



UNIVERSIDAD
POLITÉCNICA
DE MADRID

PROCESO DE
COORDINACIÓN DE LAS
ENSEÑANZAS PR/CL/001



E.T.S. de Ing. de Caminos
Canales y P.

ANX-PR/CL/001-01

GUÍA DE APRENDIZAJE

ASIGNATURA

43000602 - Modelling And Simulation In Materials Science And

PLAN DE ESTUDIOS

04AN - Master Universitario En Ingeniería De Materiales

CURSO ACADÉMICO Y SEMESTRE

2025/26 - Primer semestre

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.....	4
6. Cronograma.....	6
7. Actividades y criterios de evaluación.....	9
8. Recursos didácticos.....	12
9. Otra información.....	13

1. Datos descriptivos

1.1. Datos de la asignatura

Nombre de la asignatura	43000602 - Modelling And Simulation In Materials Science And
No de créditos	6 ECTS
Carácter	Obligatoria
Curso	Primer curso
Semestre	Primer semestre
Período de impartición	Septiembre-Enero
Idioma de impartición	Inglés/Castellano
Titulación	04AN - Master Universitario en Ingeniería de Materiales
Centro responsable de la titulación	04 - E.T.S. De Ing. De Caminos Canales Y P.
Curso académico	2025-26

2. Profesorado

2.1. Profesorado implicado en la docencia

Nombre	Despacho	Correo electrónico	Horario de tutorías *
Alvaro Ridruejo Rodriguez		alvaro.ridruejo@upm.es	V - 17:00 - 18:00
Carlos Daniel Gonzalez Martinez		c.gonzalez@upm.es	V - 17:00 - 18:00
Fco. Javier Llorca Martinez		javier.llorca@upm.es	V - 17:00 - 18:00
Javier Segurado Escudero (Coordinador/a)		javier.segurado@upm.es	- -

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

2.3. Profesorado externo

Nombre	Correo electrónico	Centro de procedencia
Jaime Otero	jaime.otero@upm.es	ETSI Telecomunicaciones
Damien Turret	damien.turret@imdea.org	IMDEA Materials Institute

3. Conocimientos previos recomendados

3.1. Asignaturas previas que se recomienda haber cursado

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

3.2. Otros conocimientos previos recomendados para cursar la asignatura

- Computer Science, Mathematical, Physical and Mechanical foundations of Materials Science, Thermodynamics, Mechanics of Materials

4. Competencias y resultados de aprendizaje

4.1. Competencias

CE1 - Capacidad para aplicar los fundamentos científicos del comportamiento físico y químico de los materiales para relacionar causalmente sus propiedades fundamentales físicas y químicas con su comportamiento macroscópico y el de los productos con ellos realizados / Ability to apply the scientific foundations of the physical and chemical behavior of materials to correlate their fundamental physical and chemical properties with their macroscopic behavior and that of the products made with them.

CE2 - Uso de equipos y técnicas experimentales de caracterización de materiales (micro y macroestructura, comportamientos mecánico, eléctrico, y óptico) para identificar y analizar los diversos tipos de materiales / Use of equipment and experimental techniques for the characterization of materials (micro and macrostructure, mechanical, electrical, and optical behavior) to identify and analyze the various types of materials.

CE4 - Autonomía para adquirir, analizar, actualizar y aplicar nuevos conocimientos, modelos y técnicas experimentales y numéricas en relación con la composición y estructura de los materiales, su caracterización física y química, sus procesos de fabricación, su utilización y aplicación científica y tecnológica, y su reciclado, reutilización y eliminación / Autonomy to acquire, analyze, update and apply new knowledge, models and

experimental and numerical techniques related to the composition and structure of materials, their physical and chemical characterization, their manufacturing processes, their use and scientific and technological application, and their recycling, reuse and disposal

CE7 - Manejo de herramientas de simulación numérica para diseño y análisis de materiales, desde la escala microscópica a la macroscópica / Management of numerical simulation tools for design and analysis of materials, from the microscopic to the macroscopic scale

CG1 - Uso de la lengua inglesa: Los alumnos son capaces de transmitir conocimientos y expresar ideas y argumentos de manera clara, rigurosa y convincente, tanto de forma oral como escrita, adaptándose a las características de la situación y de la audiencia / Use of the English Language: Students are able to transmit knowledge and express ideas and arguments in a clear, rigorous and convincing manner, both orally and in writing, adapting to the characteristics of the situation and the audience .

CG4 - Creatividad: Los alumnos son capaces de resolver de forma nueva, original y aportando valor, situaciones o problemas en el ámbito de la ingeniería de materiales / Creativity: Students are able to solve situations or problems in the field of materials engineering in a new, original way and adding value.

CG7 - Uso de las TIC: Los alumnos son capaces de aplicar conocimientos tecnológicos necesarios de manera que les permitan desenvolverse cómodamente y afrontar los retos que la sociedad les va a imponer en su quehacer profesional empleando la informática / Use of ICT: Students are able to apply the necessary technological knowledge in a way that allows them to function comfortably and face the challenges that society is going to impose on them in their professional work using computers.

CG8 - Resolución de problemas: Los estudiantes son capaces de reconocer, describir, organizar y analizar los elementos constitutivos de un problema para idear estrategias que permitan obtener, de forma razonada, una solución contrastada y acorde a ciertos criterios preestablecidos / Problem solving: Students are able to recognize, describe, organize and analyze the constitutive elements of a problem to devise strategies that allow obtaining, in a reasoned way, a contrasting solution and according to certain pre-established criteria.

4.2. Resultados del aprendizaje

RA27 - Conocer, comprender y saber aplicar los fundamentos científicos del comportamiento de los materiales

RA25 - Conocer, comprender y saber aplicar los fundamentos científicos del comportamiento de los materiales y la interrelación entre su estructura, propiedades, procesado y aplicaciones

RA26 - Saber utilizar y aplicar las técnicas y modelos matemáticos de simulación para predecir el comportamiento y evolución de los materiales. Saber evaluar su seguridad, durabilidad e integridad estructural y la de los componentes fabricados con ellos

RA24 - Saber utilizar y aplicar las técnicas y modelos matemáticos de simulación para predecir el comportamiento y evolución de los materiales, en sus aspectos mecánico, electrónico, químico o biológico

5. Descripción de la asignatura y temario

5.1. Descripción de la asignatura

The objective of this subject is twofold:

1) To complete and uniform the level of the students in scientific programming, applied mathematics and simulation techniques. The students starting the master have different background, some of them have never study and use any programming language, while other are proficient in the use of programming and modeling tools as finite elements, etc. This subject is aimed at introducing these concepts to novel students and settle and widen them for the students with experience.

2) Provide an overview of the main simulations techniques and modelling strategies in Materials Science and Engineering.

The subject will cover a first part about methodology. This part consists of an introduction to programming in which a modern and open interpreted language, Python, will be introduced. This tool is highly demanded in the industry and has been chosen for its generality as a good tool for numerical methods but widely applied to other areas, specially data science and machine learning. Then, different areas of applied maths will be reviewed and will show the methods and algorithms available to solve problems in those areas. Algebraical system of equations, ordinary differential equations, optimization and partial differential equations are covered.

The second part of the subject cover different modeling and simulation techniques widely used in Materials Engineering, covering: first principles simulations, computational thermodynamics, homogenization theory and an introduction to machine learning

The subject is thought to be practical and the students will use their own laptop during the classes.

5.2. Temario de la asignatura

1. Introduction to materials modelling and simulation. Contents and evaluation.
2. Introduction to scientific programming: python
3. Numerical methods for model implementation
4. Fundamentals of first principles calculations. The DFT method. Practical information about crystallography and geometry optimization. Quantum Espresso. Examples of applications.
5. Computational thermodynamics. Thermodynamics and phase diagrams. Thermodynamic model and parameters. Calculation of phase diagrams. Case studies. Phase field modelling
6. Homogenization theory. Thermo-elastic constants of heterogeneous solids. Eshelby's tensor. Mean-field approximations for finite concentrations. Extension to the nonlinear regime
7. Introduction to Machine Learning
8. Integrated Computational Materials Engineering

6. Cronograma

6.1. Cronograma de la asignatura *

Sem	Actividad tipo 1	Actividad tipo 2	Tele-enseñanza	Actividades de evaluación
1	<p>T1: Introduction Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T2: Introduction to scientific programming: python Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>			
2	<p>T2: Introduction to scientific programming: python Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p> <p>T3: Numerical methods Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>			
3	<p>T3: Numerical methods Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T3: Numerical methods Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			
4	<p>T3: Numerical methods Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T3: Numerical methods Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>			
5	<p>T3: Numerical methods Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T4: Fundamentals of first principles calculations Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>			
6	<p>T4: Fundamentals of first principles calculations Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T4: Fundamentals of first principles calculations Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			<p>PROBLEM 1: Numerical methods TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva y Global No presencial Duración: 00:00</p>

7	<p>T4: Fundamentals of first principles calculations Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T4: Fundamentals of first principles calculations Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			
8	<p>T4: Fundamentals of first principles calculations Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T5: Thermodynamics simulations Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>			
9	<p>T5: Thermodynamics simulations Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T5: Thermodynamics simulations Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			<p>PROBLEM 2: Ab initio techniques TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva y Global No presencial Duración: 00:00</p>
10	<p>T5: Thermodynamics simulations Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T5: Thermodynamics simulations Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			
11	<p>T5: Thermodynamics simulations Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T6: Micromechanics Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>			
12	<p>T6: Micromechanics Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T6: Micromechanics Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			<p>PROBLEM 3: Thermodynamical simulations TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva y Global No presencial Duración: 00:00</p>
13	<p>T6: Micromechanics Duración: 03:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T6: Micromechanics Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			
14	<p>T7: Machine Learning Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T7: Machine Learning Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			

15	<p>T8: Multiscale and Multiphysical approaches Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p> <p>T8: Multiscale and Multiphysical approaches Duración: 02:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>			<p>PROBLEM 4: Micromechanics TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva y Global No presencial Duración: 00:00</p>
16				
17				<p>FINAL EXAM: ORAL PRESENTATION OF A PROBLEM PI: Técnica del tipo Presentación Individual Evaluación Progresiva y Global Presencial Duración: 01:00</p>

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.

7. Actividades y criterios de evaluación

7.1. Actividades de evaluación de la asignatura

7.1.1. Evaluación (progresiva)

Sem.	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
6	PROBLEM 1: Numerical methods	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	12.5%	/ 10	
9	PROBLEM 2: Ab initio techniques	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	12.5%	/ 10	
12	PROBLEM 3: Thermodynamical simulations	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	12.5%	/ 10	
15	PROBLEM 4: Micromechanics	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	12.5%	/ 10	
17	FINAL EXAM: ORAL PRESENTATION OF A PROBLEM	PI: Técnica del tipo Presentación Individual	Presencial	01:00	50%	/ 10	CE1 CG7 CG1 CE4 CE2 CE7 CG8 CG4

7.1.2. Prueba evaluación global

Sem	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
6	PROBLEM 1: Numerical methods	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	12.5%	/ 10	

9	PROBLEM 2: Ab initio techniques	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	12.5%	/ 10	
12	PROBLEM 3: Thermodynamical simulations	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	12.5%	/ 10	
15	PROBLEM 4: Micromechanics	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	No Presencial	00:00	12.5%	/ 10	
17	FINAL EXAM: ORAL PRESENTATION OF A PROBLEM	PI: Técnica del tipo Presentación Individual	Presencial	01:00	50%	/ 10	CE1 CG7 CG1 CE4 CE2 CE7 CG8 CG4

7.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

No se ha definido la evaluación extraordinaria.

7.2. Criterios de evaluación

CONTINUOUS AND GLOBAL EVALUATION:

A) Individual exercises

- Each student will have to carry out a practical exercise corresponding to four parts of the subject:

-Numerical methods

-Ab initio techniques

-computational thermodynamics

-Homogenization theory.

-The result will be a short presentation for each problem detailing the simulation strategy, results and discussion will have to be submitted by e-mail (pdf format)

-Reports are mandatory to have access to the final exam. The weight of all the reports in 50%

If the reports have not been submitted, the student cannot attend the final oral exam.

B) Individual presentation

- Each student will present one of the exercises as an oral presentation with a discussion with the evaluators

8. Recursos didácticos

8.1. Recursos didácticos de la asignatura

Nombre	Tipo	Observaciones
Python Scripting for Computational Science, Hans Petter Langtangen, Python Scripting for Computational Science, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008	Bibliografía	
Introduction to computational Materials Science: fundamentals to applications?, Richard LeSar, Cambridge University Press, 2013.	Bibliografía	
Numerical modeling in Materials Science and Engineering? Michel Rappaz, Michel Bellet, Michel Deville, Springer, 2002.	Bibliografía	
Understanding molecular dynamics simulation. From algorithms to applications?, Daan Frenkel and Berend Smit, Academic Press, 2nd edition 2002.	Bibliografía	
A short introduction to basic aspects of continuum micromechanics. Helmut J. Böhm, ILSB report 206, Vienna University of Technology, 2013.	Bibliografía	
Notes in Moodle	Recursos web	
Partial Differential Equations and the Finite Element Method, P. Solin, Partial Differential Equations and the Finite Element Method, John Wiley & Sons, 2004.	Bibliografía	

9. Otra información

9.1. Otra información sobre la asignatura