

<b>1. Asignatura</b>	Métodos básicos de simulación molecular				
<b>Carácter:</b>	obligatoria	<b>ECTS</b>	5	<b>Temporal:</b>	C1
<b>Lenguas impartición</b>	Castellano				
<b>2. Resultados de aprendizaje:</b>					
<p>1. Conocer los aspectos históricos y las perspectivas futuras de la simulación molecular.</p> <p>2. Conocer las técnicas básicas para la evaluación de interacciones en sistemas volumétricos sencillos.</p> <p>3. Conocer las técnicas de integración de ecuaciones diferenciales acopladas por elementos finitos en Dinámica Molecular</p> <p>4. Familiarizarse con procedimientos de muestreo aleatorio de distribuciones estadísticas.</p> <p>5. Determinar propiedades termodinámicas y dinámicas básicas mediante simulación.</p> <p>6. Conocer y comprender las ventajas de los distintos métodos de aceleración de cálculo de energías y fuerzas.</p> <p>7. Saber identificar las ventajas y desventajas de las técnicas de simulación molecular.</p> <p>Alcanzar un hábito de programación modular aplicada a problemas de simulación molecular.</p>					
<b>3. Contenidos</b>					
<u>3.1. Descriptores</u>					
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.					
<u>3.2. Temario</u>					
<b>Tema 1. Introducción.</b> Pasado, presente y futuro de las simulaciones (breve resumen de hitos en computación).					
<b>Tema 2. Revisión de Mecánica básica.</b> Leyes de Newton. Conservación de la energía. Conservación del momento. Reversibilidad. Ejemplos sencillos. Cálculo de fuerzas pares.					
<b>Tema 3. Simulación Molecular.</b> Condiciones de contorno periódicas. Condición de imagen mínima. Truncamiento de potenciales. Esquemas de truncamiento. Correcciones al truncamiento.					
<b>Tema 4. Método de Dinámica Molecular.</b> Discretización de las ecuaciones de Newton. Algoritmos de Leapfrog, Verlet y Velocity-Verlet. Estabilidad del algoritmo y monitorización. Termostatación sencilla. Efecto impulsivo del truncamiento.					
<b>Tema 5. Método de Monte Carlo.</b> Números aleatorios. Muestreo aleatorio. Muestreo de importancia. Método de Metropolis.					
<b>Tema 6. Cálculo de propiedades.</b> Ecuación de estado. Correlaciones espaciales. Función de autocorrelación. Coeficiente de difusión. Otras propiedades de transporte.					
<b>Tema 7. Optimización de los cálculos.</b> Lista de vecinos de Verlet. Lista de Celdas. Proyecto: Implementar lista de vecinos en códigos.					
<b>Tema 8. Aplicaciones de la simulación molecular.</b> Equilibrado. Cálculo de propiedades de ecuación de estado. Cálculo de propiedades espaciales. Cálculo de propiedades dinámicas. Cálculo de diagramas de fase.					
<b>Tema 9. Campos de fuerza.</b> Introducción. Modelos de todos los átomos ( <i>all-atoms</i> ), átomos unidos ( <i>united-atoms</i> ) y <i>coarse-grained</i> . Interacciones no enlazadas ( <i>non-bonded</i> ). Interacciones enlazadas ( <i>bonded</i> ). Potenciales de enlace ( <i>bonding</i> ), de flexión ( <i>bending</i> ) y de torsión ( <i>torsional</i> ). Familias de modelos TraPPE. Otros campos de fuerza utilizados en la literatura.					
<u>3.3. Bibliografía</u>					
<p>1. M. Allen and D. Tildesley, <i>Computer Simulation of Liquids</i> (Clarendon Press, Oxford, 1987).</p> <p>2. D. Frenkel and B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation</i>, 2<sup>nd</sup> Edition (Academic Press, San Diego, 2002).</p> <p>3. D. C. Rapaport, <i>The art of of molecular dynamics simulations</i>, 2<sup>nd</sup> Edition (Cambridge University Press, Cambridge, 2011).</p>					
<b>4. Observaciones:</b>					
<b>5. Competencias:</b>					
<b>5.1. Básicas y generales</b>	<b>Generales</b>	CG1, CG2, CG3, CG4			
	<b>Básicas</b>	CB6, CB7, CB9, CB10			
<b>5.2. Transversales</b>	CT2, CT3, CT4, CT5, CT6				
<b>5.3. Específicas</b>	CE1, CE2, CE3, CE4, CE5, CE6, CE7, CE8, CE10, CE11				
<b>6. Actividades formativas</b>					
<b>Actividades formativas</b>	<b>Horas</b>		<b>Presencialidad (%)</b>		
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	-
<b>7. Metodologías docentes</b>		
<b>Tipo de metodología</b>	<b>Denominación</b>	
MD1. Clases expositivas mediante <i>Adobe Connect</i> . MD3. Talleres de programación a través de <i>Adobe Connect</i> . MD4. Tutorías individuales y/o colectivas programadas. MD5. Trabajos tutelados (proyectos, programas, etc.). MD7. Realización de programas computacionales. MD8. Estudio personal (lectura de bibliografía recomendada, realización de cuestionarios, tests y exámenes preparatorios vía el <i>Moodle</i> del Campus Virtual, uso y estudio de códigos computacionales de la biblioteca de la Red Española de Simulación Molecular, etc.)		
<b>8. Sistemas de evaluación</b>	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