



POLITÉCNICA

CAMPUS  
DE EXCELENCIA  
INTERNACIONAL

PROCESO DE  
COORDINACIÓN DE LAS  
ENSEÑANZAS PR/CL/001



E.T.S. de Ingenieros  
Industriales

# ANX-PR/CL/001-01

## GUÍA DE APRENDIZAJE

### ASIGNATURA

**53001299 - Computer-aided engineering**

### PLAN DE ESTUDIOS

05AZ - Master Universitario En Ingenieria Industrial

### CURSO ACADÉMICO Y SEMESTRE

2018/19 - Anual

## Índice

---

### Guía de Aprendizaje

1. Datos descriptivos.....	1
2. Profesorado.....	1
3. Conocimientos previos recomendados.....	2
4. Competencias y resultados de aprendizaje.....	2
5. Descripción de la asignatura y temario.....	3
6. Cronograma.....	7
7. Actividades y criterios de evaluación.....	11
8. Recursos didácticos.....	13
9. Otra información.....	13

## 1. Datos descriptivos

---

### 1.1. Datos de la asignatura

<b>Nombre de la asignatura</b>	53001299 - Computer-aided engineering
<b>No de créditos</b>	12 ECTS
<b>Carácter</b>	Optativa
<b>Curso</b>	Primer curso
<b>Semestre</b>	Anual
<b>Período de impartición</b>	Septiembre-Junio
<b>Idioma de impartición</b>	Castellano
<b>Titulación</b>	05AZ - Master universitario en ingeniería industrial
<b>Centro en el que se imparte</b>	05 - Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales
<b>Curso académico</b>	2018-19

## 2. Profesorado

---

### 2.1. Profesorado implicado en la docencia

<b>Nombre</b>	<b>Despacho</b>	<b>Correo electrónico</b>	<b>Horario de tutorías</b> *
Aikaterini Foteinopoulou (Coordinador/a)	Materiales	k.foteinopoulou@upm.es	L - 09:30 - 10:30
Nikolaos Karagiannis	Materiales	n.karayiannis@upm.es	M - 11:00 - 13:00

\* Las horas de tutoría son orientativas y pueden sufrir modificaciones. Se deberá confirmar los horarios de tutorías con el profesorado.

## 3. Conocimientos previos recomendados

---

### 3.1. Asignaturas previas que se recomienda haber cursado

El plan de estudios Master Universitario en Ingeniería Industrial no tiene definidas asignaturas previas recomendadas para esta asignatura.

### 3.2. Otros conocimientos previos recomendados para cursar la asignatura

- Metodos Numericos
- Química Física
- Programación Basica

## 4. Competencias y resultados de aprendizaje

---

### 4.1. Competencias

- (a) - APLICA. Habilidad para aplicar conocimientos científicos, matemáticos y tecnológicos en sistemas relacionados con la práctica de la ingeniería.
- (d) - TRABAJA EN EQUIPO. Habilidad para trabajar en equipos multidisciplinares.
- (e) - RESUELVE. Habilidad para identificar, formular y resolver problemas de ingeniería.
- (f) - ES RESPONSABLE. Comprensión de la responsabilidad ética y profesional.
- (g) - COMUNICA. Habilidad para comunicar eficazmente.

(h) - ENTIENDE LOS IMPACTOS. Educación amplia necesaria para entender el impacto de las soluciones ingenieriles en un contexto social global.

(j) - CONOCE. Conocimiento de los temas contemporáneos.

(l) - ES BILINGÜE. Capacidad de trabajar en un entorno bilingüe (inglés/castellano).

(n) - IDEA. Creatividad

## 4.2. Resultados del aprendizaje

RA114 - El alumno trabaja asumiendo el rol o la especialidad que le ha sido asignado.

RA118 - Ejecutar el procedimiento previsto. Valoración y validación del resultado obtenido.

RA189 - Comprender y desarrollar la relación entre la realidad y los modelos matemáticos computacionales que los simulan.

RA225 - Conocer el contexto multidisciplinar de la ingeniería

RA108 - El alumno analiza los resultados obtenidos del experimento, extrae conclusiones a partir de ellos y formula explicaciones.

RA113 - Cualquier miembro del equipo es capaz de exponer y defender cualquier parte del trabajo realizado.

RA115 - El alumno aporta ideas al grupo y es flexible para adaptar las suyas al grupo (observado en reuniones de los equipos con el profesor).

## 5. Descripción de la asignatura y temario

---

### 5.1. Descripción de la asignatura

El objetivo fundamental del curso es desarrollar la capacidad de diseñar nuevos materiales con funcionalidades avanzadas y con aplicación directa a necesidades sociales específicas. Para conseguirlo, el curso se basa en el uso combinado de herramientas deterministas de simulación y modelización de materiales y por otro lado de métodos heurísticos. El alumno aplicará los conocimientos previamente adquiridos para asimilar las técnicas usadas en la práctica de la ingeniería de modelado y simulación, a fin de diseñar materiales novedosos. Las ventajas de la simulación en el contexto de los materiales son múltiples dado el carácter virtual de los experimentos desarrollados. Esta combinación de lo cuantificable con lo impredecible se aproxima en gran medida a las situaciones reales que se encuentran en el sector industrial y en la ingeniería de nuevos materiales.

## 5.2. Temario de la asignatura

### 1. Introduction

- 1.1. Basic definitions and concepts
- 1.2. Molecular Modeling
- 1.3. Macroscopic Simulations for viscoelastic fluids
- 1.4. Software, Programming Languages, Compilers
- 1.5. General Bibliography
- 1.6. Presentation of different projects
  - 1.6.1. Bibliography of each project, previous works
  - 1.6.2. Analyse through the prespective of modeling

### 2. Interaction Potential

- 2.1. Hard-Sphere Model
- 2.2. Hard-Well Model
- 2.3. Soft-Sphere Model
- 2.4. Lennard-Jones Model
- 2.5. Long-range Interactions
- 2.6. From Atoms to Molecules

### 3. Simulation Cell

- 3.1. System Size
  - 3.1.1. Surface Effects
  - 3.1.2. Periodic Boundary Conditions
  - 3.1.3. Minimum Image Convention
- 3.2. Random Numbers
  - 3.2.1. Generation
  - 3.2.2. Sampling

### 4. Macroscopic Simulation Methods (FEM)

- 4.1. Numerical Methods: Newton -Raphson for a system of equations
- 4.2. Finite Element Method (FEM)

- 4.2.1. General Concept
- 4.2.2. Local Basis Functions
- 4.2.3. Boundary Conditions Classification
- 4.3. Galerkin FEM
  - 4.3.1. Weighted Residuals
  - 4.3.2. Stiffness Matrix
  - 4.3.3. Parent Element- Gauss Integration
- 4.4. Two dimensional FEM problems
  - 4.4.1. Isoparametric Element, Integration
  - 4.4.2. Type of Elements
  - 4.4.3. Boundary Conditions Application
- 4.5. Conformal mapping methods
  - 4.5.1. Moving boundaries problems
  - 4.5.2. Mapping equations
  - 4.5.3. Numerical implementation
- 5. Atomistic Methods I : Monte Carlo
  - 5.1. Numerical Method
  - 5.2. Ensemble Average
  - 5.3. Importance Sampling
  - 5.4. Markov Chain
  - 5.5. Metropolis Monte Carlo
  - 5.6. Molecular Systems
- 6. Atomistic Methods II: Molecular Dynamics
  - 6.1. Equations of Motion
  - 6.2. Time Integration
    - 6.2.1. Gear Predictor-Corrector
  - 6.3. Velocity Components
    - 6.3.1. Gaussian Distribution
  - 6.4. Atomistic Methods II: M.D. Algorithms

6.4.1. Verlet

6.4.2. Leap-Frog Verlet

6.4.3. Velocity Verlet

## 7. Applications

7.1. Entanglements: From believing to seeing

7.1.1. combining atomistic and macroscopic results

7.2. PET barrier properties

7.3. Macroscopic applications for highly viscoelastic fluids

7.3.1. Biofluids: Medical methods of diagnosis

7.3.2. Mechanical properties of synthetic polymers

## 8. Appendix: Fortran

8.1. Fortran Language

8.1.1. Compiler

8.1.2. Basic Commands

8.1.3. Examples

## 6. Cronograma

### 6.1. Cronograma de la asignatura \*

Sem	Actividad presencial en aula	Actividad presencial en laboratorio	Otra actividad presencial	Actividades de evaluación
1	<b>Chapter 1: Introduction</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Computer Practice -Linux commands -compilers</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
2	<b>Introduction to Fortran</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Examples and problems related to coding with Fortran (I)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
3	<b>Programming with Fortran</b> Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas	<b>Examples and problems related to coding with Fortran (II)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Duración: 01:00
4	<b>Interaction Potential</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Interaction Potential: Exercises</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
5	<b>Simulation Cell</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Simulation Cell: Exercises</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
6	<b>Simulation Cell (II)</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral  <b>MODB: Trabajo en equipo</b> Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas	<b>Simulation Cell (II): Exercises</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Duración: 01:00
7	<b>FEM I</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>FEM I</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
8	<b>FEM II</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral  <b>MODB: Trabajo en equipo</b> Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas	<b>FEM II: Prácticas</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
9	<b>Monte Carlo (I)</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Monte Carlo: Algorithm (I)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		

10	<b>Monte Carlo (II)</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Monte Carlo: Algorithm (II)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Duración: 01:00
11	<b>Molecular Dynamics</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Molecular Dynamics: Algorithm (I)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
12	<b>Molecular Simulation: Applications (I)</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Molecular Simulation: Applications (I)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
13	<b>Macroscopic viscoelastic flow applications (I)</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Macroscopic viscoelastic flow applications (I)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Duración: 01:00
14	<b>Molecular Simulation: Applications (II)</b> Duración: 02:00 AC: Actividad del tipo Acciones Cooperativas  <b>MODB: Comunicación</b> Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas	<b>Molecular Simulation: Applications (II)</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
15	<b>Macroscopic viscoelastic flow applications (II): Macroscopic properties from atomistic results</b> Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Macroscopic viscoelastic flow applications (II): Macroscopic properties from atomistic results</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación continua Duración: 01:00
16		<b>MODB: Comunicación</b> Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas  <b>Application: The Ising Model</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		<b>Presentation of the project: goals and milestones</b> PG: Técnica del tipo Presentación en Grupo Evaluación continua Duración: 00:00
17		<b>Applying the techniques in advancing the project</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
18		<b>Applying the techniques in advancing the project</b> Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
19		<b>Applying the techniques in advancing the project</b> Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		

20		Applying the techniques in advancing the project Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
21		Applying the techniques in advancing the project Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
22	MOD B: Técnicas de Creatividad Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas	Applying the techniques in advancing the project Duración: 03:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
23		Applying the techniques in advancing the project Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
24	MOD B: Técnicas de Creatividad Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas	Applying the techniques in advancing the project Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
25		Applying the techniques in advancing the project Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
26		Applying the techniques in advancing the project Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
27		Applying the techniques in advancing the project Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
28		Applying the techniques in advancing the project Duración: 02:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
29		MODB: Comunicación Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas		Final presentation of the results obtained PG: Técnica del tipo Presentación en Grupo Evaluación continua y sólo prueba final Duración: 01:00
30				
31				
32				examination through a power point presentation and a series of questions regarding the project solution participation in 'Acto final' TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación continua Duración: 03:00

Las horas de actividades formativas no presenciales son aquellas que el estudiante debe dedicar al estudio o al trabajo personal.

Para el cálculo de los valores totales, se estima que por cada crédito ECTS el alumno dedicará dependiendo del plan de estudios, entre 26 y 27 horas de trabajo presencial y no presencial.

\* El cronograma sigue una planificación teórica de la asignatura y puede sufrir modificaciones durante el curso.

## 7. Actividades y criterios de evaluación

### 7.1. Actividades de evaluación de la asignatura

#### 7.1.1. Evaluación continua

Sem.	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
3	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	
6	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	10%	/ 10	
10	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	20%	/ 10	
13	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	%	/ 10	
15	Trabajo en clase y en casa para resolver problemas relativas con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	30%	/ 10	
16	Presentation of the project: goals and milestones	PG: Técnica del tipo Presentación en Grupo	Presencial	00:00	%	/ 10	(d) (l) (g) (h) (a) (e) (j)
29	Final presentation of the results obtained	PG: Técnica del tipo Presentación en Grupo	Presencial	01:00	%	/ 10	(d) (l) (g) (h) (f) (a) (e) (j)

32	examination through a power point presentation and a series of questions regarding the project solution participation in 'Acto final'	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	Presencial	03:00	30%	/ 10	
----	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------------------------------	------------	-------	-----	------	--

### 7.1.2. Evaluación sólo prueba final

Sem	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
29	Final presentation of the results obtained	PG: Técnica del tipo Presentación en Grupo	Presencial	01:00	%	/ 10	(d) (l) (g) (h) (f) (a) (e) (j)

### 7.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

No se ha definido la evaluación extraordinaria.

## 7.2. Criterios de evaluación

1. Course in English
2. Applications related to present industrial problems (Horizon 2020 etc)
3. Learning to solve existing problems of chemical engineering with novel methods
4. Learning of state-of-the-art computational techniques
5. Learning to work in an international environment
6. Hierarchical approach to problem solving
7. Multidisciplinary thematic area

## 8. Recursos didácticos

---

### 8.1. Recursos didácticos de la asignatura

Nombre	Tipo	Observaciones
Faires and Burden, Numerical Methods (2013)	Bibliografía	Numerical Methods
scientific articles	Bibliografía	scientific articles on Monte Carlo and Molecular Dynamics
scientific articles	Bibliografía	Articles related to applications (polymer rheology, barrier properties of materials, ets)
Mandl, Statistical Physics (1978)	Bibliografía	Statistical Physics
Allen and Tildesley, Computer Simulation of Liquids (2003)	Bibliografía	Molecular Simulation
Fortran Compiler	Equipamiento	Fortran Compiler
V.M.D	Equipamiento	VMD: visualization program

## 9. Otra información

---

### 9.1. Otra información sobre la asignatura

Idioma principal del curso: Inglés / main language of the course: English