

Inicialización del sistema

Finaliza la simulación

Se calculan la fuerza
sobre los átomos

Se integran las
ecuaciones de
movimiento

Evolución temporal:
¿Se necesitan más
pasos?

Cómputo de
propiedades
termodinámicas de
interés y escritura de
las mismas y las
posiciones archivos
de salida

Control de la
temperatura
y/o presión

Sí

No

