



UNIVERSIDAD  
POLITÉCNICA  
DE MADRID

PROCESO DE  
COORDINACIÓN DE LAS  
ENSEÑANZAS PR/CL/001



E.T.S. de Ingenieros  
Industriales

# ANX-PR/CL/001-01

## GUÍA DE APRENDIZAJE

### ASIGNATURA

**55001092 - Modelos Matemáticos En Ingeniería De Materiales, Q**

### PLAN DE ESTUDIOS

05TI - Grado En Ingeniería En Tecnologías Industriales

### CURSO ACADÉMICO Y SEMESTRE

2025/26 - Segundo 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.....	3
6. Cronograma.....	8
7. Actividades y criterios de evaluación.....	12
8. Recursos didácticos.....	15
9. Otra información.....	16

## 1. Datos descriptivos

### 1.1. Datos de la asignatura

<b>Nombre de la asignatura</b>	55001092 - Modelos Matemáticos en Ingeniería de Materiales, Q
<b>No de créditos</b>	3 ECTS
<b>Carácter</b>	Optativa
<b>Curso</b>	Cuarto curso
<b>Semestre</b>	Octavo semestre
<b>Período de impartición</b>	Febrero-Junio
<b>Idioma de impartición</b>	Castellano
<b>Titulación</b>	05TI - Grado en Ingeniería en Tecnologías Industriales
<b>Centro responsable de la titulación</b>	05 - E.T.S. De Ingenieros Industriales
<b>Curso académico</b>	2025-26

## 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	Materiales	k.foteinopoulou@upm.es	L - 09:30 - 10:30
Nikolaos Karagiannis (Coordinador/a)	Materiales	n.karayiannis@upm.es	M - 11:00 - 13:00
Daniel Martinez Fernandez	materiales	daniel.martinez.fernandez@ upm.es	J - 10:30 - 12:00

\* 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

- Estructura Y Propiedades De Materiales No Metálico
- Fundamentos De Programacion

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

El plan de estudios Grado en Ingeniería en Tecnologías Industriales no tiene definidos otros conocimientos previos para esta asignatura.

## 4. Competencias y resultados de aprendizaje

---

### 4.1. Competencias

CE23I - Conocimiento y capacidad para el uso en la práctica de las herramientas de optimización y simulación.

CG1 - Conocer y aplicar conocimientos de ciencias y tecnologías básicas a la práctica de la Ingeniería Industrial.

CG10 - Capacidad para generar nuevas ideas (Creatividad).

CG3 - Aplicar los conocimientos adquiridos para identificar, formular y resolver problemas dentro de contextos amplios y multidisciplinarios, siendo capaces de integrar conocimientos, trabajando en equipos multidisciplinares.

## 4.2. Resultados del aprendizaje

RA12 - Uso del computador como herramienta de diseño.

RA121 - Formular las relaciones entre fuerzas aplicadas y el movimiento de un sistema desde las perspectivas vectorial, lagrangiana y hamiltoniana.

RA125 - Interpretar el funcionamiento del código fuente de un programa

RA134 - Trabajo en grupo

RA199 - Analizar los resultados de simulaciones y conocer las posibilidades y limitaciones de éstas.

RA206 - Capacidad de aplicar convenciones lingüísticas inglesas en contextos técnicos.

RA614 - diseñar algoritmos Monte Carlo para sistemas atómicos y/o de partículas

RA615 - diseñar una simulación molecular

RA124 - Describir los elementos básicos de programación

RA207 - Capacidad de usar estructuras equivalentes entre inglés y español para comunicarse.

RA127 - Codificar un algoritmo con un lenguaje de programación

RA126 - Diseñar algoritmos científicos

## 5. Descripción de la asignatura y temario

---

### 5.1. Descripción de la asignatura

El curso se centra en el uso de la simulación molecular para aplicaciones modernas relacionadas con la ingeniería química.

Se espera que los estudiantes:

) aprendan a trabajar en el sistema operativo Linux, que incluye secuencias de comandos (scripting), acceso remoto, envío de trabajos y compilación de códigos de programación.

) aprendan lenguaje de programación de alto nivel (principalmente fortran), para escribir, depurar (debug) y

ejecutar algoritmos avanzados.

) entiendan los fundamentos de las simulaciones por ordenadores con un enfoque especial en conceptos como celda de simulación, convención de imagen mínima, condiciones de contorno periódicas, números aleatorios.

) obtener conocimientos prácticos y fundamentales de física estadística relacionados con la simulación molecular.

) aprender los métodos Monte Carlo (MC) y Molecular Dynamics (MD) para la simulación de sistemas de muchos cuerpos (many-body systems).

) aprender a analizar los resultados de la simulación (procesamiento posterior a la simulación).

) obtener conocimientos prácticos sobre software de visualización de última generación (énfasis en VMD) para la producción de imágenes y videos interactivos de alta calidad.

La evaluación progresiva implica la finalización de un conjunto de trabajos en clase (a veces en equipo, classworks/teamworks), tareas para casa (homeworks) y un proyecto final. Ambas partes de evaluación no son recuperables.

La asignatura se imparte completamente en inglés. Se considera esencial para proyectos de master (TFM) en el Laboratorio de Simulación de Materiales (LSM).

## 5.2. Temario de la asignatura

1. Introduction (Introducción)
  - 1.1. Basic Definitions (Definiciones Basicas)
  - 1.2. Molecular Modeling (Modelado Molecular)
  - 1.3. Molecular Simulation (Simulación Molecular)
  - 1.4. Software, Programming Languages, Compilers (Software, Lenguajes de Programación, Compiladores)
  - 1.5. Bibliography (Bibliografía)
2. Introduction to the Linux Operating System (Introducción al Sistema Operativo Linux)
  - 2.1. The SSH and SFTP Protocols (Los Protocolos SSH y SFTP)
  - 2.2. Important Linux Commands (Comandos Importantes de Linux)
  - 2.3. Scripts and Batch Jobs (Scripts y Batch Jobs)
3. Appendix: Fortran (Apéndice: Fortran)
  - 3.1. The Fortran Programming Language (El Lenguaje de Programación Fortran)
    - 3.1.1. Compilers - Windows and Linux OS (Compiladores (SO Windows y Linux))
    - 3.1.2. Basic Commands (Comandos Básicos)
    - 3.1.3. Examples: Scientific Problems (Ejemplos: Problemas Científicos)
4. Interaction Potential (Potencial de Interacción)
  - 4.1. Hard-Sphere Model (Modelo de Esferas Duras)
  - 4.2. Square-Well Model (Modelo de Pozo Cuadrado)
  - 4.3. Soft-Sphere Model (Modelo de Esferas Blandas)
  - 4.4. Lennard-Jones Model (Modelo Lennard-Jones)
  - 4.5. Long-range Interactions (Interacciones de Largo Alcance)
  - 4.6. From Atoms to Molecules (De Átomos a Moléculas)
5. Simulation Cell (Celda de Simulación)
  - 5.1. System Size
    - 5.1.1. Surface Effects
    - 5.1.2. Periodic Boundary Conditions
    - 5.1.3. Minimum Image Convention

## 5.2. Random Numbers

### 5.2.1. Generation

### 5.2.2. Sampling

## 6. Statistical Physics (Física Estadística)

### 6.1. State of Equilibrium

### 6.2. Entropy

### 6.3. Microstates and Macrostates

### 6.4. Phase Space

### 6.5. Statistical Ensemble

## 7. Monte Carlo (Monte Carlo)

### 7.1. Numerical Method

### 7.2. Ensemble Average

### 7.3. Importance Sampling

### 7.4. Markov Chain

### 7.5. Metropolis Monte Carlo

### 7.6. Molecular Systems

## 8. Molecular Dynamics (Dinámica Molecular)

### 8.1. Equations of Motion

### 8.2. Time Integration

#### 8.2.1. Gear Predictor-Corrector

### 8.3. Velocity Components

#### 8.3.1. Gaussian Distribution

### 8.4. M.D. Algorithms

#### 8.4.1. Verlet

#### 8.4.2. Leap-Frog Verlet

#### 8.4.3. Velocity Verlet

## 9. Post-Simulation Analysis (Análisis Posterior a la Simulación)

### 9.1. Standard Post-Processing (Posprocesamiento Estándar)

### 9.2. Visualization of System Configurations (Visualización de Configuraciones del Sistema)

## 10. Applications in Research (Aplicaciones en Investigación)

10.1. Entanglements in Polymers: From Believing to Observing (Enredos en Polímeros: de Creer a Observar)

10.2. Prediction of Magnetization through Monte Carlo Simulations (Predicción de Magnetización a través de Simulaciones Monte Carlo)

10.3. Simu-D: A Simulator-Descriptor Software (Simu-D: un Software Simulador-Descriptor)

## 6. Cronograma

### 6.1. Cronograma de la asignatura \*

Sem	Actividad tipo 1	Actividad tipo 2	Tele-enseñanza	Actividades de evaluación
1	<b>Chapter 1: Basic Concepts</b> Duración: 01:30 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Computer Practice</b> Duración: 00:15 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio		
2	<b>Introduction to Linux</b> Duración: 00:45 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Examples and problems related to working, compiling and executing jobs in linux.</b> Duración: 00:45 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio  <b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:15 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		<b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:30  <b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00
3	<b>Programming with Fortran</b> Duración: 00:30 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas	<b>Examples and problems related to coding with Fortran</b> Duración: 00:45 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio  <b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:15 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		<b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:30  <b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00
4	<b>Interaccion Potential (I)</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	<b>Interaccion Potential: Exercises</b> Duración: 00:40 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio  <b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:23 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		<b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:45  <b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00

5	<p><b>Interaction Potential (II)</b> Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>	<p><b>Interaction Potential: Exercises (II)</b> Duración: 00:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p> <p><b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00</p>
6	<p><b>Simulation Cell (I)</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>	<p><b>Simulation Cell (I)</b> Duración: 00:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p> <p><b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00</p>
7	<p><b>Simulation Cell (II)</b> Duración: 01:00 PR: Actividad del tipo Clase de Problemas</p>	<p><b>Simulation Cell (II)</b> Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p>		
8	<p><b>Statistical Physics</b> Duración: 03:30 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>	<p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:30</p>
9	<p><b>Monte Carlo (I)</b> Duración: 01:45 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>	<p><b>Monte Carlo: Algorithm (I)</b> Duración: 00:27 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:28 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 01:00</p> <p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:45</p>
10		<p><b>Monte Carlo: Algorithm (I)</b> Duración: 01:00 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 01:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 02:00</p> <p><b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 02:00</p>

11	<p><b>Molecular Dynamics</b> Duración: 01:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral</p>	<p><b>Molecular Dynamics: Algorithm (I)</b> Duración: 00:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 02:00</p> <p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p>
12		<p><b>Post-Simulation Analysis Learning the VMD visualization software.</b> Duración: 01:45 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:15 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso</b> TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo Evaluación Progresiva No presencial Duración: 02:00</p> <p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 00:30</p>
13		<p><b>Application (I): The Ising Model</b> Duración: 01:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p> <p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 02:00</p>
14		<p><b>Applications (II): Entanglements in Polymers</b> Duración: 01:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p>
15		<p><b>Applications (III): Phase Behavior of Hard Spheres</b> Duración: 01:30 PL: Actividad del tipo Prácticas de Laboratorio</p> <p><b>Trabajo en clase: aplicacion</b> Duración: 00:30 OT: Otras actividades formativas / Evaluación</p>		<p><b>Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso</b> TI: Técnica del tipo Trabajo Individual Evaluación Progresiva Presencial Duración: 01:00</p>

16				
17				<b>Proyecto Final</b> EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación Progresiva Presencial Duración: 03:00

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
2	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	Presencial	00:30	2.5%	/ 10	CG3
2	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	CG1
3	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	00:30	2.5%	/ 10	CE23I
3	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	CG3
4	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	Presencial	00:45	2.5%	/ 10	CG10
4	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
5	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	Presencial	01:00	5%	/ 10	
5	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	5%	/ 10	

6	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	5%	/ 10	
6	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
8	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	00:30	2.5%	/ 10	
9	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
9	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	00:45	2.5%	/ 10	
10	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	02:00	5%	/ 10	
10	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	02:00	5%	/ 10	
11	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	5%	/ 10	
11	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	02:00	5%	/ 10	
12	Trabajo en casa para resolver problemas relativos con el curso	TG: Técnica del tipo Trabajo en Grupo	No Presencial	02:00	5%	/ 10	
12	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	00:30	5%	/ 10	
13	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	%	/ 10	

13	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	02:00	5%	/ 10	
14	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
15	Trabajo en clase para resolver problemas relativos con el curso	TI: Técnica del tipo Trabajo Individual	Presencial	01:00	2.5%	/ 10	
17	Proyecto Final	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	03:00	20%	/ 10	CG10 CG3 CG1 CE23I

### 7.1.2. Prueba evaluación global

No se ha definido la evaluación sólo por prueba final.

### 7.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

No se ha definido la evaluación extraordinaria.

## 7.2. Criterios de evaluación

1. La asignatura se imparte en Inglés
2. Aplicaciones relacionadas con los problemas industriales actuales al nivel molecular - atómico
3. Aprendizaje de técnicas computacionales de última generación
4. Aprender a trabajar en un entorno internacional

Se selecciona la evaluación progresiva como único método de evaluación.

La evaluación se compone de trabajos en clase (classworks) en cada sesión que NO son recuperables. Estos van acompañados de un conjunto de tareas para casa (homeworks).

Siempre que sea posible los trabajos de clase corresponden a trabajos en equipo (teamworks).

Un proyecto final tiene un peso del 30% y las colecciones de trabajos de clase y tareas tienen un peso del 70%.

## 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
Fortran Compiler	Equipamiento	Fortran Compiler
V.M.D	Equipamiento	VMD: visualization program
Allen and Tildesley, Computer Simulation of Liquids, 2nd edition (2017)	Bibliografía	version nueva (2017) del libro
D. Frenkel and B. Smit, Introduction to Molecular Simulation: From Fundamentals to Applications, 2nd edition (2003)	Bibliografía	

## 9. Otra información

---

### 9.1. Otra información sobre la asignatura

Idioma del curso: **Inglés** / language of the course: **English**