

Guia docent

200247 - MODC - Modelització Computacional

Última modificació: 18/05/2024

Unitat responsable: Facultat de Matemàtiques i Estadística
Unitat que imparteix: 751 - DECA - Departament d'Enginyeria Civil i Ambiental.
749 - MAT - Departament de Matemàtiques.
Titulació: GRAU EN MATEMÀTIQUES (Pla 2009). (Assignatura optativa).
Curs: 2024 **Crèdits ECTS:** 6.0 **Idiomes:** Català

PROFESSORAT

Professorat responsable: SONIA FERNANDEZ MENDEZ
Altres: Segon quadrimestre:
SONIA FERNANDEZ MENDEZ - M-A
JOSE JAVIER MUÑOZ ROMERO - M-A
PABLO SAEZ VIÑAS - M-A

CAPACITATS PRÈVIES

Conceptes bàsics d'equacions diferencials i càlcul amb operadors diferencials.

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Específiques:

GM-CE2. CE-2. Resoldre problemes de Matemàtiques, mitjançant habilitats de càlcul bàsic i d'altres, tot planificant-ne la resolució en funció de les eines de què es disposi i de les restriccions de temps i recursos.
GM-CE1. CE-1. Proposar, analitzar, validar i interpretar models de situacions reals senzilles, mitjançant les eines matemàtiques més adients als objectius que es vol aconseguir.
GM-CE3. CE-3. Utilitzar aplicacions informàtiques d'anàlisi estadístic, càlcul numèric i simbòlic, visualització gràfica, optimització o d'altres, per a experimentar en Matemàtiques i resoldre problemes.
GM-CE4. CE-4. Desenvolupar programes informàtics que resolguin problemes matemàtics, tot fent servir per a cada cas l'entorn computacional escaient.
GM-CE6. Tenir capacitat per a resoldre problemes d'àmbit acadèmic, tècnic, de les finances o social, mitjançant mètodes matemàtics.

Genèriques:

GM-CB5. Haver desenvolupat les habilitats d'aprenentatge que són necessàries per poder emprendre, amb un grau alt d'autonomia, estudis multidisciplinaris en disciplines científiques en què les Matemàtiques tenen un paper significatiu.
GM-CG1. CG-1. Comprendre i emprar el llenguatge matemàtic. Adquirir la capacitat d'enunciar propietats en diversos camps de la Matemàtica, de construir argumentacions, d'elaborar càlculs i de transmetre els coneixements matemàtics adquirits.
GM-CB4. CB-4. Ser capaç de transmetre conclusions, així com els coneixements i fonaments que les sustenten, tant a un públic especialitzat com al que no ho és, de manera clara i sense ambigüitats.
GM-CG2. CG-2. Conèixer demostracions rigoroses d'alguns teoremes clàssics en diferents àrees de la Matemàtica.
GM-CG3. CG-3. Assimilar la definició d'un nou objecte matemàtic en termes d'altres ja coneguts i ser capaç de fer servir aquest objecte en contextos diferents.
GM-CG4. CG-4. Saber abstenir-se les propietats estructurals (dels objectes matemàtics, de la realitat observada i d'altres àmbits), distingint-les de les que només són ocasionals. Poder comprovar-les amb demostracions o refutar-les mitjançant contraexemples, així com identificar errors en els raonaments incorrectes.
GM-CG6. CG-6. Detectar deficiències en el propi coneixement i superar-les mitjançant la reflexió crítica i l'elecció de la millor actuació per a ampliar aquest coneixement.

Transversals:

04 COE. COMUNICACIÓ EFICAÇ ORAL I ESCRITA: Comunicar-se de forma oral i escrita amb altres persones sobre els resultats de l'aprenentatge, de l'elaboració del pensament i de la presa de decisions; participar en debats sobre temes de la pròpia especialitat.

05 TEQ. TREBALL EN EQUIP: Ser capaç de treballar com a membre d'un equip, ja sigui com un membre més, o realitzant tasques de direcció amb la finalitat de contribuir a desenvolupar projectes amb pragmatisme i sentit de la responsabilitat, tot assumint compromisos considerant els recursos disponibles.

07 AAT. APRENENTATGE AUTÒNOM: Detectar mancances en el propi coneixement i superar-les mitjançant la reflexió crítica i l'elecció de la millor actuació per ampliar aquest coneixement.

01 EIN. EMPRENEDORIA I INNOVACIÓ: Conèixer i comprendre l'organització d'una empresa i les ciències que regeixen la seva activitat; capacitat per comprendre les regles laborals i les relacions entre la planificació, les estratègies industrials i comercials, la qualitat i el benefici.

02 SCS. SOSTENIBILITAT I COMPROMÍS SOCIAL: Conèixer i comprendre la complexitat dels fenòmens econòmics i socials típics de la societat del benestar; capacitat per relacionar el benestar amb la globalització i la sostenibilitat; habilitat per usar de forma equilibrada i compatible la tècnica, la tecnologia, l'economia i la sostenibilitat.

METODOLOGIES DOCENTS

Els models matemàtics es deriven a les classes de teoria i es resolen numèricament a l'aula d'ordinadors. Els treballs i exercicis es desenvolupen en gran part a l'aula. Per a la solució numèrica es fan servir funcions intrínseques de Python i codis desenvolupats pel professorat. Els estudiants en fan petites modificacions a nivell de programa principal.

OBJECTIUS D'APRENENTATGE DE L'ASSIGNATURA

L'objectiu principal és adquirir experiència en la modelització matemàtica amb equacions diferencials, així com en la seva solució numèrica i en l'anàlisi crític de resultats, mitjançant la solució d'una selecció de problemes d'interès en ciències aplicades i enginyeria.

HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	30,0	20.00
Hores grup petit	30,0	20.00
Hores aprenentatge autònom	90,0	60.00

Dedicació total: 150 h

CONTINGUTS**Verificació i validació de models computacionals****Descripció:**

Exemples de models computacionals i la rellevància de la seva validació (correspondència entre model i fenòmens reals) i verificació (avaluació de la qualitat de la solució numèrica) en la modelització computacional i en experiments de laboratori.

Dedicació: 2h

Grup gran/Teoria: 2h

Modelització amb l'operador de Laplace

Descripció:

Modelització matemàtica amb l'operador de Laplace: equació de la calor, flux en medi porós, flux potencial, potencial elèctric. En cada cas, derivació de la EDP i les condicions de contorn (modelització). Conceptes bàsics de la solució numèrica amb el Mètode dels Elements Finitos (MEF): forma feble, discretització, implementació en Python. Avaluació de la qualitat de la solució numèrica per aplicacions concretes realistes. Integració temporal per a problemes transitoris.

Dedicació: 13h

Grup gran/Teoria: 13h

Simulació de fluxes cel·lulars

Descripció:

Modelització del flux d'actina en una cèl·lula viva: equació de transició de convecció-difusió-reacció. Condicions de contorn. Tècniques de discretització i estabilització del FEM per als problemes dominats per la convecció. Anàlisi de l'efecte del flux d'actina en la migració cel·lular. Visiteu <https://www.youtube.com/watch?v=xtpaymWR22E>

Dedicació: 15h

Grup gran/Teoria: 15h

Transport de contaminants

Descripció:

Aquest tema té com a objectiu principal la modelització matemàtica i solució numèrica d'un problema de transport de contaminants: el filtre de carbó actiu (CA) <https://www.youtube.com/watch?v=2tWOzebxiI8&t=1s>

Modelització matemàtica de l'adsorció i desorció en una partícula de CA i aproximació semianalítica amb polinomis de grau 2 en el radi de la partícula, implementació en Python i anàlisi dels resultats i efecte dels paràmetres materials.

Modelització matemàtica del transport del contaminant dins del filtre, sense CA (convecció-difusió) i amb CA (convecció-difusió-reacció) Solució numèrica, per un filtre amb simplificació 1D, amb el mètode de les diferències finites i anàlisi dels resultats i l'efecte dels paràmetres materials.

Introducció al mètode de Volumes Finitos (MVF) per problemes de transport.

Modelització computacional d'un filtre en 2D: flux potencial per a calcular el camp de velocitats i solució amb MEF, i solució de l'equació de convecció-reacció amb MVF.

Altres aplicacions de la modelització matemàtica del transport de contaminants <https://www.youtube.com/watch?v=LsVQj8fifIU>

Dedicació: 15h

Grup gran/Teoria: 15h

Simulació de sistemes de partícules

Descripció:

Modelització de la interacció entre partícules amb potencial associat. Simulació de sistemes amb diferents escales: configuracions de partícules de cadena (https://www.youtube.com/watch?v=_dQJBKlpQQ) o molècules

(<https://www.youtube.com/watch?v=ILFEqKI3sm4>), sistemes de cel·la monocapa o sistemes multicèntrics, com a aproximació a la simulació de sistemes amb gran quantitat de partícules (<http://sbel.wisc.edu/Animations>). Plantejament del sistema d'EDO's i solució numèrica. Anàlisi de propietats d'estabilitat dels algorismes d'integració temporal. Extensió a problemes amb restriccions (conservació de volum, contacte, etc.). Solució de problemes de control òptim.

Dedicació: 15h

Grup gran/Teoria: 15h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

80% evaluació continuada (exercicis, treballs pràctics) + 20% examen

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Hairer, E; Lubich, Christian; Wanner, Gerhard. Geometric numerical integration structure-preserving algorithms for ordinary differential equations [en línia]. Springer, 2006 [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <https://link-springer-com.recursos.biblioteca.upc.edu/book/10.1007/3-540-30666-8>. ISBN 9786610610600.
- Griebel, Michael; Zumbusch, Gerhard W; Knappek, Stephan. Numerical simulation in molecular dynamics : numerics, algorithms, parallelization, applications [en línia]. Springer Berlin Heidelberg, 2007 [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <https://link-springer-com.recursos.biblioteca.upc.edu/book/10.1007/978-3-540-68095-6>. ISBN 3540680950.
- Quarteroni, Alfio. Numerical models for differential problems [en línia]. Milano: Springer Milan, 2009 [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <https://link-springer-com.recursos.biblioteca.upc.edu/book/10.1007/978-88-470-1071-0>. ISBN 9786613562357.
- Donea, Jean M; Huerta, Antonio. Finite element methods for flow problems [en línia]. Chichester: John Wiley & Sons, cop. 2003 [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <https://onlinelibrary-wiley-com.recursos.biblioteca.upc.edu/doi/book/10.1002/0470013826>. ISBN 0471496669.
- Rodríguez-Ferran, A., Sarrate, J. and Huerta, A.. "Numerical modelling of void inclusions in porous media". International Journal for Numerical Methods in Engineering [en línia]. 2004 [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <https://onlinelibrary-wiley-com.recursos.biblioteca.upc.edu/loi/10970207>.
- Mogilner, A. ; Edelstein-Keshet, L. "Regulation of actin dynamics in rapidly moving cells: a quantitative analysis.". Biophysical Journal [en línia]. [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <https://www-sciencedirect-com.recursos.biblioteca.upc.edu/journal/biophysical-journal>.
- Pollard, TD ; Cooper, JA. "Actin, a central player in cell shape and movement.". Science [en línia]. doi: 10.1126/science.1175862 [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <https://www-science-org.recursos.biblioteca.upc.edu/loi/science>.
- Pérez-Foguet, A.; Casoni, E.; Huerta, A. "Dimensionless analysis of HSDM and application to simulation of breakthrough curves of highly adsorbent porous media.". Journal of environmental engineering (ASCE) [en línia]. 10.1061/(ASCE)EE.1943-7870.0000665 [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <http://hdl.handle.net/2117/26352>.