

230486 - SIMCON - Simulación Computacional de la Materia Condensada

Unidad responsable: 230 - ETSETB - Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Telecomunicación de Barcelona
Unidad que imparte: 748 - FIS - Departamento de Física
Curso: 2019
Titulación: GRADO EN INGENIERÍA FÍSICA (Plan 2011). (Unidad docente Optativa)
Créditos ECTS: 6 Idiomas docencia: Inglés

Profesorado

Responsable: ELVIRA GUARDIA MANUEL
Otros: JORDI MARTÍ RABASSA

Horario de atención

Horario: A convenir

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, Métodos Numéricos y Computacionales (1 i 2)
Co-requisitos: ninguno

Competencias de la titulación a las cuales 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

230486 - SIMCON - Simulación Computacional de la Materia Condensada

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

Dedicación total: 150h	Horas grupo grande:	65h	43.33%
	Horas aprendizaje autónomo:	85h	56.67%

230486 - SIMCON - Simulación Computacional de la Materia Condensada

Contenidos

<p>Modelización y simulación. Introducción.</p>	<p>Dedicación: 8h Grupo grande/Teoría: 3h Aprendizaje autónomo: 5h</p>
<p>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 Actividades vinculadas: Clases magistrales Objetivos específicos: Dar ideas generales del apartado. Introducción a la asignatura</p>	
<p>Dinámica Molecular</p>	<p>Dedicación: 43h Grupo grande/Teoría: 12h Grupo pequeño/Laboratorio: 8h Aprendizaje autónomo: 23h</p>
<p>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 Teoría del Funcional de la Densidad, los métodos "ab initio" y el método de Car-Parrinello Actividades vinculadas: Programación y uso de códigos de DM clásica 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.</p>	



230486 - SIMCON - Simulación Computacional de la Materia Condensada

Método de Monte Carlo

Dedicación: 35h

Grupo grande/Teoría: 10h

Grupo pequeño/Laboratorio: 7h

Aprendizaje autónomo: 18h

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

Actividades vinculadas:

Programación y uso de códigos de MC clásico

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.

230486 - SIMCON - Simulación Computacional de la Materia Condensada

<p>Aplicaciones de la simulación a sistemas realistas</p>	<p>Dedicación: 64h</p> <p>Grupo grande/Teoría: 6h Grupo pequeño/Laboratorio: 15h Actividades dirigidas: 3h Aprendizaje autónomo: 40h</p>
<p>Descripción: Ver como las técnicas descritas en los temas anteriores se aplican a sistemas con un alto grado de realismo.</p> <p>Apartados:</p> <p>1 Materia Condensada "dura":</p> <ul style="list-style-type: none"> - Nanomateriales: los nanotubos de carbono, el grafeno - Defectos en Sólidos - Interfases y fluidos confinados: poros de óxido de silicio <p>2. Materia Condensada "blanda":</p> <ul style="list-style-type: none"> - Polímeros - Biomembranas: lípidos y colesterol en solución iónica en agua <p>Actividades vinculadas: Prácticas de simulación con ordenador</p> <p>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.</p>	

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 = $0.2 \cdot \text{cuestiones} + 0.4 \cdot (\text{nota prácticas}) + 0.4 \cdot \text{proyecto}$

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 de realización de las actividades

Presentación de prácticas y trabajos en el aula mediante material informático

230486 - SIMCON - Simulación Computacional de la Materia Condensada

Bibliografía

Básica:

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.

Thijssen, J.M. Computational physics. 2nd. ed. Cambridge University Press, 2007. ISBN 9780521833462.

Otros recursos:

Material informático

Codis de simulació

Códigos de Dinámica Molecular y Monte Carlo