

MD WORKSHOP DIA 2

ICE BREAKER:

Comparte tu científico favorito y porque es tu favorito

VISUALICEMOS DIFERENTES SISTEMAS

<https://andeplane.github.io/atomify/>

TRES ELEMENTOS PRINCIPALES DEL MODELADO MOLECULAR:

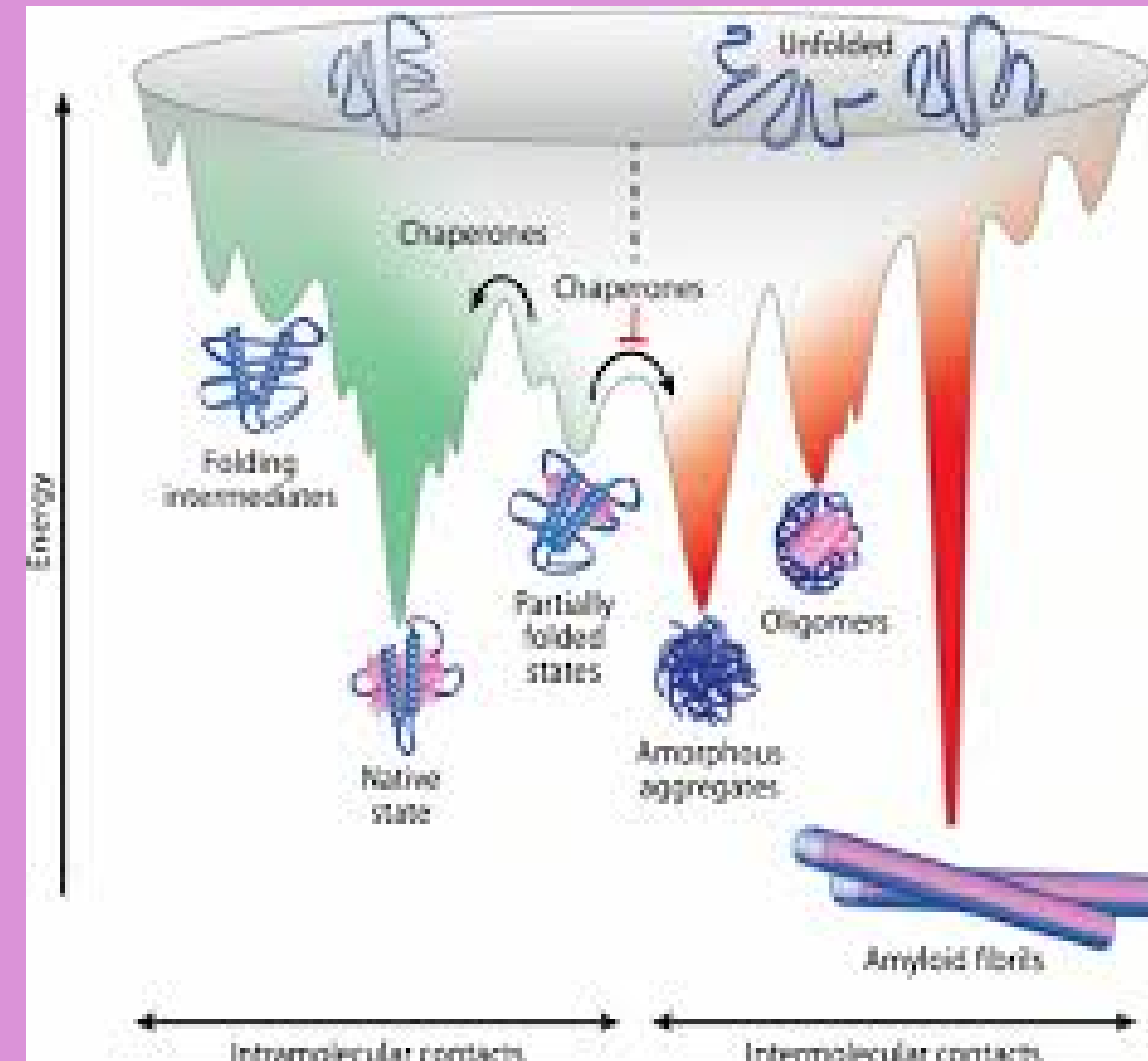
Tres elementos
principales del modelado
molecular:

1. Representación
2. Manipulación
3. Medición/Análisis

MANIPULACIÓN

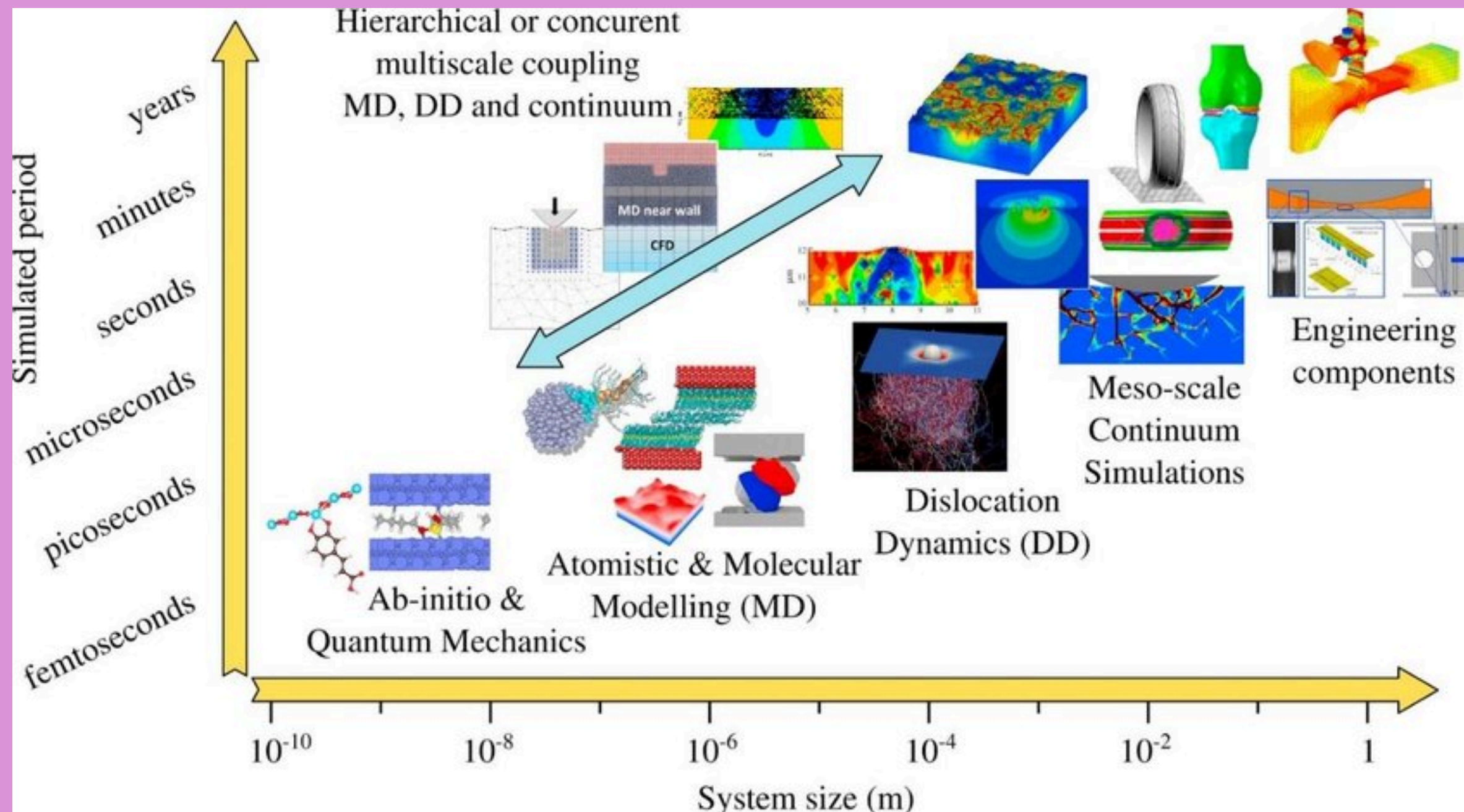
¿Cómo hago que el sistema explore configuraciones?

Implica cómo se perturban los modelos moleculares para explorar diferentes conformaciones del sistema y calcular propiedades de interés.



MÉTODOS DE MODELACIÓN SEGÚN ESCALA

Elegimos el método según el fenómeno que queremos estudiar y los recursos disponibles.



MINIMIZACIÓN DE ENERGÍA

- Es un proceso para encontrar la **estructura más estable (o una estructura metaestable) de un sistema molecular**, es decir, aquella configuración de los átomos donde la energía potencial es mínima.
- En física y química, los sistemas tienden a adoptar configuraciones de mínima energía porque son las más estables.

¿POR QUÉ QUEREMOS EMPEZAR LAS SIMULACIONES CON UNA CONFIGURACION ESTABLE (ENERGIA MINIMA)?

1. Evitar configuraciones físicamente irreales o inestables

- **Si comenzamos con una configuración aleatoria o con átomos demasiado cercanos o muy alejados, el sistema tendrá una energía potencial muy alta y fuerzas muy grandes.**
- **Esto puede generar problemas numéricos durante la simulación, como saltos abruptos en las posiciones o velocidades, que hacen que el cálculo sea inestable o incluso falle.**

¿POR QUÉ QUEREMOS EMPEZAR LAS SIMULACIONES CON UNA CONFIGURACION ESTABLE (ENERGIA MINIMA)?

2. Simular condiciones que realmente existen en la naturaleza

- En la realidad, los sistemas tienden a estar cerca de estados de mínima energía o en estados metaestables.**
- Comenzar con una estructura de energía mínima hace que la simulación refleje situaciones físicas plausibles desde el inicio.**

¿POR QUÉ QUEREMOS EMPEZAR LAS SIMULACIONES CON UNA CONFIGURACION ESTABLE (ENERGIA MINIMA)?

3. Reducir el tiempo de equilibrio

- Si empiezas con una configuración muy alejada de la mínima energía, la simulación tendrá que pasar mucho tiempo (y recursos computacionales) en la fase de “equilibración” para que el sistema “relaje” hacia un estado estable.
- Empezar con una configuración ya optimizada acorta la fase de equilibrio y permite obtener datos relevantes más rápido.

¿POR QUÉ QUEREMOS EMPEZAR LAS SIMULACIONES CON UNA CONFIGURACION ESTABLE (ENERGIA MINIMA)?

4. Mejorar la precisión y confiabilidad de resultados

- Una configuración estable reduce artefactos que puedan surgir por estructuras no físicas.
- Facilita que las propiedades calculadas (energías, fuerzas, densidades) sean más confiables y reproducibles.

¿CÓMO SE HACE?

1. El sistema inicia en una configuración cualquiera, con átomos ubicados en ciertas posiciones.
2. Se calcula la energía potencial total del sistema usando el campo de fuerza.
3. Se calcula el gradiente de la energía (la dirección y magnitud del cambio más rápido de energía con respecto a la posición de los átomos).
4. El algoritmo mueve los átomos en la dirección que reduce la energía (como bajar una pendiente).
5. Este proceso se repite iterativamente hasta que el cambio en energía entre pasos es muy pequeño (es decir, se encontró un mínimo).

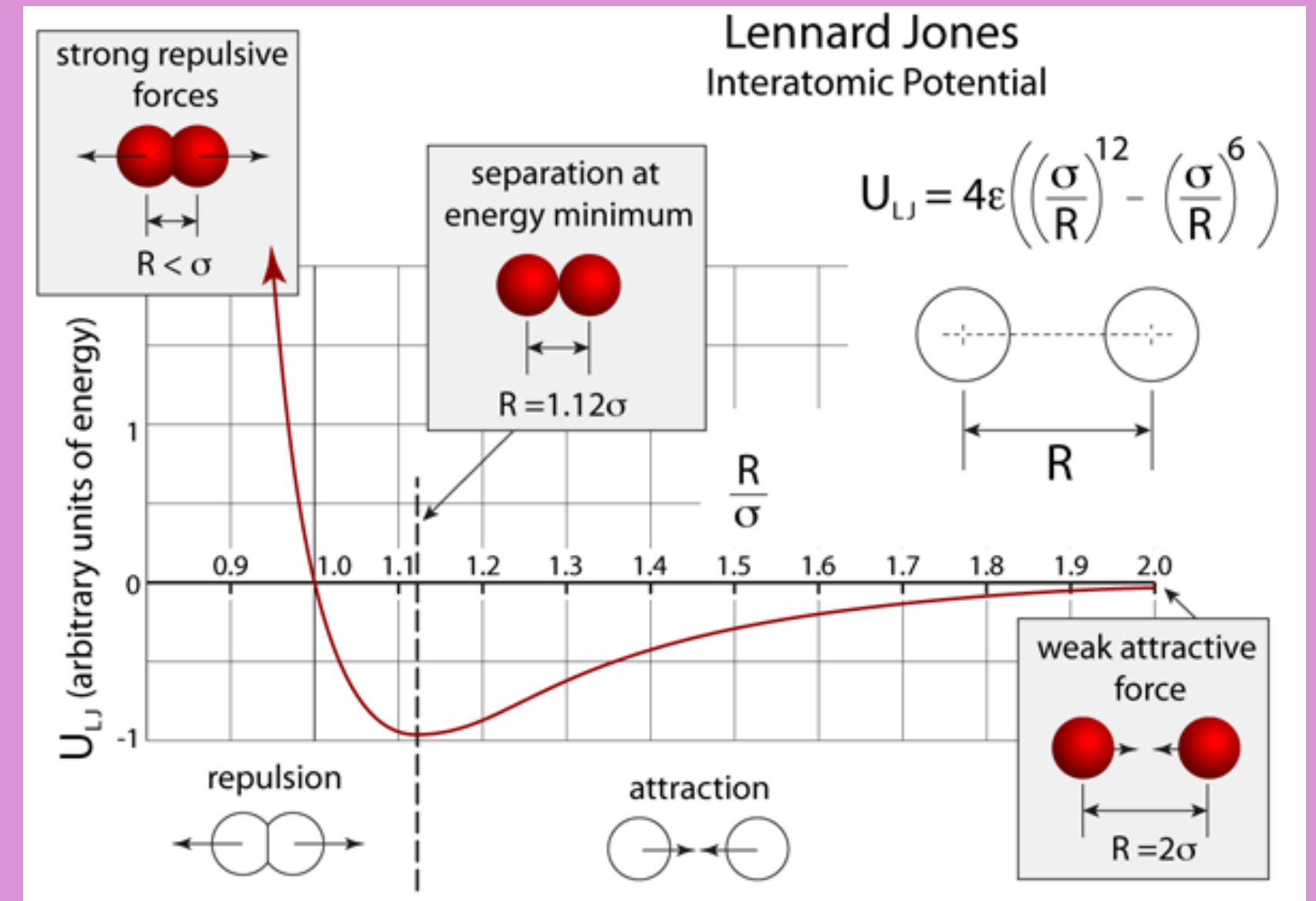
¿CÓMO SE HACE?

Algoritmos usados:

- 1. Gradiente conjugado**
- 2. Newton-Raphson**
- 3. Steepest descent**

CAMPO DE FUERZA EJEMPLO

El potencial de Lennard-Jones es una expresión matemática que modela la energía potencial entre dos átomos o moléculas neutros. Es un modelo simplificado que captura las características esenciales de la atracción a distancias intermedias y la repulsión a distancias muy cortas, así como la interacción insignificante a largas distancias. Este potencial recibe su nombre en honor a Sir John Edward Lennard-Jones, matemático y físico británico que realizó importantes contribuciones al campo de la interacción molecular.



DINÁMICA MOLECULAR (MD)

- **Simula cómo se mueven los átomos en el tiempo, resolviendo las leyes de Newton para cada partícula del sistema.**
- **Permite estudiar la evolución dinámica y termodinámica del sistema a nivel atómico, utilizando la mecánica clásica.**
- **¿Qué leyes de Newton usamos?**

DINÁMICA MOLECULAR (MD)

- Simula cómo se mueven los átomos en el tiempo, resolviendo las leyes de Newton para cada partícula del sistema.
- Permite estudiar la evolución dinámica y termodinámica del sistema a nivel atómico, utilizando la mecánica clásica.

¿Qué leyes de Newton usamos?

La segunda ley de Newton

$$\vec{F}_i = m_i \vec{a}_i = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2}$$

Esta ley establece que la aceleración de un objeto es directamente proporcional a la fuerza neta que actúa sobre él y en la misma dirección, y es inversamente proporcional a su masa.

¿CÓMO FUNCIONA EL ALGORITMO MD?

1. Se comienza con posiciones y velocidades iniciales para cada átomo.
2. Calculamos las fuerzas en cada átomo usando el campo de fuerza.
3. Aplicamos la segunda ley de Newton para obtener la aceleración.
4. Integramos numéricamente las ecuaciones para actualizar posiciones y velocidades en pequeños pasos de tiempo (por ejemplo, 1 femtosegundo).
5. Repetimos este proceso muchas veces para simular la evolución en el tiempo (nanosegundos, microsegundos, etc.).

MÉTODOS COMUNES DE INTEGRACIÓN:

Métodos comunes de integración:

- **Verlet y Velocity-Verlet:** conservan bien la energía y son rápidos.
- **Leapfrog:** buena estabilidad.

Velocity-Verlet - Es un algoritmo numérico que permite resolver las ecuaciones de Newton para cada partícula (átomo o molécula) en una simulación. En otras palabras, permite actualizar la posición y velocidad de cada partícula a lo largo del tiempo.

MÉTODOS COMUNES DE INTEGRACIÓN:

El algoritmo se compone de tres pasos:

- Actualizar posiciones
- Calcular nuevas fuerzas con las nuevas posiciones para obtener la aceleración
- Actualizar velocidades

$$\begin{aligned}\vec{x}_{i+1} &= \vec{x}_i + \vec{v}_i \Delta t + \frac{1}{2} \vec{a}_i \Delta t^2 \\ &= \vec{x}_i + \Delta t \left(\vec{v}_i + \frac{1}{2} \vec{a}_i \Delta t \right)\end{aligned}$$

$$\vec{a}_i^{\text{new}} = \frac{\vec{F}_i^{\text{new}}}{m_i}$$

$$\vec{v}_{i+1} = \vec{v}_i + \frac{1}{2} (\vec{a}_i + \vec{a}_{i+1}) \Delta t.$$

MÉTODOS COMUNES DE INTEGRACIÓN:

El algoritmo se compone de tres pasos:

- Actualizar posiciones
- Calcular nuevas fuerzas con las nuevas posiciones para obtener la aceleración
- Actualizar velocidades

$$\begin{aligned}\vec{x}_{i+1} &= \vec{x}_i + \vec{v}_i \Delta t + \frac{1}{2} \vec{a}_i \Delta t^2 \\ &= \vec{x}_i + \Delta t \left(\vec{v}_i + \frac{1}{2} \vec{a}_i \Delta t \right)\end{aligned}$$

$$\vec{a}_i^{\text{new}} = \frac{\vec{F}_i^{\text{new}}}{m_i}$$

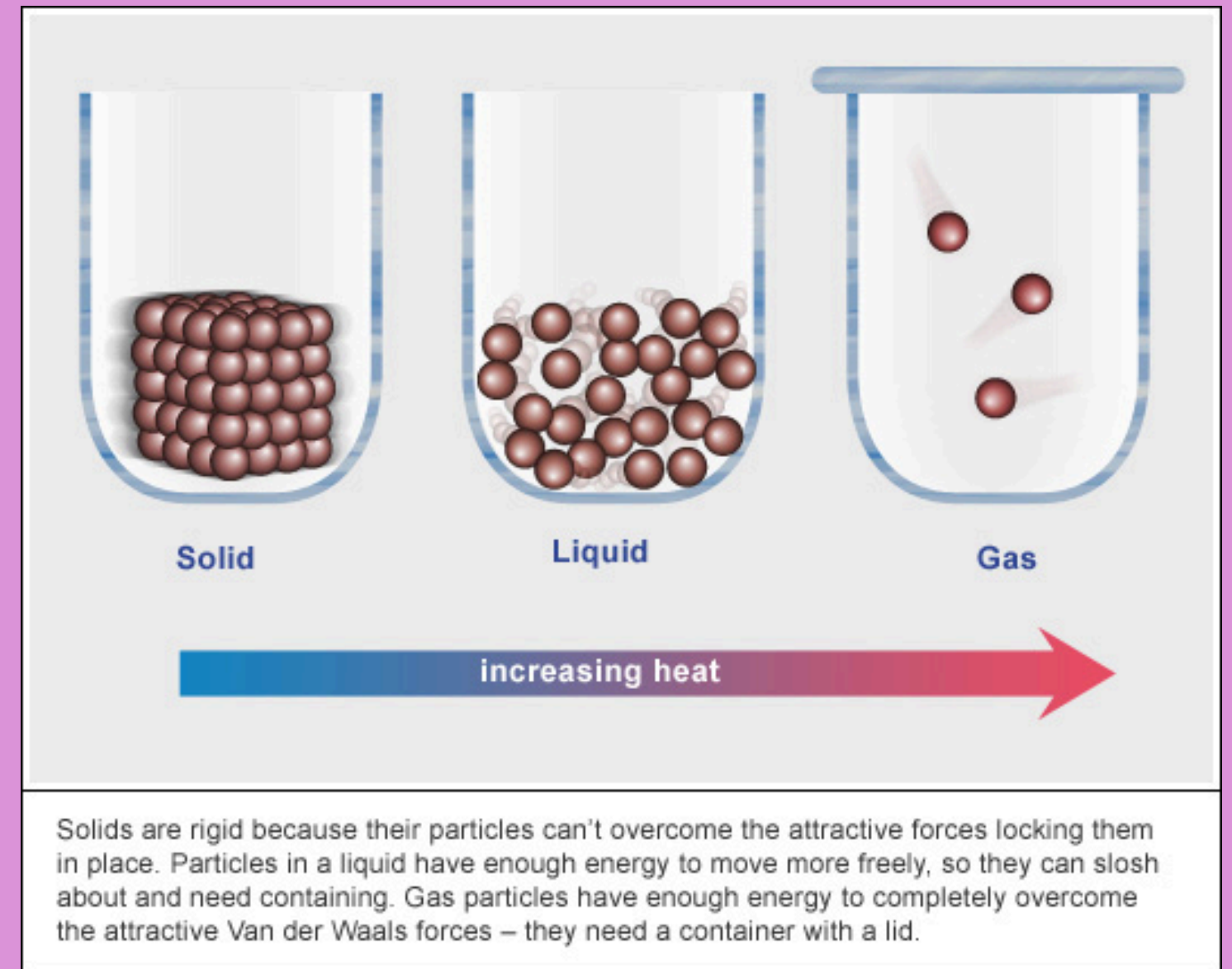
$$\vec{v}_{i+1} = \vec{v}_i + \frac{1}{2} (\vec{a}_i + \vec{a}_{i+1}) \Delta t.$$

MANIPULAMOS

- **Número de moléculas**
- **Temperatura (termóstato)**
- **Presión (baróstato)**
- **Tiempo de integración (paso de tiempo)**

TEMPERATURA

- Es una medida de la energía cinética promedio de las partículas en el sistema.
- En MD, la temperatura no se impone directamente; se calcula a partir de la velocidad de los átomos usando



TEMPERATURA

¿Por qué controlarla?

Queremos simular sistemas a condiciones experimentales reales (por ejemplo, **300 K = temperatura ambiente**).

Si no se controla, la temperatura puede subir o bajar de forma no deseada debido a errores numéricos o procesos no equilibrados.

¿Cómo se controla?

Se usa un **termóstato**: un algoritmo que ajusta las velocidades de los átomos para mantener la temperatura deseada.

Ejemplos de termóstatos:

- **Berendsen**: ajusta suavemente la temperatura.
- **Langevin**: añade fricción y ruido aleatorio (simula un “baño térmico”).
- **Nosé-Hoover**: más riguroso, conserva las propiedades del conjunto NVT (volumen constante, temperatura constante).

PRESION

La presión es el resultado de las colisiones de los átomos con las paredes del volumen simulado.

¿Por qué controlarla?

- Para simular condiciones realistas (por ejemplo, 1 atm).
- En simulaciones a presión constante (conjunto NPT), necesitamos que el volumen pueda expandirse o comprimirse para mantener la presión deseada.

Ejemplos de baróstatos:

- **Berendsen:** cambia el volumen de forma proporcional al desvío de la presión.
- **Parrinello-Rahman:** permite incluso deformaciones de la celda (útil para sólidos).
- **Monte Carlo barostat:** realiza cambios de volumen con cierta probabilidad aceptada (menos común en MD tradicional).

TIEMPO DE INTEGRACIÓN (PASO DE TIEMPO)

- Las simulaciones no son continuas como los procesos del mundo real. En cambio, se desarrollan en una serie de pasos, donde el estado del sistema se calcula en puntos específicos del tiempo.
- El paso de tiempo determina la duración de estos intervalos.

¿Por qué es importante?

- Un paso de tiempo más corto = mayor precisión, aumento del costo computacional y el tiempo necesario para completar la simulación.
- Un paso de tiempo mayor = acelera la simulación, pero puede generar imprecisiones o inestabilidad si es demasiado largo para capturar cambios importantes en la dinámica del sistema.
- La duración ideal del paso de tiempo depende del sistema específico que se esté simulando y de la rapidez con la que cambian sus variables. Para sistemas con cambios rápidos, se requiere un paso de tiempo más corto, mientras que para sistemas con cambios más lentos se requieren pasos de tiempo mayores.