

DATOS DE LA ASIGNATURA					
Asignatura:	Modelos Dinámicos en Química			Código:	
Módulo:	Complementario			Materia:	Matemáticas
Curso:	4º			Cuatrimestre:	1º
Créditos ECTS	3	Teóricos:	1,5	Prácticos:	1,5
Departamento/s:	Matemáticas		Área/s de Conocimiento:	Matemática Aplicada	

PROFESOR/A		E-mail	Ubicación	Teléfono
Prof 1: Manuel Merino Morlesín		merino@uhu.es	EX P4-N4-12	959219915
Prof 2:				
Prof 3:				
Horario Tutorías	Prof. 1	Ver la web de la asignatura		
	Prof. 2			
	Prof. 3			
Campus Virtual	<input type="checkbox"/> Web CT <input checked="" type="checkbox"/> Página web: <a href="http://moodle.uhu.es">http://moodle.uhu.es</a>			

Contexto de la asignatura	<u>Encuadre en el Plan de Estudios</u>  Modelos Dinámicos en Química es una asignatura optativa de cuarto curso del Grado en Química. Proporciona al alumno conocimientos para estudiar y comprender mejor el mundo que nos rodea. Desde hace algunos años, se ha desarrollado ampliamente este estudio a través de modelos matemáticos que describen, o intentan describir, tanto fenómenos naturales como, incluso, comportamientos humanos.
	<u>Repercusión en el perfil profesional</u>  En muchos casos, un modelo matemático no es más que una ecuación, o conjunto de ecuaciones, que recoge toda la información relevante de una determinada situación. De esta forma, las soluciones del modelo se ajustan, con un grado de fiabilidad conocido, al comportamiento real del fenómeno en cuestión y puede ser utilizado, por ejemplo, para predecir qué ocurriría en circunstancias que no pueden ser reproducidas en un laboratorio o cuya reproducción tiene un coste elevado

<p><b>Objetivo General de la Asignatura:</b></p>	<p>Con esta asignatura el alumno adquirirá los conceptos básicos de los Sistemas Dinámicos:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Comprender la imposibilidad de resolver de manera exacta (mediante fórmulas) todas las ecuaciones diferenciales y la necesidad de utilizar métodos numéricos y/o enfoques cualitativos para su resolución.</li> <li>- Establecer la relación entre los problemas reales y sus modelos matemáticos en términos de ecuaciones diferenciales.</li> <li>- Modelizar y analizar cualitativamente-numéricamente algunos problemas elementales relacionados con sistemas químicos ( cinética de las reacciones químicas, autocatálisis, osciladores químicos ...).</li> </ul>
<p><b>Competencias básicas o transversales</b></p>	<p>B1. Capacidad de análisis y síntesis          B2. Capacidad de organización y planificación          B3. Comunicación oral y escrita en la lengua nativa          B5. Capacidad para la gestión de datos y la generación de información / conocimiento          B6. Resolución de problemas          B8. Trabajo en equipo          B9. Razonamiento crítico          B10. Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional</p>
<p><b>Competencias específicas</b></p>	<p><b>Competencias específicas relativas al conocimiento:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• C21. Aplicar los fundamentos matemáticos necesarios para entender y expresar con rigor científico las relaciones entre las variables y las funciones físico-químicas, y la variación de dichas funciones respecto de sus variables.</li> <li>• C23. Desarrollar métodos numéricos que permitan la resolución de problemas.</li> <li>• C26. Resolver numéricamente ecuaciones diferenciales.</li> <li>• C27. Desarrollar algoritmos que permitan la resolución de problemas de evolución con el ordenador.</li> </ul> <p><b>Competencias específicas relativas a las habilidades y destrezas cognitivas:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Q2. Capacidad de aplicar los conocimientos específicos en Química a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.</li> </ul>
<p><b>Recomendaciones</b></p>	<p>Se recomienda tener aprobada la asignatura de Ecuaciones Diferenciales y Métodos Numéricos.</p>
<p><b>BLOQUES TEMÁTICOS</b></p>	<p>Bloque I: Modelos unidimensionales.          Bloque II: Modelos bidimensionales y tridimensionales.          Bloque III: Aspectos relacionados con la difusión.</p>

<p><b>Temario Teórico y Planificación Temporal:</b></p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Modelos unidimensionales. (5 horas)             <ol style="list-style-type: none"> <li>1.1 Modelo de Malthus.</li> <li>1.2 Modelo logístico.</li> <li>1.3 Bifurcaciones y catástrofes.</li> </ol> </li> <li>2. Modelos bidimensionales y tridimensionales. (6 horas)             <ol style="list-style-type: none"> <li>2.1 Modelos de interacción entre especies.</li> <li>2.2 Cinética de reacciones químicas.</li> <li>2.3 Autocatálisis.</li> <li>2.4 Osciladores químicos biológicos.</li> </ol> </li> <li>3. Aspectos relacionados con la difusión. (4 horas)             <ol style="list-style-type: none"> <li>3.1 Ecuación de difusión unidimensional.</li> <li>3.2 Difusión y dinámica de poblaciones.</li> </ol> </li> </ol>
<p><b>Temario Práctico y Planificación Temporal:</b></p>	<p>Práctica 1.- Introducción del software a utilizar.</p> <p>Práctica 2.- Simulación de sistemas lineales.</p> <p>Práctica 3 y 4.- Análisis de sistemas no lineales. Bifurcaciones de sistemas con parámetros.</p> <p>Prácticas 5, 6, 7 y 8.- Estudio de modelos bidimensionales.</p> <p>Prácticas 9 y 10.- Ecuación de difusión.</p> <p>Cada una de las prácticas tiene una duración de 1,5 horas.</p>
<p><b>Actividades Dirigidas y Planificación Temporal</b></p>	<p>Se realizarán 2 actividades dirigidas, no recuperables, distribuidas a lo largo del cuatrimestre. Cada actividad consistirá en la realización de una prueba, al finalizar cada uno de los dos primeros bloques temáticos, con cuestiones teóricas y problemas para resolver con el ordenador.</p>
<p><b>Metodología Docente Empleada:</b></p>	<p>En los grupos grandes se harán exposiciones teóricas sobre los conceptos fundamentales y sus aplicaciones mediante presentaciones y el uso de la pizarra.</p> <p>En los grupos reducidos se resolverán ejercicios y problemas tipo, presentes en las aplicaciones, que incidan en los principales aspectos metodológicos. Se facilitarán boletines de ejercicios y problemas de cada uno de los temas.</p> <p>En las sesiones de laboratorio se reforzará la comprensión de los conceptos teóricos mediante el estudio numérico y cualitativo de los modelos, previamente analizados en las clases teóricas, utilizando el ordenador y el paquete Matlab.</p>

<b>Criterios de Evaluación:</b>	<p>Las capacidades adquiridas en cada unidad temática se evaluarán conjuntamente con las distintas actividades formativas de la asignatura.</p> <p>La calificación final (CF) se obtiene aplicando la siguiente fórmula:</p> $CF=0.5*\text{Examen Final}+0.3*\text{Actividades Dirigidas}+0.2*\text{Trabajos realizados}$ <p>El examen final consistirá:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Un primer ejercicio con preguntas teóricas y problemas.</li> <li>2. Un examen de prácticas a realizar en los ordenadores del aula de informática, para resolver numéricamente los problemas planteados.</li> </ol> <p>Los trabajos se realizaran, individualmente, a lo largo del cuatrimestre.</p> <p>En los criterios de evaluación se tendrá en cuenta la adecuación de las respuestas, el nivel de razonamiento, de análisis y de síntesis, la exactitud, el nivel de expresión y presentación de resultados.</p>				
	<b>Distribución Horas Presenciales</b>	<b>Grupo Grande</b>	<b>Grupo Pequeño</b>	<b>Laboratorio</b>	<b>Lab. Informática</b>
	15			15	
<b>Bibliografía:</b>	<p>BURDEN, R.; FAIRES, J. Análisis Numérico. Ed. Thomson, (2002). Séptima edición</p> <p>ECUACIONES DIFERENCIALES: UNA INTRODUCCIÓN MODERNA. Henry Ricardo. (2008). Reverté. ISBN 978-84-291-51626.</p> <p>ECUACIONES DIFERENCIALES. UNA PERSPECTIVA DE MODELACIÓN. Borrelli, R.; Coleman, C.S. (2002). Oxford University Press. ISBN 970-613-611-8.</p> <p>EDELSTEIN-KESHET, L. Mathematical Models in Biology. Ed. McGraw-Hill, (2005).</p> <p>MURRAY, J.D. Mathematical biology. Ed. Springer-Verlag, (2004).</p> <p>ROMERO, J.L.; GARCIA, C. Modelos y Sistemas Dinámicos. Servicio de Publicaciones de la Universidad de Cádiz, (1998).</p> <p>SOLÉ, R. ; MANRUBIA S. Orden y Caos en Sistemas Complejos. Ediciones de la Universidad Politécnica de Cataluña, (2001).</p> <p>STROGATZ, S.H. Nonlinear Dynamics and Chaos: with applications to Physic, Biology, Chemistry an Engineering. Westview Press, (2001).</p>				