



Grao en Matemáticas

Taller de Simulación Numérica

2021/2022

 Campus virtual | Segundo semestre

Información

Créditos ECTS

Créditos ECTS: 6

Horas ECTS Criterios/Memorias

Traballo do Alumno/a ECTS: 99

Horas de Titorías: 3

Clase Expositiva: 24

Clase Interactiva: 24

Total: 150

Linguas de uso

Castelán, Galego

Tipo:

Materia Ordinaria Grao RD 1393/2007

Departamentos:

[Matemática Aplicada](#)

Áreas:

Matemática Aplicada

Centro

[Facultade de Matemáticas](#)

Convocatoria:

Segundo semestre

Docencia:

Con docencia

Matrícula:

Matriculable

Programa

Obxectivos da materia



Simular numericamente modelos matemáticos en diversas áreas da Enxeñaría, Medicina, e das Ciencias Aplicadas, en xeral, formulados como ecuacións diferenciais ordinarias ou en derivadas parciais.

A elección de problemas e métodos de resolución abrangue os seguintes temas:

- Problemas estacionarios, evolutivos, nunha ou máis dimensións con diferenzas finitas e elementos finitos.
- Simulación de fenómenos non lineais, evolutivos, e/ou acoplados con incógnitas escalares, vectoriais e/ou tensoriais.

- Exemplos na mecánica dos sólidos, fluídos, térmica, electrostática, acústica, e de interacción fluído estrutura, e no ámbito da biomedicina e da enxeñaría.

- Manexo de paquetes de software (MATLAB e COMSOL).

Para cada un das aplicacións consideradas farase unha breve descrición do problema real, a escritura concisa do correspondente modelo matemático, identificaranse os datos dispoñibles e relevantes, farase unha descrición práctica do método numérico a utilizar, a súa resolución en ordenador nos casos unidimensionais, a resolución en ordenador utilizando paquetes de cálculo en dimensións 2 e 3, a análise e a crítica dos resultados calculados, a validación do modelo, a manipulación dos resultados para realizar cálculos postproceso, e a redacción e presentación das conclusións.

Contido



1. Introducción. Importancia da simulación numérica. O proceso de simulación de problemas industriais. Tecnoloxías matemáticas involucradas. Horas expositivas: 1.

2. Problemas de contorno 1D con condicións de contorno Dirichlet. Existencia de solución. Repaso a súa resolución mediante diferenzas finitas. Converxencia do método. Cálculo da solución exacta, solución discreta, orden numérico de converxencia, representacións gráficas e postproceso. Aplicación á ecuación da calor estacionaria. Resolución de problemas con

simetría esférica. Horas: expositivas 2, clases interactivas de laboratorio 2.

3. Problemas de contorno 1D con condicións de contorno xerales. Existencia de solución. Dedución e implementación da discretización por diferenzas finitas. Programación do método. Deseño de tests académicos. Aplicación á propagación de enfermidades. Aplicación ao cálculo do balance de masa dun reactor en estado estacionario; cálculo da solución analítica e numérica; análises de inestabilidades numéricas. Reprodución de táboas e gráficas de resultados en exemplos Benchmark. Horas expositivas: 1; clases interactivas de laboratorio 3.

4. Problemas de contorno 1D non lineais e evolutivos. Implementación de algoritmos de iteración funcional e de Newton para resolver non linearidades. Deseño de tests académicos non lineais. Discretización de problemas evolutivos. Implementación dos algoritmos obtidos. Estabilidade da discretización. Deseño de tests académicos evolutivos lineais e non lineais. Aplicación dos algoritmos programados ao cálculo do balance de masa dun reactor con decaemento non lineal do soluto, e dinámico, con decaemento lineal e non lineal; verificación numérica da conservación da masa. Reprodución de táboas e gráficas de resultados en exemplos Benchmark. Horas expositivas: 1; clases interactivas de laboratorio 4.

5. Resolución de problemas de valor inicial asociados a sistemas de ecuacións diferenciais ordinarias. Postproceso da solución e validación

con modelos benchmark da bibliografía.

Resolución dun modelo determinista de evolución de pandemias. Horas expositivas: 1; clases interactivas de laboratorio 2.

6. Método de elementos finitos para resolver problemas de contorno 1D: formulación variacional, existencia e unicidade de solución débil, orden de converxencia. Cálculo das matrices e vectores elementais correspondentes a elementos de Lagrange de orden 1 e 2.

Implementación do método para diferentes condicións de contorno. Verificación do algoritmo para os tests académicos deseñados en 3. Aplicación a un modelo de alongamento, e a un modelo de transferencia de calor con un ou varios materiais. Aproximación con elementos finitos das aplicacións xa introducidas en 3.

Horas expositivas: 2; clases interactivas de laboratorio 5.

7. Método de elementos finitos para resolver problemas de contorno 1D non lineais e evolutivos. Verificación do algoritmo para os tests académicos deseñados en 4. Aplicación ao cálculo da conservación da masa dun reactor nos supostos lineais e non lineais, estáticos e dinámicos. Horas: clases interactivas de laboratorio 4.

8. Xeneralización do método de elementos finitos ao caso 2D: formulación variacional, existencia e unicidade de solución débil, orden de converxencia. Introducción á ferramenta PDEtool de MATLAB. Análise dos modelos físicos incorporados. Introducción ao concepto de CAD. Realización de CADs de xeometrías elementais e

non elementais. Análise da metodoloxía de simulación en 2D. Resolución de problemas con solución académica coñecida. Identificación dos principais punteiros xerados, e manipulación para realizar programas de posproceso sobre os resultados. Cálculo do erro en norma L2 e H1. Resolución da ecuación do calor 2D. Interpretación física dos resultados e postproceso de éstos. Horas: expositivas 2, clases interactivas de laboratorio 4.

9. Simulación con MATLAB de modelos 2D en Mecánica de sólidos, electrostática e transferencia de calor. Aplicación a xeometrías multi material. Incorporación da dependencia respecto ao tempo. Mallados adaptativos. Simplificación de problemas 3D con hipóteses de simetría cilíndrica, e con modelos de límites. Interpretación física dos resultados. Programación de cálculos postproceso. Horas: expositivas 1, clases interactivas de laboratorio 4.

10. Simulación con COMSOL de modelos 2D. Resolución de modelos 2D con datos non regulares, con especial énfase no concepto de distribución e na solución debil. Análise de resultados cando a solución débil é coñecida. Aplicación á simulación de intercambiadores de calor baixo as hipóteses simetría cilíndrica. Horas: expositivas 1, clases interactivas de laboratorio 4.

11. Simulación con COMSOL de modelos 3D en Mecánica de sólidos e transferencia de calor. Comparación dos resultados cos obtidos cos modelos simplificados 2D. Horas: expositivas

- 0.5, clases interactivas de laboratorio 4.
12. Simulación 3D da acústica dunha habitación. Dedución da ecuación de Helmholtz. Valores propios, frecuencia, amplitud. Efectos de distintos factores: ubicación do mobiliario, materiais, e ubicación da fonte de son. Comparación con exemplos Benchmark da bibliografía. Horas: expositivas 1, clases interactivas de laboratorio 3.
13. Introducción á modelización de problemas acoplados fluído estrutura. Aplicación en Medicina: simulación 3D do fluxo sanguíneo nunha arteria e interacción coas paredes. Horas: expositivas 0.5, clases interactivas de laboratorio 3.

Bibliografía básica e complementaria



- Bibliografía básica.
- CALDWELL J., DOUGLAS K.S. Mathematical Modelling. Case Studies and Projects. Kluwer texts in the Mathematical Sciences. Kluwer Academic Publishers. Vol. 28, 2004.
- PENA, F. , QUINTELA P. Curso del Taller de Simulación Numérica. Notas e programas dispoñibles no Curso Virtual.
- QUINTELA P. Matemáticas en Ingeniería con MATLAB. Serv. Publicaciones Universidad de Santiago de Compostela. 2000.
- QUINTELA P. Métodos Numéricos en Ingeniería. Tórculo Edicións. Santiago de Compostela. 2001.
- VIAÑO, J.M – FIGUEIREDO, J., Implementação do Método de Elementos Finitos. Notas. 2000.

- Manuais de Software: Guías de usuario do software.
- Revistas científicas de ciencias aplicadas, medicina e enxeñaría.

- Bibliografía complementaria

- AHMED I., MODU G.U., YUSUF A., KUMAM P., YUSUF, I. A mathematical model of Coronavirus Disease (COVID-19) containing asymptomatic and symptomatic classes. Results in Physics 21 (2021).
- BERMÚDEZ A., Continuous Thermomechanics. Birkhäuser Verlag. 2005.
- GURTIN M.E., An Introduction to Continuum Mechanics. Academic Press. New York, 1981.
- JOHNSON C. Numerical Solution of Partial Differential Equations by Finite Element Method. Cambridge Univ. Press, 1987.
- QUARTERONI A., SALERI F., Scientific Computing with MATLAB. Springer. 2003.
- RAVIART P.A. - THOMAS J.M. Introduction à l'Analyse Numérique des Équations aux Dérivées Partielles. Masson. 1983.
- SINGIRESU S.R., Applied Numerical Methods for Engineers and Scientists. Prentice Hall, 2002.
- TIAN Y., ZHANG T., YAO H., TADÉ M.O. Computation of Mathematical Models for Complex Industrial processes. Advances in Process Systems Engineering. Vol. 4. World Scientific, 2014.

Competencias



Xerais

Coñecer os conceptos, métodos e resultados máis importantes de distintas ramas das Matemáticas, xunto con certa perspectiva histórica do seu desenvolvemento.

Aplicar tanto os coñecementos teóricos-prácticos adquiridos como a capacidade de análise e de abstracción na definición e plantexamento de problemas e na procura das súas solucións tanto en contextos académicos coma profesionais.

Comunicar, tanto por escrito como de forma oral, coñecementos, procedementos, resultados e ideas en Matemáticas tanto a un público especializado coma non especializado.

Estudiar e aprender de forma autónoma, con organización de tempo e recursos, novos coñecementos y técnicas en calquera disciplina científica ou tecnolóxica.

Específicas

Comprender e utilizar a linguaxe matemática.

Coñecer demostracións rigorosas dalgúns teoremas clásicos en distintas áreas da Matemática.

Idear demostracións de resultados matemáticos, formular conxecturas e imaxinar estratexias para confirmalas ou negalas.

Identificar erros en razoamentos incorrectos propoñendo demostracións ou contra exemplos.

Asimilar a definición dun novo obxecto matemático, relacionalo con outros xa coñecidos, e ser capaz de utilizalo en diferentes contextos.

Saber abstraer as propiedades e feitos substanciais dun problema, distinguíndoas de

aquelas puramente ocasionais ou circunstanciais.

Propoñer, analizar, validar e interpretar modelos de situacións reais sinxelas, utilizando as ferramentas matemáticas máis adecuadas ós fins que se persigan.

Planificar e executar algoritmos e métodos matemáticos para resolver problemas no ámbito académico, técnico, financeiro ou social.

Utilizar aplicacións informáticas de cálculo numérico e simbólico, visualización gráfica, optimización e software científico, en xeral, para experimentar en Matemáticas e resolver problemas.

Transversais

Utilizar bibliografía e ferramentas de búsqueda de recursos bibliográficos xerais e específicos de Matemáticas, incluíndo o acceso por Internet.

Xestionar de forma óptima o tempo de traballo e organizar os recursos dispoñibles, establecendo prioridades, camiños alternativos e identificando erros lóxicos na toma de decisións.

Comprobar ou refutar razoadamente os argumentos de outras persoas.

Traballar en equipas interdisciplinarias, aportando orden, abstracción e razoamento lóxico.

Ler textos científicos tanto nas linguas oficiais como noutras de relevancia no ámbito científico, especialmente a inglesa.

Metodoloxía da ensinanza



4 horas presenciais á semana nas que se van intercalando as clases expositivas (aprox. 1h por semana), as clases interactivas de laboratorio (aprox. 3h por semana) e as titorías en grupos moi pequenos no laboratorio de informática (dúas horas). En global, o alumno recibirá 14 horas de clase expositivas e 42 horas de clases interactivas de laboratorio.

O alumno terá dunha Web virtual, na que estará dispoñible diverso material sobre a materia; ademais poderá usala como punto de encontro co profesor e con outros estudantes da materia. Realizarse polo menos 1 proba de coñecementos básicos a través do curso virtual.

Durante o curso facilitarase a interacción cos alumnos a través do correo electrónico dos profesores, e das ferramentas virtuais dispoñibles na Universidade de Santiago de Compostela.

Ademais, cada alumno deberá realizar unha práctica persoalizada, e entregar o correspondente informe.

Ao longo do curso verificarase o traballo persoal do alumno mediante a comprobación do seu nivel de resultados nas distintas prácticas realizadas.

Sistema de avaliación



Exame (10 puntos): O exame final será teórico e práctico, no que se proporán cuestións teóricas, prácticas e de manexo de paquetes de software para o deseño e execución do estudiado durante

ó curso (a parte práctica realizarase nunha sala de informática).

Traballo Persoal (10 puntos): inclúe a avaliación do traballo do alumno ó longo do curso: a súa asistencia a clase, participación nas actividades propostas, o nivel acadado nas súas prácticas, os coñecementos mostrados nos tests virtuais, e a avaliación das prácticas da materia.

Os alumnos que obteñan mais dun 7 no seu traballo persoal poderán optar por manter esa cualificación como nota final da materia, o que eximiría de presentarse ao exame.

Para aprobar a materia é imprescindible obter un total de 5 puntos ou máis na media das cualificacións do Exame y do Traballo Persoal. A cualificación final da materia será o máximo entre a do Exame, e a do Traballo Persoal.

Se considera que a cualificación é Non Presentado si o estudante non realizou na avaliación continua ningún test virtual, non entregou a práctica personalizada, nin se presentou ao exame.

As ferramentas de avaliación propostas avalían ao 100% o conxunto das competencias básicas, xerais, específicas e transversais descritas previamente.

Para os casos de realización fraudulenta de exercicios ou probas será de aplicación o recollido na "Normativa de avaliación do rendemento académico dos estudantes e de revisión de cualificacións".

Tempo de estudo e traballo persoal



TRABALLO PRESENCIAL NA AULA Horas

Clases Expositivas 14

Clases interactivas de laboratorio 42

Tutorías 2

Total horas traballo presencial na aula 58

TRABALLO PERSOAL DO ALUMNO Horas

Estudio autónomo individual ou en grupo: 25

Escritura de exercicios, conclusións e outros traballos: 20

Programación/experimentación e outros traballos no ordenador/laboratorio 30

Lecturas recomendadas, actividades na biblioteca ou similar 12

Preparación de presentacións orais, debates ou similar 5

Total horas traballo persoal do alumno 92

Recomendacións para o estudo da materia



Observacións



Haber cursado os cursos de ecuacións diferenciais, métodos numéricos e modelización matemática.

Plan de continxencia para a adaptación desta guía ao documento "Bases para o desenvolvemento dunha docencia presencial segura no curso 2020-2021", aprobado polo

Consello de Goberno da USC en sesión ordinaria celebrada o 19 de xuño de 2020:

- En caso de aplicación do escenario 2, produciranse as seguintes adaptacións desta guía:
 - Manterase o contido esencial de cada tema que se desenvolva durante este escenario.
 - Dado o carácter fundamentalmente práctico da materia, o tempo necesario para axudar aos estudantes durante as prácticas, sen comprometer a distancia recomendada, pode incrementarse tendo que usar software que o permita. Isto obrigará a unha redución dos obxectivos prácticos non esenciais propostos en cada tema que se desenvolva neste escenario.
 - A metodoloxía docente adaptarse aos criterios indicados pola Universidade de Santiago, ás directrices da Facultade de Matemáticas e ás infraestruturas e software dispoñibles nas aulas de informática da Facultade.
 - Se a infraestrutura permite gravar, total ou parcialmente, a clase, ou a asistencia remota dos estudantes a cada clase para garantir a distancia entre os alumnos, facilitarase o acceso ás gravacións a través do Curso Virtual, ou o acceso en directo se é o caso.

- En caso de aplicación do escenario 3, produciranse as seguintes adaptacións desta guía:
 - Os contidos esenciais de cada tema que se desenvolva durante este escenario manteranse cando se trate dos temas 1 a 7; en caso de non

dispoñibilidade do paquete MATLAB previsto, empregarase o software libre OCTAVE.

- Nos temas do 8 ao 13, cando se requiran paquetes de software que poden non estar dispoñibles, a adaptación farase tendo en conta a dispoñibilidade existente. Se algún dos dous paquetes previstos, MATLAB ou COMSOL, fose accesible a estudantes e profesores, estes temas converteríanse para impartirse baixo este software. Se fose necesario recorrer a un paquete non previsto na materia, dado o carácter xeral dos temas 8 e 9, poderíase manter o seu contido esencial, pero o carácter específico dos temas 10 a 13 requiriría a súa adaptación ao software dispoñible na Facultade.

- Dado o carácter fundamentalmente práctico da materia, o tempo necesario para axudar aos estudantes durante as prácticas obrigará a unha redución dos obxectivos prácticos non esenciais propostos en cada tema que se desenvolva neste escenario.

- Neste período, os estudantes serán informados semanalmente dos avances que deberán facer durante a semana. O Curso Virtual reforzarase cun Foro de participación e un Foro de incidencias para manter un contacto continuo co profesorado e aproveitar sinerxías co traballo desenvolvido polos demais estudantes na materia. O material de clase previsto nos períodos 1 e 2, completarase con vídeos explicativos que permitan un seguimento máis sinxelo dos contidos da materia. Semanalmente, programaranse ao menos dúas horas de video-clase cos equipos de MS dentro do horario

escolar previsto na materia. Nestas videoclases, os estudantes terán a oportunidade de facer preguntas, verificar as súas prácticas, etc.

Ademais, solicitarase permiso aos estudantes asistentes para gravar as sesións e poñelas a disposición de todos os estudantes no Curso virtual da materia.

- Cando o exame debe realizarse nunha fase co escenario 3, levarase a cabo combinando a utilización de ferramentas do curso virtual, para realizar unha parte tipo test e para propoñer unha tarefa que debe ser completada nunha sesión de equipos e entregala no Curso virtual propio do asunto antes do remate da sesión. Isto afecta aos estudantes de primeira e segunda oportunidade.

- En todo caso, os puntos anteriores adaptaranse aos criterios indicados pola Universidade de Santiago e ás directrices da Facultade de Matemáticas.
