



Posgrado en Interdisciplinario en Ciencias Básicas  
Facultad de Ciencias

CURSO ESPECIAL

## Simulación de Fluidos Moleculares

### Datos básicos

Semestre	Horas de teoría	Horas de práctica	Horas trabajo adicional estudiante	Créditos
Ambos	5	0	5	10

<b>Objetivos</b>	<p>Al finalizar el curso el estudiante será capaz de entender y aplicar los fundamentos de diferentes métodos de simulación como lo son la dinámica molecular, Monte Carlo, Monte Carlo cinético, y dinámica Browniana. Se enfatizará la aplicación de las metodologías computacionales a la simulación de sistemas coloidales o fluidos simples.</p>
<b>Temario</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Visualización de fluidos simples usando Jmol.</li> <li>2. Condiciones periódicas.</li> <li>3. Imagen mínima y truncamiento de potenciales de interacción.</li> <li>4. Rudimentos de mecánica estadística: ensambles y propiedades termodinámicas.</li> <li>5. Algoritmos integradores de simulación de dinámica Molecular: Verlet, leap-frog, velocity Verlet.</li> <li>6. El método de Monte Carlo.</li> <li>7. El método de Monte Carlo cinético.</li> <li>8. El método de dinámica Browniana.</li> <li>9. Simulación de fluidos moleculares y biomoléculas usando GPUs.</li> </ol>



Posgrado en Interdisciplinario en Ciencias Básicas  
Facultad de Ciencias

<b>Métodos y prácticas</b>	Métodos	Clases presenciales de maestro y estudiantes. Exposición del maestro con apoyo de recursos computacionales y audiovisuales. Lectura de libros, artículos, y desarrollo de proyectos por parte de los estudiantes. Desarrollo de programas en Fortran, C y/o Python. Se asume experiencia previa en programación en al menos uno de los lenguajes de programación anteriores.
	Prácticas	Implementación de los algoritmos vistos en clase en Fortran, C, y/o Python.
<b>Mecanismos y procedimientos de evaluación</b>	Exámenes	El curso será evaluado mediante 10% de exposiciones, 25% de tareas, 40% exámenes y 25% correspondiente al desarrollo de proyectos que involucren la implementación computacional de los algoritmos.
<b>Bibliografía básica de referencia</b>		<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Computer Simulation of Liquids; M. P. Allen y D. J. Tildesley; Clarendon Press, 1989.</li> <li>2. Understanding Molecular Simulation; D. Frenkel y B. Smit; Academic Press, 2001.</li> <li>3. Statistical Mechanics; D. A. McQuarrie; University Science Books, 2000.</li> <li>4. The Art of Molecular Dynamics Simulations; D. C. R. Rapaport; Cambridge University Press, 1996.</li> <li>5. Molecular Modelling: Principles and Applications; A. R. Leach; Prentice Hall College Division, 2001.</li> </ol>
<b>Elaboración y Fecha</b>		Guillermo Iván Guerrero García, 10 de marzo del 2017.