

Desarrollo de algoritmos de dinámica molecular, campos de fuerza y de programas paralelos de dinámica molecular en CPU/GPU.

Hora	Lunes 25	Martes 26	Miércoles 27	Jueves 28	Viernes 29
9:00 a 11:00	Potenciales y fuerzas de interacción M. en C. Valeri García Melgarejo, DQ – CBI – UAM – I	DFT. Optimización de geometría Dr. Javier Carmona, Catedrático CONACyT	Parámetros de Lennard-Jones: tensión superficial y densidad M. en C. Valeria García y Dr. Edgar Núñez	Desarrollo de programas paralelos mediante MPI M. en C. Adriana Pérez y Dr. José Luis Quiroz, DIE – CBI – UAM – I	Libre
11:00 a 11:30	Colación y bebidas	Colación y bebidas	Colación y bebidas	Colación y bebidas	Colación y bebidas
11:30 a 13:30	Ecuaciones de movimiento. Algoritmos NVE y NVT Dr. José Alejandro, DQ – CBI – UAM – I	Densidades electrónicas con CD-DFT (constraint-dipole-DFT). Distribuciones de carga con ADCH (atomic dipole corrected-Hirshfeld) Dr. Javier Carmona, Catedrático CONACyT	Campos de fuerza para líquidos iónicos a temperatura ambiente Dr. Manuel Martínez, U. de Gto. Campus León	Desarrollo de programas paralelos mediante CUDA M. en C. Adriana Pérez y Dr. José Luis Quiroz, DIE – CBI – UAM – I	Emprendedurismo L. en N. Blanca Saint Martin Posada Emprendedora independiente
13:30 a 15:00	Comida	Comida	Comida	Comida	Madrigal (pámpano)
15:00 a 17:00	Algoritmos NPT Dr. José Alejandro, DQ – CBI – UAM – I	Distribuciones de carga y constante dieléctrica Dr. Edgar Núñez, Catedrático CONACyT	Desarrollo de programas paralelos mediante OpenMP M. en C. Adriana Pérez y Dr. José Luis Quiroz, DIE – CBI – UAM – I	Programación híbrida. Desarrollo del programa paralelo DM_UAMI M. en C. Adriana Pérez y Dr. José Luis Quiroz, DIE – CBI – UAM – I	
17:00 a 19:00					