Guía docente
230486 - SIMCON - Simulación Computacional de la Materia Condensada

Última modificación: 01/06/2023

Unidad responsable: Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Telecomunicación de Barcelona
Unidad que imparte: 748 - FIS - Departamento de Física.

Titulación: GRADO EN INGENIERÍA FÍSICA (Plan 2011). (Asignatura optativa).
GRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE DATOS (Plan 2017). (Asignatura optativa).

Curso: 2023 **Créditos ECTS:** 6.0 **Idiomas:** Inglés

PROFESORADO

Profesorado responsable: Consultar aquí / See here:
https://telecos.upc.edu/ca/estudis/curs-actual/professorat-responsables-coordinadors/responsables-assignatura

Otros: Consultar aquí / See here:
https://telecos.upc.edu/ca/estudis/curs-actual/professorat-responsables-coordinadors/professorat-assignat-idioma

CAPACIDADES PREVIAS

Trabajo individual y en equipo
Habilidad para hacer trabajo gráfico (representación de datos, visualización)
Capacidad de análisis de datos e interpretación de resultados
Competencia suficiente en programación en algún lenguaje de alto nivel (C, FORTRAN, JAVA, etc.)

REQUISITOS

Pre-requisitos: Física Estadística, Termodinámica, Física Cuántica, Mètodos Numéricos y Computacionales (1 i 2)
Co-requisitos: ninguno

COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN A LAS QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

Específicas:
1. Conocimiento de la estructura de la materia y de sus propiedades a nivel atómico y molecular. Aptitud para analizar el comportamiento de materiales, sistemas electrónicos y biofísicos, y la interacción entre radiación y materia.
2. Comprensión y dominio de la programación de ordenadores, uso de sistemas operativos y de herramientas informáticas (software científico). Aptitudes para implementar algoritmos numéricos en lenguajes de bajo (C, F90) y alto (Matlab) nivel.
3. Conocimiento del método científico y sus aplicaciones en física e ingeniería. Aptitud para formular hipótesis y realizar análisis críticos sobre problemas científicos en el ámbito de la física y la ingeniería. Capacidad para relacionar la realidad física con sus modelos matemáticos y viceversa.

Genéricas:
4. CAPACIDAD PARA IDENTIFICAR, FORMULAR Y RESOLVER PROBLEMAS DE INGENIERÍA FÍSICA. Capacidad para plantear y resolver problemas de ingeniería física con iniciativa, tomada de decisiones y creatividad. Desarrollar métodos de análisis y solución de problemas de forma sistemática y creativa.

Transversales:
6. TERCERA LENGUA: Conocer una tercera lengua, que será preferentemente inglés, con un nivel adecuado de forma oral y por escrito y en consonancia con las necesidades que tendrán las tituladas y los titulados en cada enseñanza.
5. APRENDIZAJE AUTÓNOMO - Nivel 3: Aplicar los conocimientos alcanzados en la realización de una tarea en función de la pertinencia y la importancia, decidiendo la manera de llevarla a cabo y el tiempo que es necesario dedicarle y seleccionando las fuentes de información más adecuadas.
7. TRABAJO EN EQUIPO - Nivel 3: Dirigir y dinamizar grupos de trabajo, resolviendo posibles conflictos, valorando el trabajo hecho con las otras personas y evaluando la efectividad del equipo así como la presentación de los resultados generados.

METODOLOGÍAS DOCENTES

Clases magistrales
Clases de problemas y ejercicios
Prácticas con ordenador
Seminarios docentes

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Tema: Modelización y simulación computacional de sistemas físicos a nivel microscópico (sólidos, líquidos, gases)
Comprensión por parte de los estudiantes de las bases teóricas y las técnicas computacionales de simulación más relevantes
Que los estudiantes sean capaces de crear sus propios códigos de simulación (Monte Carlo, Dinámica Molecular)
Que los estudiantes sean capaces de utilizar paquetes de simulación de gran potencia y su aplicación a la modelización y simulación de sistemas con un alto grado de realismo.

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTADO

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas grupo grande	65,0	43.33
Horas aprendizaje autónomo	85,0	56.67

Dedicación total: 150 h

CONTENIDOS

Modelización y simulación. Introducción.

Descripción:
Introducción a los métodos de simulación y la modelización de sistemas físicos a escala microscópica
Apartados:
1. Modelos y campos de fuerza
2. Metodologías de simulación
3. Introducción al lenguaje de programación FORTRAN y al sistema operativo LINUX

Objetivos específicos:
Dar ideas generales del apartado. Introducción a la asignatura

Actividades vinculadas:
Clases magistrales

Dedicación: 8h
Grupo grande/Teoría: 3h
Aprendizaje autónomo: 5h

Dinámica Molecular

Descripción:
La técnica de la Dinámica Molecular permite generar trayectorias Newtonianas de las partículas de un sistema dinámico clásico y el estudio de la estructura y la dinámica temporal del sistema.
Apartados:
1. Resolución numérica de las ecuaciones del movimiento
- Ecuaciones del movimiento
- Métodos en diferencias finitas: Métodos de Euler, Verlet, Leapfrog, Runge-Kutta y algoritmo predictor-corrector
2. Simulación de un sistema de N partículas
- Fuerzas y energías
- Las condiciones de contorno periódicas
- Fuerzas de corto alcance y método de la mínima imagen
- Interacciones de largo alcance: Ewald y métodos del campo de reacción
- Termostatos y barostatos
3. Introducción a los métodos cuánticos
- Ideas sobre la Teoria del Funcional de la Densidad, los métodos "ab initio" y el método de Car-Parrinello

Objetivos específicos:
Entender el concepto de dinámica molecular (DM).
Entender las principales herramientas que se necesitan para crear una simulación DM clásica.
Estudiar el cálculo de propiedades del sistema.
Ver los principales elementos de la simulación de sistemas cuánticos.

Actividades vinculadas:
Programación y uso de códigos de DM clásica

Dedicación: 43h
Grupo grande/Teoría: 12h
Grupo pequeño/Laboratorio: 8h
Aprendizaje autónomo: 23h

Método de Monte Carlo

Descripción:
La técnica de la simulación de Monte Carlo se basa en simular la realidad a través del estudio de una muestra estadística, que se ha generado de forma totalmente aleatoria.
Apartados:
1. Simulación de Monte Carlo de sistemas discretos: el modelo de Ising
2. Simulación de Monte Carlo de sistemas continuos
- Conceptos básicos: algoritmo de Metropolis. Balance detallado
- Colectivos estadísticas: canónicos y más allá
- Re-escalado y transiciones de fase de tamaño finito
- Métodos Cuánticos de Monte Carlo

Objetivos específicos:
Entender el concepto de simulación de Monte Carlo (MC).
Entender las principales herramientas que se necesitan para generar números aleatorios y el muestreo de un sistema clásico.
Estudiar el cálculo de propiedades del sistema.

Actividades vinculadas:
Programación y uso de códigos de MC clásico

Dedicación: 35h
Grupo grande/Teoría: 10h
Grupo pequeño/Laboratorio: 7h
Aprendizaje autónomo: 18h

Aplicaciones de la simulación a sistemas realistas

Descripción:
Ver como las técnicas descritas en los temas anteriores se aplican a sistemas con un alto grado de realismo.
Apartados:
1 Materia Condensada "dura":
- Nanomateriales: los nanotubos de carbono, el grafeno
- Defectos en Sólidos
- Interfases y fluidos confinados: poros de óxido de silicio
2. Materia Condensada "blanda":
- Polímeros
- Biomembranas: lípidos y colesterol en solución iónica en agua

Objetivos específicos:
Desarrollar simulaciones muy sofisticadas herramientas específicas.
Analizar resultados microscópicos de propiedades estructurales (funciones de distribución, orientaciones y enlaces moleculares) y dinámicas (difusión, espectros).
Visualizar el sistema y generar animaciones.

Actividades vinculadas:
Prácticas de simulación con ordenador

Dedicación: 64h
Grupo grande/Teoría: 6h
Grupo pequeño/Laboratorio: 15h
Actividades dirigidas: 3h
Aprendizaje autónomo: 40h

ACTIVIDADES

Prácticas de simulación a determinar

Descripción:
Codigos creados por el alumno

Objetivos específicos:
Evaluación de la asignatura

Material:
Programas informáticos, presentación de resultados

Entregable:
Final de curso

Dedicación: 5h
Grupo grande/Teoría: 5h

SISTEMA DE CALIFICACIÓN

Cuestiones teóricas: 20% de la nota final.
Prácticas con ordenador: 40% de la nota final.
Presentación de trabajo personal (proyecto de código DM o MC) en clase: 40% de la nota final.
Nota final = 0.2*cuestiones + 0.4*(nota prácticas) + 0.4*proyecto
Los estudiantes que suspenden con un nota igual o superior a 3 (para un máximo de 2 asignaturas) podrán optar a reevaluación, que consistirá en un examen sobre los contenidos de la asignatura. Prácticas no re-evaluables.

NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

Presentación de prácticas y trabajos en el aula mediante material informático

BIBLIOGRAFÍA

Básica:

- Thijssen,J.M. Computational physics. 2nd. ed. Cambridge University Press, 2007. ISBN 9780521833462.
- Frenkel, D.; Smit, B. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications [en línea]. 3rd ed. London: Academic Press is an imprint of Elsevier, 2023 [Consulta: 28/09/2023]. Disponible a: https://sciencedirect.com/book/9780323902922. ISBN 9780323913188.
- Gould, H.; Tobochnik, J.; Christian, W. Introduction to Computer Simulation Methods: application to Physical Systems. 3rd. ed. Addison-Wesley, 2006. ISBN 0805377581.

RECURSOS

Material informático:

- Codis de simulació. Códigos de Dinámica Molecualr y Monte Carlo