



PLAN DE ESTUDIOS (PE): Licenciatura en Física Aplicada

ÁREA: OPTATIVAS

ASIGNATURA: Simulación Computacional de Biomoléculas

CÓDIGO:

CRÉDITOS: 6

FECHA: junio de 2017



1. DATOS GENERALES

Nivel Educativo:	Licenciatura
Nombre del Plan de Estudios:	Licenciatura en Física Aplicada
Modalidad Académica:	<i>Presencial</i>
Nombre de la Asignatura:	<i>Simulación Computacional de Biomoléculas</i>
Ubicación:	<i>Nivel Formativo</i>
Correlación:	
Asignaturas Precedentes:	<i>Matemáticas Básicas, Física Computacional</i>
Asignaturas Consecuentes:	<i>S/C</i>

2. CARGA HORARIA DEL ESTUDIANTE *(Ver matriz 1)*

Concepto	Horas por semana		Total de horas por periodo	Total de créditos por periodo
	Teoría	Práctica		
Horas teoría y práctica <i>Actividades bajo la conducción del docente como clases teóricas, prácticas de laboratorio, talleres, cursos por internet, seminarios, etc.</i> (16 horas = 1 crédito)	3	2	90	6



3. REVISIONES Y ACTUALIZACIONES

Autores:	<i>Alexandra Deriabina, Eduardo Gonzalez, Valeri Poltev</i>
Fecha de diseño:	<i>Junio de 2017</i>
Fecha de la última actualización:	
Fecha de aprobación por parte de la academia de área, departamento u otro.	<i>7 de julio de 2017</i>
Revisores:	
Sinopsis de la revisión y/o actualización:	<i>Se ha actualizado ajustando los nuevos periodos de semestres de 18 semanas</i>

4. PERFIL DESEABLE DEL PROFESOR (A) PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA:

Disciplina profesional:	<i>Física</i>
Nivel académico:	<i>Doctorado</i>
Experiencia docente:	<i>1 año</i>
Experiencia profesional:	<i>1 año</i>

5. PROPÓSITO: Proporcionar los conceptos, conocimientos y para el desarrollo de habilidades de programación para la resolución de problemas en Biofísica.

6. COMPETENCIAS PROFESIONALES:

1. Hacer uso apropiado de la herramienta computacional para la solución de problemas en Biofísica.
2. Aplicar lenguajes de programación para la obtención de resultados, así como en la presentación, escritura y análisis de los mismos.

7. CONTENIDOS TEMÁTICOS



Unidad de Aprendizaje	Contenido Temático	Referencias
<p>1. Representación gráfica y manipulación de los sistemas moleculares</p>	<p>1.1. Principales formatos de coordenadas de las moléculas biológicas.</p> <p>1.2. Elaboración de programa para la conversión de los formatos.</p> <p>1.3. Bancos de datos de estructuras experimentales de proteínas y ácidos nucleicos.</p> <p>1.4. Algoritmos para identificación y evaluación de los parámetros estructurales (longitudes de enlace, ángulos de valencia, ángulos de torsión).</p> <p>1.5. Elaboración del programa para cálculo de los parámetros estructurales de nucleótido.</p>	<p>Handbook of Computational Chemistry Jerzy Leszczynski Springer. 2012. Capítulo 17.</p> <p>H.M. Berman, et al.,(2000) The Protein Data Bank Nucleic Acids Research, 28: 235-242.</p>
<p>2. Mecánica Molecular</p>	<p>2.1. Modelo de oscilador armónico aplicado para moléculas. Estiramiento de enlaces y cambios en el ángulo de valencia.</p> <p>2.2. Potenciales periódicos para los ángulos de torsión.</p> <p>2.3. Diferentes propuestas para la descripción de Interacciones de van der Waals.</p> <p>2.4. Principales Campos de Fuerza de Mecánica Molecular.</p> <p>2.5. Asignación de los tipos de átomos en el ejemplo de CF AMBER.</p> <p>2.6. Identificación de los pares de átomos para cada término de CF.</p> <p>2.7. Elaboración de programa para cálculo y comparación de las contribuciones de los términos enlazantes y no enlazantes en la energía total.</p>	<p>Handbook of Computational Chemistry Jerzy Leszczynski Springer. 2012. Capítulo 9.</p> <p>Ramachandran K.I. (2008). Computational Chemistry and Molecular Modeling. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg</p> <p>D.A. Case, et al (2016), AMBER 2016, University of California, San Francisco.</p> <p>Salomon-Ferrer, R., Case, D. A., & Walker, R. C. (2013). An overview of the Amber biomolecular simulation package: Amber biomolecular simulation package. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 3(2), 198–210.</p>



Unidad de Aprendizaje	Contenido Temático	Referencias
<p>3. Optimización de las estructuras moleculares.</p>	<p>3.1. Métodos de gradiente 3.1.1 Método Steepest Descent. 3.1.2 Método de Direcciones conjugadas 3.1.3 Método de gradiente conjugado. 3.2. Las superficies de energía potencial. 3.2.1 Criterios de convergencia 3.2.2 Características de los puntos estacionarios. 3.3. Elaboración del algoritmo para la búsqueda de un mínimo local basándose en uno de los métodos de gradiente.</p>	<p>Ramachandran K.I. (2008). Computational Chemistry and Molecular Modeling. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg</p>

Nota: Las referencias deben ser amplias y actuales (no mayor a cinco años)

8. ESTRATEGIAS, TÉCNICAS Y RECURSOS DIDÁCTICOS *(Enunciada de manera general para aplicarse durante todo el curso)*



Estrategias y técnicas didácticas	Recursos didácticos
<ul style="list-style-type: none"> • <u>Lluvia o tormenta de ideas</u> • <u>Agenda de cuatro pasos o demostración</u> • <u>Philips 66</u> • <u>Corrillos</u> • <u>Dramatización o Rolle Playin</u> • <u>Círculo de expertos</u> • <u>Técnica de debate</u> • <u>Método de casos</u> • <u>Estado del arte</u> • <u>Redes de palabras o mapas mentales</u> • <u>Grupos de discusión</u> • <u>Técnica de la Rejilla</u> • <u>Técnica de los Representantes</u> • <u>Técnica de concordar-discordar</u> • <u>Técnica de Jerarquización</u> • <u>Solución de Problemas</u> • <u>Técnica de los cuadrados de Bavelas</u> • <u>Técnica de las Islas</u> • <u>Aprendizaje Basado en Problemas</u> • <u>Aprendizaje Basado en Proyectos</u> • <u>Estudio de casos</u> 	<ul style="list-style-type: none"> • <u>Impresos (textos): libros, fotocopias, periódicos, documentos...</u> • <u>Materiales manipulativos:</u> • <u>Juegos:</u> • <u>Materiales de laboratorio</u> • <u>Materiales audiovisuales:</u> • <u>Imágenes fijas proyectables (fotos)-diapositivas, fotografías</u> • <u>Materiales sonoros (audio): casetes, discos, programas de radio...</u> • <u>Materiales audiovisuales (vídeo): montajes audiovisuales, películas, vídeos, programas de televisión...</u> • <u>Programas informáticos (CD u on-line) educativos: videojuegos, presentaciones multimedia, enciclopedias, animaciones y simulaciones interactivas</u> • <u>Páginas Web, Weblog, tours virtuales, webquest, correo electrónico, chats, foros, unidades didácticas y cursos on-line</u>

9. EJES TRANSVERSALES

Describe cómo se fomenta(n) el eje o los ejes transversales en la asignatura

Eje (s) transversales	Contribución con la asignatura
Formación Humana y Social	
Desarrollo de Habilidades en el uso de las Tecnologías de la Información y la Comunicación	
Desarrollo de Habilidades del Pensamiento Complejo	
Lengua Extranjera	
Innovación y Talento Universitario	
Educación para la Investigación	



10. CRITERIOS DE EVALUACIÓN (de los siguientes criterios propuestos elegir o agregar los que considere pertinentes utilizar para evaluar la asignatura y eliminar aquellos que no utilice, el total será el 100%)

Criteria	Percentage
▪ <u>Exámenes</u>	
▪ <u>Participación en clase</u>	20%
▪ <u>Tareas</u>	20%
▪ <u>Exposiciones</u>	
▪ <u>Simulaciones</u>	
▪ <u>Trabajos de investigación y/o de intervención</u>	
▪ <u>Prácticas de laboratorio</u>	
▪ <u>Visitas guiadas</u>	
▪ <u>Reporte de actividades académicas y culturales</u>	
▪ <u>Mapas conceptuales</u>	
▪ <u>Portafolio</u>	40%
▪ <u>Proyecto final</u>	20%
▪ <u>Rúbrica</u>	
▪ <u>Lista de Cotejo</u>	
▪ <u>Guías de Observación</u>	
▪ <u>Bitácora</u>	
▪ <u>Diarios</u>	
Total	100%

11. REQUISITOS DE ACREDITACIÓN

Estar inscrito como alumno en la Unidad Académica en la BUAP
Asistir como mínimo al 80% de las sesiones para tener derecho al examen por evaluación continua y/o presentar el examen final en ordinario o extraordinario
Asistir como mínimo al 5 0%delas sesiones para tener derecho al examen extraordinario
Cumplir con las actividades académicas y cargas de estudio asignadas que señale el PE

Notas:

- a) La entrega del programa de asignatura, con sus respectivas actas de aprobación, deberá realizarse en formato electrónico, vía oficio emitido por la Dirección o Secretaría Académica, a la Dirección General de Educación Superior.
- b) La planeación didáctica deberá ser entregada a la coordinación de la licenciatura en los tiempos y formas acordados por la Unidad Académica.



Unidad 0. Diseño de programas, pseudocódigo y diagramas.

- a) Concepto de Algoritmo
- b) Análisis del Problema
- c) Diseño de Algoritmos
- d) Verificación de Algoritmos
- e) Herramientas para la representación de Algoritmos
- f) Diagramas de flujo
- g) Pseudocódigo .

Unidad I. Métodos numéricos para ecuaciones algebraicas.

- Cálculo de los ceros de una función.
- Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas (no lineales).

Unidad II. Aproximacion a una función

- i) Interpolación
- ii) Aproximacion por minimos cuadrados
- iii) Aproximacion por Spline

Aplicaciones a la fisica:Experimento de Millikan

Unidad III. Calculo Numerico

- i) Diferenciación Numérica
- ii) integración Numérica

Aplicaciones en la deflectometria óptica, en la física del estado solido

Unidad IV. Ecuaciones diferenciales ordinarias

- i) Problema de valores iniciales
- ii) Metodo de Euler y de Picard,



- iii) Metodo corrector-predictor
- iv) Métodos de Runge-Kutta.

Aplicaciones: Dinamica caotica del péndulo doble o triple

Unidad V. Simulación computacional

1. Números aleatorios. Métodos de Monte Carlo y aplicaciones:
2. – Generadores de números aleatorios. Método de las congruencias lineales. –
3. – Transformaciones de variables aleatorias.
4. – Cálculo de integrales definidas. Estimación del error.
– Otras aplicaciones : Simulacion de Camino aleatorio, decaimiento radiactivo