

# FENÓMENOS DE TRANSPORTE: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN EN FLUIDOS

Curso 2011/2012

(Código: 21156083)

## 1. PRESENTACIÓN

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.

## 2. CONTEXTUALIZACIÓN

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.

## 3. REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

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 que se tenga experiencia en programación en Fortran o lenguaje de programación equivalente para poder llevar a cabo simulaciones numéricas.

#### 4.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 discretizar las ecuaciones hidrodinámicas.
- 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.

#### 5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

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

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

TEMA 5. Dinámica de Partículas Fluidas



- 5.1. Ecuaciones de Navier-Stokes
- 5.2. Discretización con métodos de partículas fluidas
- 5.3. Partículas suaves (Smooth Particle Hydrodynamics)
- 5.4. Inclusión de las fluctuaciones térmicas (Dissipative Particle Dynamics)

#### TEMA 6. Aplicaciones

- 6.1. Dinámica de partículas coloidales
- 6.2. Problema del mojado de una superficie y formación de gotas
- 6.3. Cristales líquidos

## 6.EQUIPO DOCENTE

- [JOSE ESPAÑOL GARRIGOS](#)
- [MARIA DEL MAR SERRANO MAESTRO](#)
- [IGNACIO ZUÑIGA LOPEZ](#)

## 7.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 autocomprobación 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%.



## 8. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

### Comentarios y anexos:

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

## 9. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13): 9780198556459  
Título: COMPUTER SIMULATION OF LIQUIDS (1srt. ed., 7th rep.)  
Autor/es: Tildesley, D.J. ;  
Editorial: OXFORD UNIVERSITY PRESS

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

### Comentarios y anexos:

Este libro contiene el todo el programa de la asignatura.

Además en el curso se suministrará información bibliográfica sobre Fortran 90, y otras referencias sobre dinámica molecular y browniana.

## 10. RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

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.

## 11. TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

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 15:30 a 19:30

Despacho: 212-B (Facultad de Ciencias, 2ª planta).

Dra. Mar Serrano Maestro

e-mail: mserrano@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7126

Horario: Miércoles, de 15:30 a 19:30

Despacho: 208 (Facultad de Ciencias, 2ª planta).

Dr. Ignacio Zúñiga López

e-mail: izuniga@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7132

Horario: Miércoles, de 15:30 a 19:30

Despacho: 211-B (Facultad de Ciencias, 2ª planta).

## 12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

Se realizará a través de la valoración de una prueba de evaluación continua en línea y de calificación de un trabajo práctico propuesto. el trabajo consistirá en la adaptación de un código y en la realización de una simulación numérica de un problema propuesto.

La calificación final se obtendrá a partir de los siguientes elementos:

- Pruebas de evaluación continua en línea. Representarán un 30 % de la calificación final.
- Trabajo de curso de realización obligatoria. Representará el 70 % de la calificación final.

## 13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

