

# Simulación Molecular – MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN

Dinámica Molecular avanzada

## GUÍA DOCENTE



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

Tipo de Acción Formativa	Máster Universitario					
Nombre de la Acción Formativa	Simulación Molecular					
Denominación de la asignatura	Dinámica Molecular avanzada					
Módulo	MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN					
Curso académico	2023-2024					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	<b>Teoría:</b>	5.00	<b>Práctica:</b>	0.00	<b>Total:</b>	5.00
Periodo de impartición	Del 13 de marzo al 23 de mayo de 2024					
Modalidad Docente	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>					
Idioma/s de impartición	Español					

**Responsable/s de la asignatura**

Nombre y apellidos	Email	Universidad	Créditos
--------------------	-------	-------------	----------

**Profesorado**

Nombre y apellidos	Email	Universidad	Créditos
José Reyes Alejandro Ramírez		UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA	2.00
Luis González MacDowell		UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID	1.50
Sergio Andrés Mejía Matallana		UNIVERSIDAD DE CONCEPCION	1.50

**TUTORIAS: Horario y localización**

Aula Virtual de la UNIA: <https://campusvirtual.unia.es/>

### DESCRIPTORES DE CONTENIDOS

#### Descriptores

Mecánica analítica. Dinámica Molecular en distintos colectivos: NVE, NVT, NpT. Simulaciones moleculares de no-equilibrio. Coeficientes de transporte. Simulación de sistemas arrestados. Introducción a la simulación molecular cuántica de sistemas condensados. Simulación multiescala.

#### Temario

Tema 1. Introducción. El formalismo de la mecánica analítica. La descripción de Lagrange: el espacio configuracional y las ecuaciones de Euler-Lagrange. La descripción de Hamilton: el espacio de las fases y las ecuaciones de Hamilton. Transformaciones canónicas. La ecuación de Liouville.

Tema 2. Esquemas numéricos. Introducción a los métodos de diferencias finitas. El método predictor-corrector. Los métodos simplécticos en sistemas hamiltonianos: el algoritmo de Verlet. Aplicación a sistemas moleculares: dinámica molecular de moléculas rígidas no esféricas y en presencia de ligaduras (algoritmo SHAKE). Dinámica molecular de sistemas duros.

Tema 3. Dinámica Molecular en diferentes colectivos. Dinámica molecular a temperatura constante: el colectivo isocinético, el termostato de Andersen y el termostato de Nosé-Hoover. Cadenas de Nosé-Hoover. Dinámica Molecular en el colectivo isoterma-isobaro: el algoritmo de Hoover, de Melchionna-Ciccotti-Holian y de Martyna-Tobias-Klein. El método de Rahman-Parrinello.

Tema 4. Tópicos avanzados. Cálculo de coeficientes de transporte. Relaciones de Green-Kubo. Dinámica Molecular de No Equilibrio. Factores de estructura dinámica. Sistemas cuánticos: el algoritmo de Car-Parrinello.

Tema 5. Introducción a la simulación multiescala. Introducción. Modelos mecánico cuánticos. Formulación de Path integral. Modelos coarse-grained. Modelos mesoscópicos. Métodos de Lattice-Boltzmann y Dissipative Particle Dynamics. Modelos continuos. Las ecuaciones de Navier-Stokes.

### ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES

Véase actividades formativas.

Actividad formativa	Modalidad de enseñanza	Dedicación (horas de trabajo autónomo del estudiante)	Dedicación (horas de trabajo lectivas del estudiante con apoyo del profesor)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	VIRTUAL	35	35
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	VIRTUAL	15	15

AF3. Actividades autónomas (realización de problemas, programas y estudio personal)	VIRTUAL	25	0
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>			
Véase estrategias/metodologías de evaluación.			
<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%%
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%%
<b>MEDIOS Y RECURSOS DIDÁCTICOS</b>			
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>			
<p>M. Allen and D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987.</p> <p>D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation, 2nd Edition, Academic Press, San Diego, 2002.</p> <p>D. C. Rapaport, The art of of molecular dynamics simulations, 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge,2011.</p> <p>M. Griebel, S. Knapek and G. Zumbusch, Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms,Parallelization, Applications</p> <p>B. D. Todd and P. J. Davis, Nonequilibrium Molecular Dynamics. Theory, algorithms and applications.</p>			
<b>PLAN DE CONTINGENCIA</b>			
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 Vespucio 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>