

21-22

MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE
SISTEMAS COMPLEJOS

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



FENÓMENOS DE TRANSPORTE: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN EN FLUIDOS

CÓDIGO 21156083

Ambito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el
Código Seguro de Verificación (CSV) en la dirección <https://sede.uned.es/validar>



C78F0723A2AA59C81358157B22E9C811

uned

21-22

FENÓMENOS DE TRANSPORTE: TÉCNICAS
DE SIMULACIÓN EN FLUIDOS

CÓDIGO 21156083

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA
ASIGNATURA
EQUIPO DOCENTE
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE
RESULTADOS DE APRENDIZAJE
CONTENIDOS
METODOLOGÍA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el
"Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/validar>



C78F0723A2AA59C81358157B2E9C811

Nombre de la asignatura	FENÓMENOS DE TRANSPORTE: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN EN FLUIDOS
Código	21156083
Curso académico	2021/2022
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 2
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

Esta es una asignatura optativa que pretende proporcionar al estudiante las técnicas básicas de simulación numérica para estudiar fenómenos de dinámica microscópica de fluidos complejos.

Es por tanto una asignatura eminentemente práctica que requiere la elaboración y utilización de programas para la realización de simulaciones numéricas.

La asignatura es de interés para todos aquellos estudiantes que vayan a enfocar su actividad futura en cálculos dentro de las áreas de Física de la Materia Condensada, Física de fluidos, Física de la Materia Blanda, Química-Física, etc. Esta asignatura además posibilita la comprensión interna de programas de dinámica molecular convencionales que se utilizan en Biotecnología, Farmacología o Nanociencia.

Dentro del Módulo *Física de Fluidos* complejos se pueden distinguir dos materias, *Física de Fluidos* y *Física Estadística de Fluidos Complejos*, que corresponden respectivamente a la visión macroscópica y microscópica de los fluidos. Esta segunda materia, en la que se aborda el problema de las causas microscópicas de las propiedades macroscópicas de los medios continuos, se divide a su vez en tres asignaturas. Una primera es *Estructura y propiedades de fluidos complejos*, de carácter fenomenológico y experimental sobre polímeros y suspensiones coloidales, que son los dos tipos más representativos de fluidos complejos.

Las otras dos asignaturas, *Mecánica estadística de fluidos complejos* y *Fenómenos de transporte: Técnicas de simulación en fluidos* introducen los modelos mecano-estadísticos que dan cuenta de dicha fenomenología macroscópica.

Estas dos asignaturas son complementarias. En *Mecánica estadística de fluidos complejos* se formulan algunos modelos termodinámicamente consistentes de simulación de fluidos complejos a través de técnicas de granulado (coarse-graining). Mientras que en *Fenómenos de transporte: Técnicas de simulación en fluidos* se describen y utilizan las técnicas de simulación más convenientes para la implementación computacional de dichos modelos.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/validar>



C78F0723A2AA59C81358157B2E29C811

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

Con carácter general, para abordar la asignatura con garantías de éxito son precisos conocimientos de Matemáticas y de Física adquiridos en una titulación de Graduado en Física o Ingeniería.

Matemáticas: Cálculo diferencial en varias variables, máximos de funciones condicionados, ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, nociones básicas de espacios funcionales de Hilbert, tensores.

Física: Mecánica analítica (ecuaciones de Hamilton). Facilita mucho el seguimiento del curso el haber cursado con anterioridad materias de Física de Fluidos y Mecánica Estadística en cursos de nivel de Graduado en Física.

Además, es conveniente que se haya cursado la asignatura de este máster *Mecánica estadística de fluidos complejos* y es indispensable cierto conocimiento de programación en Fortran o lenguaje de programación equivalente para poder llevar a cabo simulaciones numéricas. Los programas que se facilitarán están escritos sólo en Fortran90. Aunque no es imprescindible, es altamente recomendable el uso del sistema operativo Linux.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

JOSE ESPAÑOL GARRIGOS (Coordinador de asignatura)
pep@fisfun.uned.es
91398-7133
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

IGNACIO ZUÑIGA LOPEZ
izuniga@fisfun.uned.es
91398-7132
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Las labores de tutorización y seguimiento se harán principalmente a través de las herramientas de comunicación del Curso virtual (Correo y Foros de debate). Por otra parte, los estudiantes podrán siempre entrar en contacto con el profesor de la asignatura por medio de correo electrónico, teléfono o entrevista personal en las siguientes coordenadas:

Dr. Pep Español Garrigós

e-mail: pep@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7133

Horario: Miércoles, de 10:00 a 14:00

Departamento de Física Fundamental. **Despacho 2.01** Biblioteca Central UNED (Senda del

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/valida/>



C78F0723A2AA59C81358157B22E9C811

Rey 5, 28040 Madrid)

Dr. Ignacio Zúñiga López

e-mail: izuniga@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7132

Horario: Miércoles, de 15:30 a 19:30

Departamento de Física Fundamental. **Despacho 2.01** Biblioteca Central UNED (Senda del Rey 5, 28040 Madrid)

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida auto dirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

CG01 - Adquirir capacidad de análisis y síntesis.

CG02 - Adquirir capacidad de organización y planificación.

CG03 - Adquirir conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio

CG04 - Adquirir capacidad de gestión de información

CG05 - Adquirir capacidad para resolución de problemas

CG08 - Adquirir razonamiento crítico

CG09 - Adquirir compromiso ético

CG10 - Adquirir capacidad de aprendizaje autónomo

CG11 - Adquirir capacidad de adaptación a nuevas situaciones

CG14 - Adquirir sensibilidad hacia temas medioambientales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE01 - Saber utilizar y relacionar los diferentes tipos de descripción (microscópica, mesoscópica y macroscópica) de los fenómenos físicos

CE03 - Comprender el papel del ruido y las fluctuaciones en los fenómenos físicos y manejar

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/validar>



C78F0723A2AA59C81358157B22E9C811

su modelización matemática

CE04 - Comprender y saber relacionar matemáticamente las propiedades macroscópicas de un sistema con las interacciones y la geometría de los elementos microscópicos del mismo

CE05 - Capacidad de análisis de problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y diferencias con modelos de referencia

CE06 - Capacidad de formular modelos matemáticos en términos de ecuaciones diferenciales (ordinarias o en derivadas parciales)

CE07 - Saber construir modelos numéricos para fenómenos descritos por ecuaciones diferenciales (ordinarias o en derivadas parciales) con diferentes condiciones iniciales o de contorno

CE08 - Capacidad de realizar análisis críticos de resultados experimentales, analíticos y numéricos

CE09 - Capacidad de búsqueda de bibliografía y fuentes de información especializadas. Manejo de las principales bases de datos de bibliografía científica y de patentes

CE10 - Conocimiento avanzado del estado actual y la evolución de un campo de investigación concreto

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Adquisición de conocimientos avanzados de mecánica estadística de no equilibrio.
- Capacidad de identificar escalas temporales características en fluidos complejos.
- Capacidad de selección de modelos de simulación apropiados para casos particulares de fluidos complejos.
- Capacidad para escribir programas de dinámica molecular y de dinámica browniana para simular problemas de sencillos de fluidos complejos.
- Capacidad de identificación de variables relevantes en suspensiones coloidales y poliméricas.
- Capacidad de calcular estas variables relevantes a partir de los resultados de la simulación.
- Comprensión del proceso de grano grueso (coarse-graining)
- Adquisición de una comprensión de la naturaleza de la investigación en el campo.
- Conocimiento de y habilidad en la búsqueda de bibliografía y de fuentes de información especializada.

CONTENIDOS

TEMA 1. Introducción a los fenómenos de transporte.

- 1.1. Colectividades de equilibrio
- 1.2. Promedios y fluctuaciones
- 1.3. Correlaciones temporales
- 1.4. Coeficientes de transporte

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/validar>



C78F0723A2AA59C81358157B2E9C811

TEMA 2. Dinámica Molecular

- 2.1. Interacción entre partículas
- 2.2. Condiciones de contorno
- 2.3. Estructura básica de un código de simulación e implementación.

TEMA 3. Análisis de resultados

- 3.1. Cálculo de funciones de correlación
- 3.2. Cálculo de errores

TEMA 4. Dinámica Browniana

- 4.1. Suspensiones coloidales y poliméricas
- 4.2. Solución numérica de ecuaciones diferenciales estocásticas (EDE): algoritmos básicos
- 4.3. Aplicaciones a ejemplos sencillos

Problemas

En esta asignatura hay tres tipos de problemas, problemas teóricos que no requieren simulación alguna, problemas de simulación que no requieren modificación del código y, finalmente, proyectos, que son problemas que requieren hacer pequeñas modificaciones del código para su realización.

METODOLOGÍA

La docencia se impartirá principalmente a través de un curso virtual dentro de la plataforma educativa de la UNED.

Dentro del curso virtual los estudiantes dispondrán de:

1. Página de bienvenida, donde se indica el concepto general de cada una de las asignaturas que componen el módulo y se presentan a los docentes.
2. Calendario, donde se establece el orden temporal de actividades y sugerencias sobre el reparto temporal de la materia, para que el estudiante lo adapte a su disponibilidad y necesidades.
3. Materiales: Guía del curso, donde se establecen los objetivos concretos y los puntos de interés. Programa, donde se especifica la división del contenido por capítulo. Orientaciones sobre la forma de abordar el estudio de cada tema.
4. Recursos, donde se proporciona el material necesario para el estudio, incluyendo programas en fortran y referencias a artículos fundamentales en el desarrollo de la



disciplina.

5. Herramientas de comunicación: Correo electrónico, foros de debate y plataforma de entrega de trabajos.

Fuera del curso virtual el estudiante también podrá realizar consultas al equipo docente a través del correo, teléfono y presencialmente en los horarios establecidos para estas actividades. También se pueden organizar videoconferencias coordinadas con los distintos Centros Asociados, si las necesidades docentes lo hicieran preciso.

Por lo que se refiere a la división temporal de las actividades del alumno en la asignatura, es esperable que la distribución sea aproximadamente la siguiente:

1. Lectura comprensiva del material suministrado: 20%.
2. Realización de ejercicios de auto comprobación de asentamiento de conocimientos: 10%.
3. Adaptación de programas para simulación problemas: 40%.
4. Redacción y presentación de los resultados problemas: 10%.
5. Búsqueda de información adicional en biblioteca, Internet, etc.: 10%.
6. Intercambio de información con otros compañeros y tutor en los foros: 10%.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen

No hay prueba presencial

CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad

No

Descripción

Esta asignatura no se evalúa a través de un examen presencial.

Criterios de evaluación

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC?

Si, PEC no presencial

Descripción

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/validar>



C78F0723A2AA59C81358157B22E9C811

El alumno realizará una serie de problemas propuestos en los apuntes de la asignatura. Estos problemas son de dos tipos. Por una parte hay un número de problemas teóricos en los que se evalúa la comprensión conceptual de la asignatura. Por otra, una serie de problemas de simulación que requieren la utilización de los programas de dinámica molecular y browniana, que se suministran en el curso virtual.

Criterios de evaluación

La presentación de los problemas tanto teóricos como de simulación debe ser clara y precisa, con todos los resultados de las simulaciones efectuadas con las gráficas adecuadas. En el curso se suministra una plantilla para la confección de la colección de problemas.

Ponderación de la PEC en la nota final 100

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

La nota se obtiene a partir de la evaluación de los problemas propuestos en el curso virtual. Los problemas teóricos contribuyen con el 30% de la nota final. Los problemas de simulación contribuyen con el 70% de la nota final. La nota final se obtiene, por tanto de acuerdo con la fórmula

(Suma de las notas de cada problema teórico (sobre 10)/ número de problemas teóricos) x0.3

+

(Suma de las notas de cada problema simulación (sobre 10)/ número de problemas simulación)x 0.7

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

El material básico y de obligada lectura para preparar la asignatura se pone a disposición del estudiante a través del Curso virtual. Dicho material ha sido generado por el equipo docente encargado de la docencia de la asignatura y abarca todo el temario de la asignatura.

En el apartado relativo a la bibliografía complementaria se recogen textos que pueden servir al estudiante para profundizar en algunos de los conceptos abordados en el material

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/validar>



C78F0723A2AA59C81358157B22E9C811

básico o bien para extender su visión a otros temas de Física de Fluidos Complejos no abarcados en el presente curso.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):9780198556459

Título:COMPUTER SIMULATION OF LIQUIDS (1srt. ed., 7th rep.)

Autor/es:Tildesley, D.J. ;

Editorial:OXFORD UNIVERSITY PRESS

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

En las páginas del Curso Virtual se pondrá a disposición de los estudiantes enlaces y material que se considere de particular interés para esta asignatura. Concretamente, se proporcionarán códigos generales de dinámica molecular y browniana para que se adapten fácilmente a la simulación de los problemas concretos propuestos.

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/validar>



C78F0723A2AA59C81358157B22E9C811