

22-23

MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA
AVANZADA

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



FENÓMENOS DE TRANSPORTE: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN EN FLUIDOS (MÁSTER FÍSICA AVANZADA)

CÓDIGO 21580102

Atención: 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/>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

uned

22-23

FENÓMENOS DE TRANSPORTE: TÉCNICAS
DE SIMULACIÓN EN FLUIDOS (MÁSTER
FÍSICA AVANZADA)
CÓDIGO 21580102

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/valida/>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

Nombre de la asignatura	FENÓMENOS DE TRANSPORTE: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN EN FLUIDOS (MÁSTER FÍSICA AVANZADA)
Código	21580102
Curso académico	2022/2023
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA AVANZADA
Tipo	
Nº ETCS	0
Horas	0.0
Periodo	SEMESTRE
Idiomas en que se imparte	

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

La asignatura de Fenómenos de Transporte es una asignatura optativa de la especialidad de Física de Fluidos que pretende proporcionar al estudiante las técnicas básicas de simulación numérica para estudiar fenómenos de dinámica microscópica de fluidos simples y complejos. Es una asignatura eminentemente práctica que requiere la elaboración y utilización de programas para la realización de simulaciones numéricas, por lo que puede ser también de interés para estudiantes de la especialidad de Física Computacional.

En esta asignatura se estudian los fundamentos de la dinámica molecular como herramienta para extraer propiedades macroscópicas a partir de detalles microscópicos. Para ello, se estudian (desde el punto de vista de la mecánica clásica) distintos integradores de las ecuaciones del movimiento, colectividades, potenciales de interacción, etc., tanto desde el punto de vista teórico como computacional. También se estudia la vinculación estadística entre propiedades microscópicas (como las fuerzas entre partículas) y observables macroscópicos (como la fricción) para obtener coeficientes de transporte. Por último, se estudian también ejemplos sencillos de dinámica browniana que se complementan con otras asignaturas del título.

Esta asignatura utiliza conceptos de las asignaturas del módulo obligatorio Métodos Numéricos Avanzados y Complementos de Métodos Matemáticos. También se asienta en la teoría que se desarrolla en la asignatura de Mecánica Estadística de Fluidos Complejos, por lo que resulta interesante el aprovechamiento previo de todas estas materias.

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.
- **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 el grado.

Ámbito: GUJ - 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/>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

- Además, es indispensable cierto conocimiento de programación en C/Fortran o lenguaje de programación equivalente para poder llevar a cabo simulaciones numéricas.

La bibliografía básica de la asignatura está escrita en inglés, por lo que es necesario un conocimiento del inglés que permita la lectura y comprensión fluida de textos científicos y técnicos.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos	JAIME ARTURO DE LA TORRE RODRIGUEZ (Coordinador de asignatura)
Correo Electrónico	jatorre@fisfun.uned.es
Teléfono	91398-7136
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	FÍSICA FUNDAMENTAL

Nombre y Apellidos	IGNACIO ZUÑIGA LOPEZ
Correo Electrónico	izuniga@fisfun.uned.es
Teléfono	91398-7132
Facultad	FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento	FÍSICA FUNDAMENTAL

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

El curso virtual es el instrumento fundamental para la tutorización y seguimiento del aprendizaje. En general, los estudiantes podrán plantear las dudas de contenido en cualquiera de los foros habilitados. No obstante, también es posible realizar consultas al equipo docente a través del correo electrónico, teléfono y presencialmente en los horarios establecidos para estas actividades, solicitando cita previa con suficiente antelación. Los datos de contacto del equipo docente son:

Dr. D. Jaime Arturo de la Torre (Coordinador de la asignatura)

e-mail: jatorre@fisfun.uned.es

Tel.: 91 398 71 36

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

Horario de atención al estudiante: martes lectivos, de 12:00 a 14:00 y de 16:00 a 18:00

Dr. D. Ignacio Zúñiga López

e-mail: izuniga@fisfun.uned.es

Tel.: 91 398 71 32

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

Horario de atención al estudiante: martes lectivos, de 12:00 a 14:00 y de 16:00 a 18:00

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/>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS

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 autodirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

CG1 - Comprender conceptos avanzados de Física y demostrar, en un contexto de investigación científica altamente especializada, una relación detallada y fundamentada entre los aspectos teóricos y prácticos y la metodología empleada en este campo.

CG2 - Elaborar un trabajo escrito con datos bibliográficos, teóricos y/o experimentales, escribiendo un resumen o articulado en extenso (tal y como se realizan los artículos científicos), formulando hipótesis razonables, composiciones originales y conclusiones motivadas.

CG3 - Comunicar con claridad y rigor los resultados de un trabajo de investigación de forma oral o escrita.

CG4 - Utilizar bibliografía y fuentes de información especializada, propias del ámbito de conocimiento de la física, manejando las principales bases de datos de recursos científicos.

CG7 - Adquirir los conocimientos necesarios en Física Avanzada para incorporarse a un grupo de investigación o a empresas.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE1 - Conocer y comprender los elementos más relevantes de la física teórica, computacional y de fluidos actual. Profundizar en la comprensión de las teorías que se encuentran en la frontera de estos temas, incluyendo su estructura matemática, su confrontación con resultados experimentales, y la descripción de los fenómenos físicos que dichas teorías explican.

CE2 - Adquirir la capacidad para abordar y resolver un problema avanzado en la física teórica, computacional o de fluidos, mediante la elección adecuada del contexto teórico, la identificación de los conceptos relevantes y el uso de las técnicas matemáticas que

Ámbito: GUJ - 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>



7DFC88054A98823967F9AD3CA95FD5E

constituyen la mejor aproximación para así llegar a la solución.

CE3 - Modelizar sistemas de alto grado de complejidad. Identificar variables y parámetros relevantes y realizar aproximaciones que simplifiquen el problema. Construir modelos físicos que describan y expliquen situaciones en ámbitos diversos.

CE5 - Analizar una situación compleja extrayendo cuales son las cantidades físicas relevantes y ser capaz de reducirla a un modelo parametrizado.

CE6 - Resolver problemas algebraicos, de resolución de ecuaciones y de optimización mediante métodos numéricos.

CE7 - Conocer los sistemas operativos y lenguajes de programación y herramientas de computación relevantes en el campo de la física avanzada.

CE8 - Modelar y simular fenómenos físicos complejos por ordenador.

CE10 - Comprender las propiedades cualitativas de las soluciones a las ecuaciones de la física (sus tipos, estabilidad, singularidades, etc.) y su dependencia de los parámetros que definen un sistema físico.

CE11 - Analizar problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y diferencias con modelos de referencia.

CE12 - Analizar críticamente resultados experimentales, analíticos y numéricos en el campo de la física avanzada.

CE9 - Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas en el campo de la física avanzada.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1. Entender la importancia de las distintas colectividades de equilibrio y su relación con la simulación de fenómenos físicos.
2. Familiarizarse con los principales integradores numéricos y potenciales de interacción para modelizar la evolución de un sistema físico.
3. Realizar simulaciones de dinámica molecular de sistemas multicomponentes bajo distintas condiciones.
4. Aprender algoritmos de optimización para reducir el coste computacional de las simulaciones.
5. Extraer propiedades macroscópicas de equilibrio y de no equilibrio de modelos físicos a partir de simulaciones de dinámica molecular.
6. Realizar simulaciones de dinámica browniana y extraer propiedades de equilibrio y de no equilibrio.

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>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

CONTENIDOS

Tema 1. Fundamentos de la dinámica molecular

1. Integradores numéricos
2. Potenciales de interacción
3. Simulaciones

Tema 2. Fenómenos de transporte

1. Colectividades de equilibrio
2. Promedios y fluctuaciones
3. Correlaciones temporales
4. Coeficientes de transporte

Tema 3. Métodos acelerados

1. Listas de Verlet
2. Suma de Ewald
3. Transformada rápida de Fourier

Tema 4. Dinámica browniana

1. Suspensiones coloidales y poliméricas
2. Soluciones numéricas a ecuaciones diferenciales estocásticas: algoritmos básicos
3. Aplicaciones a ejemplos sencillos

METODOLOGÍA

El curso se impartirá a través de la plataforma educativa virtual aLF, con la metodología propia de la educación a distancia. El trabajo autónomo del estudiante es esencial para la consecución de los objetivos propuestos en la asignatura. El curso virtual dispondrá de suficientes elementos de ayuda (páginas con información, herramientas para el entrega de tareas, foros de discusión, tablón de noticias, etc.) para ayudar a cumplir los objetivos propuestos.

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/7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

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 tiene prueba 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

Durante el cuatrimestre lectivo se realizarán dos pruebas de evaluación continua.

La primera prueba (PEC1) consistirá en un test de respuesta múltiple sobre la teoría de los temas. La fecha de la prueba se anunciará en el curso virtual con suficiente antelación.

La segunda prueba (PEC2) consistirá en un caso práctico en el que se deberá desarrollar, modificar o explicar el contenido de un pequeño programa que aplique algunos de los conceptos estudiados en la parte de teoría. Los detalles concretos sobre las condiciones que debe cumplir el programa se darán en el curso virtual.

Criterios de evaluación

La corrección de la PEC1 será automática. De todas las respuestas posibles a cada pregunta solo una se considerará correcta. Las respuestas incorrectas penalizarán la calificación final.

La corrección de la PEC2 será manual. Se valorará, entre otros conceptos, la implementación de los requisitos planteados, la eficacia para alcanzar los resultados correctos, la eficiencia del código empleado y las explicaciones dadas. El código empleado deberá estar suficientemente documentado y ser legible en cualquier sistema operativo.

Ponderación de la PEC en la nota final PEC1: 20% PEC2: 20%

Fecha aproximada de entrega PEC1/antes de Semana Santa;
PEC2/después de Semana Santa

Comentarios y observaciones

Será imprescindible cumplir con el calendario de entregas planteado al inicio del curso para poder ser evaluado en la convocatoria ordinaria.

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/>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? Si, no presencial

Descripción

La principal actividad de la asignatura consistirá en la elaboración de una memoria científica a partir de los resultados de simulación de un proceso físico. A cada estudiante se le asignará el estudio de un fenómeno con unas condiciones dadas. El estudiante deberá implementar el fenómeno físico haciendo uso de las herramientas enseñadas durante el curso, extraer resultados y escribir una memoria donde se detalle todo el proceso.

Criterios de evaluación

De forma no exhaustiva, a partir de las condiciones dadas por el equipo docente, se evaluará:

La correcta explicación del fenómeno físico subyacente al proceso.

La implementación numérica del fenómeno.

La extracción de resultados y la visualización correcta de los mismos.

La elaboración de conclusiones.

Para poder superar la asignatura será requisito imprescindible tener una calificación mínima de 5 (sobre 10 puntos) en el trabajo.

Ponderación en la nota final 60%

Fecha aproximada de entrega Final de curso

Comentarios y observaciones

Para que el trabajo pueda evaluarse, será imprescindible entregar una memoria científica que detalle los pasos seguidos, incorporar a la memoria los archivos de entrada o el código de programación utilizado, y que ambos archivos se envíen a través del curso virtual antes de la fecha límite que figure al inicio del curso.

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

Para superar la asignatura será imprescindible tener una calificación mínima de 5 (sobre 10 puntos) en el trabajo fin de curso. La calificación final es la suma de las tres actividades evaluables, ponderadas del siguiente modo:

NOTA FINAL = 0,2 PEC1 + 0,2 PEC2 + 0,6 TRABAJO

Convocatoria extraordinaria de septiembre

Aquellos estudiantes que no superen la asignatura en la convocatoria ordinaria de junio podrán presentarse a la convocatoria extraordinaria de septiembre. Las calificaciones parciales obtenidas se guardan para la convocatoria de septiembre.

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/>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9780122673511

Título: UNDERSTANDING MOLECULAR SIMULATION: FROM ALGORITHMS TO APPLICATIONS (2002)

Autor/es: Smit, Berend ; Frenkel, Daan ;

Editorial: ELSEVIER

ISBN(13):9780198803195

Título: COMPUTER SIMULATION OF LIQUIDS: SECOND EDITION (2017)

Autor/es: Tildesley, D.J. ; Allen, M. P. ;

Editorial: OXFORD UNIVERSITY PRESS

El libro de Frenkel y Smit, **Understanding Molecular Simulation**, es un excelente volumen con numerosos detalles sobre dinámica molecular que son relevantes para este curso. Con un lenguaje sencillo y ejemplos desarrollados en FORTRAN, es un buen complemento que cubre, además, conceptos que van más allá del temario de la asignatura.

El volumen de Allen y Tildesley, **Computer Simulation of Liquids**, es también un libro muy completo que cubre todo el temario, incluyendo información importante sobre los coeficientes de transporte y los métodos acelerados. Tanto la edición de 2017 como la primera edición (de 1987 con múltiples reimpresiones) son válidas para seguir la asignatura.

Además del uso de estos libros, en la asignatura se fomentará la búsqueda de artículos científicos relevantes para los distintos temas. También se proporcionará material complementario sobre aspectos técnicos (como el software de dinámica molecular). Se recuerda que la bibliografía básica de la asignatura está escrita en inglés, por lo que es necesario un conocimiento del inglés que permita la lectura y comprensión fluida de textos científicos y técnicos.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):9788436245721

Título: MECÁNICA ESTADÍSTICA (3ª reimpresión)

Autor/es: Brey Abalo, José Javier ; Rubia Pacheco, Juan De La ; Rubia Sánchez, Javier De La ;

Editorial: U.N.E.D.

El libro de Brey, de la Rubia, de la Rubia, **Mecánica Estadística**, es un buen material complementario para entender, entre otros conceptos, los fundamentos de la teoría de colectividades de equilibrio. Este volumen está especialmente recomendado para aquellos estudiantes que necesiten refrescar conocimientos de los cursos de grado.

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>



7DFC88054A9823967F9AD3CA95FD5E

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

DINÁMICA MOLECULAR

LAMMPS es uno de los paquetes de software de dinámica molecular más extendidos en la comunidad científica. Altamente paralelizable, utiliza una sintaxis propia que se ejecuta secuencialmente. Posee una documentación muy extensa y dispone de versiones para Linux, MacOS y Windows.

COMPILADORES

Existen compiladores de C, C++ y FORTRAN gratuitos para Linux (gcc), MacOS (Xcode) y Windows (Visual Studio). Algunas librerías como GSL o Armadillo hacen más sencillo el trabajo con álgebra matricial. Librerías como LAPACK pueden ayudar a operar eficientemente con los datos que genere el código de dinámica molecular.

Es posible también usar el compilador de python o alguna de las suites de programación e IDE más usuales como anaconda, spyder o scipy. Librerías como matplotlib, numpy o pandas pueden facilitar también el trabajo de programación.

REPRESENTACIÓN GRÁFICA

VMD es el software por excelencia para la visualización de datos obtenidos mediante dinámica molecular. También tiene algunas herramientas de análisis interesantes y dispone de un entorno interpretado con sintaxis de TCL.

gnuplot es un programa muy versátil para la representación de datos en bruto. Python, maxima y octave permiten también la representación usando funciones o librerías auxiliares.

En última instancia, pueden usarse programas de ofimática como LibreOffice, OpenOffice, Excel o Numbers.

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.

