

# Guia docent

## 230486 - SIMCON - Simulació Computacional de la Matèria Condensada

Última modificació: 29/04/2020

**Unitat responsable:** Escola Tècnica Superior d'Enginyeria de Telecomunicació de Barcelona

**Unitat que imparteix:** 748 - FIS - Departament de Física.

**Titulació:** GRAU EN ENGINYERIA FÍSICA (Pla 2011). (Assignatura optativa).

**Curs:** 2020

**Crèdits ECTS:** 6.0

**Idiomes:** Anglès

### PROFESSORAT

---

**Professorat responsable:** ELVIRA GUARDIA MANUEL

**Altres:** JORDI MARTÍ RABASSA

### CAPACITATS PRÈVIES

---

Treball individual i en equip

Habilitat per fer treball gràfic (representació de dades, visualització)

Capacitat d'anàlisi de dades i interpretació de resultats

Competència suficient en programació en algun llenguatge d'alt nivell (C, FORTRAN, JAVA, etc.)

### REQUISITS

---

Pre-requisits: Física Estadística, Termodinàmica, Física Quàntica, Mètodes Numèrics i Computacionals (1 i 2)

Co-requisits: cap

### COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

---

#### Específiques:

1. Coneixement de l'estructura de la matèria i de les seves propietats a nivell atòmic i molecular. Aptitud per analitzar el comportament de materials, sistemes electrònics i biofísics, i la interacció entre radiació i matèria.
2. Comprensió i domini de la programació d'ordinadors, ús de sistemes operatius i d'eines informàtiques (programari científic). Aptituds per implementar algorismes numèrics en llenguatges de baix (C, F90) i alt (Matlab) nivell.
3. Coneixement del mètode científic i les seves aplicacions en física i enginyeria. Aptitud per formular hipòtesis i realitzar anàlisis crítiques sobre problemes científics en l'àmbit de la física i l'enginyeria. Capacitat per relacionar la realitat física amb els seus models matemàtics i viceversa.

#### Genèriques:

4. CAPACITAT PER IDENTIFICAR, FORMULAR I RESOLDRE PROBLEMES D'ENGINYERIA FÍSICA. Capacitat per identificar, formular i resoldre problemes d'enginyeria física amb iniciativa, presa de decisions i creativitat. Desenvolupar mètodes d'anàlisi i solució de problemes de forma sistemàtica i creativa.

#### Transversals:

6. TERCERA LLENGUA: Conèixer una tercera llengua, que serà preferentment l'anglès, amb un nivell adequat de forma oral i per escrit i amb consonància amb les necessitats que tindran les titulades i els titulats en cada ensenyament.
5. APRENENTATGE AUTÒNOM - Nivell 3: Aplicar els coneixements assolits a la realització d'una tasca en funció de la pertinència i la importància, decidint la manera de dur-la a terme i el temps que cal dedicar-hi i seleccionant-ne les fonts d'informació més adequades.
7. TREBALL EN EQUIP - Nivell 3: Dirigir i dinamitzar grups de treball, resolent-ne possibles conflictes, valorant el treball fet amb les altres persones i avaluant l'efectivitat de l'equip així com la presentació dels resultats generats.



## METODOLOGIES DOCENTS

Classes magistrals  
Classes de problemes i exercicis  
Pràctiques amb ordinador  
Seminaris docents

## OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Tema: Modelització i simulació computacional de sistemes físics a nivell microscòpic (sòlids, líquids, gasos)  
Comprensió per part dels estudiants de les bases teòriques i les tècniques computacionals de simulació més rellevants  
Que els estudiants siguin capaços de crear els seus propis codis de simulació (Monte Carlo, Dinàmica Molecular)  
Que els estudiants siguin capaços de fer servir paquets de simulació de gran potència i la seva aplicació a la modelització i simulació de sistemes amb un alt grau de realisme.

## HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

| Tipus                      | Hores | Percentatge |
|----------------------------|-------|-------------|
| Hores aprenentatge autònom | 85,0  | 56.67       |
| Hores grup gran            | 65,0  | 43.33       |

**Dedicació total:** 150 h

## CONTINGUTS

### Modelització i simulació. Introducció.

**Descripció:**

Introducció als mètodes de simulació i la modelització de sistemes físics a escala microscòpica

Apartats:

1. Models i camps de força
2. Metodologies de simulació
3. Introducció al llenguatge de programació FORTRAN i al sistema operatiu LINUX

**Objectius específics:**

Donar idees generals de l'apartat. Introducció a l'assignatura

**Activitats vinculades:**

Classes magistrals

**Dedicació:** 8h

Grup gran/Teoria: 3h

Aprenentatge autònom: 5h



## Dinàmica Molecular

### Descripció:

La tècnica de la Dinàmica Molecular permet generar trajectòries Newtonianes de partícules clàssiques en un sistema dinàmic i estudiar l'estructura i dinàmica temporal del sistema.

Apartats:

1. Resolució numèrica de les equacions del moviment
  - Equacions del moviment
  - Mètodes en diferències finites: Mètodes d'Euler, Verlet, Leapfrog, Runge-Kutta i algorisme predictor-corrector
2. Simulació d'un sistema de N partícules
  - Forces i energies
  - Les condicions de contorn periòdiques
  - Forces de curt abast i mètode de la mínima imatge
  - Interaccions de llarg abast: Ewald i mètodes del camp de reacció
  - Termòstats i barostats
3. Introducció als mètodes quàntics
  - Idees sobre la Teoria del Funcional de la Densitat, els mètodes "ab initio" i el mètode de Car-Parrinello

### Objectius específics:

Entendre el concepte de dinàmica molecular (DM).  
Entendre les principals eines que calen per crear una simulació DM clàssica.  
Estudiar el càlcul de propietats del sistema.  
Veure els principals elements de la simulació de sistemes quàntics.

### Activitats vinculades:

Programació i ús de codis de DM clàssica

### Dedicació: 43h

Grup gran/Teoria: 12h

Grup petit/Laboratori: 8h

Aprenentatge autònom: 23h

## Mètode de Monte Carlo

### Descripció:

La tècnica de la simulació de Monte Carlo es basa en simular la realitat a través de l'estudi d'una mostra estadística, que s'ha generat de forma totalment aleatòria.

Apartats:

1. Simulació de Monte Carlo de sistemes discrets: el model d'Ising
2. Simulació de Monte Carlo de sistemes continus
  - Conceptes bàsics: algorisme de Metropolis. Balanç detallat
  - Col·lectius estadístics: canònics i més enllà
  - Re-escalatge i transicions de fase de tamany finit
  - Mètodes Quàntics de Monte Carlo

### Objectius específics:

Entendre el concepte de simulació de Monte Carlo (MC).  
Entendre les principals eines que calen per generar nombres aleatoris i el mostreig d'un sistema clàssic.  
Estudiar el càlcul de propietats del sistema.

### Activitats vinculades:

Programació i ús de codis de MC clàssic

### Dedicació: 35h

Grup gran/Teoria: 10h

Grup petit/Laboratori: 7h

Aprenentatge autònom: 18h



## Aplicacions de la simulació a sistemes realistes

### Descripció:

Veure com les tècniques descrites als temes anteriors s'apliquen a sistemes amb un alt grau de realisme.

Apartats:

1 Matèria Condensada "dura":

- Nanomaterials: els nanotubs de carboni, el grafè
- Defectes en Sòlids
- Interfases i fluids confinats: porus d'òxid de silici

2. Matèria Condensada "tova":

- Polímers
- Biomembranes: lípids i colesterol en solució iònica en aigua

### Objectius específics:

Desenvolupar simulacions molt sofisticades amb eines específiques.

Anàlitzar resultats microscòpics de propietats estructurals (funcions de distribució, orientacions i enllaços moleculars) i dinàmiques (difusió, espectres).

Visualitzar el sistema i generar animacions.

### Activitats vinculades:

Pràctiques de simulació amb ordinador

**Dedicació:** 64h

Grup gran/Teoria: 6h

Grup petit/Laboratori: 15h

Activitats dirigides: 3h

Aprenentatge autònom: 40h

## SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

Qüestions teòriques: 20% de la nota final.

Pràctiques amb ordinador: 40% de la nota final.

Presentació de treball personal (projecte de codi DM o MC) a classe: 40% de la nota final.

Nota final =  $0.2 \cdot \text{questions} + 0.4 \cdot \text{pràctiques} + 0.4 \cdot \text{projecte}$

Els estudiants que suspenen amb un nota igual o superior a 3 (per un màxim de 2 assignatures) podran optar a re-avaluació, que consistirà en un examen sobre els continguts de l'assignatura. Pràctiques no re-avaluables.

## NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

Presentació de pràctiques i treballs a l'aula mitjançant material informàtic

## BIBLIOGRAFIA

### Bàsica:

- Thijssen, J.M. Computational physics. 2nd. ed. Cambridge University Press, 2007. ISBN 9780521833462.
- Frenkel, D.; Smit, B. Understanding molecular simulation. London: Academic Press, 2002. ISBN 0122673514.
- Gould, H.; Tobochnik, J.; Christian, W. Introduction to Computer Simulation Methods: application to Physical Systems. 3rd. ed. Addison-Wesley, 2006. ISBN 0805377581.

## RECURSOS

### Material informàtic:

- Codis de simulació. Codis de Dinàmica Molecular i Monte Carlo