

<b>1. Asignatura</b>	Monte Carlo avanzado				
<b>Carácter:</b>	obligatoria	<b>ECTS</b>	5	<b>Temporal:</b>	C2
<b>Lenguas impartición</b>	Castellano				
<b>2. Resultados de aprendizaje:</b>					
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Conocer los distintos colectivos termodinámicos, comprender su fundamento teórico y ser capaz de valorar cual es el más adecuado para cada problema.</li> <li>2. Conocer y comprender el fundamento de métodos para sesgar y acelerar el muestreo en simulaciones Monte Carlo.</li> <li>3. Conocer y comprender los métodos de simulación para el cálculo de diagrama de fases.</li> <li>4. Familiarizarse con diversos métodos para muestrear eventos poco frecuentes.</li> <li>5. Ser capaz de programar un código Monte Carlo complejo que utilice métodos avanzados.</li> <li>6. Ser capaz de analizar datos y extraer la información relevante de una simulación.</li> </ol>					
<b>3. Contenidos</b>					
<u>3.1. Descriptores</u>					
Monte Carlo en diferentes colectivos (NVT, NpT, $\mu$ 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>					
<b>Tema 1. Revisión del método de Monte Carlo.</b> Algoritmo Monte Carlo básico Movimientos rotacionales: ángulos de Euler y/o cuaterniones.					
<b>Tema 2. Monte Carlo en el colectivo isobárico-isotérmico (NpT).</b> 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.					
<b>Tema 3. Monte Carlo en el colectivo gran canónico (<math>\mu</math>VT).</b> 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.					
<b>Tema 4. Métodos Monte Carlo con muestreos sesgados.</b> 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.					
<b>Tema 5. Cálculo de equilibrio de fases.</b> 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.					
<b>Tema 6. Métodos para mejorar el muestreo.</b> 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> .					
<b>Tema 7. Muestreo de eventos poco frecuentes.</b> 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"> <li>1. Frenkel y Smit, <i>Understanding molecular simulation</i>.</li> <li>2. Newman y Barkema, <i>Monte Carlo Methods in Statistical Physics</i>.</li> <li>3. Tuckerman, <i>Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation</i>.</li> <li>4. Curso de David Kofke (<a href="http://www.eng.buffalo.edu/~kofke/ce530/">http://www.eng.buffalo.edu/~kofke/ce530/</a>).</li> <li>5. Curso MolSim (<a href="http://www.acmm.nl/molsim/molsim2015/index.html">http://www.acmm.nl/molsim/molsim2015/index.html</a>).</li> </ol>					
<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, CB8, 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, CE9, 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> 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.)		
<b>8. Sistemas de evaluación</b>	<b>Pond. Mínima</b>	<b>Pond. Máxima</b>
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