

Curso Académico: ( 2023 / 2024 )

Fecha de revisión: 17-05-2023

Departamento asignado a la asignatura: Departamento de Ciencia e Ingeniería de Materiales e Ingeniería Química

Coordinador/a: JIMENEZ MORALES, ANTONIA

Tipo: Optativa Créditos ECTS : 3.0

Curso : 1 Cuatrimestre : 2

**REQUISITOS (ASIGNATURAS O MATERIAS CUYO CONOCIMIENTO SE PRESUPONE)**

Mecánica de sólidos. Álgebra. Métodos numéricos.

**OBJETIVOS****COMPETENCIAS:**

CB6, Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7, Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio

CB8, Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9, Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CB10, Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG1, Comprender la problemática implicada en la Ciencia e Ingeniería de Materiales en un contexto industrial y de investigación

CG3, Desarrollar capacidades de trabajo en equipo en un contexto de investigación

CG6, Adquirir las habilidades necesarias para defender un proyecto de investigación y sus resultados

CG7, Desarrollar estrategias creativas y de toma de decisiones frente a problemas relacionados con los materiales, su diseño, fabricación y comportamiento.

CE2, Diseñar vías de optimización en las propiedades de los diferentes materiales para aplicaciones concretas a través de modificaciones en su estructura y composición

CE9, Consolidar habilidades específicas de investigación en el campo de la Ciencia e Ingeniería de Materiales

CE10, Adquirir conocimientos y habilidades científico-técnicas útiles para solventar problemas específicos asociados al trabajo en un laboratorio de investigación en el campo del desarrollo y la caracterización de los materiales

**RESULTADOS DEL APRENDIZAJE**

La superación de esta materia implica que el alumno ha aprendido:

- A identificar las técnicas de simulación más importantes y su potencial en la resolución de problemas en Ciencia e Ingeniería de Materiales.
- Los fundamentos de la Ingeniería de Materiales Computacional
- Los fundamentos de la técnica de simulación atomística.
- Los fundamentos de la técnica de modelización por elementos finitos.

**DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS: PROGRAMA**

Programa de la asignatura:

1. Introducción a las técnicas de simulación en ingeniería de materiales.
  - 1.1. Principios de la Ingeniería de materiales computacional
  - 1.2 Escalas en la estructura y comportamiento de los materiales
  - 1.3 Técnicas de simulación atomística
  - 1.4 Técnicas de simulación a la mesoescala
  - 1.5 Técnicas de simulación del continuo
  - 1.6 Simulaciones multiescala

## 1.7 Ejemplos de aplicación en ingeniería de materiales

Parte 1: Fundamentos de técnicas de simulación atomística, incluyendo métodos de Monte Carlo y dinámica molecular

### 2. Introducción a simulación atomística de materiales

2.1 Métodos computacionales utilizados en ciencia de los materiales.

2.2 Mecánica cuántica vs clásica.

2.3 Método QM/MM.

2.3 Sistemas finitos y condiciones de contorno periódicas.

### 3. Métodos de Monte Carlo y aplicaciones en ingeniería de materiales.

### 4. Técnicas de mecánica molecular

4.1 Campos de fuerza interatómicos y moleculares

4.2 Optimización de geometría

### 5. Técnicas de dinámica molecular:

5.1 Integración de las ecuaciones de movimiento

5.2 Control de temperatura y presión, lista de vecinos, etc.

5.3 Determinación de propiedades físicas.

### 6. Introducción a la termodinámica computacional

6.1. Leyes termodinámicas. Función de energía de Gibbs y modelos

6.2. Equilibrio de fase en sistemas heterogéneos

6.3. Datos experimentales para el modelado termodinámico

6.4. Método de CALPHAD

6.5. Casos y ejemplos

Parte 2: Fundamentos de micromecánica del continuo

### 7. Fundamentos de técnicas de simulación del continuo.

7.1 Métodos de Campo Medio.

7.2 Métodos de Acotamiento.

7.3 Aproximaciones de microcampos periódicos

7.4 Concepto de RVE

### 8. Resolución numérica.

8.1 Métodos de elementos finitos. Principios generales. Discretización espacial e integración numérica. Discretización temporal. Condiciones de contorno..

## ACTIVIDADES FORMATIVAS, METODOLOGÍA A UTILIZAR Y RÉGIMEN DE TUTORÍAS

### ACTIVIDADES FORMATIVAS

AF1, Clases teórico-prácticas: 11 horas de clases magistrales

AF2, Prácticas de laboratorio: 6 sesiones de 1.5 de prácticas por ordenador para la realización de simulaciones (9 horas)

AF3, Tutorías: Se incentivará la asistencia de los alumnos en los horarios de tutorías establecidos en la asignatura (2.5 horas)

AF4, Trabajo en grupo: los estudiantes realizarán las prácticas por ordenador en grupos de 2 (7 horas)

AF5, Trabajo individual del estudiante: se estiman 30 horas de trabajo individual por parte del alumno.

### METODOLOGÍA DOCENTES

MD1, Exposiciones en clase del profesor

MD3, Resolución por parte del alumno en grupo de casos prácticos planteados por el profesor durante las prácticas por ordenador.

MD5, Realización de prácticas por ordenador, bajo la orientación del profesor

MD6, Elaboración de informes en grupo sobre los ejercicios planteados en las prácticas.

## SISTEMA DE EVALUACIÓN

- Trabajo individual (evaluación continua) (SE2): 30%
- Trabajo en grupo sobre las prácticas en ordenador (SE3): 30%
- Examen final (SE4): 40%

<b>Peso porcentual del Examen Final:</b>	40
<b>Peso porcentual del resto de la evaluación:</b>	60

#### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- Daan Frenkel and Berend Smit Understanding Molecular Simulation, Elsevier.
- Introduction to Computational Materials Science. Fundamentals to Applications Richard Lesar, Cambridge University Press.
- O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. The Finite Element Method, Butterworth-Heinemann Editors.

#### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Andrew Leach Molecular Modelling: Principles and Applications, Prentice Hall.
- J. M. Haile Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods , Wiley.