

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

Control de la  
temperatura  
y/o presión

Sí

No

