

MODELIZACIÓN EN CIENCIA DE MATERIALES: INTRODUCCIÓN A LAS SIMULACIONES ATÓMICAS Y MÉTODOS MONTE CARL (2017-18)**DATOS GENERALES**

Código 35831

Créditos ECTS 3

Departamentos y áreas

Departamento	Área	Dpt. Resp.	Dpt. Acta
FISICA APLICADA	FISICA APLICADA	SÍ	SÍ

Estudios en que se imparte

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA DE MATERIALES

DOCTORADO EN CIENCIA DE MATERIALES

Contexto de la asignatura

Esta asignatura es una optativa dentro del programa de Ciencia de Materiales en la que se introduce al alumno/a en las técnicas más utilizadas en la modelización y en la simulación del comportamiento de materiales.



OBJETIVOS

Objetivos específicos aportados por el profesorado (2017-18)

Conocimientos básicos de las técnicas de modelización y simulación en ciencia de materiales, fundamentalmente dinámica molecular y distintos métodos Monte Carlo. Iniciar a los alumnos en la programación por ordenador.

CONTENIDOS

Contenidos teóricos y prácticos (2017-18)

Temario:

1. Introducción

¿Qué es la ciencia de materiales computacional?

La simulación multiescala y métodos de simulación en ciencia de materiales.

2. Métodos Monte Carlo

Introducción

Algoritmos de generación de números aleatorios

Integración con Monte Carlo

Cálculo del número pi

Metrópolis Monte Carlo

Monte Carlo cinético

3. Dinámica molecular clásica

Fundamentos

Potenciales de interacción

Algoritmos de integración

Condiciones de contorno

Listas de vecinos

Aplicaciones de la dinámica molecular en ciencia de materiales

EVALUACIÓN

Instrumentos y criterios de Evaluación 2017-18

La evaluación de las competencias se realiza en gran medida de forma continua a través de la valoración por parte del profesor de las distintas actividades propuestas a los alumnos (cuestiones, exposiciones, trabajo en laboratorio, informes, etc.). También se recoge la posibilidad de realizar un examen escrito. La evaluación continua supondrá entre un 50 y un 70 % de la nota final y el resto corresponderá al examen final.

El alumno debe realizar todos los ejercicios que se le plantean en las clases y presentar aquellos ejercicios que se les soliciten.

El alumno/a presentará un trabajo de su elección relacionado con los temas tratados en la asignatura. La exposición del trabajo será tanto escrita como oral frente al resto de alumnos de la clase.

Tipo	Criterio	Descripción	Ponderación
EXAMEN FINAL	El alumno/a presentará un trabajo de su elección relacionado con los temas tratados en la asignatura. La exposición del trabajo será tanto escrita como oral frente al resto de alumnos de la clase.	Trabajo expositivo	50
ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	El alumno debe realizar todos los ejercicios que se le plantean en las clases y presentar aquellos ejercicios que se les soliciten.	Trabajo continuado	50