

## Programa Interinstitucional para el Fortalecimiento de la Investigación y el Posgrado del Pacífico

### Simulación paralelizada MPI de dinámica molecular en sistemas de materia blanda.

**Asesor:** *Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica (CONACYT)*

**Estudiante:** *Diana Marlén Castañeda Bagatella, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla*

**Estudiante:** *Santiago Alberto Flores Román, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla*

### PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La dinámica molecular (MD), es un método de simulación por computadora para analizar los movimientos físicos de átomos y moléculas. Se permite que los átomos y las moléculas interactúen durante un período fijo de tiempo, dando una visión de la "evolución" dinámica del sistema. En la versión más común, las trayectorias de los átomos o moléculas se determinan resolviendo numéricamente las ecuaciones de movimiento de Newton, las cuales son previamente planteadas para un sistema de partículas que interactúan mediante campos de fuerza adecuados al modelo físico que se busca simular.

Las simulaciones en MD se han vuelto populares en ciencia de materiales, bioquímica, biofísica y varios otros campos. Las mejoras en los recursos computacionales, en la calidad de los parámetros y algoritmos del campo de fuerza han producido mejoras significativas en el rendimiento y la confiabilidad.

En este trabajo, analizamos como generar un código propio de dinámica molecular en los ensambles NVE, NVT y NPT. Nuestro código permite variar distintos parámetros, tales como el número de dimensiones, número de partículas, pasos en el tiempo, longitud de tiempo, el ancho de la celda de simulación y el diámetro de las partículas. Este código permite generar una trayectoria de las partículas, las cuales son utilizadas posteriormente para determinar observables tales como la temperatura o la presión del sistema.

En particular, esperamos que el planteamiento de este código favorezca en el desarrollo o implementación en sistemas más complejos, tales como sistemas compuestos de partículas anisótropas (cristales líquidos, por ejemplo). Así mismo, buscamos comprender cómo funciona el cómputo paralelizado en sistemas de memoria distribuida utilizando MPI, lo cual nos permitirá abordar más adelante el estudio de sistemas dinámicos dentro de nuestra trayectoria académica o profesional.

### METODOLOGÍA

## Programa Interinstitucional para el Fortalecimiento de la Investigación y el Posgrado del Pacífico

Se comenzó por familiarizarse con el método de dinámica molecular para sistemas de materia blanda simples en alguna fuentes de información proporcionadas por el asesor, posteriormente, se profundizó en el conocimiento adquirido en la primera semana, revisando otros ensambles tales como NVT y NPT, en particular se revisaron distintos tipos de termostatos cuya implementación en código sea sencilla, tales como el reescalamiento de velocidades y el termostato de Berendsen y se inició con la escritura de un código propio de dinámica molecular en C++.

Por otra parte, se realizó una revisión bibliográfica sobre los tipos de termostatos que son posibles de implementar de forma sencilla en un código de dinámica molecular y se continuó con la escritura del código de dinámica molecular implementando termostatos y barostatos para las simulaciones de sistemas de materia blanda simples, específicamente en el caso del barostato se considerará el barostato de Berendsen para ser adaptado al código.

### CONCLUSIONES

Se logró generar un código de dinámica molecular eficiente que genera un archivo comprimido xtc, lo cual permite guardar trayectorias de simulaciones más largas sin que se penalice tanto el uso del espacio en memoria. Por otra parte, se comprendió el funcionamiento de LAMMPS para sistemas de Lennard Jones y del programa VMD, para observar la dinámica del sistema. Esto nos permitió comparar nuestros resultados contra resultados obtenidos con motores de dinámica ampliamente comprobados. Así mismo, se logró implementar en el código el barostato y termostato de Berendsen, ya que brinda un enfoque de equilibrio de primer orden rápido y suave.

Se continuará en la escritura del código propio y en la programación paralela en MPI del mismo.