

24-25

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



MECÁNICA ESTADÍSTICA FUERA DEL EQUILIBRIO: LA TEORÍA DEL COARSE- GRAINING

CÓDIGO 21580160

UNED

24-25

MECÁNICA ESTADÍSTICA FUERA DEL
EQUILIBRIO: LA TEORÍA DEL COARSE-
GRAINING

CÓDIGO 21580160

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
IGUALDAD DE GÉNERO

Nombre de la asignatura	MECÁNICA ESTADÍSTICA FUERA DEL EQUILIBRIO: LA TEORÍA DEL COARSE- GRAINING
Código	21580160
Curso académico	2024/2025
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA AVANZADA
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

Descriptores: Mecánica estadística de no equilibrio, operadores de proyección, formalismo GENERIC, termodinámica de sistemas pequeños, partículas Brownianas, suspensiones coloidales.

Objetivo general: Transmitir al alumno un conocimiento básico de los conceptos propios de la Mecánica Estadística fuera de equilibrio y de su implementación matemática, ilustrando el marco general con varios ejemplos de sistemas concretos como son termodinámica de sistemas pequeños, partículas Brownianas, suspensiones coloidales y otros.

Objetivos concretos:

Introducir la formulación de la teoría del grano grueso, o mecánica estadística fuera de equilibrio, con ilustraciones concretas.

Dar un marco teórico claro basado en los conceptos de nivel de descripción y reducción de la información.

Mostrar la transferencia de información entre los niveles de descripción microscópico y macroscópico.

Estudiar sistemas modelo a distintas escalas de longitud y tiempo.

Preparar al estudiante para poder abordar problemas de simulación de sistemas que abarcan muchas escalas de longitud y tiempos.

Esta es una asignatura que, dentro del Máster, tiene carácter optativo y pretende proporcionar al estudiante la base teórica suficiente para poder entender la conexión entre la dinámica microscópica de un sistema y su comportamiento macroscópico en situaciones de no equilibrio.

La formación avanzada que se pretende proporcionar en la asignatura enlaza con asignaturas habitualmente impartidas en el Grado de Física, como puede ser la Mecánica Estadística o la Física de Fluidos. También está fuertemente relacionada con las asignaturas "Crecimiento fuera del equilibrio", "Modelización y simulación de sistemas complejos", "Fenómenos de transporte: técnicas de simulación en fluidos" y "Microhidrodinámica" que se imparten en este mismo Máster.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

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.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

JOSE ESPAÑOL GARRIGOS (Coordinador de asignatura)
pep@fisfun.uned.es
91398-7133
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

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 10:00 a 14:00

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

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS

CM1 Poseer la capacidad para el desarrollo de una aptitud crítica ante el aprendizaje que le lleve a plantearse nuevos problemas desde perspectivas no convencionales.

CM2 Adquirir los conocimientos necesarios en Física Avanzada para incorporarse a un grupo de investigación o a empresas.

CM3 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 constituyen la mejor aproximación para así llegar a la solución.

CM4 Analizar una situación compleja extrayendo cuales son las cantidades físicas relevantes y ser capaz de reducirla a un modelo parametrizado.

CM5 Analizar problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y diferencias con modelos de referencia.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

CONOCIMIENTOS O CONTENIDOS

CN1 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.

CN2 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.

CN4 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.

HABILIDADES O DESTREZAS

H1 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.

H3 Utilizar bibliografía y fuentes de información especializada, propias del ámbito de conocimiento de la física, manejando las principales bases de datos de recursos científicos.

H5 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.

H8 Modelar y simular fenómenos físicos complejos por ordenador.

H9 Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas en el campo de la física avanzada.

COMPETENCIAS

CM1 Poseer la capacidad para el desarrollo de una aptitud crítica ante el aprendizaje que le lleve a plantearse nuevos problemas desde perspectivas no convencionales.

CM2 Adquirir los conocimientos necesarios en Física Avanzada para incorporarse a un grupo de investigación o a empresas.

CM3 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 constituyen la mejor aproximación para así llegar a la solución.

CM4 Analizar una situación compleja extrayendo cuales son las cantidades físicas relevantes y ser capaz de reducirla a un modelo parametrizado.

CM5 Analizar problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y diferencias con modelos de referencia.

CONTENIDOS

TEMA 1 Impresionismo, granulación, mecánica estadística

En este tema presentamos el problema básico que plantea la simulación de fluidos complejos y mostramos la necesidad de encontrar representaciones simplificadas de estos sistemas.

TEMA 2 Los conceptos clave de la teoría del granulado

Este tema es prácticamente un glosario de términos y conceptos que son esenciales en la asignatura. En ellos describimos de manera muy concisa todo el esquema de la teoría del granulado, sin entrar apenas en los aspectos matemáticos.

TEMA 3 Ejemplo preliminar: Una suspensión coloidal

Los conceptos de nivel de descripción, escalas temporales, etc. introducidos en el Tema 2 son ahora ilustrados para un ejemplo concreto, una suspensión coloidal. Aunque se presentan las distintas formas de la ecuación de Fokker-Planck, no se da ninguna justificación de cómo se ha obtenido dicha ecuación. La idea es simplemente observar cómo se implementan los distintos conceptos básicos en cada nivel de descripción de este sistema particular, haciendo una discusión de las escalas temporales involucradas.

TEMA 4 Salto de un nivel microscópico a un nivel mesoscópico

4.1 El nivel microscópico (5h): Se introduce el nivel microscópico descrito por las ecuaciones de Hamilton, el espacio de las fases y el teorema de Liouville que gobierna la probabilidad en el espacio de las fases (4.1.1). También se discute la solución estacionaria de la ecuación de Liouville, que describe el estado de equilibrio del sistema (4.1.2).

4.2 El nivel mesoscópico (25h). A continuación se introduce el nivel mesoscópico y se discute la necesaria descripción en términos probabilistas de la dinámica mesoscópica, que proviene esencialmente del desconocimiento de las condiciones iniciales. Se formula por tanto, la distribución de probabilidad inicial y cómo se obtiene a partir de un principio de máxima

entropía. En este punto es posible consultar el material auxiliar en el curso sobre la definición de funcional (que son funciones en un espacio de funciones) y sobre la maximización con restricciones a través de multiplicadores de Lagrange (4.2.1).

El siguiente apartado (4.2.2) describe cómo podemos obtener una ecuación formalmente exacta para la probabilidad del estado mesoscópico. En este apartado se introducen los operadores de proyección y la colectividad relevante.

Finalmente en (4.2.3) se utilizan las propiedades de los operadores de proyección para obtener una expresión más aceptable de esta ecuación exacta.

En (4.2.4) se introduce la aproximación más importante del método, la denominada aproximación Markoviana. Con esta aproximación, la ecuación exacta deviene una ecuación aproximada que tiene la forma de una ecuación de Fokker-Planck. La obtención de esta ecuación es uno de los objetivos principales de esta asignatura.

Completado el estudio de esta segunda parte de la asignatura, es conveniente volver a repasar la introducción y los conceptos clave de la teoría del granulado, es decir, la primera parte de la asignatura.

También es conveniente estudiar el Material Auxiliar que se suministra en el curso sobre la ecuación de Fokker-Planck, sus propiedades básicas y cómo se puede representar matemáticamente también a través de ecuaciones diferenciales estocásticas (10h).

TEMA 5 Le estructura GENERIC de la ecuación de Fokker-Planck

En este tema se estudia el efecto de poder describir la energía total del sistema en función de las variables relevantes del nivel de descripción mesoscópica. Es decir, qué pasa cuando en el nivel mesoscópico la energía se conserva. En este caso emerge una estructura termodinámica muy potente, denominada GENERIC, que unifica los conceptos de la termodinámica de equilibrio con los de no equilibrio. La discusión se hace en el nivel de la ecuación de Fokker-Planck obtenida en el tema anterior.

TEMA 6 Resumen final de la teoría

En este capítulo recopilatorio hacemos un resumen de las hipótesis usadas y de los resultados obtenidos. Es muy útil en este punto, volver atrás a lo largo de los temas 4 y 5 e ir identificando en qué momentos se hacen las hipótesis y se obtienen las ecuaciones recopiladas.

En los capítulos que siguen a continuación, se presentan algunos ejemplos de descripciones mesoscópicas de fluidos complejos. En ocasiones, estos ejemplos serán simplemente una aplicación de la ecuación de Fokker-Planck, particularizada al sistema y nivel de descripción elegido. En otras, usaremos directamente la estructura GENERIC para formular estas descripciones.

TEMA 7 Termodinámica

El primer nivel de descripción a considerar en todo sistema es el de la termodinámica. Usaremos el formalismo para derivar las ecuaciones básicas de la termodinámica para un ejemplo paradigmático, el pistón termodinámico.

TEMA 8 Suspensiones coloidales.

En este tema consideramos una suspensión coloidal descrita en el nivel de Smoluchowski, es decir, sólo nos importan la posición de las partículas coloidales. Particularizamos la ecuación de Fokker-Planck obtenida en el Tema 5 a este caso y obtenemos la ecuación de difusión de Smoluchowski.

TEMA 9 Fluidos compuestos de moléculas complejas

En este tema, abordamos la descripción de un sistema compuesto de moléculas complejas, formadas por muchos átomos, en el cual definimos el nivel de descripción mesoscópico a través de los centros de masa de las moléculas complejas. Como consecuencia, estos centros de masa interactúan entre sí a través de potenciales efectivos y fricciones.

METODOLOGÍA

1. 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:**
 1. Guía del curso, donde se establecen los objetivos concretos y los puntos de interés.
 2. Programa, donde se especifica la división del contenido por capítulos.
 3. Orientaciones sobre la forma de abordar el estudio de cada tema.
 4. Recursos, donde se proporciona el material necesario para el estudio, incluyendo referencias a artículos fundamentales en el desarrollo de la disciplina.
4. **Herramientas de comunicación:**
 1. Correo, para la consulta personal de cuestiones particulares del alumno.

2. Foros de debate, donde se intercambian conocimientos y se resuelven dudas de tipo conceptual o práctico.
3. Plataforma de entrega de los trabajos obligatorios, exámenes y problemas, y herramientas de calificación.

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.

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: 20%.
3. Resolución de problemas: 30%.
4. Manejo de herramientas informáticas y de ayuda a la presentación de resultados: 5%.
5. Redacción de los problemas: 15%.
6. Búsqueda de información adicional en biblioteca, Internet, etc.: 5%.
7. Intercambio de información con otros compañeros y tutor en los foros: 5%.

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

Criterios de evaluación

Además de la originalidad y corrección del trabajo, se valorará el desarrollo del mismo, la justificación de las hipótesis que se usen, y la explicación de los pasos que se realicen. También se valorará la calidad de la presentación y la redacción de la solución, a ser posible en el formato LaTeX suministrado en el curso virtual.

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final 20%

Fecha aproximada de entrega 15/02

Comentarios y observaciones

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC? Si, PEC no presencial

Descripción

Esta asignatura se puede seguir a través del texto base elaborado por el profesor y disponible en el curso virtual. Este texto contiene intercalados a lo largo de los capítulos los distintos problemas que el alumno debe resolver. Estos problemas son, la mayor parte de las veces, la resolución de un paso de una ecuación a otra en el texto y por tanto, su resolución es indispensable para una correcta comprensión del desarrollo lógico de la asignatura. Aproximadamente el número de problemas es de unos 90, variando el número en función del tema. El estudiante deberá enviar la colección de problemas resueltos en una única entrega en la última semana de Enero. Cada problema resuelto correctamente cuenta un punto y la nota final es el número total de puntos dividido por el número de problemas en la colección y multiplicado por 10. De esta forma todos los problemas resueltos correctamente dan una nota global de 10 en el apartado de problemas

Criterios de evaluación

Además de la corrección de las respuestas en cada problema, se valorará el desarrollo de las mismas, la justificación de las hipótesis que se usen, y la explicación de los pasos que se realicen. También se valorará la calidad de la presentación y la redacción de la solución, a ser posible en el formato LaTeX suministrado en el curso virtual.

Ponderación de la PEC en la nota final 80%

Fecha aproximada de entrega 31/1

Comentarios y observaciones

Los estudiantes que por alguna circunstancia sobrevenida no puedan seguir el calendario podrán entrar en la convocatoria de septiembre. Estos estudiantes deberán ponerse en contacto con el equipo docente para recibir instrucciones y un plan de trabajo. Deberán entregar una parte de los ejercicios antes del 1 de mayo y el resto antes del 15 de septiembre.

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

La nota final será el resultado de la evaluación de los problemas resueltos por 4/5 más la evaluación del trabajo de investigación por 1/5.

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 profesor 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.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

H. Grabert *Projection Operator Techniques in Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Springer-Verlag, 1982). Este libro contiene una discusión exhaustiva de la técnica de operadores de proyección.

H.C. Ottinger

Beyond Equilibrium Thermodynamics

(Wiley 2005). Este es un texto del autor que más ha contribuido al desarrollo de la estructura GENERIC y a su implementación. Discute dentro de este formalismo un número elevado de ejemplos de fluidos complejos.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

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.

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.