

## GRADO EN QUÍMICA

### DATOS DE LA ASIGNATURA

ASIGNATURA	MODELOS DINÁMICOS EN QUÍMICA	SUBJECT	DYNAMIC MODELS IN CHEMISTRY
CÓDIGO	757509311		
MÓDULO	COMPLEMENTARIO	MATERIA	MATEMÁTICAS
CURSO	4 <sup>º</sup>	CUATRIMESTRE	1 <sup>º</sup>
DEPARTAMENTO	CIENCIAS INTEGRADAS	ÁREA DE CONOCIMIENTO	FÍSICA APLICADA
CARÁCTER	OPTATIVA	CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

### DISTRIBUCIÓN DE CRÉDITOS

	TOTAL	TEÓRICOS GRUPO GRANDE	TEÓRICOS GRUPO REDUCIDO	PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA	PRÁCTICAS DE LABORATORIO	PRÁCTICAS DE CAMPO
ECTS	3	1.11	0.39	1.5	0	0

### DATOS DEL PROFESORADO

#### COORDINADOR

NOMBRE	ANTONIO ALGABA DURÁN		
DEPARTAMENTO	CIENCIAS INTEGRADAS		
ÁREA DE CONOCIMIENTO	MATEMÁTICA APLICADA		
UBICACIÓN	FACULTAD CCEE, PLANTA 4º, NÚCLEO 4º, DESPACHO 11		
CORREO ELECTRÓNICO	algaba@uhu.es	TELÉFONO	959219913
URL WEB		CAMPUS VIRTUAL	MOODLE

### DESCRIPCIÓN GENERAL DE LA ASIGNATURA

#### DESCRIPCIÓN GENERAL

**Modelos continuos y discretos. Bifurcaciones de sistemas dinámicos. Osciladores químicos.**

#### ABSTRACT

Continuous and discrete models. Bifurcations of dynamical systems. Chemical oscillators

#### OBJETIVOS: RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Con esta asignatura el alumno adquirirá los conceptos básicos de los Sistemas Dinámicos:

- 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.
- Establecer la relación entre los problemas reales y sus modelos matemáticos en términos de ecuaciones diferenciales.
- Modelizar y analizar cualitativamente-numéricamente algunos problemas elementales relacionados con sistemas químicos ( cinética de las reacciones químicas, autocatálisis, osciladores químicos ...).



Universidad  
de Huelva

# Grado en QUÍMICA

Curso 2019/2020



## REPERCUSIÓN EN EL PERFIL PROFESIONAL

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.

## RECOMENDACIONES AL ALUMNADO

Haber cursado las asignaturas de Matemáticas, Cálculo Numérico y Estadística y Ecuaciones Diferenciales y Métodos Numéricos.

## COMPETENCIAS

### COMPETENCIAS BÁSICAS

CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.

CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

B1 - Capacidad de análisis y síntesis.

B2 - Capacidad de organización y planificación.

B3 - Comunicación oral y escrita en la lengua nativa.

B4 - Conocimiento de una lengua extranjera.

B5 - Capacidad para la gestión de datos y la generación de información/conocimiento.

B6 - Resolución de problemas.

B7 - Capacidad de adaptarse a nuevas situaciones y toma de decisiones.

B8 - Trabajo en equipo.

B9 - Razonamiento crítico.

B10 - Capacidad de aprendizaje autónomo para el desarrollo continuo profesional.

B11 - Sensibilidad hacia temas medioambientales.

B12 - Compromiso ético.

### COMPETENCIAS GENERALES

CG1 - Que los estudiantes hayan desarrollado y demostrado poseer habilidades de aprendizaje y conocimientos procedentes de su campo de estudio, siendo capaces de aplicarlos en su trabajo, interpretando datos relevantes para emitir juicios de temas de diversa índole pudiendo transmitirlos a un público tanto especializado como no especializado.

### COMPETENCIAS TRANSVERSALES

### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

C21 - Aplicar los fundamentos matemáticos necesarios para entender y expresar con rigor científico las relaciones entre las

variables y las funciones físico-matemáticas, y la variación de dichas funciones respecto de sus variables.

C23 - Desarrollar métodos numéricos que permitan la resolución de problemas.

C26 - Resolver numéricamente ecuaciones diferenciales.

C27 - Desarrollar algoritmos que permitan la resolución de problemas de evolución con el ordenador.

Q2 - Capacidad de aplicar dichos conocimientos a la resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados.

## TEMARIO Y DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

### TEORÍA

1. Sistemas dinámicos continuos.
  - 1.1 Concepto de solución. Interpretación geométrica.
  - 1.2 Sistemas autónomos.
  - 1.3 Sistemas lineales planos. Estabilidad de las soluciones.
  - 1.4 Introducción a la teoría de bifurcaciones.
2. Modelos unidimensionales.
  - 2.1 Modelo de Malthus.
  - 2.2 Modelo logístico.
  - 2.3 El efecto Allee: modelos despensatorios.
  - 2.4 El modelo de Ludwig. Bifurcaciones y catastrofes.
  - 2.5 Explotación de recursos renovables.
- 3 Modelos bidimensionales y tridimensionales
  - 3.1 Modelos de interacción entre especies.
  - 3.2 Cinética de reacciones químicas
  - 3.3 Autocatálisis.
  - 3.4 Osciladores químicos biológicos.

### PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA

- Práctica 1.- Introducción al software a utilizar (2 h)
- Práctica 2.- Simulación de sistemas lineales (4 h)
- Práctica 3.- Análisis de sistemas no lineales. Bifurcaciones de sistemas con parámetros (4 h)
- Prácticas 4.- Estudio de modelos bidimensionales (5 h)

### METODOLOGÍA DOCENTE



Universidad  
de Huelva

# Grado en QUÍMICA

Curso 2019/2020



- Grupo grande
- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.
  - Utilización del aula de informática para reforzar los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos previamente.
  - Test y resolución de cuestiones teórico-prácticas.
  - Cualquier actividad dirigida que ayude a la adquisición de conocimientos, habilidades y destrezas.
  - Resolución de dudas.

- Prácticas de informática
- Clases presenciales relativas a los contenidos teóricos y prácticas (problemas) de la asignatura, utilizando recursos didácticos tales como transparencias, presentaciones informatizadas y videos.
  - Prácticas de laboratorio con grupos reducidos manejo de técnicas experimentales, discusión de resultados, obtención de conclusiones, presentación de una memoria final.
  - Utilización del aula de informática para reforzar los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos previamente.
  - Realización de presentaciones por los estudiantes de aspectos relativos al temario de la asignatura.
  - Test y resolución de cuestiones teórico-prácticas.
  - Cualquier actividad dirigida que ayude a la adquisición de conocimientos, habilidades y destrezas.
  - Resolución de dudas.

## CRONOGRAMA ORIENTATIVO I

SEMANAS (S):	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15
GRUPO GRANDE	T1	T1		T1	T1		T1	T1	T1		T1		T1		T1
GRUPO REDUCIDO															
PRÁCTICAS DE LABORATORIO															
PRÁCTICAS DE INFORMÁTICA			L1	L1		L1	L1	L1	L1	L1		L1		L1	L1
PRÁCTICAS DE CAMPO															

## EVALUACIÓN DE LA ASIGNATURA

PRIMERA EVALUACIÓN ORDINARIA (FEBRERO/JUNIO)

EVALUACIÓN CONTINUA

La evaluación contemplará, con una valoración numérica entre 0 y 10, los siguientes aspectos:

- la participación en clase (teórico-práctica / laboratorio) (Hasta 5 puntos)
- la realización de trabajos dirigidos opcionales (Hasta 5 puntos)
- la realización de problemas complementarios (Hasta 5 puntos)
- la realización de prácticas de laboratorio complementarias (Hasta 5 puntos)

Para superar la asignatura, el estudiante debe tener una calificación no inferior a 5.

### EVALUACIÓN FINAL

La evaluación única final consistirá en dos exámenes: uno de tipo teórico-práctico con un valor del 40% de la nota final que se realizará en el aula y otro de prácticas de laboratorio con un valor del 60% de la nota final, que se realizará en el aula de informática y consistirá en la resolución de problemas de tipo práctico usando Matlab.

En los criterios de evaluación se tendrá en cuenta el nivel de razonamiento, la exactitud en los cálculos, la adecuación de las respuestas, así como el nivel de expresión y presentación de los resultados.

¿Contempla una evaluación parcial?

NO

### SEGUNDA EVALUACIÓN ORDINARIA

El sistema de evaluación de esta convocatoria consistirá en dos exámenes: uno de tipo teórico-práctico con un valor del 40% de la nota final que se realizará en el aula y otro de prácticas de laboratorio con un valor del 60% de la nota final, que se realizará en el aula de informática y consistirá en la resolución de problemas de tipo práctico usando Matlab.

En los criterios de evaluación se tendrá en cuenta el nivel de razonamiento, la exactitud en los cálculos, la adecuación de las respuestas, así como el nivel de expresión y presentación de los resultados.

### TERCERA EVALUACIÓN ORDINARIA Y OTRAS EVALUACIONES

La evaluación consistirá en dos exámenes: uno de tipo teórico-práctico con un valor del 40% de la nota final que se realizará en el aula y otro de prácticas de laboratorio con un valor del 60% de la nota final, que se realizará en el aula de informática y consistirá en la resolución de problemas de tipo práctico usando Matlab.

En los criterios de evaluación se tendrá en cuenta el nivel de razonamiento, la exactitud en los cálculos, la adecuación de las respuestas, así como el nivel de expresión y presentación de los resultados.

### OTROS CRITERIOS DE EVALUACIÓN

¿Contempla la posibilidad de subir nota una vez realizadas las pruebas?

NO

Requisitos para la concesión de matrícula de honor

Obtener una calificación de 9 ó más puntos.

### REFERENCIAS

#### BÁSICAS

- **EDELSTEIN-KESHET, L.** Mathematical Models in Biology. Ed. McGraw-Hill, (2005).



Universidad  
de Huelva

# Grado en QUÍMICA

Curso 2019/2020



- **MURRAY, J.D.** Mathematical biology. Ed. Springer-Verlag, (2004).
- **ROMERO, J.L.; GARCIA, C.** Modelos y Sistemas Dinámicos. Servicio de Publicaciones de la Universidad de Cádiz, (1998).
- **SOLÉ, R. ; MANRUBIA S.** Orden y Caos en Sistemas Complejos. Ediciones de la Universidad Politécnica de Cataluña, (2001).
- **STROGATZ, S.H.** Nonlinear Dynamics and with applications to Physic, Biology, Chemistry an Engineering. Westview Press, (2000).

## ESPECÍFICAS

- **DOUBOVA, A.; GUILLEN F.** Un Curso de Cálculo Numérico. Secretariado de Publicaciones de la Universidad de Sevilla (2007) .
- **HALE, J.; KOCAK, H.** Dynamics and Bifurcations. Springer-Verlag (1996) .
- **HIRSCH, M.; SMALE S.** Ecuaciones diferenciales, sistemas dinámicos y álgebra lineal. Ed. Alianza Universidad, (1983).
- **LYNCH, S.** Dynamical Systems with applications using matlab. Birkhauser, (2004).
- **POLKING, J.; ARNOLD, D.** Ordinary Differential Equations Using MATLAB, (2003).

## OTROS RECURSOS