

Simulación Molecular – MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN

Monte Carlo avanzado

GUÍA DOCENTE



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

Curso Académico:	2022-2023					
Máster:	Simulación Molecular					
Denominación de la asignatura	Monte Carlo avanzado					
Módulo	MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN					
Curso académico	2022-2023					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	Teoría:	5.00	Práctica:	0.00	Total:	5.00
Periodo de impartición	Del 24 de marzo al 11 de mayo de 2023					
Modalidad	VIRTUAL					
Web universidad coordinadora	https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3					
Web universidad colaboradora	http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular					
Idiomas de impartición	Español					

Profesorado			
Nombre y apellidos	Email	Universidad	Créditos
Eva González Noya		Instituto de Química Física Rocasolano (IQFR/CSIC)	2.00
Alessandro Patti		UNIVERSIDAD DE GRANADA	1.50
Guillermo Jorge Zarragoicoechea		UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA	1.50
TUTORIAS (Coordinador/a de asignatura): Horario y localización			
https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular			
COMPETENCIAS			
Básicas y Generales	CG1: Comprender, analizar, evaluar y seleccionar teorías científicas adecuadas y metodologías precisas para formular juicios		

	<p>a partir de los datos disponibles, bien sean experimentales y/o teóricos, en los ámbitos de la Termodinámica, la Mecánica 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 científicotécnicos, 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>
Transversales	<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. CT6: Sensibilización en temas medioambientales.</p>
<p>Específicas</p>	<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>CE4: Ser capaz de desarrollar programas en lenguajes de programación de alto nivel en el contexto de la simulación molecular.</p> <p>CE5: Comprender los fundamentos matemáticos de los métodos de modelado más habituales y su implementación numérica computacional.</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</p>

máster, tanto escrito como en presentaciones.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1. Conocer los distintos colectivos termodinámicos, comprender su fundamento teórico y ser capaz de valorar cual es el más adecuado para cada problema.
2. Conocer y comprender el fundamento de métodos para sesgar y acelerar el muestreo en simulaciones Monte Carlo.
3. Conocer y comprender los métodos de simulación para el cálculo de diagrama de fases.
4. Familiarizarse con diversos métodos para muestrear eventos poco frecuentes.
5. Ser capaz de programar un código Monte Carlo complejo que utilice métodos avanzados.
6. Ser capaz de analizar datos y extraer la información relevante de una simulación.

CONTENIDOS

Descriptores

Primer Principio de la Termodinámica. Segundo Principio de la Termodinámica. Formulaciones alternativas de la Termodinámica. Regla de las fases de Gibbs. Diagramas de fase. Equilibrio de fase de sistemas puros y mezclas

Temario

Tema 1. Conceptos básicos y definiciones. El sistema y el exterior. Tipos de paredes y ligaduras. Paredes adiabáticas. Sistemas simples y sistemas compuestos. Estado termodinámico. Estados de equilibrio. Procesos termodinámicos. Propiedades derivadas.

Tema 2. Primer principio de la Termodinámica. Trabajo. Calor. Energía interna. Primer principio de la Termodinámica. Aplicaciones del primer principio. Ecuación del gas ideal.

Tema 3. Segundo principio de la Termodinámica. Procesos cuasiestáticos. Procesos reversibles e irreversibles. Máquinas térmicas. El teorema de Clausius. El ciclo de Carnot. Entropía. Ecuación fundamental de la Termodinámica. Ecuación de Euler. Relación de Gibbs-Duhem.

Tema 4. El formalismo termodinámico. Postulados de la Termodinámica. Representación energética. Principio extremal de la energía. Representación entrópica. Principio extremal de la entropía. Propiedades extensivas e intensivas. Transformadas de Legendre. Formulaciones de la Termodinámica alternativas. Relaciones de Maxwell. Método de los jacobianos.

Tema 5. Criterios de estabilidad. Introducción. El criterio de estabilidad. Sustancias puras. Sistemas binarios. Sistemas ternarios. Estados críticos.

Tema 6. Equilibrio de fase y estabilidad. Transiciones de fase de primer orden. Discontinuidad del volumen: regla de la palanca. Discontinuidad de la entropía: calor latente. Estados metaestables. Ecuación de Clausius-Clapeyron. Regla de las fases de Gibbs. Diagramas de fase. Componentes puros. Mezclas binarias.

Tema 7. Aplicaciones a sistemas puros y mezclas. Ecuación de van der Waals. Principio de los estados correspondientes. Ecuaciones de estado PVTN para fluidos. Relaciones PVTN para mezclas. Propiedades de mezcla. Mezclas de gases ideales y disoluciones ideales. Reacciones químicas y equilibrio químico. Grado de

reacción. Reacciones simultáneas. Calor de reacción. Estabilidad y principio de Le Châtelier. Regla de las fases de Gibbs para sistemas químicos. Reacciones químicas en gases ideales.

ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES

Véase actividades formativas.

Actividad formativa	Modalidad de enseñanza	Dedicación (horas de trabajo autónomo del estudiante)	Dedicación (horas de trabajo 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

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Véase estrategias/metodologías de evaluación.

OBSERVACIONES

Estrategias/metodologías de evaluación	Porcentaje de valoración sobre el total
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%%

BIBLIOGRAFÍA

Frenkel y Smit, Understanding molecular simulation.

Newman y Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics.
Tuckerman, Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation.
Curso de David Kofke (<http://www.eng.buffalo.edu/~kofke/ce530/>).
Curso MolSim (<http://www.acmm.nl/molsim/molsim2015/index.html>).

PLAN DE CONTINGENCIA

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.
- privadas.
- 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>