

# Información asignaturas Máster en Simulación Molecular

## MÓDULO I, FUNDAMENTOS FÍSICOS Y QUÍMICOS.

### **A1. Bases físicas y químicas de la Termodinámica.**

El objetivo de la asignatura es introducir las bases fundamentales de la Termodinámica de sistemas físicos y químicos necesarias para el uso y desarrollo de programas de simulación en Monte Carlo y Dinámica Molecular. En particular, se hace hincapié en los principios de la Termodinámica, el formalismo termodinámico, los criterios de estabilidad de los sistemas, la regla de las fases de Gibbs y el estudio de los diagramas de fase de sustancias puras y mezclas binarias.

### **A2. Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística.**

El objetivo de la asignatura es introducir las bases fundamentales de la Mecánica Estadística de sistemas físicos y químicos necesarias para el uso y desarrollo de programas de simulación Monte Carlo y Dinámica Molecular. En particular, se hace hincapié en los postulados de la Mecánica Estadística, los potenciales de interacción de moléculas monoatómicas, rígidas y flexibles, así como en los colectivos más importantes en los que se llevan a cabo simulaciones de sistemas físicos y químicos.

## MÓDULO II, METODOLOGÍAS.

### **A3. Sistemas operativos y programación.**

La asignatura introduce los conceptos y conocimientos necesarios para trabajar en entornos computacionales, haciendo hincapié en simulaciones moleculares, escritura de programas de simulación y análisis de resultados obtenidos. En particular, se incide en dos temáticas esenciales: sistemas operativos y lenguajes de programación. En el primer caso, se estudia el sistema operativo UNIX/Linux, haciendo hincapié en comandos básicos en Linux, intérprete de comandos y scripts. En el segundo caso, se introducen los lenguajes de programación interpretado (Python) y compilado (Fortran).

### **A4. Métodos numéricos.**

El objetivo de la asignatura es familiarizar al alumno en métodos numéricos básicos, de interpolación, diferenciación e integración. Asimismo, se hace hincapié en la resolución de ecuaciones y sistemas de ecuaciones lineales y no lineales, así como de ecuaciones diferenciales ordinarias. Todo ello se lleva a cabo de manera coordinada con los conocimientos adquiridos en la asignatura "Sistemas operativos y programación", desarrollando soluciones en los lenguajes de programación Python y Fortran.

## MÓDULO III, TÉCNICAS DE SIMULACIÓN MOLECULAR.

### **A5. Métodos básicos de simulación molecular.**

El objetivo de la asignatura es introducir los conceptos básicos de los métodos de Monte Carlo y Dinámica molecular para que el alumno sea capaz de escribir códigos sencillos y ejecutarlos. En particular, se definen los conceptos de caja de simulación, condiciones de contorno periódicas y truncamientos de potenciales. A partir de ahí, se desarrollan los conceptos necesarios para simular mediante algoritmos básicos de Monte Carlo y Dinámica molecular, haciendo hincapié en el cálculo de propiedades y optimización de cálculos mediante el uso de listas de vecinos moleculares.

## **A6. Monte Carlo avanzado.**

La asignatura Monte Carlo avanzando, junto con Dinámica molecular avanzada, es la continuación natural de Métodos básicos de simulación molecular. En Monte Carlo avanzado, además de introducir las técnicas para simular en diferentes colectivos, se analizan métodos de muestreo sesgado, técnicas para la determinación del equilibrio de fases, para la mejora del muestreo y metodologías para el muestreo de eventos poco frecuentes, como nucleación homogénea de sólidos y líquidos.

## **A7. Dinámica molecular avanzada.**

La asignatura Dinámica molecular avanzada, junto con Monte Carlo avanzando, es la continuación natural de Métodos básicos de simulación molecular. En Dinámica molecular avanzada, además de introducir los diferentes esquemas de integración numérica específicas para la resolución de las ecuaciones de la dinámica de Newton, se introducen métodos para llevar a cabo simulaciones dinámicas en diferentes colectivos haciendo uso de termostatos y baróstatos, y se introducen algunos tópicos avanzados, como la dinámica molecular de no equilibrio, sistemas cuánticos y simulación multiescala.

## **A8. Paquetes de simulación.**

El objetivo de la asignatura es familiarizar al alumno con el uso de dos de los paquetes de simulación comerciales de libre distribución de Dinámica Molecular disponibles en la literatura más utilizados y optimizados, GROMACS y LAMMPS. Para ello, se hace uso de las cuentas que el alumno dispone en el Centro de Supercomputación de Galicia, para aprender a seleccionar campos de fuerza apropiados, preparar configuraciones iniciales, llevar a cabo simulaciones en diferentes colectivos estadísticos y obtener y procesar información termodinámica de interés a partir de los resultados obtenidos.

## **A9. Trabajo Fin de Máster.**

El Trabajo Fin de Máster constituye la asignatura final del título, en la que el alumno reúne todos los conocimientos adquiridos en las ocho asignaturas para abordar el estudio, mediante técnicas de Monte Carlo o Dinámica Molecular, de sistemas de interés en el campo de simulación molecular clásica. Los trabajos fin de máster pueden ser metodológicos, orientados a demostrar que se han adquirido las competencias y destrezas exigidas por el Título, o de investigación, orientados hacia una temática más compleja y exigente acorde con una línea de investigación en desarrollo. Todos ellos son propuestos por los profesores que imparten docencia en el título, así como por investigadores expertos en el área de la simulación molecular clásica.