



A) NOMBRE DE CADA CURSO O ACTIVIDAD CURRICULAR:

BIOFÍSICA COMPUTACIONAL (OPTATIVA)

B) DATOS BÁSICOS DEL CURSO

Semestre	Horas de teoría por semana	Horas de práctica por semana	Horas trabajo adicional estudiante	Créditos
7 u 8	5	0	5	10

C) OBJETIVOS DEL CURSO

Objetivos generales	Al finalizar el curso el estudiante será capaz de entender los fundamentos de las técnicas de simulación molecular y aplicar dichas técnicas en el estudio de sistemas biológicos. En particular, conocerá los programas VMD y NAMD para simular biomoléculas, los cuales son ampliamente utilizados en biofísica.	
Objetivos específicos	Unidades	Objetivo específico
	1. Solución de ecuaciones diferenciales y dinámica de partículas.	En esta unidad se repasarán los métodos numéricos de solución de ecuaciones diferenciales ordinarias, así como la dinámica de partículas en una, dos y tres dimensiones.
	2. Fundamentos computacionales.	En esta unidad se repasarán los elementos básicos del sistema operativo Linux y de la instalación de <i>software</i> libre en ese entorno.
	3. Introducción a la Mecánica Estadística	En esta unidad se estudiarán los principios básicos de la mecánica estadística clásica.
	4. Introducción a la interfaz gráfica VMD.	En esta unidad se instalará y conocerá la interfaz gráfica VMD.
	5. Introducción a NAMD: Módulo de simulación molecular.	En esta unidad se instalará y conocerá el <i>software</i> de simulación molecular NAMD.
	6. Simulación de biomoléculas.	En esta unidad se emplearán los programas VMD y NAMD para simular moléculas relevantes en la Biofísica.

D) CONTENIDOS Y MÉTODOS POR UNIDADES Y TEMAS

5h/semana, 16 semanas: 80 h/semestre

Unidad 1 Solución de ecuaciones diferenciales y dinámica de partículas.	15 h
Tema 1.1. Solución de ecuaciones diferenciales y dinámica de partículas.	15 h
	1.1.1 Método de Taylor. 1.1.2 Métodos de Runge-Kutta y sistemas de ecuaciones diferenciales. 1.1.3 Algoritmo de Verlet. 1.1.4 Elementos de simulación. 1.1.5 Ecuaciones dinámicas para el movimiento de una partícula. 1.1.6 Solución analítica de las ecuaciones dinámicas de una partícula. 1.1.7 Solución numérica de las ecuaciones dinámicas de una partícula.
Lecturas y otros	Otros textos de divulgación y artículos sobre aplicaciones.



recursos	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado científico de cada uno de los conceptos nuevos.
Actividades de aprendizaje	Tareas y programas de computadora previos y posteriores a cada tema. Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales y programas de computadora. Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales y programas de computadora.

Unidad 2. Fundamentos computacionales.		5 h
Tema 2.1. Fundamentos computacionales.		5 h
	2.1.1 El sistema operativo Linux. 2.1.2 Órdenes básicas y <i>scripts</i> en Linux. 2.1.3 Instalación de <i>software</i> libre en Linux.	
Lecturas y otros recursos	Otros textos de divulgación y artículos sobre aplicaciones.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado científico de cada uno de los conceptos nuevos.	
Actividades de aprendizaje	Tareas y programas de computadora previos y posteriores a cada tema. Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales y programas de computadora. Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales y programas de computadora.	

Unidad 3. Introducción a la Mecánica Estadística.		5 h
Tema 3.1. Introducción a la Mecánica Estadística.		5 h
	3.1.1 Sistemas de muchas partículas en equilibrio. 3.1.2 Postulados básicos de la mecánica estadística. 3.1.3 Sistemas aislados y sistemas en contacto térmico. 3.1.4 La función de partición. 3.1.5 El gas ideal clásico y sus propiedades. 3.1.6 La distribución de Maxwell y sus implicaciones. 3.1.7 Equipartición de la energía. 3.1.8 Fluctuaciones: conexión entre la mecánica estadística y la termodinámica. 3.1.9 Propiedades dinámicas.	
Lecturas y otros recursos	Otros textos de divulgación y artículos sobre aplicaciones.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado científico de cada uno de los conceptos nuevos.	
Actividades de aprendizaje	Tareas y programas de computadora previos y posteriores a cada tema. Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales y programas de computadora. Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales y programas de computadora.	

Unidad 4. Introducción a la interfaz gráfica VMD.		9 h
Tema 4.1. Introducción a la interfaz gráfica VMD.		9 h
	4.1.1 Instalación de VMD. 4.1.2 Archivos PDB y PSF. 4.1.3 Visualización y manipulación de moléculas. 4.1.4 Módulos de solvatación y adición de sal. 4.1.5 Módulo de órdenes TCL. 4.1.6 Módulo de análisis.	



	4.1.7 <i>Scripts</i> básicos. 4.1.8 VMD en modo texto y sus opciones.
Lecturas y otros recursos	Otros textos de divulgación y artículos sobre aplicaciones.
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado científico de cada uno de los conceptos nuevos.
Actividades de aprendizaje	Tareas y programas de computadora previos y posteriores a cada tema. Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales y programas de computadora. Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales y programas de computadora.

Unidad 5. Introducción a NAMD: Módulo de simulación molecular.		16 h
Tema 5.1. Introducción a NAMD: Módulo de simulación molecular.		16 h
	5.1.1 Instalación de NAMD. 5.1.2 Modelos de potenciales para moléculas. 5.1.3 Archivos de topología y de parámetros. 5.1.4 Archivos de entrada: parámetros de simulación. 5.1.5 Preparación de los sistemas: iniciación, minimización y simulación. 5.1.6 El compilador y sus opciones.	
Lecturas y otros recursos	Otros textos de divulgación y artículos sobre aplicaciones.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado científico de cada uno de los conceptos nuevos.	
Actividades de aprendizaje	Tareas y programas de computadora previos y posteriores a cada tema. Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales y programas de computadora. Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales y programas de computadora.	

Unidad 6. Simulación de biomoléculas.		30 h
Tema 6.1. Simulación de biomoléculas.		30 h
	6.1.1 Simulación de moléculas de agua. 6.1.2 Simulación de proteínas. 6.1.3 Simulación de ácidos nucleicos. 6.1.4 Simulación de membranas. 6.1.5 Determinación de energías libres. 6.1.6 Estiramiento de biomoléculas.	
Lecturas y otros recursos	Otros textos de divulgación y artículos sobre aplicaciones.	
Métodos de enseñanza	Exposición detallada frente al pizarrón de cada uno de los temas haciendo énfasis del significado científico de cada uno de los conceptos nuevos.	
Actividades de aprendizaje	Tareas y programas de computadora previos y posteriores a cada tema. Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales y programas de computadora. Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales y programas de computadora.	

E) ESTRATEGIAS DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE

- Exposición del maestro con apoyo de recursos computacionales y audiovisuales



- Tareas y programas de computadora previos y posteriores a cada tema
- Evaluación de conceptos formales en exámenes parciales y programas de computadora
- Evaluación de la capacidad de síntesis e integración del conocimiento mediante exámenes parciales y programas de computadora

F) EVALUACIÓN Y ACREDITACIÓN

Elaboración y/o presentación	Periodicidad	Abarca	Ponderación
Primer examen parcial	1	Unidades 1,2	20%
Segundo examen parcial	1	Unidades 3	20%
Tercer examen parcial	1	Unidades 4,5	20%
Cuarto examen parcial	1	Unidades 6	40%
TOTAL			100%

G) BIBLIOGRAFÍA Y RECURSOS INFORMÁTICOS

Textos básicos

- 1.- Richard L. Burden, J. Douglas Faires, Análisis Numérico, 7a edición, Thomson, México, 2002.
- 2.- Ellen Siever, Figgins Stephen, Robert Amor, Arnold Robbins, Linux in a nutshell, 6th edition, O'Reilly Media, EUA, 2009.
- 3.- Richard P. Feynman, Robert B. Leighton, Matthew Sands, Física: Mecánica, radiación y calor, Volumen I, The Feynman Lectures on Physics, 1a edición, Fondo Educativo Interamericano, México, 1971.
- 4.- Frederick Reif, Física Estadística, Berkeley Physics Course, Vol. 5, Editorial Reverte.
- 5.- Manuales y tutoriales de los programas VMD/NAMD (<http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/>).