



## Becas colaboración curso 2018/2019

Fecha: 28 Junio 2018

### Vicerrectorado de Investigación, Innovación y Transferencia

Subcomisión de I+D+i

Propuesta del departamento *INGENIERIA QUIMICA Y NUCLEAR*

**Núm Proyecto: 2018/23/00011**

#### Responsable

Gozálvez Zafrilla, José Marcial

#### E-mail

jmgz@iqn.upv.es

#### Ext.

76333

#### Título proyecto

Simulación dinámica molecular aplicada a la separación por membranas.

#### Valoración proyecto

4

#### Descripción proyecto

La simulación dinámica molecular (MDS) es una herramienta muy útil en la determinación de propiedades de disoluciones difícilmente obtenibles experimentalmente. Muchas de estas propiedades son útiles en los modelos de membranas. Los profesores disponen de códigos en C++ de funciones de cálculo de propiedades de conjuntos de moléculas. No obstante, estos códigos deben integrarse de forma adecuada para la modelización del comportamiento de disoluciones iónicas en sistemas confinados útiles para simular membranas, así como validarse con resultados experimentales. Asimismo, es necesaria una conexión con Matlab para lograr una interfaz sencilla.

El proyecto va destinado a alumnos de ingeniería con un dominio de C++ suficiente, por lo que un perfil informático es deseable. La parte conceptual físico-química quedaría en un segundo plano pues se parte de códigos hechos, no obstante, un alumno con interés podrá aprender bastante en el campo.

#### Actividades a realizar por el alumno

- Testeo y montaje de códigos de C++.
- Realización de pruebas en cluster. Preparación para el cálculo paralelizado si es posible.
- Realización de envolturas en Matlab para llamada al código de C++.
- Participación en la discusión de los resultados.

#### Horario

El número total de horas establecido en la convocatoria para cada semana se realizará mañanas o tardes de forma compatible con el horario del profesor y huecos del alumno, pues el acceso a las máquinas de cálculo se realizará desde el despacho del profesor.