

Ciencias y modelos matemáticos: necesidad y futuro

MEMORIA FINAL

Compromisos y Resultados

Actuaciones Avaladas para la Mejora Docente

2017/2018

Título del proyecto
Ciencias y modelos matemáticos: necesidad y futuro

Responsable		
Apellidos	Nombre	NIF
Bruzón Gallego	María de los Santos	31210223M

1. Describa los resultados obtenidos a la luz de los objetivos y compromisos que adquirió en la solicitud de su proyecto¹. Copie en las dos primeras filas de cada tabla el título del objetivo y la descripción que incluyó en el apartado 2 de dicha solicitud e incluya tantas tablas como objetivos contempló.

Objetivo nº 1	Preparación de un artículo para su publicación		
Indicador de seguimiento o evidencias:	<i>Evaluación de la elaboración de un artículo científico</i>		
Valor numérico máximo que puede tomar el indicador:	10		
Fecha prevista para la medida del indicador:	<i>Al finalizar el curso</i>	Fecha de medida del indicador:	<i>Al finalizar el curso</i>
Actividades previstas:	<i>Seminarios impartidos por profesionales de prestigio relacionados con modelos matemáticos de diversas ramas de las ciencias</i>		
Actividades realizadas y resultados obtenidos:	<i>Seminarios impartidos por profesionales de prestigio relacionados con modelos matemáticos de diversas ramas de las ciencias</i>		

Objetivo nº 2	Describir modelos matemáticos que surgen en otras ramas de las ciencias		
Indicador de seguimiento o evidencias:	<i>Evaluación de la elaboración de un survey</i>		
Valor numérico máximo que puede tomar el indicador:	10		
Fecha prevista para la medida del indicador:	<i>Al finalizar el curso</i>	Fecha de medida del indicador:	<i>Al finalizar el curso</i>

¹ La relación incluida en el documento *Actúa* que adjuntó en su solicitud a través de la plataforma de la Oficina Virtual.

Actividades previstas:	<i>Elaboración de un artículo científico usando LaTeX. Talleres para aprender a utilizar LaTeX para la creación de un artículo</i>
Actividades realizadas y resultados obtenidos:	<i>Elaboración de un artículo científico usando LaTeX. Talleres para aprender a utilizar LaTeX para la creación de un artículo</i>

Objetivo nº 3	Obtención de soluciones analítica y numéricas del modelo		
Indicador de seguimiento o evidencias:	<i>Evaluación de la elaboración de un artículo científico</i>		
Valor numérico máximo que puede tomar el indicador:	10		
Fecha prevista para la medida del indicador:	<i>Al finalizar el curso</i>	Fecha de medida del indicador:	<i>Al finalizar el curso</i>
Actividades previstas:	<i>Seminarios teórico/práctico sobre soluciones analíticas de modelos. Seminario teórico/práctico sobre soluciones numéricas de modelos.</i>		
Actividades realizadas y resultados obtenidos:	<i>Seminarios teórico/práctico sobre soluciones analíticas de modelos. Seminario teórico/práctico sobre soluciones numéricas de modelos.</i>		

2. Marque una X bajo las casillas que correspondan en la siguiente tabla. Describa las medidas a las que se comprometió en la solicitud y las que ha llevado a cabo.

Compromiso de compartición / difusión de resultados en el entorno universitario UCA adquirido en la solicitud del proyecto				
1. Sin compromisos	2. Compromiso de impartición de una charla o taller para profesores	3. Adicionalmente fecha y centro donde se impartirá	4. Adicionalmente programa de la presentación	5. Adicionalmente compromiso de retransmisión o grabación para acceso en abierto
	X	X		
Descripción de las medidas comprometidas				
Se invitará a participar en todos los seminarios a los profesores de la Facultad de Ciencias a lo largo del curso.				
Descripción de las medidas que se han llevado a cabo				
<p>A partir de la aprobación del proyecto de innovación se creó un curso de doctorado que fue aprobado para su impartición en la escuela de doctorado EDUCA: https://posgrado.uca.es/web/short/cursodoc.php?idcurso=320</p> <p>También, las actividades propuestas fueron ofrecidas para ser impartidas en la Universidad de Granada y en la web https://wpd.ugr.es/~iemath/es/events/event/modelos-matematicos-de-las-ciencias-doctorado-en-matematicas/ se puede encontrar la información de las actividades realizadas.</p> <p>Se impartieron 10 seminarios de hora y media cada uno en el calendario que se indica a continuación</p>				
SEMANA	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
28/05 al 01/06				SEM 4: 1/6 Galindo
04/06 al 08/06	SEM 1: 5/6 Gandarias y Bruzón		SEM 1: 7/6 Gandarias y Bruzón	SEM 2: 8/6 Víctor Pérez
11/06 al			SEM 7:14/6	SEM 8: 15/6

15/06			M ^a Victoria Velasco y Miguel Bustamante	M ^a Victoria Velasco y Miguel Bustamante
18/06 al 22/06	SEM 5: 19/06 Clara Pereyra		SEM 11: 21/06 Pilar García	SEM 12: 22/6 José Luis Legido
25/06 al 29/06	SEM 3: 26/6 David Zorrilla		SEM 9: 12/6 Bruzón SEM 6: 12/6 Miguel Piñar	SEM 10:29/6 Juan Belmonte

A modo de ejemplo, se describe el seminario sobre Modelos matemáticos y herramientas estadísticas aplicados en Química, impartido por la profesora M^a Dolores Galindo Riaño

Estos modelos y herramientas quimiométricas se aplican para seleccionar o diseñar procedimientos y experimentos óptimos, y proveer información relevante a partir de datos químicos. En este seminario se explica y define el concepto de la Quimiometría como disciplina química que utiliza las matemáticas, la estadística y la lógica formal en el ámbito de la Química. Se ejemplifica su uso en el proceso analítico, durante el muestreo, la optimización de los pretratamiento de las muestras, el tratamiento de las señales obtenidas durante la medida, el proceso de contratos, validación y calibración de los métodos, la propagación de errores, el tratamiento de los resultados y la definición de pautas de comportamiento de las variables/muestras/analitos.

Los casos de estudio analizados en el seminario son:

- a- Concepto de repetibilidad y reproducibilidad de la medida aplicado al análisis de cromo en aguas por espectroscopía de absorción atómica.
- b- Propagación de errores durante la valoración de una disolución de Fe(III) con sulfocianuro.
- c- Test de contraste aplicado a la comparación del análisis de Au(III) en una muestra real con el contenido de una muestra de referencia certificada.
- d- Test de contraste de dos medias experimentales aplicado a la optimización del tiempo de reflujo en la extracción de Sn en alimentos con HCl.
- c- Modelos de regresión lineal en la cuantificación de un cromóforo por espectroscopía de absorción molecular UV-Vis.
- d- Empleo de la derivada de la señal analítica para resolver interferencias espectrales.
- e- Series temporales aplicadas al comportamiento del análisis de parámetros físico-químicos en ecosistemas acuáticos.
- f- Regresión multivariante en la calibración de mezclas de analitos:
 - Análisis de los iones Fe(III), Al(III) y Cu(II) en muestras de agua de plantas desaladoras de agua de mar.
 - Análisis de la superficie de muestras de uva con un sensor IR y correlación de las medidas con el contenido en polifenoles totales
- g- Análisis por componentes principales (PCA), aplicado a los parámetros de calidad de las aguas del Río Guadalquivir.

En el seminario “Modelos matemáticos y su aplicación en el campo de los fluidos supercríticos”, se ha dado una breve introducción a las características y usos de los mismos, centrándose en las aplicaciones de extracción y precipitación supercrítica. Tras su definición, modos de operar y ejemplos, se han desarrollado los modelos matemáticos utilizados para describir los procesos de transferencia de materia que tienen lugar, la termodinámica y la hidrodinámica de los mismos.

Para la transferencia de materia, se suelen usar la ecuación de continuidad, considerando a la partícula como una esfera de radio r donde la difusión tiene lugar únicamente en la dirección radial:

Resolviendo considerando la transformada de Fourier:

$$N_i = -c_{i0} D_{mi} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 x_{ir})}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial (x_{i\theta} \sin \theta)}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial x_{i\phi}}{\partial \phi} \right)$$

$$N_i = 4R(c_{ij} - c_i) \left[\sum_k \frac{(\sin \beta_{ki} - \beta_{ki} \cos \beta_{ki})^2}{\beta_{ki}^3 (2\beta_{ki} - \sin 2\beta_{ki})} (1 - e^{(\beta_{ki}/R)^2 (-D_{mi})}) \right]$$

Con respecto a la Termodinámica, es necesario conocer el punto crítico de mezcla, aplicando el criterio termodinámico de equilibrio de fases y usando, principalmente la ecuación de estado de Peng-Robinson para mezclas:

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i \phi_i^{sat} P_i^{sat}}{\hat{\lambda}_i^F D} \exp \frac{(P - P_i^{sat}) \bar{V}_i^L}{RT}$$

$$\ln \hat{\phi}_i^F = \frac{b_i}{\bar{V} - b} - \ln \left[z \left(1 - \frac{b}{\bar{V}} \right) \right] + \frac{a \alpha}{2(\sqrt{2} + 1) b RT} \left[\frac{b_i}{b} - \frac{2 \sum_j y_j (a \alpha)_{ij}}{a \alpha} \right] \ln \left[\frac{1 + (\sqrt{2} + 1) b / \bar{V}}{1 - (\sqrt{2} - 1) b / \bar{V}} \right]$$

Con respecto a la hidrodinámica, se trabaja principalmente con número adimensionales, siendo necesario conocer la velocidad crítica de atomización:

$$Z^{**} = \frac{\eta_l \cdot v}{\sigma} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \cdot \sqrt{\frac{\eta_l}{\eta_g}} \quad v_c = 29 \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_g \cdot d_n}} \text{ (cm/s)}$$

Se impartieron 5 talleres para la elaboración de un survey en el calendario que se cita a continuación:

JULIO (UCA)

SEMANA	LUNES	MARTES	MIÉRCOLES	JUEVES	VIERNES
02/07 al 06/07				Actividades 1: 11:00 a 13:00 Alejandro Pérez	
09/07 al 13/07	Actividades 2: 10:30 a 13:30 Antonia Castaño	Actividades 3: 10:30 a 14:00 Elena Recio y Rafael de la Rosa	Actividades 4: 10:30 a 14:00 Elena Recio y Rafael de la Rosa		Actividades 5: 10:30 a 14:00 Elena Recio y Rafael de la Rosa

Se mantuvieron reuniones virtuales entre los miembros del proyecto y tres reuniones presenciales. Durante la estancia de los conferenciantes, los miembros del proyecto los han atendido manteniendo reuniones con ellos.

Las actividades realizadas por el profesorado fueron recibidas por los siguientes doctorandos de diversos programas de doctorado. Todos los alumnos han participado activamente.

- 15439083B, ALBA MUÑOZ, GONZALO
- 1250839A, EGIDO AMBROSY, JOSÉ JULIO
- 53582190X, GARRIDO LETRAN, TAMARA MARIA

4. AN444385, GONZALEZ CONEO, JORGE
5. 45380272F, MARQUEZ LOZANO, ALMUDENA DEL PILAR
6. 10879354, NUÑEZ PEREZ, BERNARDO
7. 32065164J, PÉREZ GAGO, ALBERTO
8. 1140842940, VILLANUEVA CANTILLO, JEYMS

Se hizo difusión de los seminarios y se invitó a la participación mediante correo electrónico y a través de la web de los cursos organizados.