

# Simulación Molecular – MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN

Paquetes de simulación molecular

## GUÍA DOCENTE



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

1. Las guías docentes de las asignaturas de los programas oficiales de postgrado que coordina la Universidad Internacional de Andalucía se deben adecuar a los criterios académicos que se concretan en el plan de contingencia para la adaptación de las actividades académicas de los programas en el curso académico 2020-21, aprobado en el Consejo de Gobierno en la sesión celebrada el pasado 19 de junio de 2020 .

2. Las guías docentes de las asignaturas recogerán la programación del curso académico 2020-2021 de acuerdo con la modalidad en que se halle verificada en la memoria del correspondiente título, aunque deberán incluir adicionalmente apartados específicos donde se diseñen y planifiquen las adaptaciones de la asignatura a dos posibles escenarios alternativos: por un lado, un escenario de menor actividad académica presencial como consecuencia de la adopción de medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal destinadas a limitar el aforo permitido en las aulas(escenario A); y por otro, un escenario de suspensión de la actividad presencial por emergencia sanitaria(escenario B). Este último escenario del plan de contingencia también podrá activarse si las restricciones a los desplazamientos internacionales por motivos sanitarios impiden o dificultan la modalidad presencial.

Adaptaciones de la programación académica al escenario A de menor presencialidad: se adoptará un sistema multimodal o híbrido de enseñanza que combine clases presenciales, clases en línea(sesiones sincronicas) y actividades formativas no presenciales para el aprendizaje autónomo del estudiante.

Adaptaciones de la programación académica al escenario B de suspensión de la actividad presencial: en este caso se acordará la adaptación de las actividades formativas a docencia virtual en todas las materias del programa y se desarrollará a través de los recursos informáticos disponibles en la plataforma de teledocencia de la UNIA.

La activación del plan de contingencia bien en el escenario A o bien en el escenario B, vendrá de la mano, en primera instancia, de las medidas que puedan en su caso establecer las autoridades sanitarias.

3. Debe tenerse presente que los objetivos, competencias y resultados de aprendizaje no pueden verse alterados.

4. El coordinador/a de cada módulo/asignatura(incluyendo los Trabajos Fin de Máster y Prácticas Curriculares), consensuará con el equipo docente la guía docente siempre en consonancia con el plan de contingencia para la adaptación de las actividades académicas de los programas oficiales de postgrado que coordina la Universidad Internacional de Andalucía a las situaciones extraordinarias que se deriven de la evolución de la pandemia de la COVID-19, aprobado en la sesión del día 19 de junio de Consejo de Gobierno de la Universidad internacional de Andalucía.

5. Estos coordinadores de asignatura serán los responsables de elaborar las guías de cada asignatura y una vez cumplimentadas las remitirán a la Dirección del Máster y al Presidente de la Comisión de Garantía de Calidad(en el caso de que ambos cargos no recaigan en la misma persona).

6. La Comisión de Garantía de Calidad del Máster será la responsable de coordinar el proceso, recabando las guías de los coordinadores y enviando la propuesta, una vez aprobada por la Comisión de Garantía de Calidad(que levantará acta de la reunión telemática celebrada), a la Comisión de Postgrado, para su visto bueno. Las guías cumplimentadas en su conjunto(incluyendo los apartados de los escenarios A y B) deberán ser enviadas al Vicerrectorado de Postgrado(postgrado@unia.es) antes del 15 de julio de 2020

7. Una vez aprobadas, las guías docentes deberán ser publicadas y darles la difusión oportuna tanto en los espacios virtuales del Máster como en la web oficial de los mismos cara, en última instancia, a garantizar la transparencia de la información a los estudiantes.

Curso Académico:	2021-2022					
Máster:	Simulación Molecular					
Denominación de la asignatura	Paquetes de simulación molecular					
Módulo	MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN					
Curso académico	2021-2022					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	<b>Teoría:</b>	5.00	<b>Práctica:</b>	0.00	<b>Total:</b>	5.00
Periodo de impartición	Del 11 de febrero al 22 de marzo de 2022					
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>
Jesús Algaba Fernández	j.algaba16@imperial.ac.uk	IMPERIAL COLLEGE LONDON	2.00
José Matías Garrido Acuña	josemagarrido@udec.cl	UNIVERSIDAD DE CONCEPCION	1.50
Diego González Salgado	dgs@uvigo.es	UNIVERSIDAD DE VIGO	1.50
<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>			
<b>Básicas y Generales</b>	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		

	<p>Estadística y la Simulación Molecular.</p> <p>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.</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>CB8: Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.</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>

	CT6: Sensibilización en temas medioambientales.
Específicas	<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> <p>CE3: Ser capaz de crear estructuras algorítmicas básicas, en forma modular, en el contexto de lenguajes de programación de alto nivel.</p> <p>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.</p> <p>CE7: Comprender los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>CE11: Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones.</p>
<b>RESULTADOS DE APRENDIZAJE</b>	
<ol style="list-style-type: none"> <li>Entender los fundamentos de la mecánica clásica de sistemas conservativos en su formulación lagrangiana y hamiltoniana.</li> <li>Conocer distintos métodos de resolución numérica de las ecuaciones de evolución de la mecánica clásica.</li> </ol>	

3. Entender la conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de un sistema molecular.
4. Determinar las propiedades de equilibrio de sistemas moleculares en distintos colectivos.
5. Determinar las propiedades de transporte en sistemas moleculares.
6. Caracterizar computacionalmente el comportamiento de sistemas moleculares fuera del equilibrio.
7. Profundizar en las habilidades de programación necesarias para implementar y ejecutar códigos de Dinámica Molecular.
8. Saber identificar la metodología más apropiada para la obtención de cada propiedad de interés de un sistema molecular.

## **CONTENIDOS**

### Descriptores

Gromacs. Termostatos en Dinámica Molecular. Barostatos en Dinámica Molecular. Sistemas de ficheros de Gromacs. Determinación de propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas con Gromacs. Cálculo de equilibrios de fase con Gromacs.

### Temario

Tema 1. Introducción a los paquetes de simulación molecular. Gromacs. LAMMPS, DL\_POLY. NAMD. HooMD-Blue.

Tema 2. Termostatos y baróstatos en Dinámica Molecular. Formulación lagrangiana de la Dinámica Molecular. Concepto de termostato. Termostato de Berendsen. Termostato de Nosé-Hoover. Termostato de reescalado estocástico. Concepto de barostato. Barostato de Berendsen. Barostato de Parrinello-Rahman.

Tema 3. Dinámica Molecular con GROMACS I. Introducción. Manejo de ficheros de entrada y salida. Visualización de resultados. Aspectos prácticos de la Dinámica Molecular en GROMCAS. Elección de los parámetros de simulación: paso de tiempo, truncamiento del potencial, elección del campo de fuerzas, dimensiones del sistema simulado y geometría de las condiciones de contorno periódicas.

Tema 4. Dinámica Molecular con GROMACS II. Termostatos y barostatos. Análisis de trayectorias. Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales. Cálculo de propiedades dinámicas. Funciones de autocorrelation. Propiedades de transporte. Aplicaciones a sólidos y líquidos.

## **ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES**

<b>Actividad formativa</b>	<b>Modalidad de enseñanza</b>	<b>Dedicación</b> (horas de trabajo autónomo del estudiante)	<b>Dedicación</b> (horas de trabajo del estudiante con apoyo del profesor)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	VIRTUAL	20	20
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	VIRTUAL	60	30
AF3. Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	VIRTUAL	45	0
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>			
<b>OBSERVACIONES</b>			
None			
<b>Estrategias/metodologías de evaluación</b>			<b>Porcentaje de valoración sobre el total</b>
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%%
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			50-70%%
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>			
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. M. Allen and D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987.</li> <li>2. D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation, 2nd Edition, Academic Press, San Diego, 2002.</li> <li>3. J. M. Haile, Molecular Dynamics simulations, John Wiley and sons, 1997.</li> <li>4. A. R. Leach, Molecular modelling. Principles and applications, Prentice Hall, 2001.</li> <li>5. T. Schlick, Molecular modelling and simulation (Springer, 2006).</li> </ol>			
<b>PLAN DE CONTINGENCIA</b>			
No procede, ya que la enseñanza es VIRTUAL.			

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>