



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

2025/26 - 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.....	8
7. Actividades y criterios de evaluación.....	12
8. Recursos didácticos.....	15
9. Otra información.....	16

1. Datos descriptivos

1.1. Datos de la asignatura

Nombre de la asignatura	53001374 - Simulación Molecular: de Algoritmos a Aplicaciones
No de créditos	6 ECTS
Carácter	Optativa
Curso	Segundo curso
Semestre	Cuarto semestre
Período de impartición	Febrero-Junio
Idioma de impartición	Castellano
Titulación	05BC - Master Universitario en Ingeniería Química
Centro responsable de la titulación	05 - E.T.S. De Ingenieros Industriales
Curso académico	2025-26

2. Profesorado

2.1. Profesorado implicado en la docencia

Nombre	Despacho	Correo electrónico	Horario de tutorías *
Aikaterini Foteinopoulou	Materiales	k.foteinopoulou@upm.es	L - 09:30 - 10:30
Nikolaos Karagiannis	Materiales	n.karayiannis@upm.es	M - 11:00 - 13:00
Daniel Martinez Fernandez (Coordinador/a)	Materiales	daniel.martinez.fernandez@ upm.es	X - 10:00 - 12:00 Comunicar con antelación por correo electrónico

* 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

- Nociones básicas de programación

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.

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

RA167 - aplicar métodos estocásticos para simular sistemas atómicos o de partículas

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 con el sistema operativo Linux, incluyendo secuencias de comandos (*scripting*), acceso remoto, envío de trabajos y compilación de códigos de programación.
- Aprendan un lenguaje de programación científico de alto nivel (principalmente Fortran) para escribir, depurar (*debug*) y ejecutar algoritmos avanzados.
- Entiendan los fundamentos de las simulaciones computacionales, con un enfoque especial en conceptos como celda de simulación, convención de imagen mínima, condiciones de contorno periódicas, números aleatorios, etc.
- Obtengan conocimientos prácticos y fundamentales de física estadística relacionados con la simulación molecular.
- Aprendan los métodos de Monte Carlo (MC) y Dinámica Molecular (*Molecular Dynamics*, MD) para la simulación de sistemas de muchos cuerpos (*many-body systems*).
- Aprendan a analizar estadísticamente los resultados de la simulación (post-procesamiento a la simulación).
- Obtengan conocimientos prácticos sobre software de visualización de última generación (énfasis en VMD) para la producción de imágenes y videos interactivos de alta calidad.

Una evaluación continua y progresiva se desarrollará durante el transcurso del curso. Esta evaluación implicará la realización de un conjunto de trabajos/ejercicios en clase (a veces en equipo, *classworks/teamworks*), tareas para casa (*homeworks*) y un proyecto final. Todas estas partes de la evaluación no son recuperables.

La asignatura se imparte completamente en inglés. Además, se considera esencial para la realización de proyectos de Fin de Máster (TFM) en el Laboratorio de Simulación de Materiales (LSM).

5.2. Temario de la asignatura

1. Introduction (Introducción)
 - 1.1. Basic Definitions (Definiciones Basicas)
 - 1.2. Molecular Modeling (Modelado Molecular)
 - 1.3. Molecular Simulation (Simulación Molecular)
 - 1.4. Software, Programming Languages, Compilers (Software, Lenguajes de Programación, Compiladores)
 - 1.5. Bibliography (Bibliografía)
2. Introduction to the Linux Operating System (Introducción al Sistema Operativo Linux)
 - 2.1. The SSH and SFTP Protocols (Los Protocolos SSH y SFTP)
 - 2.2. Important Linux Commands (Comandos Importantes de Linux)
 - 2.3. Scripts and Batch Jobs (Scripts y Batch Jobs)
3. Appendix: Fortran (Apéndice: Fortran)
 - 3.1. The Fortran Programming Language (El Lenguaje de Programación Fortran)
 - 3.1.1. Compilers - Windows and Linux OS (Compiladores - SO Windows y Linux)
 - 3.1.2. Basic Commands (Comandos Básicos)
 - 3.1.3. Examples: Scientific Problems (Ejemplos: Problemas Científicos)
4. Interaction Potential (Potencial de Interacción)
 - 4.1. Hard-Sphere Model (Modelo de Esferas Duras)
 - 4.2. Square-Well Model (Modelo de Pozo Cuadrado)
 - 4.3. Soft-Sphere Model (Modelo de Esferas Blandas)
 - 4.4. Lennard-Jones Model (Modelo Lennard-Jones)
 - 4.5. Long-range Interactions (Interacciones de Largo Alcance)
 - 4.6. From Atoms to Molecules (De Átomos a Moléculas)
5. Simulation Cell (Celda de Simulación)

- 5.1. System Size (Tamaño del Sistema)
 - 5.1.1. Surface Effects (Efectos Superficiales)
 - 5.1.2. Periodic Boundary Conditions (Condiciones Periódicas de Contorno)
 - 5.1.3. Minimum Image Convention (Convención de Imagen Mínima)
- 5.2. Random Numbers (Números Aleatorios)
 - 5.2.1. Generation (Generación)
 - 5.2.2. Sampling (Muestreo)
- 6. Statistical Physics (Física Estadística)
 - 6.1. State of Equilibrium (Estado de Equilibrio)
 - 6.2. Entropy (Entropía)
 - 6.3. Microstates and Macrostates (Microestados y Macroestado)
 - 6.4. Phase Space (Espacio Fásico)
 - 6.5. Statistical Ensemble (Ensamble Estadístico)
- 7. Monte Carlo (Monte Carlo)
 - 7.1. Numerical Method (Método Numérico)
 - 7.2. Ensemble Average (Promedio del Ensamble)
 - 7.3. Importance Sampling (Importancia del Muestreo)
 - 7.4. Markov Chain (Cadena de Markov)
 - 7.5. Metropolis Monte Carlo
 - 7.6. Molecular Systems (Sistemas Moleculares)
- 8. Molecular Dynamics (Dinámica Molecular)
 - 8.1. Equations of Motion (Ecuación de Movimiento)
 - 8.2. Time Integration (Integración del Tiempo)
 - 8.2.1. Gear Predictor-Corrector (Método Predictor-Corrector de Gear)
 - 8.3. Velocity Components (Componentes de la Velocidad)
 - 8.3.1. Gaussian Distribution (Distribución Gaussiana)
 - 8.4. M.D. Algorithms (Algoritmos de Dinámica Molecular)
 - 8.4.1. Verlet
 - 8.4.2. Leap-Frog Verlet

8.4.3. Velocity Verlet

9. Post-Simulation Analysis (Análisis Post-Simulación)

9.1. Standard Post-Processing (Post-procesamiento Estándar)

9.2. Visualization of System Configurations (Visualización de Configuraciones de Sistema)

10. Applications in Research (Aplicaciones en Investigación)

10.1. Entanglements in Polymers: From Believing to Observing (Enredos en Polímeros: de Creer a Observar)

10.2. Prediction of Magnetization through Monte Carlo Simulations (Predicción de Magnetización a través de Simulaciones Monte Carlo)

10.3. Simu-D: A Simulator-Descriptor Software (Simu-D: un Software Simulador-Descriptor)

6. Cronograma

6.1. Cronograma de la asignatura *

Sem	Actividad tipo 1	Actividad tipo 2	Tele-enseñanza	Actividades de evaluación
1	Chapter 1: Basic Concepts Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Computer Practice Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
2	Introduction to Linux Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Examples and problems related to working, compiling and executing jobs in linux. Duración: 01:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio Trabajo en clase: aplicacion Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:30 Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00
3	Programming with Fortran Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas	Examples and problems related to coding with Fortran Duración: 01:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio Trabajo en clase: aplicacion Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:30 Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00
4	Interaction Potential (I) Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Interacción Potential: Exercises Duración: 01:15 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio Trabajo en clase: aplicacion Duración: 00:45 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:45 Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00

5	<p>Interaction Potential (II) Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>	<p>Interaction Potential: Exercises (II) Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p> <p>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00</p>
6	<p>Simulation Cell (I) Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>	<p>Simulation Cell (I) Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p> <p>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00</p>
7	<p>Simulation Cell (II) Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>	<p>Simulation Cell (II) Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p>		
8	<p>Statistical Physics Duración: 03:30 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>	<p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:30</p>
9	<p>Monte Carlo (I) Duración: 02:30 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>	<p>Monte Carlo: Algorithm (I) Duración: 00:45 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 00:45 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00</p> <p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:45</p>
10		<p>Monte Carlo: Algorithm (I) Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 02:00</p> <p>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 02:00</p>

11	<p>Molecular Dynamics Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>	<p>Molecular Dynamics: Algorithm (I) Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 02:00</p> <p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p>
12		<p>Post-Simulation Analysis Learning the VMD visualization software. Duración: 03:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 02:00</p> <p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:30</p>
13		<p>Application (I): The Ising Model Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p> <p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 02:00</p>
14		<p>Applications (II): Entanglements in Polymers Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p>
15		<p>Applications (III): Phase Behavior of Hard Spheres Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p>Trabajo en clase: aplicacion Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p>

16				
17				Proyecto Final EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación Progresiva 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.

7. Actividades y criterios de evaluación

7.1. Actividades de evaluación de la asignatura

7.1.1. Evaluación (progresiva)

Sem.	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
2	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	Presencial	00:30	2.5%	/ 10	
2	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
3	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	00:30	2.5%	/ 10	CG5 CT3 CG11 CT1
3	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
4	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	Presencial	00:45	2.5%	/ 10	
4	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
5	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	Presencial	01:00	5%	/ 10	
5	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	5%	/ 10	

6	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	5%	/ 10	CT1 CE4
6	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
8	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	00:30	2.5%	/ 10	
9	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
9	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	00:45	2.5%	/ 10	
10	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	02:00	5%	/ 10	
10	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	02:00	5%	/ 10	
11	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	5%	/ 10	CG10 CT1
11	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	02:00	5%	/ 10	
12	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	02:00	5%	/ 10	
12	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	00:30	5%	/ 10	
13	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	%	/ 10	CT7 CE3 CT1 CG9

13	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	02:00	5%	/ 10	
14	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
15	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
17	Proyecto Final	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	03:00	20%	/ 10	

7.1.2. Prueba evaluación global

No se ha definido la evaluación sólo por prueba final.

7.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

No se ha definido la evaluación extraordinaria.

7.2. Criterios de evaluación

1. La asignatura se imparte en Inglés
2. Aplicaciones relacionadas con los problemas industriales actuales al nivel molecular - atómico
3. Aprendizaje de técnicas computacionales de última generación
4. Aprender a trabajar en un entorno internacional

Se selecciona la evaluación continua como único método de evaluación.

La evaluación se compone de trabajos en clase (*classworks*) en cada sesión que NO son recuperables. Estos van acompañados de un conjunto de tareas para casa (*homeworks*).

Siempre que sea posible los trabajos de clase corresponden a trabajos en equipo (*teamworks*).

Un proyecto final tiene un peso del 20% y las colecciones de trabajos de clase y tareas tienen un peso del 80%.

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
Allen and Tildesley, Computer Simulation of Liquids, 2nd edition (2017)	Bibliografía	New book version (2017)
D. Frenkel and B. Smit, Introduction to Molecular Simulation: From Fundamentals to Applications, 2nd edition (2003)	Bibliografía	
Fortran Compiler	Equipamiento	Fortran Compiler
V.M.D	Equipamiento	VMD: visualization program

9. Otra información

9.1. Otra información sobre la asignatura

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

Para el desarrollo del curso, se requiere que los estudiantes cuenten con un ordenador portátil propio con capacidad de conectarse a Internet. Además, durante el transcurso del curso, requerirán de la descarga e instalación de diversos programas, como Clientes SSH, Compiladores, Programas de Visualización (VMD), etc.