

## Simulaciones avanzadas (AFE-19)

---

Número de créditos: 10

Horas a la semana: 10

Teoría: 6

Practica: 4

Requisitos: AFB-1, AFB-2, AFB-3, AFB-4, AFB-5

Clave: **AFE-19**

Asignatura: Especifica

---

**Descripción de la asignatura:** El material de este curso está diseñado para introducir la técnica de simulación DPD (Dissipative Particle Dynamics). Se le pedirá al estudiante un conocimiento previo de mecánica estadística y de métodos numéricos para un mejor aprovechamiento de dicho material. El material se divide en tres partes. La primera es la parte introductoria y consta de un repaso de las bases teóricas de los métodos computacionales. La segunda, se enfoca en los fundamentos de dichos métodos y, finalmente, la tercera parte esta dedica al método DPD aplicado a la biofísica y materia blanda. Este curso dotará al estudiante de los conocimientos necesarios que podrá aplicar en su investigación ya que tendrá la habilidad de simular cualquier sistema biológico. El material estará acompañado de un Software en línea que, aunado a que los ejemplos que se verán son los más representativos en la bioingeniería, facilitara la comprensión y el entendimiento de las técnicas de simulaciones computacionales.

### Contenidos:

- Base Teórica de los Métodos Computacionales.
- Fundamentos de los Métodos Computacionales.
- Aplicaciones del Método DPD (Dissipative Particle Dynamics).

### Índice Temático:

1. Base Teórica de los Métodos Computacionales. Matrices y Tensores.  
Fundamentos de Mecánica Continua. Fenómenos en un Medio Deformable y Poroso.
2. Fundamentos de los Métodos Computacionales. Formulación de Elementos Finitos. Análisis de la dinámica de Elementos finitos. Introducción al análisis de elementos finitos No-lineales. Modelado de Elementos Finito de Problema de Campo. Métodos de Partículas Discretas para modelas Sólidos y Fluidos.
3. Aplicaciones del Método DPD (Dissipative Particle Dynamics). Introducción al Método DPD. Simulaciones de la Dinámica de Sistemas Mesoscópicos. La Mecánica Estadística del modelo del Grano-Grueso. Tópicos Avanzados: Modelo de Colisión Mesoscópica de Multipartícula para el Flujo de un Fluido y Dinámica Molecular. Dinámica Molecular de Sistemas Complejos. Modelos Híbridos.

#### **Bibliografía Básica:**

- Computer Modeling in Bioengineering, Milos Kojic , John Wiley & Sons. UK  
2008.
- Novel Methods in Soft Matter Simulations (Lecture Notes in Physics). Mikko  
Karttunen, Springer. Germany 2004.

#### **Bibliografía Complementaria:**

- Advanced Computer Simulation Approaches for Soft Matter Sciences III,¿  
Springer,2009.
- Computer Simulations of Liquid Crystals and Polymers, NATO  
Science  
Series, 2003.