

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**

Curso Académico:	2022-2023					
Máster:	Simulación Molecular					
Denominación de la asignatura	Dinámica Molecular avanzada					
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
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 (Coordinador/a de asignatura): Horario y localización			
Aula Virtual de la UNIA 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>
<p>Transversales</p>	<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.</p> <p>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</p>

en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1. Entender los fundamentos de la mecánica clásica de sistemas conservativos en su formulación lagrangiana y hamiltoniana.
2. Conocer distintos métodos de resolución numérica de las ecuaciones de evolución de la mecánica clásica.
3. Entender la conexión entre la descripción microscópica y macroscópica de un sistema molecular.
4. Determinar las propiedades de equilibrio de sistemas moleculares en distintos colectivos.
5. Determinar las propiedades de transporte en sistemas moleculares.
6. Caracterizar computacionalmente el comportamiento de sistemas moleculares fuera del equilibrio.
7. Profundizar en las habilidades de programación necesarias para implementar y ejecutar códigos de Dinámica Molecular.
8. Saber identificar la metodología más apropiada para la obtención de cada propiedad de interés de un sistema molecular.

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 isotermodisipativo: 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 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

- M. Allen and D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987.
 D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation, 2nd Edition, Academic Press, San Diego, 2002.
 D. C. Rapaport, The art of of molecular dynamics simulations, 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2011.
 M. Griebel, S. Knapek and G. Zumbusch, Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications
 B. D. Todd and P. J. Daivis, Nonequilibrium Molecular Dynamics. Theory, algorithms and applications.

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.
 - 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>