



DATOS IDENTIFICATIVOS

Simulación computacional

Asignatura	Simulación computacional			
Código	V11M188V01107			
Titulación	Máster Universitario en Nanociencia y Nanotecnología			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	3	OP	1	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego Inglés			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Pérez Juste, Ignacio Mandado Alonso, Marcos			
Profesorado	Hervés Beloso, Juan Pablo Mandado Alonso, Marcos Pérez Juste, Ignacio			
Correo-e	mandado@uvigo.es uviqipj@uvigo.es			
Web	http://www.usc.gal/gl/estudios/masteres/ciencias-saude/master-universitario-nanociencia-nanotecnologia/20212022/simulacion-computacional-17797-17029-3-98997			
Descripción general	Introducción al estado del arte de las técnicas de simulación computacional en nanomateriales, a las técnicas de modelización y simulación, así como a los principales tipos de recursos computacionales			

Resultados de Formación y Aprendizaje

Código

Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje
------------------------------------	---------------------------------------

Contenidos

Tema

- Introducción a las técnicas de simulación numérica
- Modelos clásicos, semi-clásicos y cuánticos
- Técnicas de simulación Monte-Carlo
- Herramientas de simulación
- Técnicas de computación HPC y HTC

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	10	20	30
Seminario	8	24	32
Prácticas de laboratorio	6	7	13
Examen de preguntas objetivas	0	0	0

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Lección magistral	Exposición por parte del profesor de los contenidos sobre la materia objeto de estudio, bases teóricas y/o directrices de un trabajo, ejercicio que el/la estudiante tiene que desarrollar

Seminario	Actividad enfocada al trabajo sobre un tema específico, que permite ahondar o complementar los contenidos de la materia. Se pueden emplear como complemento de las clases teóricas.
Prácticas de laboratorio	Actividades de aplicación de los conocimientos a situaciones concretas y de adquisición de habilidades básicas y procedimentales relacionadas con la materia objeto de estudio. Se desarrollan en espacios especiales con equipamiento especializado (laboratorios, aulas informáticas, etc).

Atención personalizada

Evaluación

	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
Seminario	- Participación activa en los seminarios, clases prácticas y/o presentaciones orales (40% de la calificación). Se evaluará la participación activa en seminarios y prácticas de laboratorio. Esta evaluación se llevará a cabo mediante la resolución de cuestiones y problemas planteados en clase, la presentación de trabajos, la realización de tests y/o la intervención en los debates que puedan surgir.	40	
Examen de preguntas objetivas	- Examen escrito sobre contenidos de la materia (60% de la calificación). El examen de la asignatura consistirá en preguntas de respuesta corta o tipo test y/o resolución de problemas.	60	

Otros comentarios sobre la Evaluación

Fuentes de información

Bibliografía Básica

J. M. Thijssen, **Computational Physics**, Cambridge University Press, 1999

R. M. Martin, **Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods**, Cambridge University Press, 2004

O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, J.Z. Zhu, **The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals**, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005

P. Pacheco, **An Introduction to Parallel Programming**, Morgan Kaufmann Publishers, 2011

C. J. Cramer, **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**, 2nd, Wiley, 2005

Bibliografía Complementaria

Recomendaciones