

RESPONSABLE(S) DE TUTORIZACIÓN			TRABAJO FIN DE GRADO		DETALLE DEL TFG					
Número	DPTO	RESPONSABLE DE TUTORIZACIÓN	RESPONSABLE DE COTUTORIZACIÓN si procede	TIPOLOGÍA	TÍTULO	ESTUDIANTE	Descripción, resumen de contenidos y actividades a desarrollar en el ámbito de la Informática	Descripción, resumen de contenidos y actividades a desarrollar en el ámbito de las Matemáticas	Materias del Grado relacionadas	HARDWARE/SOFTWARE/BIBLIOGRAFIA
42	MA	Juan Calvo Yague	Lázaro René Izquierdo Fábregas		Revisión Bibliográfica sobre Dinámica Molecular: Modelización, Algoritmos, y Aplicaciones.	No	La dinámica molecular (DM) es un método de simulación computacional utilizado para analizar el movimiento de átomos y moléculas, resolviendo numéricamente las ecuaciones de movimiento de Newton para partículas que interactúan entre sí <sup>1</sup> . Este método es fundamental en física química, ciencia de materiales y biofísica, ya que permite estudiar sistemas moleculares complejos que no pueden abordarse analíticamente debido a su gran número de partículas <sup>2,4</sup> . Sin embargo, las simulaciones prolongadas de DM enfrentan problemas de errores acumulativos en la integración numérica, que pueden minimizarse, pero no eliminarse completamente, mediante una adecuada selección de algoritmos y parámetros. Este proyecto pretende realizar una revisión bibliográfica sobre los principales modelos matemáticos, algoritmos y sus aplicaciones en DM. La revisión se centrará en la mejora de la precisión y la eficacia de las	Ver anterior	Metodología de la programación, Estructuras de datos, Algorítmica, Métodos Numéricos I & II, Modelos Matemáticos I & II, Ecuaciones Diferenciales I & II, Probabilidad	1Rapaport, D. C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. (Cambridge University Press, 2004).2Leach, A. R. Molecular Modelling: Principles and Applications. (Prentice Hall, 2001).3Schlick, T. Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide. (Springer New York, 2010).4Halle, J. M. Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods. (Wiley, 1997).5Levitt, M. & Warshel, A. Computer simulation of protein folding. Nature 253, 694-698 (1975).6Holingsworth, S. A. & Dror, R. O. Molecular Dynamics Simulation for All. Neuron 99, 1129-1143