

# Bienvenidos al Track: **Ciencia computacional y análisis de datos**



**FERNANDA SULANTAY  
VARGAS**

Co-Founder e Instructora  
Ingeniera Química  
PhD candidate, B.S.



**National Radio  
Astronomy  
Observatory**



**MICHAEL SANCHEZ**

Instructor  
Científico de Datos  
M.S., B.S.

# Experimentos Moleculares en la Computadora: Dinámica en Acción

---

Fernanda Sulantay Vargas  
Computational Soft Matter Group  
Department of Chemical & Environmental Engineering

InpiraSTEM 2025  
El Salvador

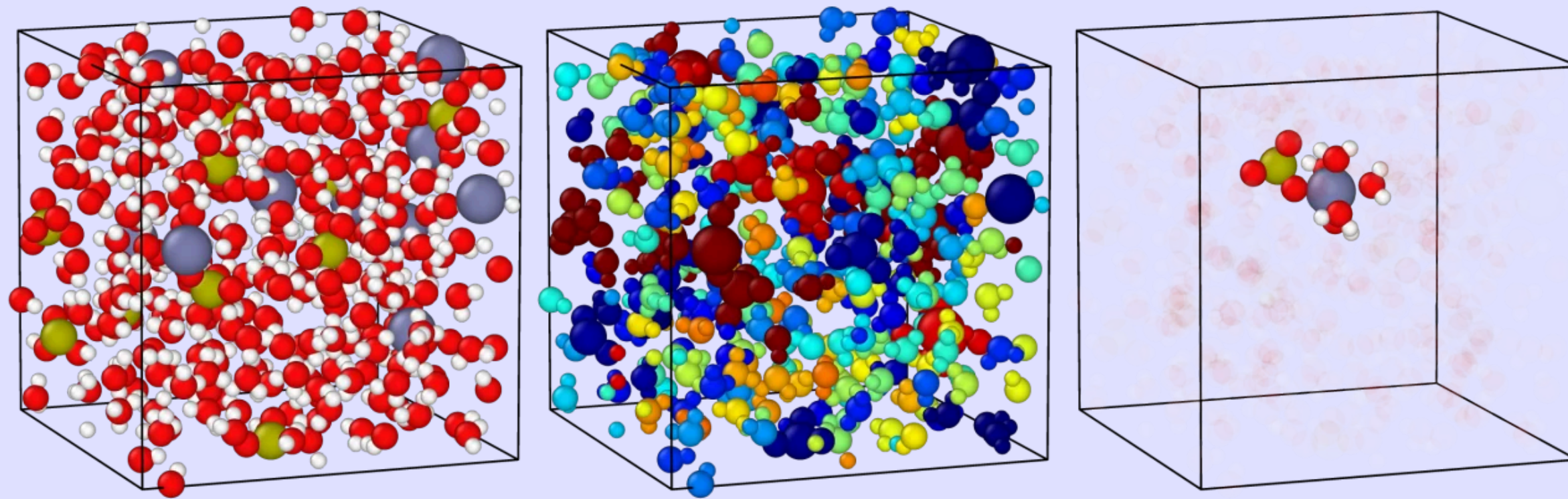
Julio 23, 2025

Ice Breaker:  
Compartan su nombre preferido,  
carrera, y un fun fact

# ¿QUÉ ES LA DINÁMICA MOLECULAR (MD) Y PARA QUÉ SIRVE?

---

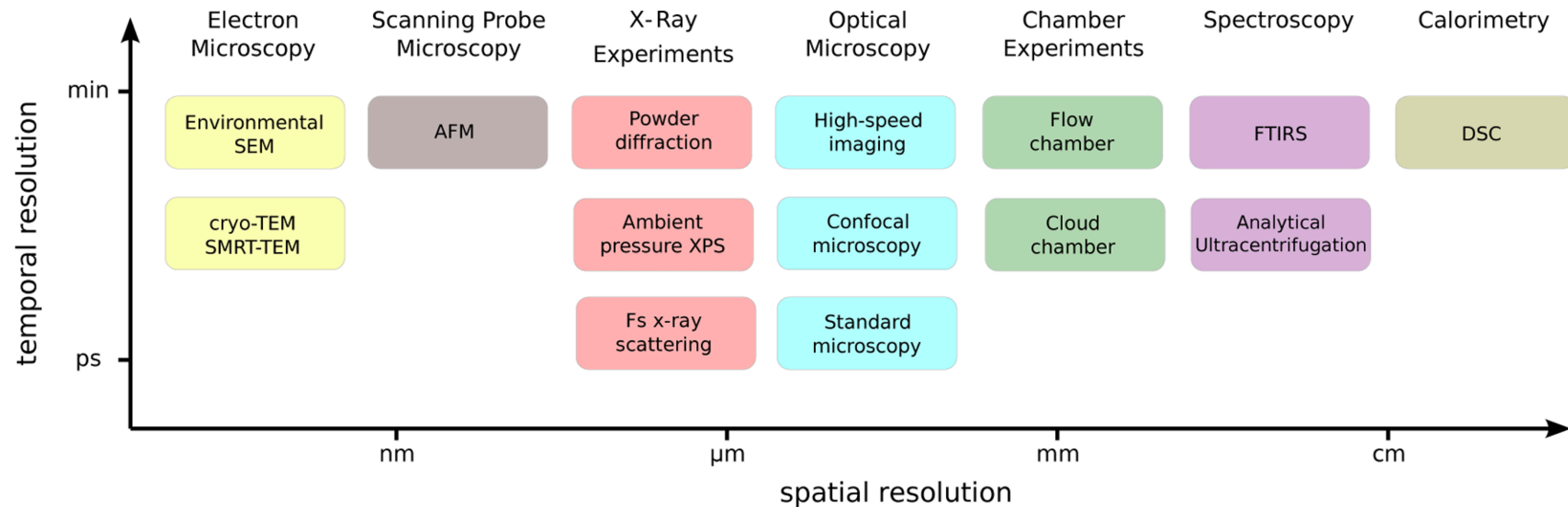
- La dinámica molecular (DM) es una técnica de simulación por computadora en la que se permite que átomos y moléculas interactúen por un período, permitiendo una visualización del movimiento de las partículas.





# ¿QUÉ ES LA DINÁMICA MOLECULAR (MD) Y PARA QUÉ SIRVE?

- Experimentos vs Computational tools



**Figure 4.** Overview of some of the experimental methods that have been applied to characterize nucleation. Ranges of the spatial and temporal resolutions typical of each approach are reported on the  $x$  and  $y$  axes, respectively.

# LA MEJORA EN LA POTENCIA DE CÓMPUTO

---



**Supercomputadora Cray-1 (1976)**



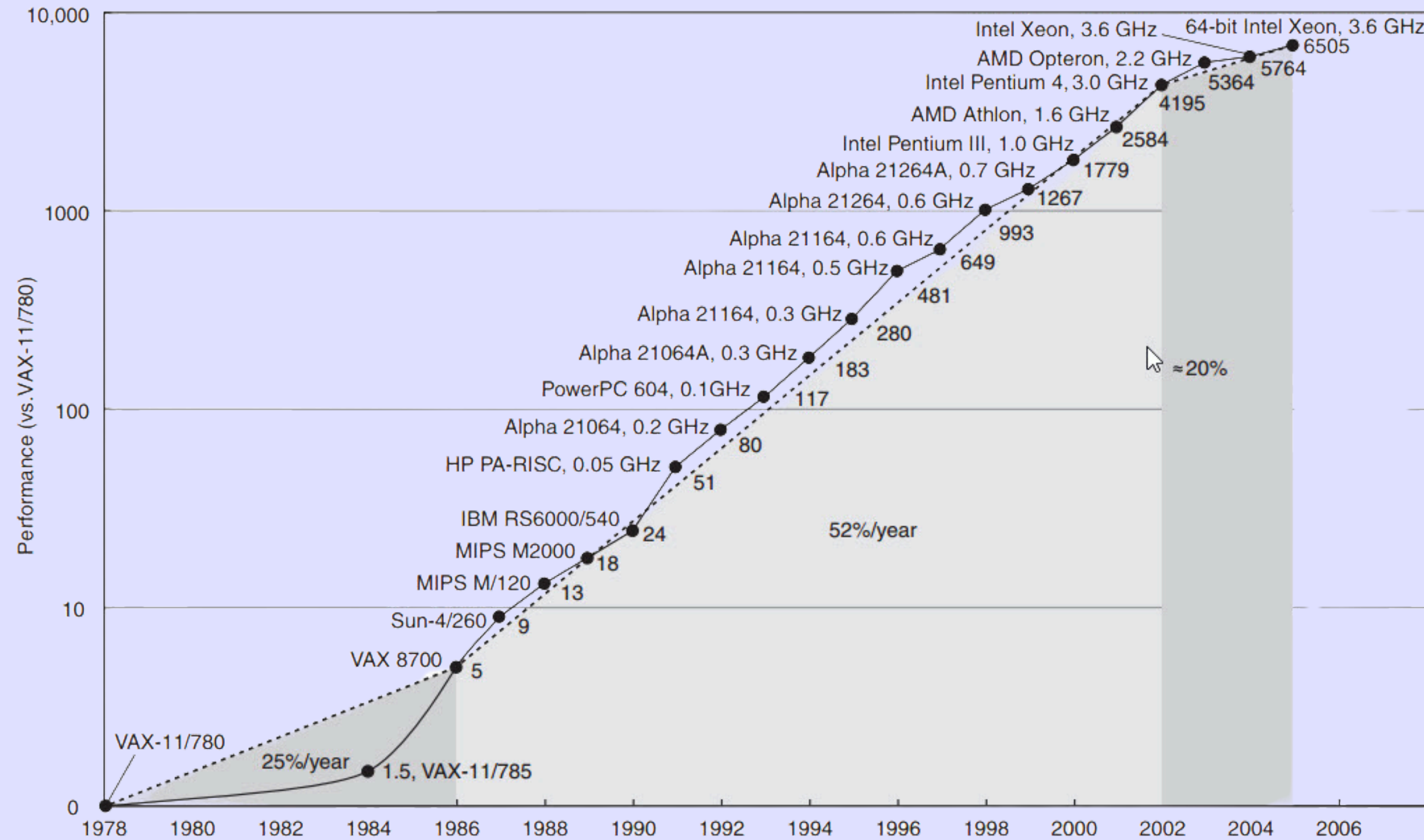
**Laptop promedio actual (2025)**

**Primera simulación molecular  
histórica (años 1950–1970)**

**Capacidades actuales  
(2020–2025)**

**Simulación clásica de  
proteína (años 1977-1980)**

# LEY DE MOORE



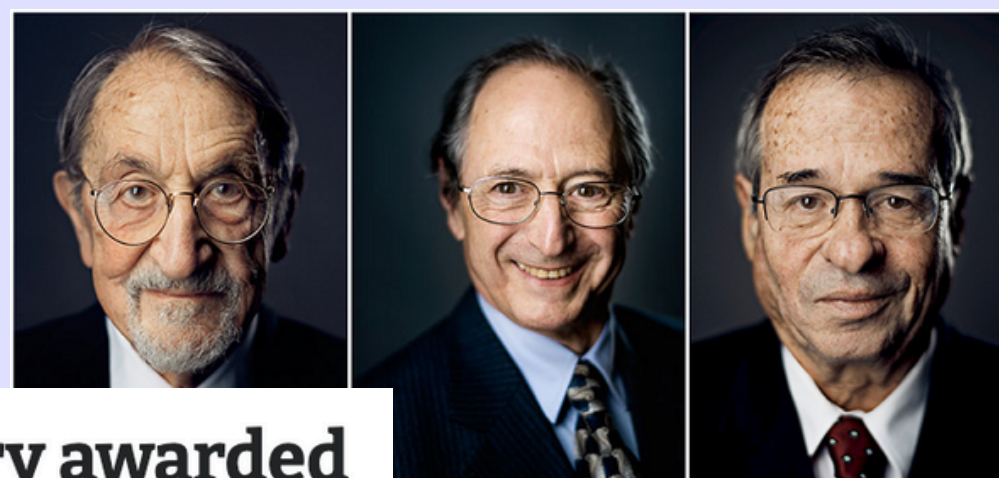
La ley de Moore expresa que aproximadamente cada 2 años se duplica el número de transistores en un microprocesador.



# BREVE HISTORIA DE LA SIMULACIÓN MOLECULAR

---

- Década de 1950–60: primeros experimentos con modelos de esferas duras y simulaciones Monte Carlo.
- 1977: Alder y Wainwright simulan el gas de esferas duras → observan transiciones de fase.
- Décadas de 1980–1990: se desarrollan los primeros campos de fuerza (force fields) para proteínas y materiales.
- 2013 - Premio Nobel de Química:



## **Nobel Prize in Chemistry awarded for computer modelling of complex chemical systems**

The 2013 Nobel Prize in Chemistry has been awarded to Martin Karplus, Michael Levitt and Arieh Warshel "for the development of multiscale models for complex chemical systems."

Professor Dominic Tildesley, President-Elect of the Royal Society of Chemistry, and a world-leading expert in large-scale computational modelling and experimentation said: "This is truly wonderful news. The field of computational modelling has revolutionised how we design new medicines, by allowing us to accurately predict the behaviour of proteins."

# MOTIVOS PARA MODELAR:

---

- Obtener información inaccesible experimentalmente: tiempos muy cortos, resoluciones atómicas, procesos en condiciones extremas.
- Probar hipótesis sin restricciones físicas: podemos estudiar cosas que aún no se pueden sintetizar o que son peligrosas.
- Diseño racional: fármacos, materiales, catalizadores → podemos usar simulaciones para predecir qué diseño funcionará mejor.

# SIMULACIÓN COMO EXPERIMENTO COMPUTACIONAL

---

El modelado molecular implica el uso de algoritmos informáticos y simulaciones para investigar y predecir el comportamiento y las propiedades de las moléculas y los sistemas moleculares.

# FUNDAMENTOS DE LA MODELACIÓN MOLECULAR

---

Tres elementos principales del modelado molecular:

1. Representación
2. Manipulación
3. Medición/Análisis



# REPRESENTACIÓN

---

¿Cómo representamos una molécula en la computadora?

Hay que representar moléculas de una forma que:

- Sea computacionalmente factible (que se pueda hacer)
- Capture las propiedades de interés

Preguntas importantes al elegir una representación:

1. ¿Qué aproximaciones se necesitan para que los cálculos sean factibles?
2. ¿Qué modelo puede capturar la estructura y las propiedades del sistema?

# REPRESENTACIÓN

---

La representación abarca:

- Átomos como esferas con masa y carga
- Enlaces intramoleculares
  - Enlaces como resortes (modelados con funciones armónicas)
- Enlaces intermoleculares
  - Fuerzas de Van der Waals, fuerzas de dipolo, puentes de hidrógeno, fuerzas electrostáticas débiles

También debemos elegir un campo de fuerza (force field) adecuado

# PREGUNTA: ¿CÓMO OBTENGO LA DENSIDAD DEL AGUA?

---

- Aparato:
- Material:
- Procedimiento:
- Análisis:
- En el laboratorio:

# PREGUNTA: ¿CÓMO OBTENGO LA DENSIDAD DEL AGUA?

---

- Aparato: recipiente, báscula, vaso medidor o probeta
- Material: Agua a temperatura ambiente
- Procedimiento: Pesar el agua, medir el volumen
- Análisis: Calcular la densidad
- En el laboratorio: peso 100 mL y mido su masa → densidad = masa/volumen.



# PREGUNTA: ¿CÓMO OBTENGO LA DENSIDAD DEL AGUA?

---

- Ahora te enseno como lo haríamos en una simulacion
  - Aparato: computadora
  - Representación: Campo de fuerza/potencial (masa, enlaces, ángulos, cargas, interacciones)
  - Manipulación: Número de moléculas de agua, temperatura (termostato), presión (barostato), actualización de posiciones y velocidades (integrador)
  - Medición: Cálculo de densidad

# EJERCICIO EN GOOGLE COLAB

---

[https://colab.research.google.com/github/fernandasulantay/InspiraSTEM2025MD/blob/main/Dia-1/Day1\\_MD\\_WaterTIP4P\\_OpenMM.ipynb](https://colab.research.google.com/github/fernandasulantay/InspiraSTEM2025MD/blob/main/Dia-1/Day1_MD_WaterTIP4P_OpenMM.ipynb)

