



# Universidad Autónoma del Estado de México. Facultad de Ciencias



Desarrollo del código de simulación  
SIMAT (SIMulaciones Atomísticas) en GPU's para  
estudiar sistemas biológicos a gran escala: Seminario  
de Investigación VI 2017B

**Nombre de la Unidad de Aprendizaje:  
SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN VI  
SEMINARIO INTERDISCIPLINARIO VI  
(Doctorado)**

**Autor: Dr Jorge Mulia Rodríguez**

**Coautor: M. en C. Luis Rolando Guarneros Nolasco**

**Septiembre de 2017**

## GUÍA EXPLICATIVA DE USO GENERAL PARA LA UNIDAD DE APRENDIZAJE DE SEMINARIO DE INVESTIGACIÓN VI (SEMINARIO INTERDISCIPLINARIO V) (DOCTORADO)

	Página
I. Objetivo	7
II. Antecedentes	8
III. Métodos	9
IV. Dinámica molecular (DM)	10
V. Algoritmo de integración: Velocity Verlet	11
VI. Condiciones iniciales	12
VII. Condiciones periódicas de frontera	13
VIII. Potencial de interacción: Intramolecular e Intermolecular	14
IX. Diagrama de flujo de una DM	15
X. Aplicaciones para dinámica molecular en Unidades de Procesamiento Gráfico (GPU's) acreditados por Nvidia	16

	Página
XI. Cómputo de alto rendimiento en GPU's.	25
XII. Resultados preliminares: Performance Dina Vs Simat	30
XIII. Bibliografía	40

# I. TRAYECTORÍA ACADÉMICA

## DOCTORADO EN CIENCIAS

Área	Primer periodo lectivo	Segundo periodo lectivo	Tercer periodo lectivo	Cuarto periodo lectivo	Quinto periodo lectivo	Sexto periodo lectivo
Investigación	Seminario de investigación I HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación II HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación III HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación IV HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación V HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación VI HT: 0 HP: 2 Créditos: 2
	Actividades de investigación de Doctorado I HT: 1 HP: 4 Créditos: 6	Actividades de investigación de Doctorado II HT: 1 HP: 10 Créditos: 12	Actividades de investigación de Doctorado III HT: 1 HP: 10 Créditos: 12	Actividades de investigación de Doctorado IV HT: 1 HP: 10 Créditos: 12	Actividades de investigación de Doctorado V HT: 1 HP: 10 Créditos: 12	Actividades de investigación de Doctorado VI HT: 1 HP: 10 Créditos: 12
Complementaria	Curso en Ciencias A HT: 3 HP: 2 Créditos: 8					
		Curso en Ciencias B HT: 3 HP: 2 Créditos: 8				

## DOCTORADO EN CIENCIAS (INTEGRADO)

Area	Primer periodo lectivo	Segundo periodo lectivo	Tercer periodo lectivo	Cuarto periodo lectivo	Quinto periodo lectivo	Sexto periodo lectivo	Séptimo periodo lectivo	Octavo periodo lectivo
Investigación	Seminario interdisciplinario I HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario interdisciplinario II HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación I HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación II HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación III HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación IV HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación V HT: 0 HP: 2 Créditos: 2	Seminario de investigación VI HT: 0 HP: 2 Créditos: 2
	Actividades de investigación de Maestría I HT: 1 HP: 4 Créditos: 6	Actividades de investigación de Maestría II HT: 1 HP: 4 Créditos: 6	Actividades de investigación de Doctorado I HT: 1 HP: 4 Créditos: 6	Actividades de investigación de Doctorado II HT: 1 HP: 10 Créditos: 12	Actividades de investigación de Doctorado III HT: 1 HP: 10 Créditos: 12	Actividades de investigación de Doctorado IV HT: 1 HP: 10 Créditos: 12	Actividades de investigación de Doctorado V HT: 1 HP: 10 Créditos: 12	Actividades de investigación de Doctorado VI HT: 1 HP: 10 Créditos: 12
Básica	Básica A HT: 3 HP: 2 Créditos: 8							
	Básica B HT: 3 HP: 2 Créditos: 8							
Complementaria		Curso en Ciencias A HT: 3 HP: 2 Créditos: 8	Curso en Ciencias C HT: 3 HP: 2 Créditos: 8					
		Curso en Ciencias B HT: 3 HP: 2 Créditos: 8	Curso en Ciencias D HT: 3 HP: 2 Créditos: 8					

## II. UNIDAD DE APRENDIZAJE

<b>Unidad de Aprendizaje:</b>		Seminario de Investigación V		
<b>Periodo lectivo</b>	<b>Horas totales</b>	<b>Horas Teóricas</b>	<b>Horas Prácticas</b>	<b>Créditos</b>
Quinto	2	0	2	2
<b>Unidades de Aprendizaje Antecedentes</b>		<b>Unidades de Aprendizaje Consecuentes</b>		
Seminario de Investigación IV		Seminario de Investigación VI		
<b>Fecha de elaboración:</b>		<b>Elaboró:</b>		
Mayo 2014		Comité curricular y colaboradores		
<b>Objetivo general:</b>				
Intercambiar conocimientos básicos e interdisciplinarios en torno a los protocolos de investigación de los estudiantes y las LGAC del Plan de Estudios.				
<b>Contenido temático:</b>				
Exposiciones individuales del protocolo y avances en investigación por parte del estudiante de acuerdo a las actividades establecidas en su protocolo de tesis. Pláticas de especialistas invitados.				
<b>Actividades de aprendizaje:</b>				
Asistencia y participación en cada Coloquio semestral de <del>doctorantes</del> , así como en las actividades académicas relacionadas con las LGAC del posgrado.				
El titular de la UA promoverá actividades de reflexión sobre la ética en la investigación y aplicación del conocimiento para establecer el compromiso y responsabilidad de cada estudiante de incluirla en su quehacer científico.				
El titular de la UA promoverá actividades de reflexión sobre conceptos de justicia, dignidad y equidad de las personas en el ámbito científico.				
Adicionalmente el titular de los seminarios dará seguimiento a los avances de los alumnos conforme a los protocolos de tesis aprobados por la Comisión Académica.				
<b>Procedimiento de evaluación:</b>				
La calificación corresponde a una evaluación diagnóstica de la presentación por escrito y oral de acuerdo a las actividades establecidas en su protocolo de tesis, con la finalidad de conocer los conocimientos y avances previos adquiridos durante el semestre del estudiante. Se evaluará la presentación por escrito y la defensa oral, considerando los siguientes criterios con sus escalas respectivas:				
1. Tema principal 50%				
(Antecedentes, objetivos e hipótesis, materiales y métodos, conocimiento del tema)				
2. Técnicas de presentación 10%				
(Claridad de la exposición y secuencia de la presentación)				
3. Ayudas visuales 10%				
4. Reacción y discusión de la audiencia 10%				
5. Desarrollo académico del estudiante a las preguntas formuladas durante sus intervenciones en el seminario.20%				
<b>Bibliografía</b>				
Revistas y textos especializados acorde con las LGAC del Posgrado y el protocolo de investigación de cada alumno.				
Artículos especializados seleccionados por el titular de la Unidad de Aprendizaje.				
Bases de datos.				

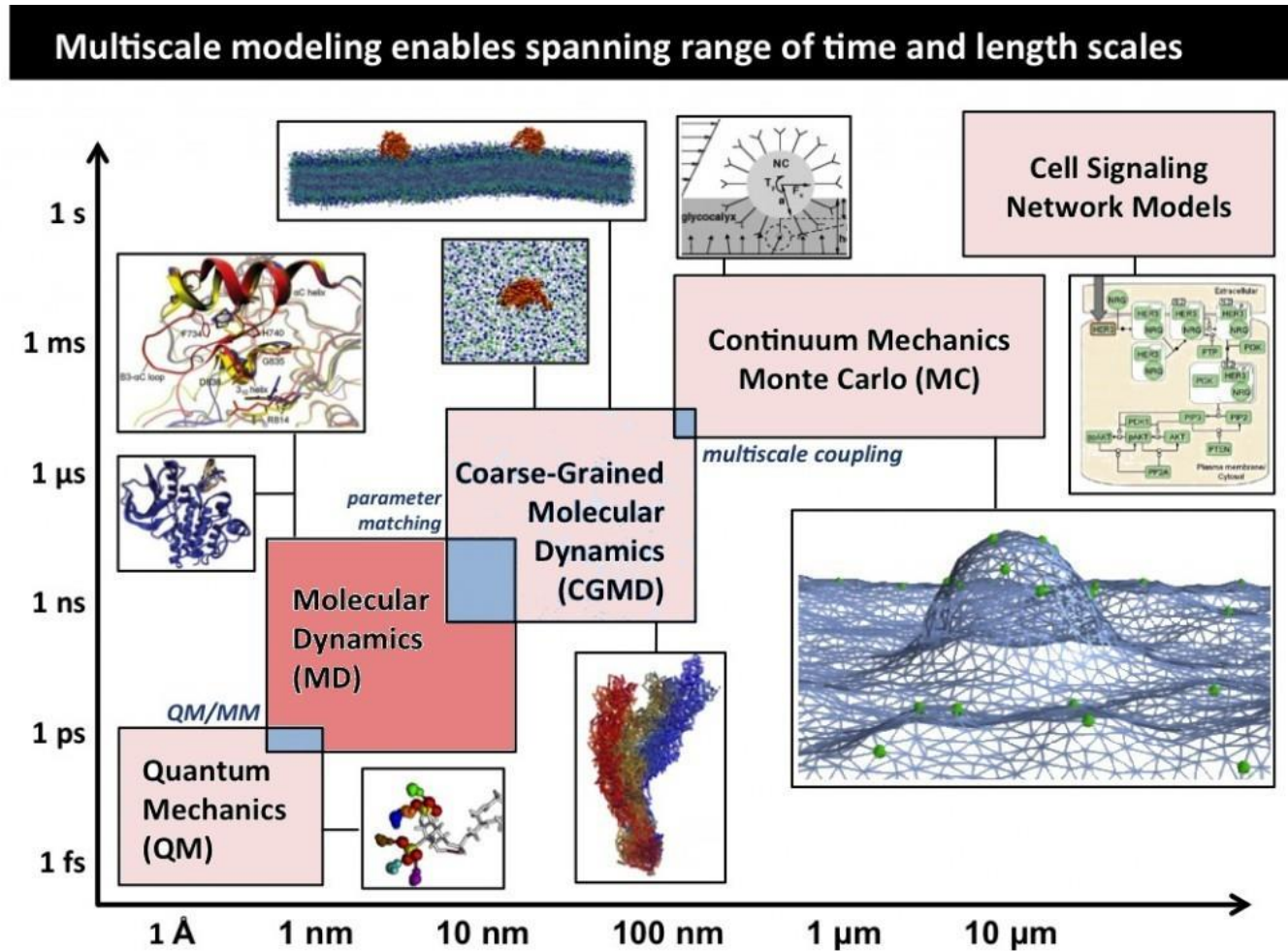
Desarrollo del código de simulación  
SIMAT (SIMulaciones Atomísticas) en  
GPU's para estudiar sistemas  
biológicos a gran escala.

# I. Objetivo

- / Implementar novedosos algoritmos para realizar simulaciones moleculares de sistemas biológicos a gran escala en diversos ensambles estadísticos como volumen y energía constante (NVE), volumen y temperatura constante (NVT) y presión y temperatura constante (NPT), a través de un nuevo código desarrollado en unidades de procesamiento gráfico GPU's denominado SIMAT (SIMulaciones Atomísticas).

# II. Antecedentes

Los métodos para análisis presentan dos limitantes para estudiar sistemas de gran tamaño como las proteínas: **partículas del sistema y el tiempo de integración**





# III. Métodos

# IV. Dinámica molecular (DM)

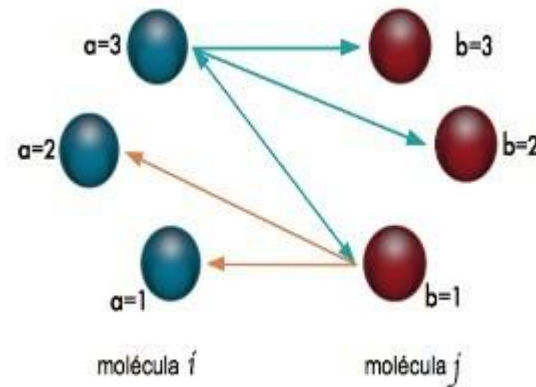
Resuelve las ecuaciones clásicas de movimiento para un sistema de  $N$  partículas con masa  $m_i$  y posiciones  $\mathbf{r}_i$  a un tiempo  $t$  que interactúan por medio de un potencial de interacción de átomos.

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

$$i = 1, \dots, N$$

$$\mathbf{F}_i = \sum_{i \neq j}^N \mathbf{F}_{ij}$$

$$\mathbf{F}_{ij} = - \frac{dU(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}$$

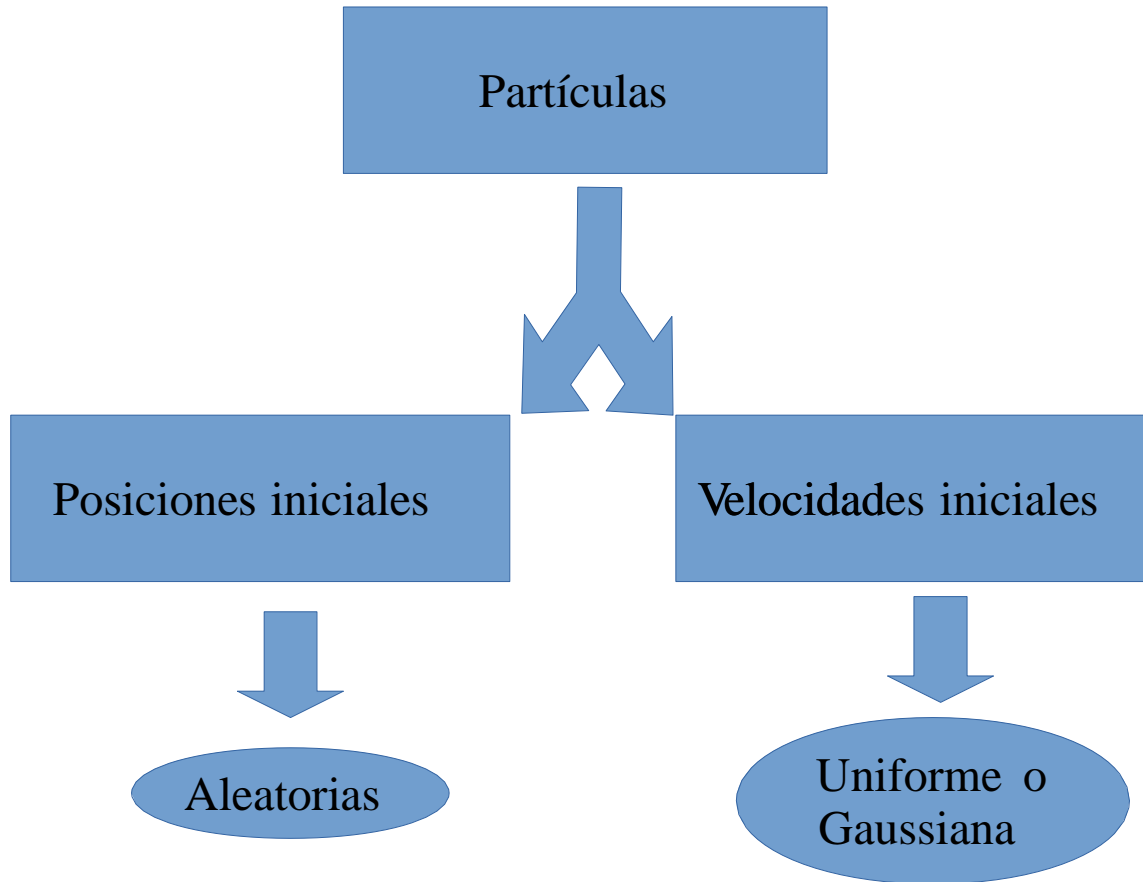


## V. Algoritmos de integración: Velocity Verlet

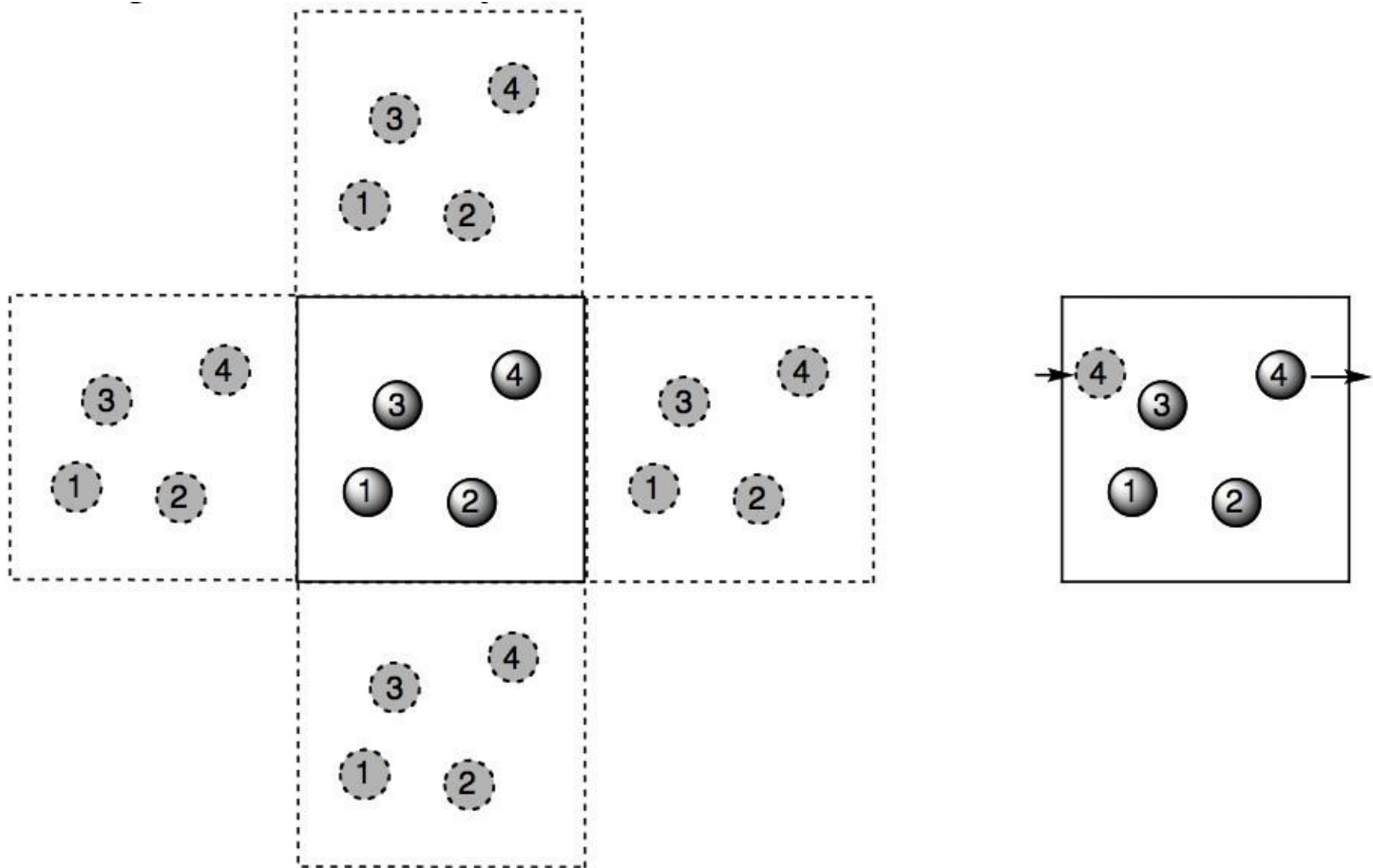
$$\mathbf{r}_i(\Delta t) = \mathbf{r}_i(0) + \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}\Delta t + \frac{1}{2}\frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2}\Delta t^2 + \dots$$
$$\mathbf{v}_i(\Delta t) = \mathbf{v}_i(0) + \frac{d\mathbf{v}_i}{dt}\Delta t + \frac{1}{2}\frac{d^2\mathbf{v}_i}{dt^2}\Delta t^2 + \dots$$

$$\mathbf{r}_i(\Delta t) = \mathbf{r}_i(0) + \mathbf{v}_i(0)\Delta t + \frac{\mathbf{F}_i(0)}{2m_i}\Delta t^2$$
$$\mathbf{v}_i(\Delta t) = \mathbf{v}_i(0) + \frac{\Delta t}{2m_i}[\mathbf{F}_i(0) + \mathbf{F}_i(\Delta t)]$$

# VI. Condiciones Iniciales



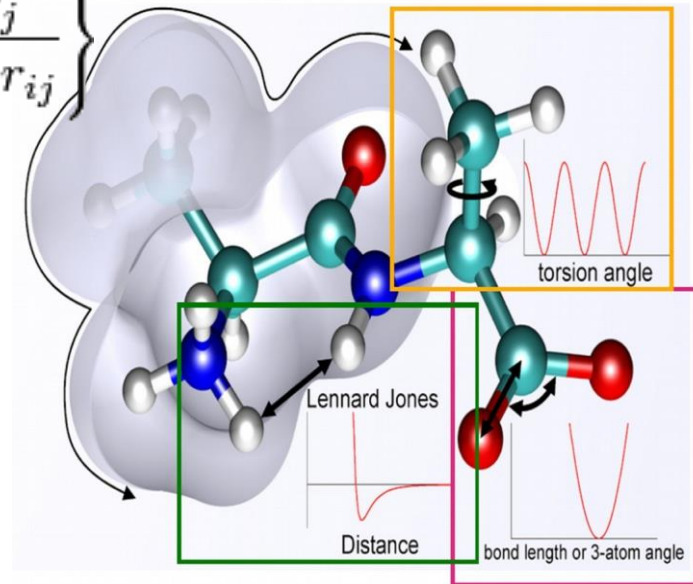
# VII. Condiciones periódicas de frontera



[2] R. López-Rendón, 2007.

# VIII. Potencial de Interacción: Intramolecular e Intermolecular

$$\begin{aligned}
 V(r^N) = & \sum_{\text{bonds}} \frac{1}{2} k_b (l - l_0)^2 + \sum_{\text{angles}} \frac{1}{2} k_a (\theta - \theta_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{torsions}} \frac{1}{2} V_n [1 + \cos(n\omega - \gamma)] \\
 & + \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=j+1}^N \left\{ \epsilon_{i,j} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right\}
 \end{aligned}$$



[2] R. López-Rendón, 2007.

# IX. Diagrama de flujo de una DM

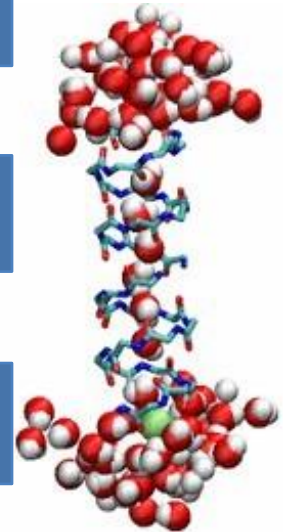
Dar a los átomos una posición inicial  $r^{(t=0)}$ , seleccionando un corto periodo de tiempo  $\Delta t$

Se obtienen las fuerzas  $F = -\nabla V(r^{(i)})$  y  $a = F/m$

Movemos los átomos  $r^{(i+1)} = r^{(i)} + v^{(i)} \Delta t + \frac{1}{2} a \Delta t^2 + \dots$  Movemos

el tiempo hacia adelante  $t = t + \Delta t$

Repetir al número de pasos necesarios



# X. Aplicaciones para dinámica molecular en GPU acreditadas por Nvidia

## ACEMD

- € 150 ns/day DHFR Speed up Supported Features
- € Written for use only on GPU's

## NAMD

- € 4.0 ns/day F1-ATPase Speed up Supported Features
- € Full electrostatics with PME and most simulation features

## GROMACS

- € 165 ns/day DHFR Speed up Supported Features
  - € Implicit (5x)
  - € Explicit (2x) solvent

## HOOMD-Blue

- € 2x Speed up Supported Features
- € Written for use only on GPU's

## LAMMPS

- € 3.5 - 18x Speed up Supported Features
  - € Lennard-Jones
  - € Gay-Berne
  - € Tersoff

\* Las aceleraciones esperadas dependen mucho de la configuración del sistema. A menos que se indique de otra forma, la aceleración vale para todo el código. Rendimiento de la GPU comparado con socket de CPU x86 con múltiples núcleos. Rendimiento de la GPU comparado a partir de los recursos admitidos por la GPU. Puede ser un kernel por la comparación del rendimiento del kernel



# ¿Por qué desarrollar un nuevo código para estudiar sistemas biológicos con simulación molecular?

- / Métodos (DM)
- / Otro modelo de potencial de interacción
- / Diferente algoritmo de integración
- / Nuevo código en GPUs
- / Problema biológico a resolver

# Método a implementar

/ Se basa en métodos propuestos anteriormente y basados en los operadores de Liouville para el desarrollo de algoritmos en diferentes ensambles (López-Rendón[1])

$$\Gamma(t) = e^{iLt} \Gamma(0)$$

$$e^{iL\Delta t} = e^{iL_2\Delta t/2} e^{iL_1\Delta t} e^{iL_2\Delta t/2}$$

[1] R. López-Rendón, 2007.

# Ensamblas implementados

# Ensamble NVE: Energía Constante

for  $i = 1$  to  $N$        $\mathbf{p}_i\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \leftarrow \mathbf{p}_i(0) + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{F}_i(0)$

    for  $i = 1$  to  $N$        $\mathbf{r}_i(\Delta t) \leftarrow \mathbf{r}_i(0) + \Delta t \left(\frac{\mathbf{p}_i(\Delta t/2)}{m_i}\right)$

    Calcular las fuerzas  $\mathbf{F}_i(\Delta t)$

    for  $i = 1$  to  $N$        $\mathbf{p}_i(\Delta t) \leftarrow \mathbf{p}_i\left(\frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{F}_i(\Delta t)$

# Ensamble NVT: Temperatura constante

Termostato de Nosé-Hoover

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= \mathbf{F}_i - \frac{p_\eta}{Q} \mathbf{p}_i \\ \dot{\eta} &= \frac{p_\eta}{Q} \\ \dot{p}_\eta &= \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - dNk_B T\end{aligned}$$

Cadenas de Termostato de Nosé-Hoover

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= \mathbf{F}_i - \frac{p_{\eta_1}}{Q_1} \mathbf{p}_i \\ \dot{\eta}_k &= \frac{p_{\eta_k}}{Q_k} \quad k = 1, \dots, M \\ \dot{p}_{\eta_k} &= G_k - \frac{p_{\eta_{k+1}}}{Q_{k+1}} p_{\eta_k} \\ \dot{p}_{\eta_M} &= G_M\end{aligned}$$

$$G_1 = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - dNk_B T \quad G_k = \frac{p_{\eta_{k-1}}^2}{Q_{k-1}} - k_B T$$

# Ensamble NVT: Temperatura constante

**Thermo – Update**  $\left(\frac{\Delta t}{2}, \{\eta\}, \{p_\eta\}, \mathbf{p}_i\right)$

**for**  $i = 1$  **to**  $N$        $\mathbf{p}_i\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \leftarrow \mathbf{p}_i(0) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{F}_i(0)$

**for**  $i = 1$  **to**  $N$        $\mathbf{r}_i(\Delta t) \leftarrow \mathbf{r}_i(0) + \frac{\Delta t}{m_i} \mathbf{p}_i\left(\frac{\Delta t}{2}\right)$

**Calcular las fuerzas**  $\mathbf{F}_i(\Delta t)$

**for**  $i = 1$  **to**  $N$        $\mathbf{p}_i(\Delta t) \leftarrow \mathbf{p}_i\left(\frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{F}_i(\Delta t)$

**Thermo – Update**  $\left(\frac{\Delta t}{2}, \{\eta\}, \{p_\eta\}, \mathbf{p}_i\right)$

# Ensamble NPT: Presión y Temperatura constante

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{p_\epsilon}{W} \mathbf{r}_i$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i - \left(1 + \frac{1}{N}\right) \frac{p_\epsilon}{W} \mathbf{p}_i - \frac{p_{\eta_1}}{Q_1} \mathbf{p}_i$$

Volumen

$$\dot{V} = \frac{dV}{W} p_\epsilon$$

$$\dot{p}_\epsilon = dV (P_{\text{int}} - P_{\text{ext}}) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - \frac{p_{\xi_1}}{Q'_1} p_\epsilon$$

Termostato

$$\dot{\eta}_k = \frac{p_{\eta_k}}{Q_k} \quad k = 1, \dots, M$$

$$\dot{p}_{\eta_k} = G_k - \frac{p_{\eta_{k+1}}}{Q_{k+1}} p_{\eta_k}$$

$$\dot{p}_{\eta_M} = G_M$$

Barostato

$$\dot{\xi}_k = \frac{p_{\xi_k}}{Q'_k} \quad k = 1, \dots, M$$

$$\dot{p}_{\xi_k} = G'_k - \frac{p_{\xi_{k+1}}}{Q'_{k+1}} p_{\xi_k}$$

$$\dot{p}_{\xi_M} = G'_M$$

# Ensamble NPT: Presión y Temperatura constante

Barost – Update  $\left(\frac{\Delta t}{2}, \xi, p_\xi, \mathbf{p}_i\right)$

Thermo – Update  $\left(\frac{\Delta t}{2}, \eta, p_\eta, \mathbf{p}_i\right)$

$$G_\epsilon(0) \leftarrow \alpha \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} + \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i - dP_{ext}V(0)$$

$$V_\epsilon\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \leftarrow V_\epsilon + \frac{\Delta t}{2}G_\epsilon(0)$$

for  $i = 1$  to  $N$       $\mathbf{p}_i \leftarrow \mathbf{p}_i e^{-\alpha v_\epsilon \Delta t/2} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{F}_i e^{-\alpha v_\epsilon \Delta t/2} \frac{\sinh(\alpha v_\epsilon \Delta t/4)}{\alpha v_\epsilon \Delta t/4}$

for  $i = 1$  to  $N$       $\mathbf{r}_i \leftarrow \mathbf{r}_i e^{v_\epsilon \Delta t} + \Delta t \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} e^{v_\epsilon \Delta t/2} \frac{\sinh(v_\epsilon \Delta t/2)}{v_\epsilon \Delta t/2}$

Calcular las fuerzas  $\mathbf{F}_i(\Delta t)$

$$\epsilon(\Delta t) \leftarrow \epsilon(0) + V_\epsilon\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t$$

$$V(\Delta t) \leftarrow V(0) \exp(d\epsilon(\Delta t))$$

for  $i = 1$  to  $N$       $\mathbf{p}_i \leftarrow \mathbf{p}_i e^{-\alpha v_\epsilon \Delta t/2} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{F}_i(0) e^{-\alpha v_\epsilon \Delta t/2} \frac{\sinh(\alpha v_\epsilon \Delta t/4)}{\alpha v_\epsilon \Delta t/4}$

$$G_\epsilon \leftarrow \alpha \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} + \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i - dP_{ext}V$$

$$V_\epsilon \leftarrow V_\epsilon + \frac{\Delta t}{2}G_\epsilon$$

Thermo – Update  $\left(\frac{\Delta t}{2}, \eta, p_\eta, \mathbf{p}_i\right)$

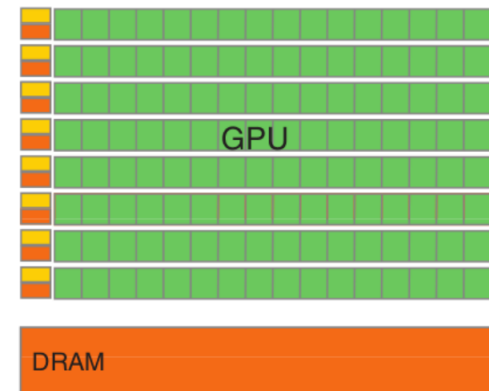
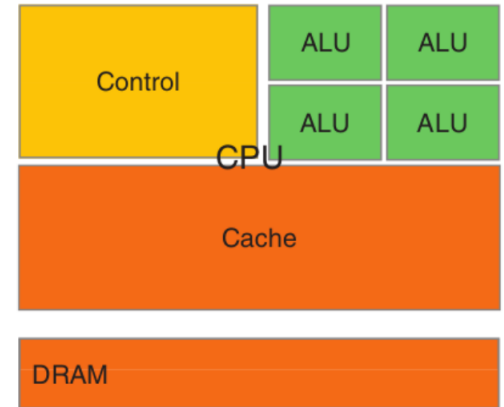
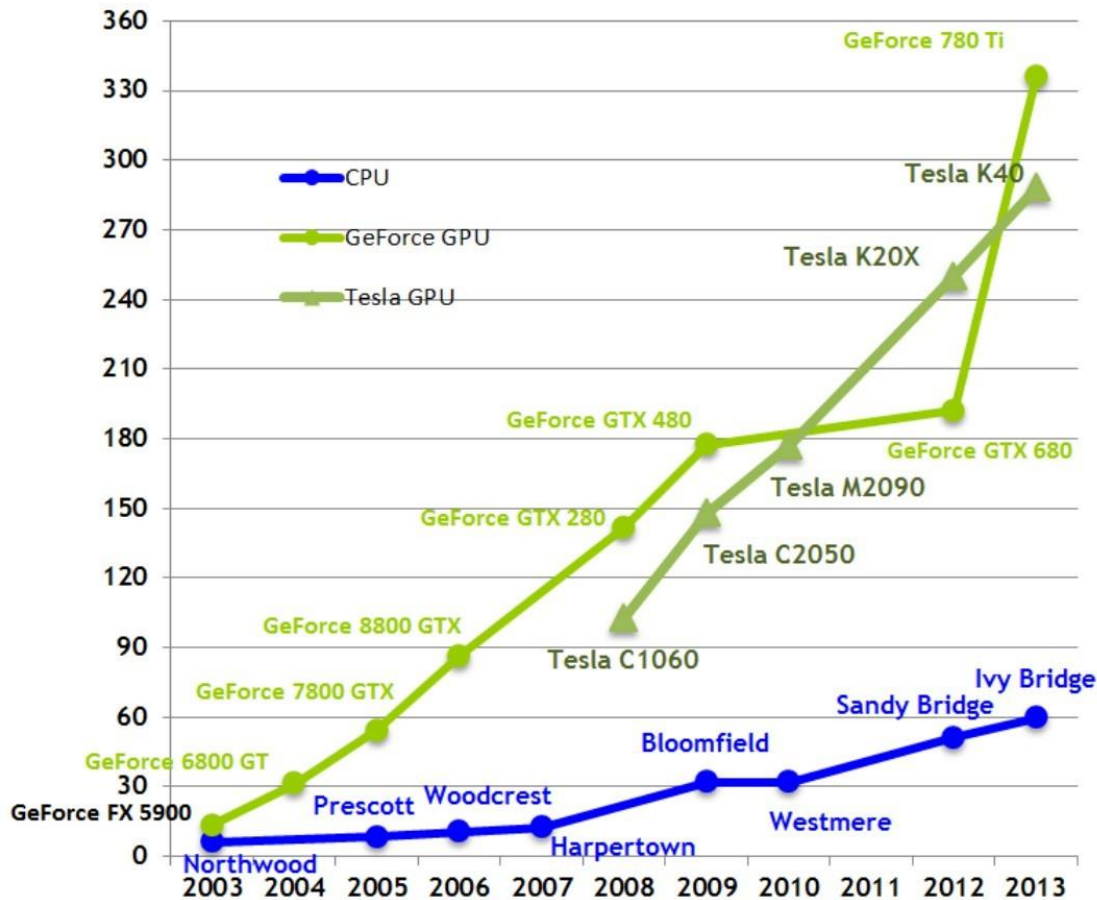
Barost – Update  $\left(\frac{\Delta t}{2}, \xi, p_\xi, \mathbf{p}_i\right)$



# XI. Cómputo de alto rendimiento en GPU's

# Cómputo de Alto Rendimiento en GPU's: Capacidad de procesamiento

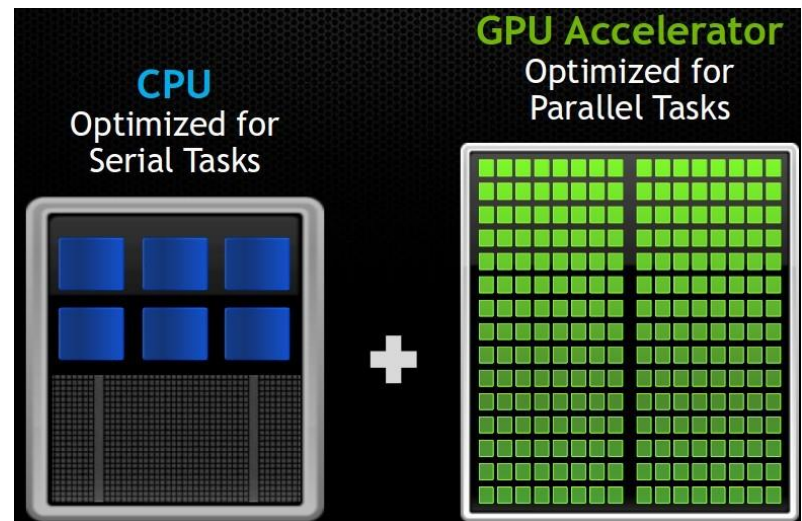
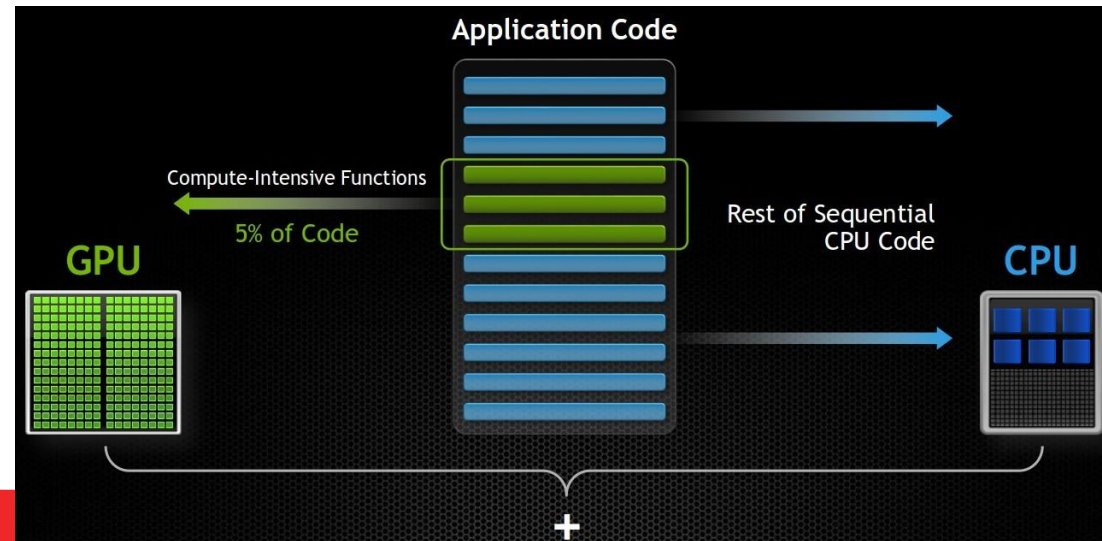
Theoretical GB/s



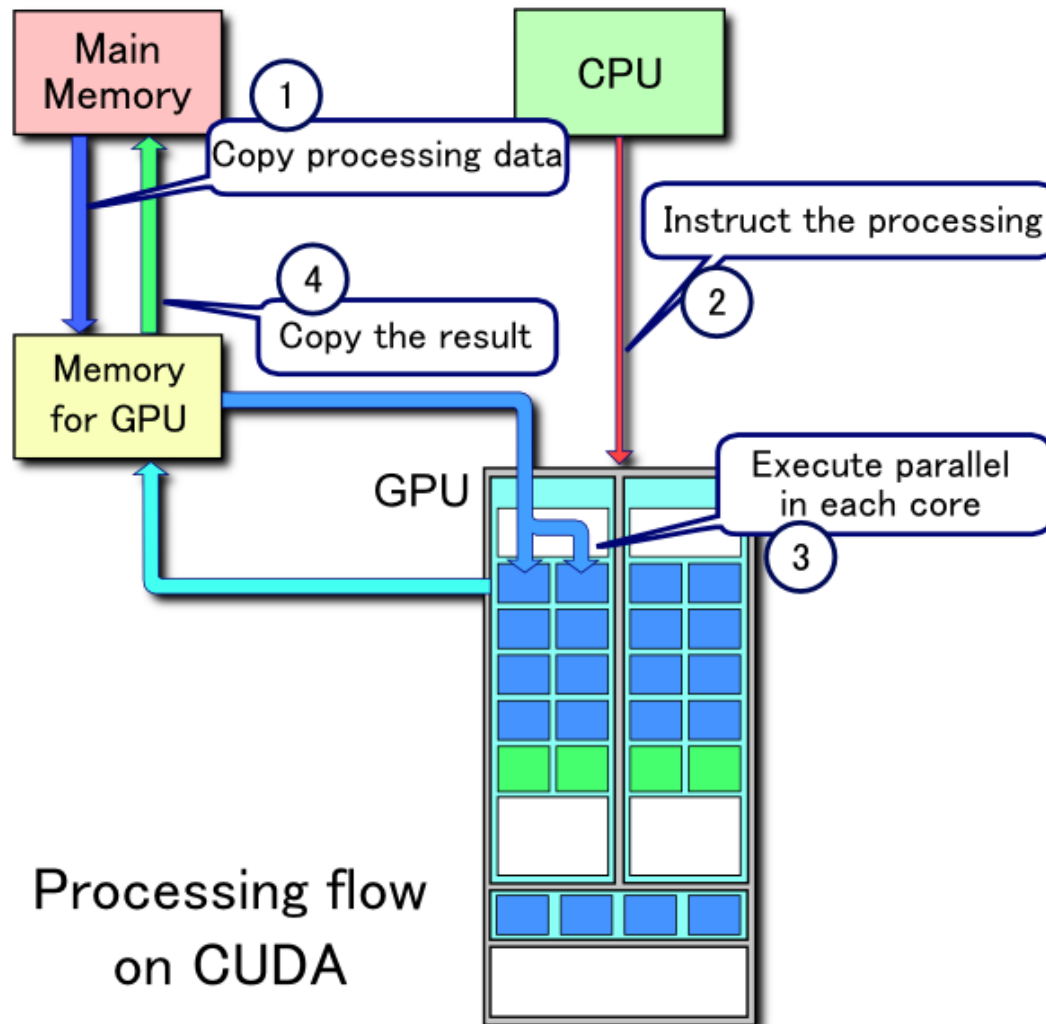
# Cómputo de Alto Rendimiento en GPU's

Compute Unified Device Architecture (CUDA) es una arquitectura de cálculo paralelo de Nvidia.

Las GPU's poseen miles de núcleos que procesan las cargas de trabajo de forma paralela y muy eficiente.

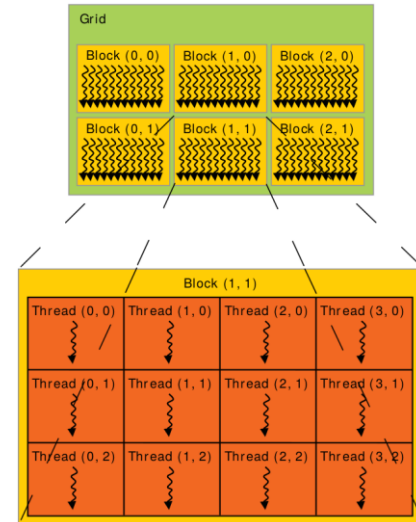
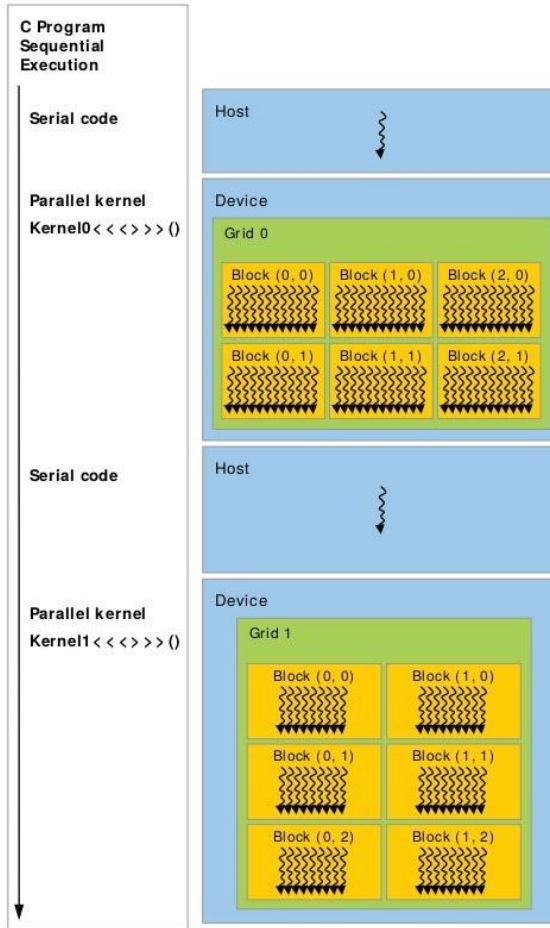
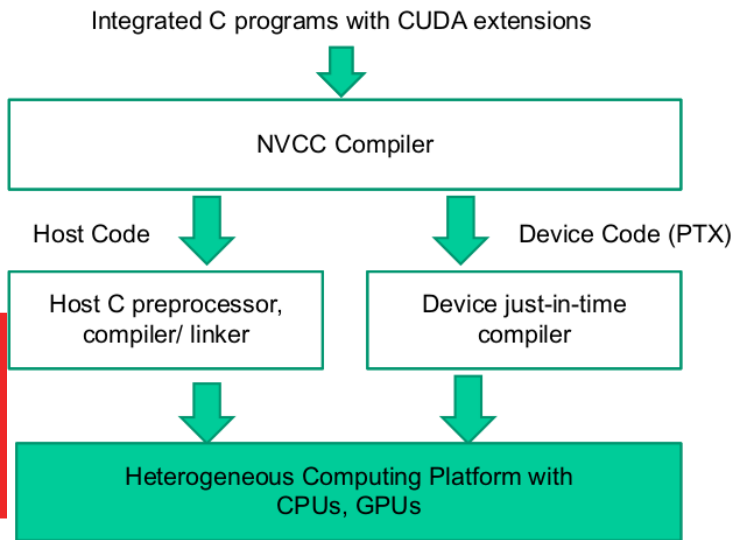


# Cómputo de Alto Rendimiento en GPU's



Processing flow  
on CUDA

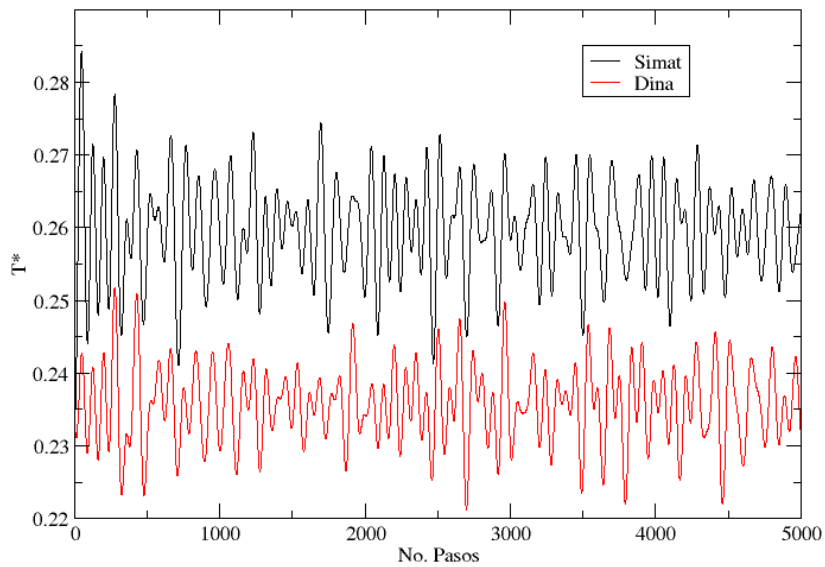
# Proceso de compilación en CUDA



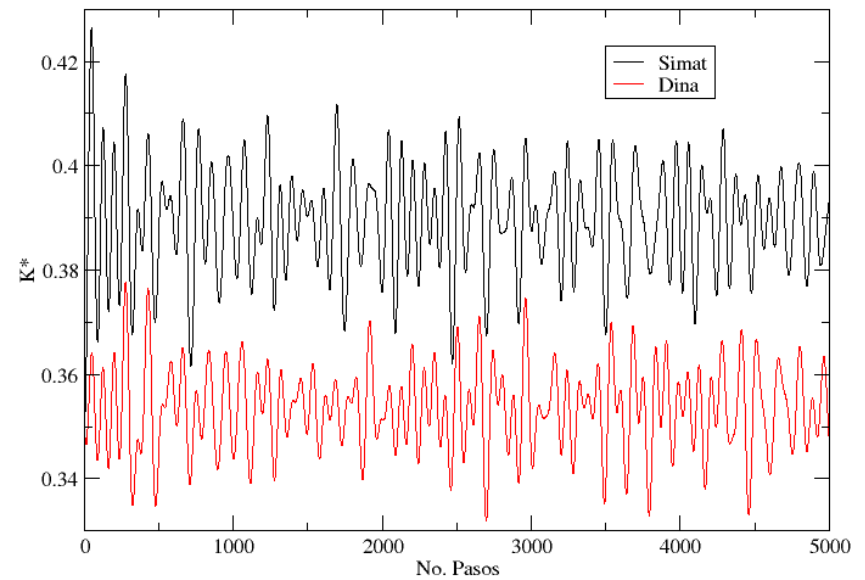
## XII. Resultados preliminares: performance Dina vs Simat

# Preliminares NVE: Dina vs SIMAT

Temperatura

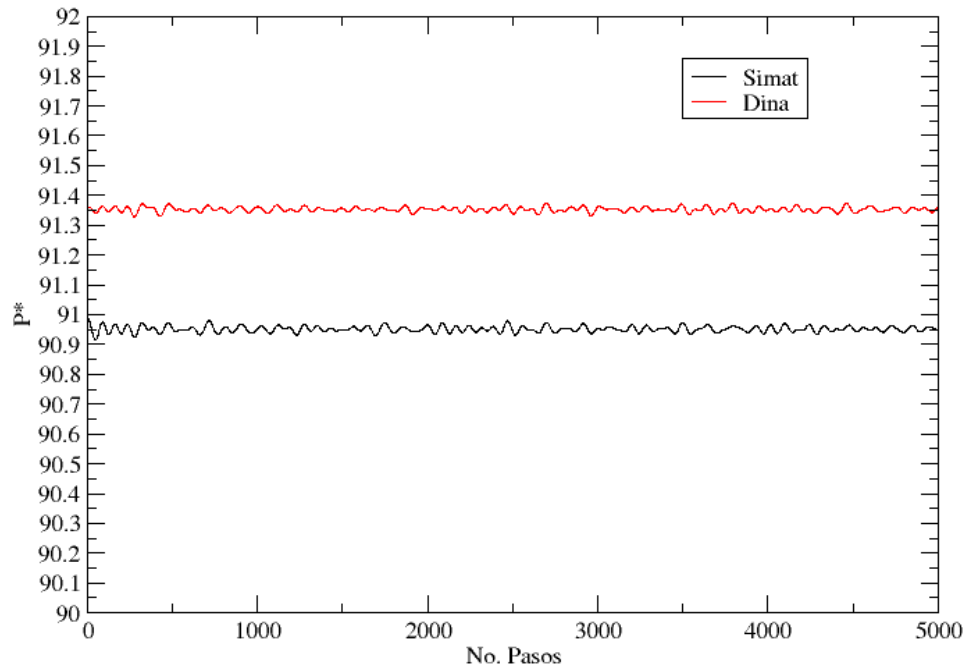


Energia Cinetica



# Preliminares NVE: Dina vs SIMAT

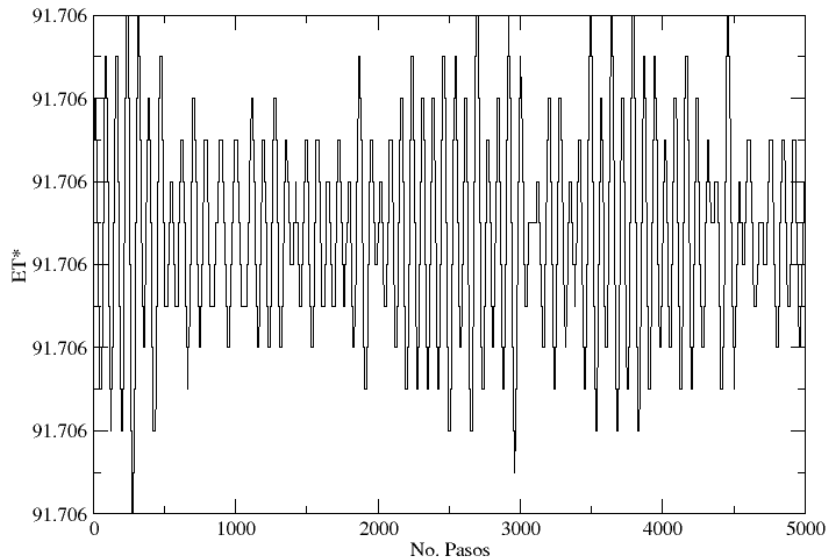
Energia Potencial



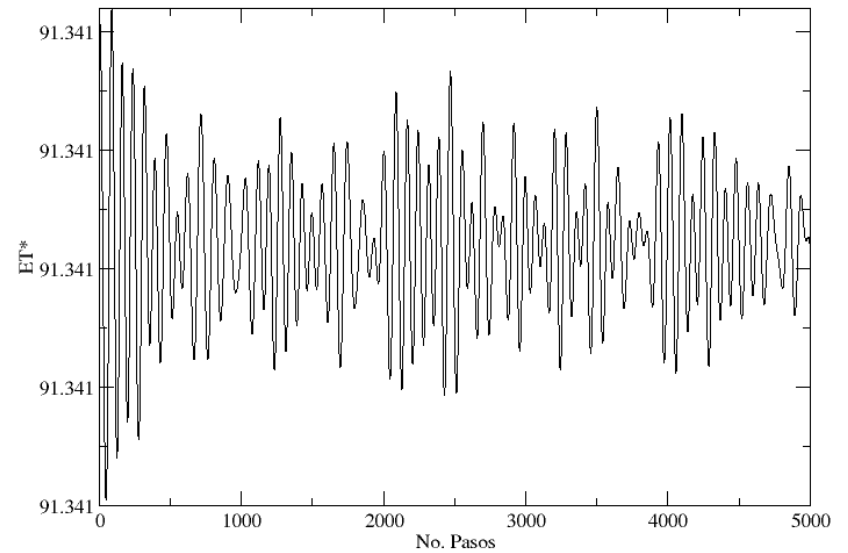


# Preliminares NVE: Dina vs SIMAT

Energia Total

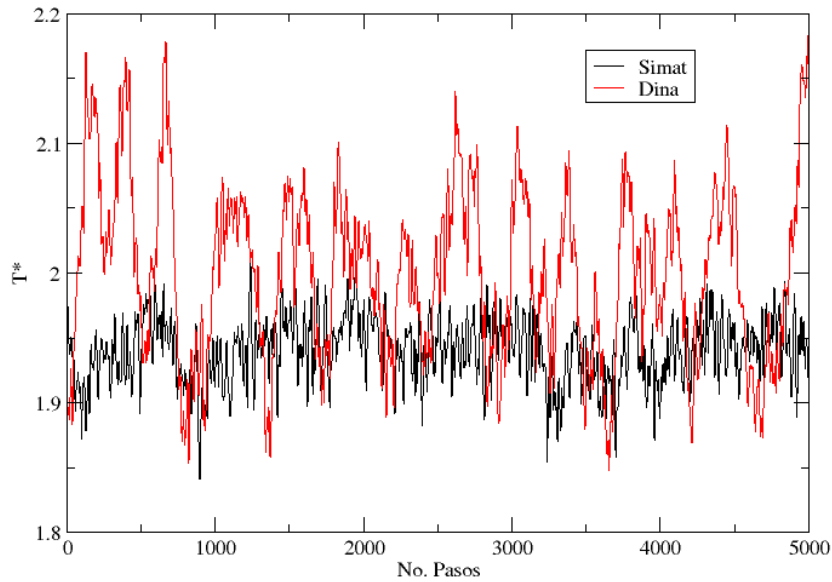


Energia Total

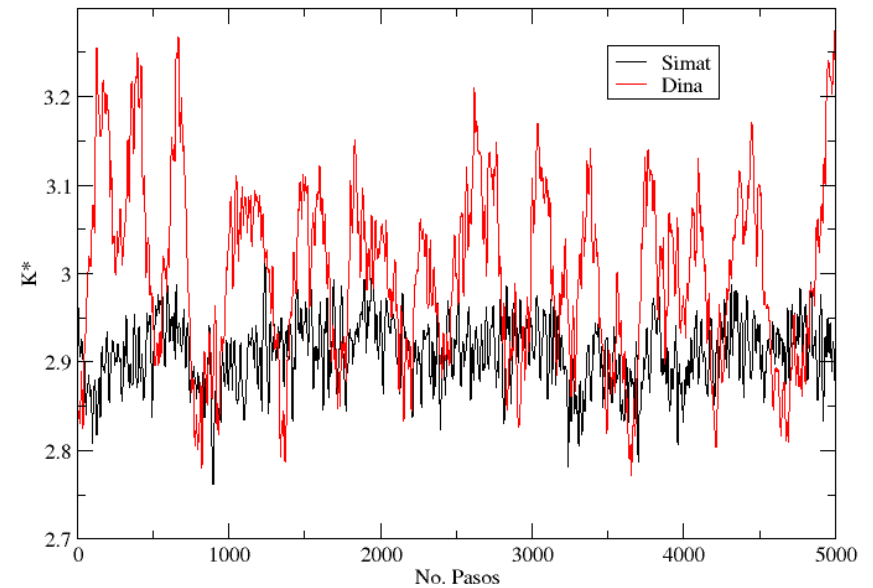


# Preliminares NVT: Dina vs SIMAT

Temperatura

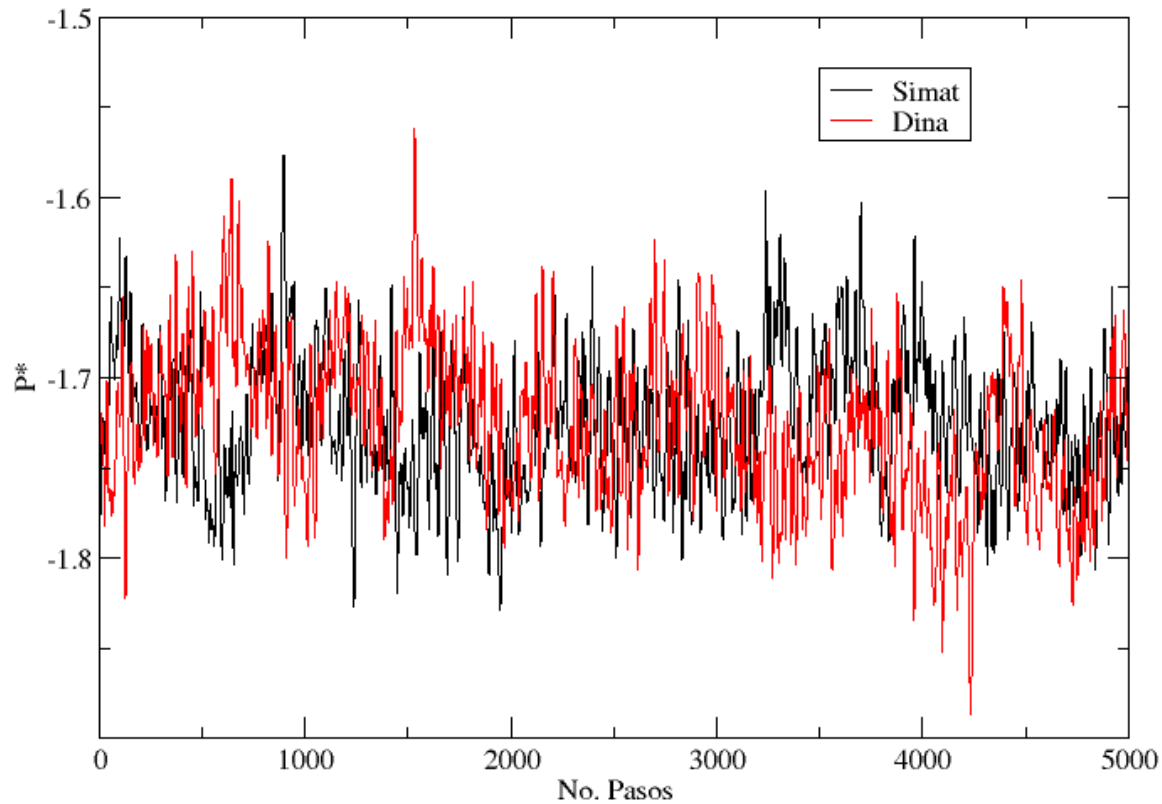


Energia Cinetica



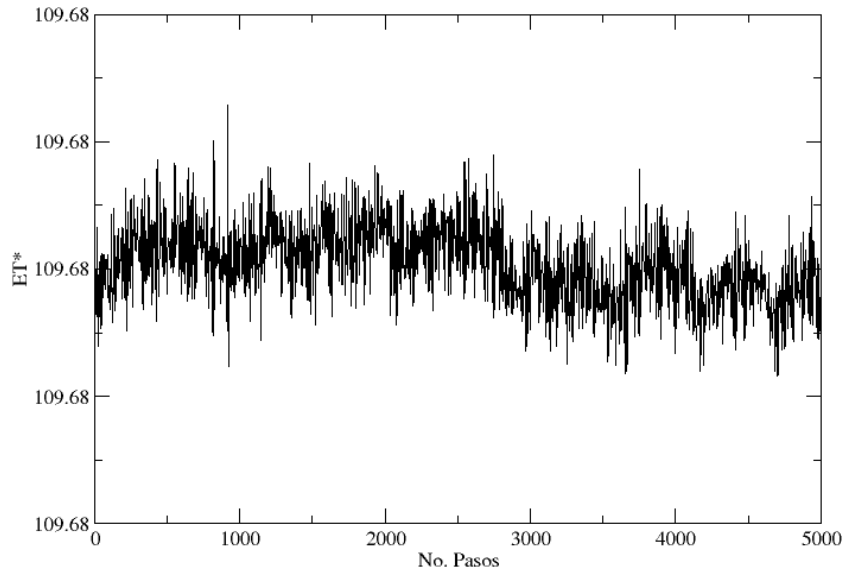
# Preliminares NVT: Dina vs SIMAT

Energia Potencial

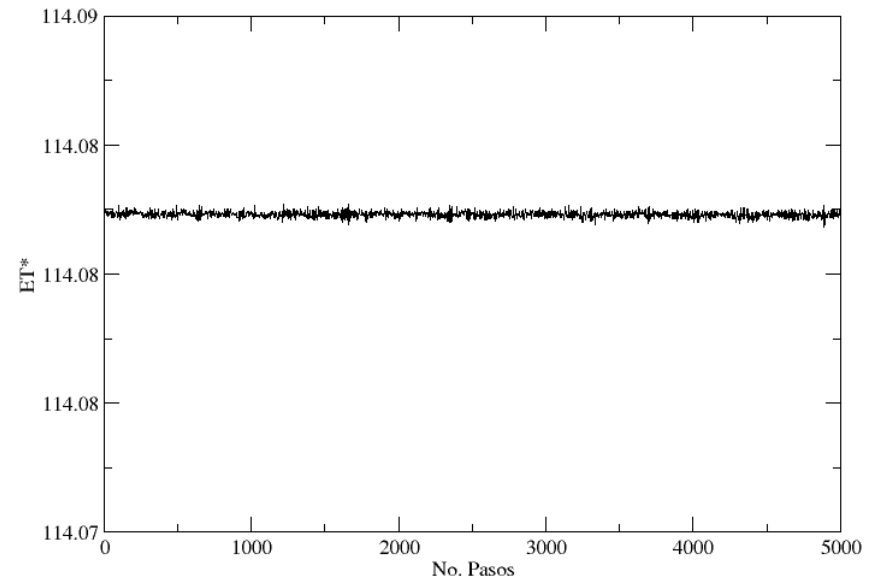


# Preliminares NVT: Dina vs SIMAT

Energia Total



Energia Total

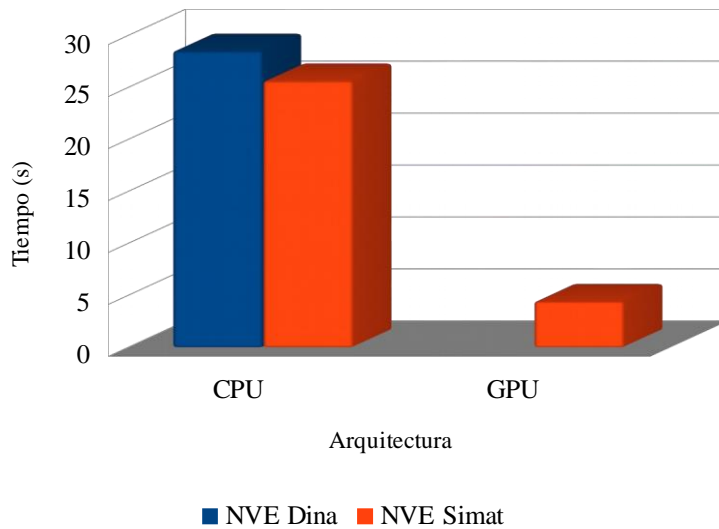


# Tiempos Preliminares:

# Dina vs SIMAT

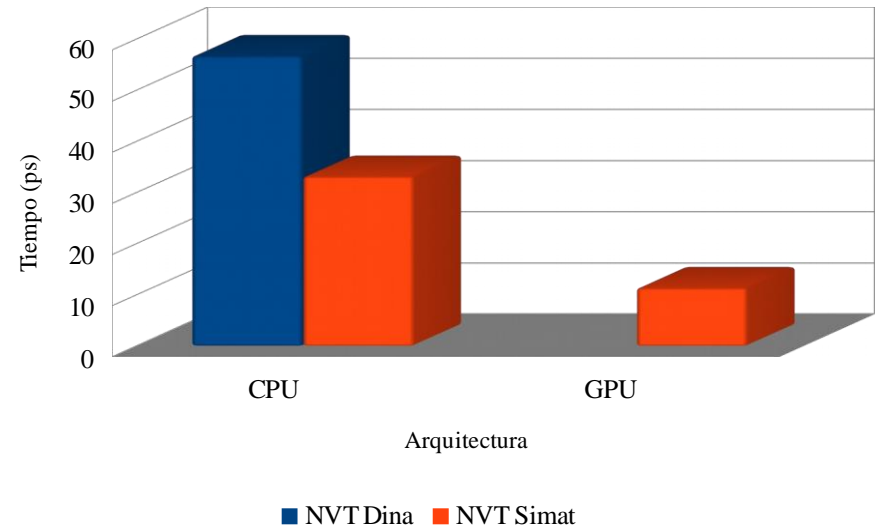
Ensamble NVE

Tiempo de procesamiento



Ensamble NVT

Tiempo de procesamiento



- 500 átomos
- 5000 pasos

# Discusiones preliminares

- El ensamble NVE en SIMAT muestra algunas variaciones en el cálculo de las energías tanto potencial como cinética, aunque estas se encuentran dentro del margen de error estadístico, comparado con el software Dina del grupo de investigación del Dr. Alejandré.
- El ensamble NVT en SIMAT muestra un desempeño apropiado en el cálculo de las energías, comparado con el software Dina del grupo de investigación del Dr. Alejandré.
- Los algoritmos implementados en el software Dina están desarrollados en Fortran, por lo que los resultados de ejecución son lentos. Al migrarlos a la tecnología de GPU's permitió reducir los tiempos de ejecución.
- Realizar una optimización de las funciones del código para reducir los tiempos de procesamiento.

# Actividades complementarias

- € Red de Venómica Computacional y Bioingeniería Molecular a Multiescala
- € Primera Escuela Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Octubre, 2016, Mérida, Yucatán
- € XIV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, Noviembre 2015, Tonalá, Jalisco.
- € 2nd Workshop in High Throughput Molecular Dynamics, Noviembre, 2016, Barcelona, España.

# XIII. Bibliografía

- [1] R. W. Tourdot, R. P. Bradley, N. Ramakrishnan, R. Radhakrishnan, Multiscale Computational Models in Physical Systems *Biology of Intracellular Trafficking, IET Systems Biology*, 2014, 8(5), 198-213
- [2] R. López-Rendón, Simulación con dinámica molecular de soluciones acuosas de etanolaminas en presencia de gases ácidos (Tesis, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, 2007).
- [3] M. Tuckerman, J. Alejandre, R. López-Rendón, A. Jochim, and G. Martyna, *J. Phys. A: Math. Gen.* 39, 5629 (2006).
- [4] *J Chem Theory Comput.* 2013, 9, 3267-3281. Sweet JC, Nowling RJ, Cickovski T, Sweet CR, Pande VS, Izaguirre JA.
- [5] *J Chem Phys.* 2014, 141, doi: 10.1063/1.4895044. Schwantes CR, McGibbon RT, Pande VS.
- [6] *Curr Opin Struct Biol.* 2013, 23, 58-65. doi: 10.1016/j.sbi.2012.11.002. Lane TJ1, Shukla D, Beauchamp KA, Pande VS.
- [7] F. Mendoza-Ambrosio, Interacciones moleculares y propiedades interfaciales de hidrocarburos y agua. (Tesis, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, 2010).
- [8] M.J. Abraham, D. van der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, and the GROMACS development team, GROMACS User Manual versión 5.0.7, [www.gromacs.org](http://www.gromacs.org) (2015)
- [9] John E. Stonea, David J. Hardy, Ivan S. Ufimtsevb, and Klaus Schultenc, GPU-Accelerated Molecular Modeling Coming Of Age, *J. Mol Graph Model.* 2010 September ; 29(2): 116–125. doi:10.1016/j.jmgm.2010.06.010.
- [10] Owens JD, Luebke D, Govindaraju N, Harris M, Krüger J, Lefohn AE, Purcell TJ. A survey of general- purpose computation on graphics hardware. *Comput. Graph. Forum* 2007;26:80–113.
- [11] Owens JD, Houston M, Luebke D, Green S, Stone JE, Phillips JC. GPU computing. *Proc. IEEE* 2008;96:879–899
- [12] Hoover, W. G. Canonical dynamics-equilibrium phase-space distributions. *Phys. Rev. A*, 1985, 31,1695.
- [13] Martyna, G. J. And Tuckerman. M.E. and Klein, M. L. Nosé Hoover Chains: The canonical ensemble via continuous dynamics. *J. Chem. Phys.*, 1992, 97,2625.
- [14] Design Guide, Cuda C programming Guide, Nvidia, march 2015.