



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	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				Estudio de los contenidos impartidos en clase	1.5	2
	2	<b>Parte 1: Fundamentos de técnicas de simulación atomística, incluyendo métodos de Monte Carlo y dinámica molecular</b> 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.				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	<b>Ejercicio práctico:</b> Cálculo de energías de sólidos.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable .	1.5	4
4	7	<b>Ejercicio práctico:</b> Puesta a punto de una simulación de dinámica molecular.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos..	1.5	3
	8	<b>Ejercicio práctico:</b> Caso práctico de dinámica molecular: fusión de un sólido.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable.	1.5	4



5	9	<b>Parte 2: Fundamentos de Micromecánica del continuo</b> 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	<b>Ejercicio práctico.</b> 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	<b>Ejercicio práctico.</b> Propiedades elásticas de materiales compuestos. Comparación con teorías de homogenización.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable.	1.5	3
	14	<b>Ejercicio práctico.</b> Propiedades plásticas. Campos locales de tensión.			Informática	Análisis de las ejercicios prácticos. Entrega de ejercicio evaluable. Preparación examen final.	1.5	4
<b>TOTAL HORAS</b>							<b>21</b>	<b>37</b>