



## Becas colaboración curso 2023/2024

Fecha: 29 Mayo 2023

### Vicerrectorado de Investigación

Subcomisión de I+D+i

Propuesta del departamento *INGENIERÍA QUÍMICA Y NUCLEAR*

**Núm Proyecto: 2023/23/00013**

#### Responsable

Gozálvez Zafrilla, José Marcial

#### E-mail

jmgz@iqn.upv.es

#### Ext.

76333

#### Título proyecto

Simulación Dinámica Molecular para el estudio de moléculas en sistemas confinados con Julia-Molly

#### Valoración proyecto

4

#### Descripción proyecto

La simulación dinámica molecular (MDS) es una herramienta muy útil en la determinación de propiedades de sistemas difícilmente obtenibles experimentalmente y que son útiles en diversos campos: flujo en sistemas porosos, membranas, microrreactores, etc.

En este proyecto se busca preparar ejemplos demostrativos para su uso en docencia empleando la toolbox Molly de Julia (Julia es libre, muy similar a Matlab y de rápido aprendizaje, especialmente si sabe este último), así como de software de visualización y modelización de moléculas. Se partirá de ejemplos adaptados por el profesor para crear otros relativos a espacios confinados. Dependiendo del desarrollo, sería interesante comparar con otros softwares libres o con librerías de Python.

Con el proyecto, el alumno interesado se iniciará en un campo de gran potencial en un futuro próximo. Posibilidad de TFM.

#### Actividades a realizar por el alumno

- Aprendizaje de Julia y preparación de un manual comparativo con Matlab.
- Estudio de los ejemplos de MDS ya existentes.
- Preparación de nuevos ejemplos de aplicación de MDS en espacios confinados bajo la dirección del profesor.
- Comparación con otros softwares libres.

#### Localización de la actividad (Campus)

Vera

#### Horario

El número total de horas establecido en la convocatoria para cada semana se realizará por el alumno a través de tareas fijándose siempre 3 h/semana compatibles con los horarios de profesor y alumno para evaluar el progreso.