



















ESCUELA NACIONAL DE SUPERCÓMPUTO, APLICACIONES PARA LA REMOCIÓN DE CONTAMINANTES EN EL AGUA

El Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A.C. (IPICYT), a través del Grupo de Ciencia e Ingeniería Computacionales (GCIC) del Centro Nacional de Supercómputo (CNS), y la División de Materiales Avanzados (DMAv) invitan a las y los estudiantes de las carreras de licenciatura e ingeniería que tengan interés en familiarizarse con los principios del modelado computacional de materiales, a participar en la Escuela Nacional de Supercómputo de Aplicaciones para la Remoción de Contaminantes en el Aqua.

Contacto: ens-contamiagua-gcic@ipicyt.edu.mx

A quien va dirigido:

- Estudiantes de carreras STEM, que se encuentren cursando los últimos semestres y que tengan promedio mayor o igual 8.5.
- Estudiantes de posgrado STEM
- Profesionales en las áreas STEM

Objetivo de la escuela:

Presentar un panorama general e introductorio del potencial de las simulaciones computacionales en tres escalas de espacio y tiempo diferentes, mediante la impartición de una escuela de verano. La escuela está integrada por 3 talleres y seminarios donde se aborda el problema de la remoción de contaminantes del agua utilizando la teoría del funcional de la densidad, la dinámica molecular clásica y el método de elementos finitos. Siendo uno de los objetivos primordiales conducir a los estudiantes en el uso de programas de simulación computacional utilizados en la investigación para tratar el problema de contaminantes del agua desde estas tres aproximaciones que describen distintas escalas de espacio y tiempo.

Modalidad:

Presencial

Ubicación:

Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

Duración:

Del 23 al 27 de junio 2025

Deberás traer:

Laptop

Fecha límite para inscribirse:

10 de mayo 2025





TEMARIO DE CURSOS

Cálculos de primeros principios

- 1. Introducción a la simulación computacional de materiales mediante cálculos de primeros principios basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT)
- 2. Revisión de los fundamentos de la DFT
- 3. Cálculos de minimización de energía y caracterización de propiedades físicas de materiales
- 4. Adsorción de contaminantes en superficies y partículas utilizando DFT
- 5. Caso de estudio de remoción de contaminantes por adsorción utilizando DFT

Dinámica Molecular Clásica:

- 1. Introducción a la Dinámica Molecular (DM)
- 2. Sistemas modelo y potenciales de interacción
- 3. Un poco de mecánica estadística para DM
- 4. Minimización de la energía
- 5. Integración de la ecuaciones de movimiento
- 6. Condiciones periódicas de frontera (simulando un sistema enorme)
- 7. Simulaciones en distintos ensambles

Método del Elemento Finito:

- 1. Generalidades del elemento finito
- 2. Introducción a COMSOL Multiphysics
- 3. Ejemplos de aplicación de simulación numérica con COMSOL Multiphysics
- 4. Planteamiento de un problema de adsorción
- 5. Definición del problema en Comsol Multiphysics
- 6. Análisis de resultados y postprocesamiento



INSTRUCTORES

Dr. Luis Felipe Cházaro Ruiz

División de Ciencias Ambientales Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A. C.

Luis Felipe Cházaro Ruiz es Licenciado en Ciencias con área terminal en Fisicoquímica egresado de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Es Doctor en Ciencias Químicas por parte del Departamento de Química del CINVESTAV del I.P.N. Unidad Zacatenco en la Ciudad de México, en donde realizó estudios de activación electroquímica de compuestos organometálicos de tipo rutenoceno. Posteriormente realizó dos estancia postdoctorales, la primera en el Instituto Leibniz IFW-Dresden, Alemania, en donde realizó estudios de espectroelectroquímica de polímeros conductores. La segunda estancia se realizó en el Instituto de Química Orgánica y Bioquímica de la Academia de Ciencias de la República Checa, en donde llevó a cabo estudios de síntesis y caracterización de metalocarboranos. Actualmente, sus intereses de investigación están enfocados a procesos electroquímicos: (1) Electroadsorción de contaminantes inorgánicos y orgánicos; (2) Barreras ambientales nanoestructuradas; (3) Sistemas bioeléctricos para la estimulación del metabolismo bacteriano; (4) (Bio)Sensores electroquímicos; (5) Sistemas bioelectroquímicos de tipo celda electroquímica microbiana; y (7) Sistemas de conversión/almacenamiento de energía. El Dr. Cházaro ha sido responsable técnico de proyectos financiados por CONACYT, y también ha participado en proyectos de colaboración con empresas.

Dra. Pricila Betbirai Romero Vázquez

Tecnológico Nacional de México Campus Zacapoaxtla.

Originaria de Veracruz, realizó estudios de Técnico Superior Universitario en Nanotecnología en la Universidad Tecnológica del Centro de Veracruz (2012-2014) y estudió la carrera de Ingeniería en Nanotecnología en la Universidad Tecnológica de Tulancingo (Hidalgo, 2014-2016). Posteriormente estudió la Maestría y Doctorado en Nanociencias y Materiales en el Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A.C. (IPICYT, 2016-2023). Actualmente está trabajando en el Instituto Tecnológico Superior de Zacapoaxtla. Su tesis de doctorado la realiza en el área de simulación computacional, donde estudió el comportamiento de propiedades físicas de compuestos ABO4 mediante cálculos de primeros principios. A la fecha ha publicado cuatro artículos en revistas indexadas y ha presentado parte de los resultados de su trabajo de investigación en diversos foros en universidades, centros de investigación y congresos.

Dr. Sinhué López Moreno

División de Materiales Avanzados Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A. C.

Nació en la Ciudad de México. Realizó estudios de Licenciatura en Ing. Electromecánica en el Instituto Tecnológico de Ocotlán, Jalisco (2004). Posteriormente estudió la Maestría (2006) y Doctorado (2010) en Ciencias de Materiales en el Cinvestav Unidad Querétaro, Querétaro, México. Más adelante hizo una estancia Posdoctoral en la Universidad de La Laguna (Tenerife,



Islas Canarias, España, 2010-2011) y otro más en la Facultad de Ciencias de la Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM (Ciudad de México, 2011-2012). Posterior a las estancias Posdoctorales se desempeño como Profesor Investigador Titular en la Escuela Superior de Ciudad Sahagún, perteneciente a la Universidad Autónoma de Hidalgo (2013-2014). Es miembro del Sistema Estatal de Investigadores (San Luis Potosí), del Registro de Evaluadores Acreditados (RCEA) del SECIHTI y Nivel II del Sistema Nacional de Investigadoras e Investigadores (SNII).

Actualmente se encuentra en el "Programa de Investigadoras e Investigadores por México del SECIHTI" y está adscrito a la División de Materiales Avanzados del IPICYT en San Luis Potosí. Dentro de sus líneas de investigación trabaja en el estudio de materiales de baja dimensionalidad como superficies, materiales 2D y cúmulos, entre otros. Además, trabaja en colaboración con grupos experimentales del extranjero en el estudio de la estabilidad de óxidos bajo presión, así como la caracterización de su estructura cristalina y propiedades electrónicas, elásticas, vibracionales y mecánicas.

Dr. Ramón Díaz de León-Zapata

Tecnológico Nacional de México Campus San Luis Potosí

Es ingeniero electrónico y maestro en ciencias computacionales por el Instituto Tecnológico de San Luis Potosí y Doctor en Ciencias Aplicadas con especialidad en fotónica por la Universidad Autónoma de SLP. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores nivel I y es líder del Cuerpo Académico Consolidado "Calidad de la Energía" del ITSLP. Actualmente se desempeña como Pofesor investigador en el Instituto Tecnológico de San Luis Potosí. Ha sido jefe de proyectos de investigación de la licenciatura y maestría en electrónica y ha participado y dirigido proyectos de Estímulo a la Innovación (PEI-CONACyT) donde se involucran la parte académica con el sector productivo, así como director de un proyecto internacional con apoyo del gobierno británico para analizar las condiciones de pobreza energética que dará como resultado propuestas concretas de políticas públicas para redicr esta condición en comunidades en desventaja económica. Ha publicado varios artículos científicos relacionados con el aprovechamiento de las energías renovables y actualmente se encuentra investigando sobre micro, nano y opto electrónica.

Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera

Universidad Autónoma de Nuevo León

Realizó los estudios de licenciatura en la Universidad Autónoma de Nayarit donde obtuvo el gradod e Ing. Químico. Posteriormente realizó los estudios de Maestría en Ing. Chímica en el Instituto Tecnológico de Celaya. El grado de Doctor en Ing. Química lo obtuvo en la Universidad Metropolitana. Actualmente es Miembo del Sistema Nacional de Investigadoras e Investigadores con nivel 1, cuenta con el Perfil Deseable PRODEP y es Presidente del Capítulo Mexicano de Interpore. Ha publicado 53 artículos en revistas del JCR y 16 en revistas de divulgación, con 73 participación en Congresos Nacionales y 10 Internacionales, 3 capítulos de libro, 1 libro y 2 registros de software. Ha participado en la dirección y/o codirección de 13 tesis de Licenciatura terminadas, 6 tesis de Maestría



terminadas y 1 en proceso, 3 tesis de Doctorado terminadas y 3 tesis de Doctorado en proceso.

Dr. Guillermo Iván Guerrero García

Facultad de Ciencias Universidad Autónoma de San Luis Potosí

El Dr. Iván Guerrero se doctoro en el Instituto de Física de la Universidad de San Luis Potosí en el 2006. Trabajó en el Instituto Mexicano del Petróleo como Investigador Postdoctoral durante 2007-2008. Posteriormente se incorporó al departamento de Ciencia y Tecnologia de Materiales de la Universidad Northwestern en 2009 como Investigador Postdoctoral y en 2013 como Investigador Asociado. De 2014-2019 se desempeño como Catedrático CONACYT en el Instituto de Física de la Universidad de San Luis Potosí, y en 2020 obtuvo una plaza en la Facultad de Ciencias de la misma universidad. Intereses de investigación y experiencia: simulaciones numericas y teoría de ecuaciones integrales de sistemas cargados de materia condensada blanda, estudiando la compatitud capacitiva, correlaciones iónicas, la inversión de carga, la amplificación de carga superficial, cargas imagen o efectos de polarización cerca de nanopartículas, coloides o interfaces agua/aceite en presencia de contraste dieléctrico; potenciales efectivos entre macroiones; computo paralelo de alto rendimiento utilizando CPUs y GPUs; y simulaciones de Monte Carlo o dinámica molecular y/o browniana de líquidos cargados.

Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco

Centro Nacional de Supercómputo Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A. C.

Estudió la licenciatura en Física y el doctorado en Ciencias e Ingenierías de Materiales en la Universidad Nacional Autónoma de México. Actualmente se encuentra laborando como Investigador por México del CONACYT, adscrito al Centro Nacional de Supercómputo-IPICYT. Sus intereses de investigación están ligados al estudio de sistemas coloidales mediante simulaciones moleculares, utilizando computación de alto rendimiento. Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores Nivel I.

Dr. Héctor Domínguez Castro

Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

Realizó sus estudios de Doctorado en el departamento de Física en la Universidad de Bristol, Inglaterra. Después de la obtención del grado en 1997, se trasladó a los Estados Unidos para realizar una estancia posdoctoral en el departamento de Química de la universidad de Chapel Hill, Carolina del Norte, USA de 1998 a 2000. En junio del 2000 se incorporó al Instituto de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y en el año 2004, ingresó al Instituto de Investigaciones en Materiales (IIM). Actualmente es nivel III en el sistema Nacional de Investigadoras e Investigadores. En el 2018 fue reconocido por su trayectoria académica en el 10th Meeting on Molecular Simulations. Ha sido profesor visitante en el departamento de Ingeniería Química del



Imperial College en Inglaterra en 2009 y en el Departamento de Física de la universidad British Columbia en Canadá en 2015. Cuenta con mas de 90 artículos publicados en revistas internacionales indizadas del Science Citation Index y sus publicaciones cuentan con mas de 1700 citas. Ha sido árbitro regular de revistas internacionales de alto prestigio como, Journal of Physical Chemistry, Journal of Colloid and Interface Science, Journal of Molecular Liquids, Molecular Simulations entre otras.

En los últimos años sus líneas de investigación se basan en el estudio de la retención de contaminantes, iones metálicos, en disoluciones acuosas mediante el uso de moléculas surfactantes empleando simulaciones por computadora.

Resumen de la ponencia:

"El uso de moléculas surfactantes para retener contaminantes en disoluciones acuosas: Un estudio por dinámica molecular".

Impartido por el Dr. Héctor Domínguez Castro.

Mediante simulaciones de Dinámica Molecular, investigamos el papel de las moléculas surfactantes como agentes para la eliminación de contaminantes en fases acuosas. Los surfactantes se utilizan para estudiar la retención de partículas metálicas, como plomo (Pb), mercurio (Hg) y gases como CO2 en agua. Mediante la preparación de micelas compuestas de surfactantes anicónicos y biosurfactantes se estudia la eficiencia de los agregados moleculares para capturar las partículas contaminantes. Los datos se analizaron en términos

de funciones de distribución radial, perfiles de densidad radial e isotermas, y para el caso de las partículas metálicas se observa que están son capturadas por los grupos polares del surfactante, mientras que para los gases depende de la naturaleza polar de los surfactantes. Los resultados muestran que la retención de partículas metálicas aumenta con la concentración de SDS. Para el caso de la retención del gas CO2, se observa que las micelas de biosurfactantes son mejores para la adsorción del gas.

Dr. Christian Alejandro Celaya López

Centro de Nanociencias y Nanotecnología CNYN-UNAM

Investigador posdoctoral del Centro de Nanociencias y Nanotecnología CNYN-UNAM.



ASESORES

Ing. Alejandro Morales Vázquez

Centro Nacional de Supercómputo Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A. C.

Ingeniero en Electrónica por la Universidad Autónoma de San Luis Potosí. Cuenta con más de 15 años de experiencia en el sector de ciencia, tecnología e innovación apoyando actividades administrativas, en la coordinación de órganos colegiados y seguimiento de proyectos. De 2018-2019, como colaborador en el Consejo Potosino de Ciencia y Tecnología, coordinó el Sistema de Ciencia, Tecnología e Innovación del Estado de San Luis Potosí, integrando la cartera de proyectos prioritarios de las áreas estratégicas del estado, a través de grupos multidisciplinarios. Participó además en actividades de vinculación y capacitación de dicho consejo. Ha sido coordinador técnico y logístico del Programa de Resultados Electorales Preliminares del 2000-2016 (trianual) tanto para el Organismo Electoral del Estado como para organizaciones políticas locales. En los últimos años ha participado en estudios sobre la Industria 4.0 en el sector automotriz del Estado y la situación general de dicha industria en San Luis Potosí.

Ing. Eva Hayde Flores Ramos

Centro Nacional de Supercómputo Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A. C.

Egresada de la licenciatura en Computación por la Universidad Autónoma Metropolitana unidad Iztapalapa, actualmente cursando la maestría en Ciencias y Tecnologías de información en la misma universidad. Miembro del Laboratorio de Supercómputo y Visualización en Paralelo de la Universidad Autónoma Metropolitana entre los años 2013-2015, donde participó en la instalación, configuración y puesta a punto del clúster Yoltla. Así como en la instalación y configuración de aplicaciones de HPC. Trabajo en la empresa Lufac Computación dedicada al supercómputo, dentro del área de investigación y desarrollo, enfocándose en la instalación y configuración de aplicaciones de HPC, desarrollo de programas en paralelo, atención a usuarios y configuración y puesta a punto de equipos de supercómputo. Actualmente se desempeña como responsable del área de Servicios de Supercómputo del Centro Nacional de Supercómputo del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica.



CALENDARIO

DÍA 1: 23 Junio 2025				
Hora inicio	Hora término	Actividad		
08:45 horas	09:00 horas	Innauguración de la escuela: Autoridades de IPICYT		
09:00 horas	10:00 horas	Ponencia: Una visión general de la contaminación del agua Dr. Luis Felipe Chazaro Ruiz, SNII 2		
10:00 horas	10:50 horas	Taller de teoría y práctica: Teoría del funcional de la densidad Dra. Pricila Betbirai Romero Vázquez Dr. Sinhué López Moreno, SNII 2		
10:50 horas	11:00 horas	Coffee break		
11:00 horas	12:00 horas	Taller de teoría y práctica: Teoría del funcional de la densidad Dra. Pricila Betbirai Romero Vázquez Dr. Sinhué López Moreno, SNII 2		
12:00 horas	13:50 horas	Taller de teoría y práctica: Dinámica molecular clásica Dr. Guillermo Iván Guerrero García, SNII 2 Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco, SNII 1		
13:50 horas	15:00 horas	Comida		
15:00 horas	16:50 horas	Taller de teoría y práctica: Elemento finito Dr. Ramón Díaz de León Zapata, SNII 1		
16:50 horas	17:00 horas	Coffee break		
17:00 horas	18:00 horas	Ponencia: Estudio de la remoción de contaminantes mediante la teoría del funcional de la densidad Dr. Christian Alejandro Celaya López		

DÍA 1: 24 Junio 2025				
Hora inicio	Hora término	Actividad		
09:00 horas	10:50 horas	Taller de teoría y práctica: Teoría del funcional de la densidad Dra. Pricila Betbirai Romero Vázquez Dr. Sinhué López Moreno, SNII 2		
10:50 horas	11:00 horas	Coffee break		
11:00 horas	12:00 horas	Recorrido por el CNS		
12:00 horas	13:50 horas	Taller de teoría y práctica: Dinámica molecular clásica Dr. Guillermo Iván Guerrero García, SNII 2 Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco, SNII 1		
13:50 horas	15:00 horas	Comida		
15:00 horas	16:50 horas	Taller de teoría y práctica: Elemento finito. Dr. Ramón Díaz de León Zapata, SNII 1		
16:50 horas	17:00 horas	Coffee break		
17:00 horas	18:00 horas	Ponencia: El uso de moléculas surfactantes para retener contaminantes en disoluciones acuosas: Un estudio por dinámica molecular Dr. Héctor Domínguez Castro		



DÍA 3: 25 Junio 2025				
Hora inicio	Hora término	Actividad		
09:00 horas	10:50 horas	Taller de teoría y práctica: Teoría del funcional de la densidad Dra. Pricila Betbirai Romero Vázquez Dr. Sinhué López Moreno, SNII 2		
10:50 horas	11:00 horas	Coffee break		
11:00 horas	12:00 horas	Taller de teoría y práctica: Teoría del funcional de la densidad Dra. Pricila Betbirai Romero Vázquez Dr. Sinhué López Moreno, SNII 2		
12:00 horas	13:50 horas	Taller de teoría y práctica: Dinámica molecular clásica Dr. Guillermo Iván Guerrero García, SNII 2 Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco, SNII 1		
13:50 horas	15:00 horas	Comida		
15:00 horas	16:50 horas	Taller de teoría y práctica: Elemento finito Dr. Ramón Díaz de León Zapata, SNII 1		
16:50 horas	17:00 horas	Coffee break		
17:00 horas	18:00 horas	Ponencia: Modelado y simulación con CFD de la remoción de contaminantes por medio de adsorción de sólidos porosos Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera, SNII 1		

DÍA 4: 26 Junio 2025				
Hora inicio	Hora término	Actividad		
09:00 horas	10:50 horas	Taller de teoría y práctica: Teoría del funcional de la densidad Dra. Pricila Betbirai Romero Vázquez Dr. Sinhué López Moreno, SNII 2		
10:50 horas	11:00 horas	Coffee break		
11:00 horas	13:50 horas	Taller de teoría y práctica: Dinámica molecular clásica Dr. Guillermo Iván Guerrero García, SNII 2 Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco, SNII 1		
13:50 horas	15:00 horas	Comida		
15:00 horas	16:50 horas	Taller de teoría y práctica: Elemento finito Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera, SNII 1		
17:30 horas	18:00 horas	Coffee break		
18:00 horas	19:00 horas	Taller de teoría y práctica: Elemento finito Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera, SNII 1		



DÍA 5: 27 Junio 2025				
Hora inicio	Hora término	Actividad		
09:00 horas	10:50 horas	Taller de teoría y préctica: Teoría del funcional de la densidad Dra. Pricila Betbirai Romero Vázquez Dr. Sinhué López Moreno, SNII 2		
10:50 horas	11:00 horas	Coffee break		
11:00 horas	12:50 horas	Taller de teoría y préctica: Dinámica molecular clásica Dr. Guillermo Iván Guerrero García, SNII 2 Dr. Daniel Ignacio Salgado Blanco, SNII 1		
13:00 horas	14:50 horas	Taller de teoría y préctica: Elemento finito. Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera, SNII 1		
14:50 horas	15:00 horas	Clausura		
15:00 horas	16:50 horas	Comida		





Si estás interesado en participar en la selección para cursar la Escuela, favor de registrarte aquí:





Si fuiste seleccionado, se te notificará al correo electrónico que registraste.



