

# Simulación Molecular – MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN

Métodos básicos de simulación molecular

## GUÍA DOCENTE



**INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN Y TRAMITACIÓN DE LAS GUÍAS DOCENTES  
DE LAS ASIGNATURAS**

Curso Académico:	2022-2023					
Máster:	Simulación Molecular					
Denominación de la asignatura	Métodos básicos de simulación molecular					
Módulo	MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN					
Curso académico	2022-2023					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	<b>Teoría:</b>	5.00	<b>Práctica:</b>	0.00	<b>Total:</b>	5.00
Periodo de impartición	Del 9 febrero al 21 de marzo de 2023					
Modalidad	VIRTUAL					
Web universidad coordinadora	<a href="https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3">https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3</a>					
Web universidad colaboradora	<a href="http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular">http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular</a>					
Idiomas de impartición	Español					

<b>Profesorado</b>			
<b>Nombre y apellidos</b>	<b>Email</b>	<b>Universidad</b>	<b>Créditos</b>
Enrique de Miguel Agustino		UNIVERSIDAD DE HUELVA	3.00
Manuel Martínez Piñeiro		UNIVERSIDAD DE VIGO	2.00
<b>TUTORIAS (Coordinador/a de asignatura): Horario y localización</b>			
Aula Virtual de la UNIA <a href="https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular">https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular</a>			
<b>COMPETENCIAS</b>			
Básicas y Generales	<p>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.</p> <p>CG2: Demostrar dominio en la utilización de bibliografía científica</p>		

	<p>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.</p> <p>CG3: Comprender y ser capaz de elaborar informes, presentaciones y/o publicaciones científicas en el ámbito de la Simulación Molecular.</p> <p>CG4: Comprender y ser capaz de concebir y planificar un proceso de investigación en el ámbito de la Simulación Molecular.</p> <p>CB6: Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.</p> <p>CB7: Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.</p> <p>CB9: Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.</p> <p>CB10: Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.</p>
<p>Transversales</p>	<p>CT2: Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.</p> <p>CT3: Gestionar la información y el conocimiento.</p> <p>CT4: Comprometerse con la ética y la responsabilidad social como ciudadano y como profesional.</p> <p>CT5: Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.</p> <p>CT6: Sensibilización en temas medioambientales.</p>
<p>Específicas</p>	<p>CE1: Ser capaz de trabajar en los entornos informáticos que se emplean en el contexto de la simulación molecular.</p> <p>CE2: Ser capaz de desarrollar scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo.</p>

CE3: Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel.

CE4: Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular.

CE5: Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional.

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.

CE7: Comprender los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas.

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

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.

CE11: Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones.

### RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1. Conocer los aspectos históricos y las perspectivas futuras de la simulación molecular.
2. Conocer las técnicas básicas para la evaluación de interacciones en sistemas volumétricos sencillos.
3. Conocer las técnicas de integración de ecuaciones diferenciales acopladas por elementos finitos en Dinámica Molecular
4. Familiarizarse con procedimientos de muestreo aleatorio de distribuciones estadísticas.
5. Determinar propiedades termodinámicas y dinámicas básicas mediante simulación.
6. Conocer y comprender las ventajas de los distintos métodos de aceleración de cálculo de energías y

fuerzas.

7. Saber identificar las ventajas y desventajas de las técnicas de simulación molecular.  
Alcanzar un hábito de programación modular aplicada a problemas de simulación molecular.

## CONTENIDOS

### Descriptores

Mecánica clásica. Simulación por ordenador. Programación de alto nivel. Método de Dinámica Molecular. Método de Monte Carlo. Mecánica estadística. Líquidos y sólidos. Campos de fuerza: all-atoms y united-atoms.

### Temario

Tema 1. Introducción. Pasado, presente y futuro de las simulaciones (breve resumen de hitos en computación).

Tema 2. Revisión de Mecánica básica. Leyes de Newton. Conservación de la energía. Conservación del momento. Reversibilidad. Ejemplos sencillos. Cálculo de fuerzas pares.

Tema 3. Simulación Molecular. Condiciones de contorno periódicas. Condición de imagen mínima. Truncamiento de potenciales. Esquemas de truncamiento. Correcciones al truncamiento.

Tema 4. Método de Dinámica Molecular. Discretización de las ecuaciones de Newton. Algoritmos de Leapfrog, Verlet y Velocity-Verlet. Estabilidad del algoritmo y monitorización. Termostatación sencilla. Efecto impulsivo del truncamiento.

Tema 5. Método de Monte Carlo. Números aleatorios. Muestreo aleatorio. Muestreo de importancia. Método de Metropolis.

Tema 6. Cálculo de propiedades. Ecuación de estado. Correlaciones espaciales. Función de autocorrelación. Coeficiente de difusión. Otras propiedades de transporte.

Tema 7. Optimización de los cálculos. Lista de vecinos de Verlet. Lista de Celdas. Proyecto: Implementar lista de vecinos en códigos.

Tema 8. Aplicaciones de la simulación molecular. Equilibrado. Cálculo de propiedades de ecuación de estado. Cálculo de propiedades espaciales. Cálculo de propiedades dinámicas. Cálculo de diagramas de fase.

Tema 9. Campos de fuerza. Introducción. Modelos de todos los átomos (all-atoms), átomos unidos (united-atoms) y coarse-grained. Interacciones no enlazadas (non-bonded). Interacciones enlazadas (bonded). Potenciales de enlace (bonding), de flexión (bending) y de torsión (torsional). Familias de modelos TraPPE. Otros campos de fuerza utilizados en la literatura.

ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES			
Véase actividades formativas.			
Actividad formativa	Modalidad de enseñanza	Dedicación (horas de trabajo autónomo del estudiante)	Dedicación (horas de trabajo del estudiante con apoyo del profesor)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	VIRTUAL	30	30
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	VIRTUAL	20	20
AF3. Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	VIRTUAL	25	0
SISTEMA DE EVALUACIÓN			
Véase estrategias/metodologías de evaluación.			
OBSERVACIONES			
Estrategias/metodologías de evaluación			Porcentaje de valoración sobre el total
Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (Adobe Connect) y Campus Virtual (Moodle) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)			0 - 20%%
Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura			20% - 40%%
Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (Moodle)			20% - 40%%
Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura			20% - 40%%
BIBLIOGRAFÍA			
M. Allen and D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids (Clarendon Press, Oxford, 1987). D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation, 2nd Edition (Academic Press, San Diego, 2002).			

D. C. Rapaport, The art of of molecular dynamics simulations, 2nd Edition (Cambridge University Press, Cambridge, 2011).

## PLAN DE CONTINGENCIA

No procede, ya que la enseñanza es VIRTUAL.

Conforme a lo dispuesto en la legislación vigente en materia de protección de datos de carácter personal (Reglamento (UE) 2016/679, de 27 de abril) le informamos que los datos personales que nos ha facilitado pasarán a ser tratados por la UNIVERSIDAD INTERNACIONAL DE ANDALUCÍA como responsable del tratamiento, siendo órgano competente en la materia la Dirección del Área de Gestión Académica (Monasterio Santa María de las Cuevas, C / Américo Vesputio nº2. Isla de La Cartuja - 41092 - Sevilla) ante quien Ud. puede ejercitar sus derechos de acceso, rectificación, limitación, oposición o portabilidad señalando concretamente la causa de su solicitud y acompañando copia de su documento acreditativo de identidad. La solicitud podrá hacerse mediante escrito en formato papel o por medios electrónicos.

Caso de no obtener contestación o ver desestimada su solicitud puede dirigirse al Delegado de Protección de Datos de la Universidad (rgpd@unia.es Tfno 954 462299) o en reclamación a la Agencia Española de Protección de Datos a través de los formularios que esa entidad tiene habilitados al efecto y que son accesibles desde su página web: <https://sedeagpd.gob.es>

Como responsable, la Universidad le informa que exclusivamente tratará los datos personales que Ud. le facilite para dar cumplimiento a los siguientes fines:

a) Gestión académica y administrativa de:

- Participación en procesos de acceso y admisión a las enseñanzas oficiales (Grado, Máster y Doctorado) o de formación Continua de la Universidad Internacional de Andalucía.

- Inscripción y/o matrícula como alumno en cualquiera de las titulaciones oficiales (Grado, Máster y Doctorado), Formación Continua u otras actividades académicas ofrecidas por la Universidad Internacional de Andalucía.

- Participación en convocatorias de becas y ayudas al estudio de la Universidad Internacional de Andalucía, la Admón. General del Estado o la de las Comunidades Autónomas y de otras entidades públicas o privadas.

- Participación en convocatorias de programas de movilidad de carácter nacional o internacional.

- Obtención y expedición de títulos oficiales, títulos propios y otros títulos académico

b) Gestión de su participación como estudiante en prácticas y actividades formativas nacionales o internacionales en instituciones, empresas, organismos o en otros centros.

c) Utilización de servicios universitarios como obtención del carné universitario, bibliotecas, actividades deportivas u otros.

La Universidad se encuentra legitimada para tratar estos datos al ser necesarios para la ejecución de la relación jurídica establecida entre Ud. y la Universidad y para que ésta pueda cumplir con sus obligaciones legales establecidas en la Ley Orgánica 6/2001, de Universidades.

Usted responde de la veracidad de los datos personales que ha proporcionado a la Universidad y de su actualización.

La Universidad comunicará los datos personales que sean indispensables, y nunca en otro caso, a las siguientes categorías de destinatarios:

- A otras Administraciones y organismos públicos para el ejercicio de las competencias que les sean propias y compatibles con las finalidades arriba enunciadas (Así - a modo enunciativo y no limitativo - a

Ministerios con competencias en educación y ciencia, a otras administraciones, a otras Universidades o Centros formativos equivalentes para la gestión de traslados, a empresas para la realización de prácticas)

- A entidades bancarias para la gestión de pagos y cobros.

- A organismos públicos o privados en virtud de la celebración de convenios de colaboración o contratos, conforme a lo dispuesto en la legislación vigente en materia de Protección de Datos.

- A los servicios de la propia Universidad que sean adecuados para gestionar la utilización de los servicios universitarios ofertados.

Sus datos de carácter personal se tratarán y conservarán por la Universidad conforme a la legislación vigente en materia de protección de datos, pasando luego a formar parte -previo expurgo- del Archivo Histórico Universitario conforme a lo dispuesto en la legislación sobre Patrimonio Histórico.

La Universidad sólo prevé la transferencia de datos a terceros países en el caso de su participación como alumno en alguno de los programas de formación o becas de carácter internacional. La transferencia se realizará siguiendo las directrices establecidas al respecto por el Reglamento Europeo de Protección de Datos y normativa de desarrollo.

El Servicio de Protección de Datos de la Universidad Internacional de Andalucía cuenta con una página en la que incluye legislación, información y modelos en relación con la Protección de Datos Personales a la que puede acceder desde el siguiente enlace: <https://www.unia.es/protecciondatos>