

200247 - MODC - Modelització Computacional

Unitat responsable: 200 - FME - Facultat de Matemàtiques i Estadística
Unitat que imparteix: 751 - DECA - Departament d'Enginyeria Civil i Ambiental
749 - MAT - Departament de Matemàtiques
Curs: 2019
Titulació: GRAU EN MATEMÀTIQUES (Pla 2009). (Unitat docent Optativa)
Crèdits ECTS: 6 Idiomes docència: Anglès

Professorat

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

Horari d'atenció

Horari: Veure versió en anglès.

Capacitats prèvies

Veure versió en anglès.

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.

200247 - MODC - Modelització Computacional

GM-CG4. CG-4. Saber abstroure 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

Veure versió en anglès.

Objectius d'aprenentatge de l'assignatura

.Veure versió en anglès.

Hores totals de dedicació de l'estudiantat

Dedicació total: 150h	Hores grup gran:	30h	20.00%
	Hores grup mitjà:	0h	0.00%
	Hores grup petit:	30h	20.00%
	Hores activitats dirigides:	0h	0.00%
	Hores aprenentatge autònom:	90h	60.00%

200247 - MODC - Modelització Computacional

Continguts

Verificació i validació de models computacionals	Dedicació: 2h Grup gran/Teoria: 2h
<p>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.</p>	
Simulació de sistemes de partícules	Dedicació: 15h Grup gran/Teoria: 15h
<p>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=_dQJBBkIpQQ) o molècules (https://www.youtube.com/watch?v=ILFEqKI3sm4), cel·la monocapa sistemes 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'EDOs i solució numèrica. Anàlisi de propietats d'estabilitat dels algorismes d'integració temporal. Extensió a problemes amb restriccions (conservació de volum, contacte, etc.). Anàlisi de sistemes amb canvi de veïns.</p>	
El Laplacà en modelització computacional	Dedicació: 13h Grup gran/Teoria: 13h
<p>Descripció: Modelització matemàtica amb operador de Laplace i aplicacions: equació de calor, flux en un mitjà porós, potencial de flux, potencial elèctric. Derivació de l'EDP i les condicions de contorn per a cada aplicació (modelització). Conceptes bàsics sobre la solució numèrica amb el mètode d'elements finits (MEF): forma feble, discretització, implementació en Matlab. Avaluació de la qualitat de la solució numèrica. Solució de problemes particulars amb l'aplicació de la vida real. Discretització i integració del temps per a problemes transitoris.</p>	
El MEF per la simulació de fluxes cel·lulars	Dedicació: 15h Grup gran/Teoria: 15h
<p>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</p>	

200247 - MODC - Modelització Computacional

Transport de contaminants	Dedicació: 15h Grup gran/Teoria: 15h
<p>Descripció: Solució numèrica d'un problema de transport de contaminants en l'aire, vegeu https://www.youtube.com/watch?v=LsVQj8fifIU. Modelització computacional de filtres de carbó activat (AC): flux d'aire en el filtre, adsorció i desorció en els grans de AC, problema de reacció de convecció-difusió (no lineal) a escala de filtre, consulteu https://www.youtube.com/watch?v=LsVQj8fifIU Aplicació al disseny d'un filtre de CA per a un automòbil: efecte de cambres d'aire, parets interiors, etc. Introducció als volums finits i mètodes discontinus de Galerkin per a problemes amb fronts verticals.</p>	

Sistema de qualificació

50% evaluació continuada (exercicis, treballs pràctics, presentacions orals) + 50% examen

Bibliografia

Bàsica:

- Hairer, E; Lubich, Christian; Wanner, Gerhard. Geometric Numerical Integration [Recurs electrònic] : structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations [en línia]. Berlin, Heidelberg: Springer, 2006 Disponible a: <<http://dx.doi.org/10.1007/3-540-30666-8>>. ISBN 978-3-540-30666-5.
- Griebel, Michael; Zumbusch, Gerhard W; Knapek, Stephan. Numerical simulation in molecular dynamics [Recurs electrònic] : Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications [en línia]. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2007 Disponible a: <<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-68095-6>>. ISBN 978-3-540-68095-6.
- Quarteroni, Alfio. Numerical models for differential problems [Recurs electrònic] [en línia]. Milano: Springer Milan, 2009 Disponible a: <<http://dx.doi.org/10.1007/978-88-470-1071-0>>. ISBN 978-88-470-1071-0.
- Donea, Jean M; Huerta, Antonio. Finite element methods for flow problems [en línia]. Chichester: John Wiley & Sons, cop. 2003 Disponible a: <<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/0470013826>>. ISBN 978-0-471-49666-3.
- 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: 31/05/2018]. Disponible a: <[http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1097-0207](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1097-0207)>.
- Mogilner, A. ; Edelstein-Keshet, L. "Regulation of actin dynamics in rapidly moving cells: a quantitative analysis.". Biophysical Journal [en línia]. [Consulta: 31/05/2018]. Disponible a: <<http://proquest.umi.com/pqdweb?RQT=318&pmid=36123&clientId=41459>>.
- Pollard TD ; Cooper JA. "Actin, a central player in cell shape and movement.". Science [en línia]. doi: 10.1126/science.1175862 [Consulta: 31/05/2018]. Disponible a: <<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/19965462>>.
- 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: 31/05/2018]. Disponible a: <<http://hdl.handle.net/2117/26352>>.