



DENOMINACIÓN ASIGNATURA: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN DE MATERIALES		
POSTGRADO: MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES Profesor/a: Jon Molina	ECTS: 3	CUATRIMESTRE: 2

CRONOGRAMA DE LA ASIGNATURA (versión detallada)

SEMANA	SESIÓN	DESCRIPCIÓN DEL CONTENIDO DE LA SESIÓN	GRUPO (marcar X)		Indicar espacio Necesario distinto aula (aula informática, audiovisual, etc..)	TRABAJO DEL ALUMNO DURANTE LA SEMANA		
			1	2		DESCRIPCIÓN	HORAS PRESENCIALES	HORAS TRABAJO Semana Máximo 7 H
1	1	<p>1. Introducción a las técnicas de simulación en ingeniería de materiales.</p> <p>1.1. Principios de la Ingeniería de materiales computacional</p> <p>1.2 Escalas en la estructura y comportamiento de los materiales</p> <p>1.3 Técnicas de simulación atomística</p> <p>1.4 Técnicas de simulación a la mesoescala</p> <p>1.5 Técnicas de simulación del continuo</p> <p>1.6 Simulaciones multiescala</p> <p>1.7 Ejemplos de aplicación en ingeniería de materiales</p>				Estudio de los contenidos impartidos en clase	1.5	2
	2	<p>Parte 1: Fundamentos de técnicas de simulación atomística, incluyendo métodos de Monte Carlo y dinámica molecular</p> <p>2. Introducción a simulación atomística de materiales</p> <p>2.1 Métodos computacionales utilizados en ciencia de los materiales.</p> <p>2.2 Mecánica cuántica vs clásica.</p> <p>2.3 Método QM/MM.</p> <p>2.3 Sistemas finitos y condiciones de contorno periódicas.</p>				Estudio de los contenidos impartidos en clase	1.5	2



2	3	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				Estudio de los contenidos impartidos en clase	1.5	2
	4	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.				Estudio de los contenidos impartidos en clase		2
3	5	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 termodinámica 6.4. Método de CALPHAD 6.5. Casos y ejemplos				Estudio de los contenidos impartidos en clase	1.5	2
	6	Ejercicio práctico: Cálculo de energías de sólidos.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable .	1.5	4
4	7	Ejercicio práctico: Puesta a punto de una simulación de dinámica molecular.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos..	1.5	3
	8	Ejercicio práctico: Caso práctico de dinámica molecular: fusión de un sólido.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable.	1.5	4



5	9	Parte 2: Fundamentos de Micromecánica del continuo 6. Fundamentos de técnicas de simulación del continuo. 6.1 Métodos del campo medio.				Estudio de los contenidos impartidos en clase	1.5	2
	10	6.2 Métodos de acotamiento 6.3 Aproximaciones de microcampos periódicos. 6.4 Concepto de RVE				Estudio de los contenidos impartidos en clase	1.5	2
6	11	Ejercicio práctico. Puesta a punto de un RVE en una simulación de elementos finitos: generación del volumen, mallado, condiciones de contorno. Composites.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable.	1.5	3
	12	7. Resolución numérica. Métodos de elementos finitos. Principios generales. Discretización espacial e integración numérica. Discretización temporal. Condiciones de contorno..				Estudio de los contenidos impartidos en clase	1.5	2
7	13	Ejercicio práctico. Propiedades elásticas de materiales compuestos. Comparación con teorías de homogenización.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable.	1.5	3
	14	Ejercicio práctico. Propiedades plásticas. Campos locales de tensión.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable. Preparación examen final.	1.5	4
TOTAL HORAS							21	37