



Becas colaboración curso 2021/2022

Fecha: 28 Mayo 2021

Vicerrectorado de Investigación, Innovación y Transferencia

Subcomisión de I+D+i

Propuesta del departamento *INGENIERÍA QUÍMICA Y NUCLEAR*

Núm Proyecto: 2021/23/00021

Responsable

Gozálvez Zafrilla, José Marcial

E-mail

jmgz@iqn.upv.es

Ext.

76333

Título proyecto

Simulación dinámica molecular con software libre aplicada a Ingeniería Química.

Valoración proyecto

4

Descripción proyecto

La simulación dinámica molecular (MDS) es una herramienta muy útil en Ingeniería Química. Con ella pueden determinarse propiedades moleculares difícilmente obtenibles experimentalmente y que son válidas en diferentes campos. Existen códigos abiertos en lenguajes Julia o Python o aplicaciones. En el proyecto principalmente se trataría de estudiar las posibilidades de diferentes aplicaciones libres, describiendo las capacidades de cada una y comparando resultados, especialmente desarrollando una base común de conexión de resultados en Matlab para una mayor productividad. El proyecto va destinado a alumnos de Ingeniería Química o Ingeniería Industrial.

Campus de Vera

Actividades a realizar por el alumno

- Realización de informes descriptivos de software y documentación para su instalación y realización de ejemplos sencillos.
- Desarrollo de sencillos scripts para comparar y explotar resultados en Matlab.

En Campus de Vera

Horario

El número total de horas establecido en la convocatoria para cada semana se realizará mañanas o tardes de forma compatible con el horario del profesor y huecos del alumno, pues el acceso a las máquinas de cálculo se realizará desde el despacho del profesor.