



UNIVERSIDAD  
POLITÉCNICA  
DE MADRID

PROCESO DE  
COORDINACIÓN DE LAS  
ENSEÑANZAS PR/CL/001



E.T.S. de Ingenieros  
Industriales

# ANX-PR/CL/001-01

## GUÍA DE APRENDIZAJE

### ASIGNATURA

**53001374 - Simulación Molecular: de Algoritmos a Aplicaciones**

### PLAN DE ESTUDIOS

05BC - Master Universitario en Ingeniería Química

### CURSO ACADÉMICO Y SEMESTRE

2020/21 - Segundo semestre

## Índice

---

### Guía de Aprendizaje

1. Datos descriptivos.....	1
2. Profesorado.....	1
3. Conocimientos previos recomendados.....	2
4. Competencias y resultados de aprendizaje.....	2
5. Descripción de la asignatura y temario.....	4
6. Cronograma.....	7
7. Actividades y criterios de evaluación.....	9
8. Recursos didácticos.....	10
9. Otra información.....	11

## 1. Datos descriptivos

### 1.1. Datos de la asignatura

<b>Nombre de la asignatura</b>	53001374 - Simulación Molecular: de Algoritmos a Aplicaciones
<b>No de créditos</b>	6 ECTS
<b>Carácter</b>	Optativa
<b>Curso</b>	Segundo curso
<b>Semestre</b>	Cuarto semestre
<b>Período de impartición</b>	Febrero-Junio
<b>Idioma de impartición</b>	Castellano
<b>Titulación</b>	05BC - Master Universitario en Ingeniería Química
<b>Centro responsable de la titulación</b>	05 - Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales
<b>Curso académico</b>	2020-21

## 2. Profesorado

### 2.1. Profesorado implicado en la docencia

<b>Nombre</b>	<b>Despacho</b>	<b>Correo electrónico</b>	<b>Horario de tutorías</b> *
Aikaterini Foteinopoulou	Materiales	k.foteinopoulou@upm.es	L - 09:30 - 10:30
Nikolaos Karagiannis (Coordinador/a)	Materiales	n.karayiannis@upm.es	M - 11:00 - 13:00

\* Las horas de tutoría son orientativas y pueden sufrir modificaciones. Se deberá confirmar los horarios de tutorías con el profesorado.

## 3. Conocimientos previos recomendados

---

### 3.1. Asignaturas previas que se recomienda haber cursado

El plan de estudios Master Universitario en Ingeniería Química no tiene definidas asignaturas previas recomendadas para esta asignatura.

### 3.2. Otros conocimientos previos recomendados para cursar la asignatura

- Programación Basica
- Química Física
- Metodos Numericos

## 4. Competencias y resultados de aprendizaje

---

### 4.1. Competencias

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

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

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

CE1 - Aplicar conocimientos de matemáticas, física, química, biología y otras ciencias naturales, obtenidos mediante estudio, experiencia, y práctica, con razonamiento crítico para establecer soluciones viables económicamente a problemas técnicos.

CE2 - Diseñar productos, procesos, sistemas y servicios de la industria química, así como la optimización de otros ya desarrollados, tomando como base tecnológica las diversas áreas de la ingeniería química, comprensivas de procesos y fenómenos de transporte, operaciones de separación e ingeniería de las reacciones químicas, nucleares, electroquímicas y bioquímicas.

CE3 - Conceptualizar modelos de ingeniería, aplicar métodos innovadores en la resolución de problemas y aplicaciones informáticas adecuadas, para el diseño, simulación, optimización y control de procesos y sistemas.

CE4 - Tener habilidad para solucionar problemas que son poco familiares, incompletamente definidos, y tienen especificaciones en competencia, considerando los posibles métodos de solución, incluidos los más innovadores, seleccionando el más apropiado, y poder corregir la puesta en práctica, evaluando las diferentes soluciones de diseño

CG1 - Capacidad para aplicar el método científico y los principios de la ingeniería y economía, para formular y resolver problemas complejos en procesos, equipos, instalaciones y servicios, en los que la materia experimente cambios en su composición, estado o contenido energético, característicos de la industria química y de otros sectores relacionados entre los que se encuentran el farmacéutico, biotecnológico, materiales, energético, alimentario o medioambiental.

CG10 - Adaptarse a los cambios, siendo capaz de aplicar tecnologías nuevas y avanzadas y otros progresos relevantes, con iniciativa y espíritu emprendedor.

CG11 - Poseer las habilidades del aprendizaje autónomo para mantener y mejorar las competencias propias de la ingeniería química que permitan el desarrollo continuo de la profesión

CG4 - Realizar la investigación apropiada, emprender el diseño y dirigir el desarrollo de soluciones de ingeniería, en entornos nuevos o poco conocidos, relacionando creatividad, originalidad, innovación y transferencia de tecnología

CG5 - Saber establecer modelos matemáticos y desarrollarlos mediante la informática apropiada, como base científica y tecnológica para el diseño de nuevos productos, procesos, sistemas y servicios, y para la optimización de otros ya desarrollados

CG9 - Comunicar y discutir propuestas y conclusiones en foros multilingües, especializados y no especializados, de un modo claro y sin ambigüedades

CT1 - Uso de la lengua inglesa

CT3 - Creatividad

CT7 - Trabajos en contextos internacionales

## 4.2. Resultados del aprendizaje

RA36 - 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

## 5. Descripción de la asignatura y temario

---

### 5.1. Descripción de la asignatura

El curso se centra en el uso de la simulación molecular para aplicaciones modernas relacionadas con la ingeniería química.

Se espera que los estudiantes:

- ) aprendan a trabajar en el sistema operativo Linux, que incluye secuencias de comandos (scripting), acceso remoto, envío de trabajos y compilación de códigos de programación.
- ) aprendan lenguaje de programación de alto nivel (principalmente fortran), para escribir, depurar (debug) y ejecutar algoritmos avanzados.
- ) entiendan los fundamentos de las simulaciones por ordenadores con un enfoque especial en conceptos como celda de simulación, convención de imagen mínima, condiciones de contorno periódicas, números aleatorios.
- ) obtener conocimientos prácticos y fundamentales de física estadística relacionados con la simulación molecular.
- ) aprender los métodos Monte Carlo (MC) y Molecular Dynamics (MD) para la simulación de sistemas de muchos cuerpos (many-body systems).
- ) aprender a analizar los resultados de la simulación (procesamiento posterior a la simulación).
- ) obtener conocimientos prácticos sobre software de visualización de última generación (énfasis en VMD) para la producción de imágenes y videos interactivos de alta calidad.

La evaluación continua implica la finalización de un conjunto de trabajos de clase y tareas y un mini proyecto final.

La asignatura se imparte completamente en inglés. Se considera esencial para proyectos de master (TFM) en el laboratorio de simulación de materiales (LSM).

## 5.2. Temario de la asignatura

### 1. Introduction

- 1.1. Basic definitions
- 1.2. Molecular Modeling
- 1.3. Molecular Simulation
- 1.4. Software, Programming Languages, Compilers
- 1.5. Bibliography

### 2. Interaction Potential

- 2.1. Hard-Sphere Model
- 2.2. Hard-Well Model
- 2.3. Soft-Sphere Model
- 2.4. Lennard-Jones Model
- 2.5. Long-range Interactions
- 2.6. From Atoms to Molecules

### 3. Simulation Cell

- 3.1. System Size
  - 3.1.1. Surface Effects
  - 3.1.2. Periodic Boundary Conditions
  - 3.1.3. Minimum Image Convention
- 3.2. Random Numbers
  - 3.2.1. Generation
  - 3.2.2. Sampling

### 4. Statistical Physics

- 4.1. State of Equilibrium

- 4.2. Entropy
- 4.3. Microstates and Macrostates
- 4.4. Phase Space
- 4.5. Statistical Ensemble
- 5. Monte Carlo
  - 5.1. Numerical Method
  - 5.2. Ensemble Average
  - 5.3. Importance Sampling
  - 5.4. Markov Chain
  - 5.5. Metropolis Monte Carlo
  - 5.6. Molecular Systems
- 6. Molecular Dynamics
  - 6.1. Equations of Motion
  - 6.2. Time Integration
    - 6.2.1. Gear Predictor-Corrector
  - 6.3. Velocity Components
    - 6.3.1. Gaussian Distribution
  - 6.4. M.D. Algorithms
    - 6.4.1. Verlet
    - 6.4.2. Leap-Frog Verlet
    - 6.4.3. Velocity Verlet
- 7. Applications
  - 7.1. Entanglements: From believing to seeing
  - 7.2. PET barrier properties
- 8. Appendix: Fortran
  - 8.1. Fortran Language
    - 8.1.1. Compiler
    - 8.1.2. Basic Commands
    - 8.1.3. Examples



## 6. Cronograma

### 6.1. Cronograma de la asignatura \*

Sem	Actividad presencial en aula	Actividad presencial en laboratorio	Tele-enseñanza	Actividades de evaluación
1	<b>Chapter 1: Basic Concepts</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Computer Practice</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
2	<b>Introduction to Fortran</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Examples and problems related to coding with Fortran (I)</b> Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
3	<b>Programming with Fortran</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas	<b>Examples and problems related to coding with Fortran (II)</b> Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00
4	<b>Interaction Potential (I)</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Interaction Potential: Exercises</b> Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
5	<b>Interaction Potential (II)</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas	<b>Interaction Potential: Exercises (II)</b> Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
6	<b>Simulation Cell (I)</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Interaction Potential: Simulation Cell (I)</b> Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00
7	<b>Simulation Cell (II)</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas	<b>Interaction Potential: Simulation Cell (II)</b> Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
8	<b>Statistical Physics</b> Duración: 05:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
9	<b>Monte Carlo (I)</b> Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Monte Carlo: Algorithm (I)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
10		<b>Monte Carlo: Algorithm (II)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00

11	<b>Molecular Dynamics</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Molecular Dynamics: Algorithm (I)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
12		<b>Molecular Dynamics: Algorithm (II)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
13		<b>Application: The Ising Model</b> Duración: 04:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00
14	<b>Molecular Simulation: Applications</b> Duración: 04:00 AC: Actividad del tipo Acciones Cooperativas			
15	<b>Molecular Simulation: Applications (II)</b> Duración: 04:00 AC: Actividad del tipo Acciones Cooperativas			
16		<b>Molecular Simulation: Applications</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Presencial Duración: 01:00
17				<b>Examen final</b> EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación sólo prueba final Presencial Duración: 03:00  <b>Examen final</b> EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación continua Presencial Duración: 03:00

Para el cálculo de los valores totales, se estima que por cada crédito ECTS el alumno dedicará dependiendo del plan de estudios, entre 26 y 27 horas de trabajo presencial y no presencial.

\* El cronograma sigue una planificación teórica de la asignatura y puede sufrir modificaciones durante el curso derivadas de la situación creada por la COVID-19.

## 7. Actividades y criterios de evaluación

### 7.1. Actividades de evaluación de la asignatura

#### 7.1.1. Evaluación continua

Sem.	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
3	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CE2 CG11 CT1 CG5 CT3
6	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	CT1 CE4
10	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	20%	/ 10	CG10 CT1
13	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	%	/ 10	CT7 CE3 CT1 CG9
16	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	30%	/ 10	CG1 CG4 CB10 CE1
17	Examen final	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	03:00	30%	/ 10	

#### 7.1.2. Evaluación sólo prueba final

Sem	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
17	Examen final	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	03:00	100%	/ 10	CT1

### 7.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

No se ha definido la evaluación extraordinaria.

## 7.2. Criterios de evaluación

1. Course in English
2. Applications related to present industrial problems (Horizon 2020 etc)
3. Learning to solve existing problems of chemical engineering with novel methods
4. Learning of state-of-the-art computational techniques
5. Learning to work in an international environment
6. Hierarchical approach to problem solving
7. Multidisciplinary thematic area

## 8. Recursos didácticos

---

### 8.1. Recursos didácticos de la asignatura

Nombre	Tipo	Observaciones
Faires and Burden, Numerical Methods (2013)	Bibliografía	Numerical Methods
scientific articles	Bibliografía	scientific articles on Monte Carlo and Molecular Dynamics
scientific articles	Bibliografía	Articles related to applications (polymer rheology, barrier properties of materials, ets)
Mandl, Statistical Physics (1978)	Bibliografía	Statistical Physics
Allen and Tildesley, Computer Simulation of Liquids (2003)	Bibliografía	Molecular Simulation
Fortran Compiler	Equipamiento	Fortran Compiler
V.M.D	Equipamiento	VMD: visualization program
Allen and Tildesley, Computer Simulation of Liquids, 2nd edition (2017)	Bibliografía	version nueva (2017) del libro

## 9. Otra información

---

### 9.1. Otra información sobre la asignatura

Idioma principal del curso: **Inglés** / main language of the course: **English**