código Monte Carlo complejo que utilice métodos avanzados. 6. Ser capaz de analizar datos y extraer la información relevante de una simulación. 					
3. Contenidos					
<u>3.1. Descriptores</u>					
Monte Carlo en diferentes colectivos (NVT, NpT, μ VT). Simulación de moléculas rígidas y flexibles. Cálculo de energías libres y diagrama de fases. Métodos para sesgar el muestro. Simulación de eventos poco frecuentes.					
<u>3.2. Temario</u>					
Tema 1. Revisión del método de Monte Carlo. Algoritmo Monte Carlo básico Movimientos rotacionales: ángulos de Euler y/o cuaterniones.					
Tema 2. Monte Carlo en el colectivo isobárico-isotérmico (NpT). Derivación de la probabilidad de aceptación. Implementación de los movimientos de volumen. Utilización de coordenadas de caja. Extensión a cajas anisótropas (Parrinello-Rahman). Definición de la matriz de caja y unidades de caja. Ejemplos de aplicabilidad: ecuaciones de estado de fluidos y sólidos.					
Tema 3. Monte Carlo en el colectivo gran canónico (μVT). Derivación de la probabilidad de aceptación. Implementación de las inserciones/borrado de partículas. Ejemplos de aplicabilidad: ecuaciones de estado y adsorción en medios confinados. Mezclas: colectivo semi gran canónico, derivación e implementación.					
Tema 4. Métodos Monte Carlo con muestreos sesgados. Idea general del muestreo sesgado. Muestreo de conformaciones de polímeros: “ <i>Configurational bias</i> ”. Derivación del método e implementación. Otros métodos de sesgado: sesgo en los movimientos rotacionales, en la inserción de partículas, etc.					
Tema 5. Cálculo de equilibrio de fases. Introducción: ¿por qué son necesarios métodos especiales? Fenómenos de histéresis en las transiciones de fase. Derivación e implementación del colectivo de Gibbs. Integración termodinámica (en isothermas, isóbaras e isocoras). Cálculo del potencial químico con el método de Widom. Evaluación de energía libre de sólidos: método del cristal de Einstein. Trazado de líneas de coexistencia: método Gibbs-Duhem.					
Tema 6. Métodos para mejorar el muestreo. Introducción: ejemplos donde Monte Carlo proporciona muestreos poco eficientes. Superficies de energía potencial rugosas. Mejora del muestreo mediante intercambio de simulaciones a diferentes temperaturas (“ <i>replica-exchange</i> ”). Método Wang-Landau: cálculo de la densidad de estados. Análisis de resultados con el método de <i>histogram-reweighting</i> .					
Tema 7. Muestreo de eventos poco frecuentes. Introducción: nucleación del sólido como ejemplo. Método “ <i>umbrella-sampling</i> ”, definición de coordenadas de reacción. Nociones básicas de “ <i>Transition Path Sampling</i> ”.					
<u>3.3. Bibliografía</u>					
<ol style="list-style-type: none"> 1. Frenkel y Smit, <i>Understanding molecular simulation</i>. 2. Newman y Barkema, <i>Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i>. 3. Tuckerman, <i>Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation</i>. 4. Curso de David Kofke (http://www.eng.buffalo.edu/~kofke/ce530/). 5. Curso MolSim (http://www.acmm.nl/molsim/molsim2015/index.html). 					
4. Observaciones:					
5. Competencias:					
5.1. Básicas y generales	Generales	CG1, CG2, CG3, CG4			
	Básicas	CB6, CB7, CB8, CB9, CB10			
5.2. Transversales	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6				
5.3. Específicas	CE1, CE2, CE3, CE4, CE5, CE6, CE7, CE8, CE9, CE10, CE11				

6. Actividades formativas		
Actividades formativas	Horas	Presencialidad (%)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	30	100
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	40	50
AF3. Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	55	0
Total	125	-
7. Metodologías docentes		
Tipo de metodología	Denominación	
MD1. Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i> MD2. Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i> MD3. Tutorías individuales y/o colectivas programadas MD4. Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.) MD5. Realización de programas computacionales MD6. Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el MD7. <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)		
8. Sistemas de evaluación	Pond. Mínima	Pond. Máxima
Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (<i>Adobe Connect</i>) y Campus Virtual (<i>Moodle</i>) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)	0	0.2
Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura	0.2	0.4
Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (<i>Moodle</i>)	0.2	0.4
Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura	0.2	0.4