

## Modelado Computacional en Ciencia y Tecnología de Materiales Curso de Posgrado

**Docente responsable:** Dr. Alejandro D. Rey (Universidad McGill, Montreal, Canada)

**Fecha:** inicio 23 de noviembre, duración 1 mes

**Modalidad:** Curso presencial

### **Descripción:**

El objetivo principal del curso es introducir al alumno al modelado computacional en ciencia e ingeniería de materiales. Se presentarán algunos principios y modelos básicos concernientes a la termodinámica, las transiciones de fases y la caracterización estructural de materiales, así como un panorama actualizado de las técnicas disponibles para la resolución numérica.

### **Programa:**

1. COMPUTATIONAL METHODS: Linear and non-linear systems, finite elements and finite differences, tessellations.
2. MATERIALS STRUCTURAL DESCRIPTION: Microstructure, order parameters, orientation distribution functions, correlation functions, structure factor, structure evolution.
3. COMPUTATIONAL THERMODYNAMICS, PHASE TRANSFORMATIONS, AND PHASE TRANSITIONS: Phase diagrams, kinetics of phase transformations, conserved and non-conserved phase transformations.
4. MONTE CARLO POTTS METHODS: Ising model, Q-Potts method, speed-up algorithm, applications to polymers and soft matter.
5. CELLULAR AUTOMATA: Introduction, application to material science and fluid mechanics, re-crystallization.
6. PHASE FIELD MODELS: Evolution of multiphase and multicomponent systems, external fields, strain effects.
7. LANDAU- DE GENNES MODELS: Soft matter, liquid crystals, interfaces, shape equations, membranes, and filaments.

### **Evaluación:**

Los contenidos del curso se evaluarán mediante dos exámenes y un proyecto especial

### **Bibliografía:**

Koenraad George, Frans Janssens, Dierk Raabe, Ernest Kozeschnik, Mark A Miodownik, Britta Nestler, "Computational Materials Engineering: An Introduction to Microstructure Evolution", Academic Press, 2007.

O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor "The Finite Element Method Set", Butterworth-Heinemann, 2005