

GUIA DIDACTICA



Matemáticas y Ciencia Básica

24 de marzo - 4 de abril de 2003

**Aula Magna de las Facultades de
Matemáticas y Física**

<http://www.anamat.ull.es/sctm03>



**Cursos Universitarios Interdisciplinarios 2003
Vicerrectorado de Extensión Universitaria
Universidad de La Laguna**

Diseño y maquetación: María Isabel Marrero Rodríguez
Edita: CAMPUS - C/. Delgado Barreto, 32 - 38204 La Laguna (Tenerife)

ISBN: 84-932960-4-X (Obra completa), 84-932960-2-3 (Módulo 2)
Depósito Legal: TF-1318/2003

Curso Universitario Interdisciplinar
“Sociedad, Ciencia, Tecnología y Matemáticas” 2003
Guía Didáctica del Módulo 2

María Isabel Marrero Rodríguez
Rodrigo Trujillo González

(editores)

La Laguna, marzo de 2003

Índice

Presentación	7
Programa	10
<i>José M. Méndez Pérez</i> La investigación en Matemáticas, ¿para qué?	12
<i>Daniel Alonso Ramírez</i> Física y Matemáticas	14
<i>Justo R. Pérez Cruz</i> Espectroscopía y Procesos Estocásticos	16
<i>Rafael Sala Mayato</i> Mecánica Cuántica: ¿Intuición o Matemáticas?	17
<i>Jesús González de Buitrago Díaz</i> La Teoría de la Relatividad y las Teorías “Gauge”	19
<i>Basilio Ruiz Cobo</i> Métodos de Inversión en Astrofísica	20
<i>José C. Sabina de Lis</i> Introducción a la Biología Matemática	21
<i>Néstor V. Torres Darias</i> Modelización matemática y optimización de bioprocesos: Métodos y aplicaciones	23
<i>Matías Llabrés Martínez</i> Las Matemáticas en el I+D galénico	25
<i>Miguel Á. Rodríguez Delgado</i> Las Matemáticas y la Química: Quimiometría y Cualimetría	27

Presentación



*Curso Universitario Interdisciplinar
“Sociedad, Ciencia, Tecnología y Matemáticas” 2003*

Vicerrectorado de Extensión Universitaria
Universidad de La Laguna

Objetivos

Las Matemáticas desempeñan un papel protagonista en nuestros días. Como herramienta fundamental para el análisis, la cuantificación y la modelización de fenómenos, están presentes en todas las disciplinas y aparecen continuamente en las más variadas situaciones de la vida cotidiana. Sin ellas no serían posibles los avances científicos y tecnológicos que sustentan la sociedad de la información o contribuyen al bienestar de sus ciudadanos.

Paradójicamente, tanto el conocimiento como el reconocimiento público de las Matemáticas son escasos. El objetivo del presente Curso es destacar y difundir su importancia en los ámbitos social, científico y tecnológico, familiarizando al alumno con las herramientas y los métodos matemáticos propios de las diferentes áreas de conocimiento, necesarios para entender el mundo en que vivimos.

Oferta formativa

El Curso forma parte de la Oferta Oficial de Créditos de Libre Elección de la Universidad de La Laguna y tiene una carga lectiva de 60 horas (6 créditos). Se estructura en 3 Módulos optativos e independientes de 20 horas (2 créditos), distribuidos en 10 sesiones de 2 horas cada una, de acuerdo al siguiente calendario:

Módulo 1: Matemáticas y Sociedad

10-21 de marzo de 2003, de 18:00 a 20:00 horas.

Módulo 2: Matemáticas y Ciencia Básica

24 de marzo - 4 de abril de 2003, de 18:00 a 20:00 horas.

Módulo 3: Matemáticas y Tecnología

17-28 de marzo de 2003, de 16:00 a 18:00 horas.

Contenidos

El Módulo 1, *Matemáticas y Sociedad*, reflexionará sobre las Matemáticas como elemento de creación cultural y analizará los modelos matemáticos propios de las ciencias sociales y económicas. El Módulo 2, *Matemáticas y Ciencia Básica*, versará sobre algunos aspectos de la interacción entre las Matemáticas y la Física, la Astrofísica, la Biología y la Química. El Módulo 3, *Matemáticas y Tecnología*, expondrá diversos usos tecnológicos e industriales de las Matemáticas, entre ellos: construcción de telescopios, visión por ordenador,

criptografía y seguridad de la información, radiodiagnóstico y radioterapia, creación de un espacio acústico virtual para invidentes, explotación de recursos pesqueros y diseño de carrocerías y fuselajes.

Profesorado

Cada tema será impartido por expertos de reconocido prestigio en la materia correspondiente, pertenecientes a la Sociedad Canaria “Isaac Newton” de Profesores de Matemáticas, al Instituto de Astrofísica, el Centro Oceanográfico y el Hospital Universitario de Canarias, así como a las Universidades de La Laguna, Las Palmas de Gran Canaria, Autónoma de Madrid, Cantabria y Santiago de Compostela, a un nivel divulgativo pero riguroso, y con especial énfasis en las aplicaciones a la resolución de problemas reales de nuestro entorno.

Lugar de celebración

Todas las sesiones del Curso tendrán lugar en el Aula Magna de las Facultades de Matemáticas y Física de la Universidad de La Laguna.

Certificado de Asistencia

Habrà un control de asistencia en cada Módulo. La Universidad de La Laguna, por medio del Vicerrectorado de Extensión Universitaria, expedirá gratuitamente un Certificado de Asistencia a los alumnos matriculados que hayan atendido como mínimo al 80% del total de horas del Módulo. Para obtener este Certificado no es necesario someterse a prueba de evaluación alguna.

Convalidación por Créditos de Libre Elección

Sólo aparecerán en acta los alumnos que hayan asistido como mínimo al 80% de la carga lectiva de un Módulo. Aquellos que, además, superen la correspondiente prueba de evaluación recibirán un Certificado de Asistencia, Aptitud y Convalidación por Créditos de Libre Elección, expedido por el Vicerrectorado de Extensión Universitaria, en el que figurará toda la información del Módulo y la calificación obtenida. Quienes no realicen o no superen esta evaluación recibirán únicamente el Certificado de Asistencia.

La prueba de evaluación consistirá en la entrega de una memoria individual de entre 3 y 5 páginas sobre los contenidos del Módulo, que sólo podrá ser calificada con SUSPENSO o APROBADO. Para subir esta calificación será necesario someterse a un examen tipo test.

Cada Módulo es convalidable por 2 Créditos de Libre Elección.

Organización

El presente Curso forma parte de la programación de Cursos Universitarios Interdisciplinares 2003 del Vicerrectorado de Extensión Universitaria de la Universidad de La Laguna. Colaboran en su organización la Facultad de Matemáticas y el Departamento de Análisis Matemático de esta Universidad.

El Equipo Coordinador del Curso está integrado por los siguientes Profesores Titulares del Departamento de Análisis Matemático:

Directora:

María Isabel Marrero Rodríguez

Coordinadores Módulo 1:

José Barrios García, María Isabel Marrero Rodríguez

Coordinadores Módulos 2 y 3:

María Isabel Marrero Rodríguez, Rodrigo Trujillo González

Para más información sobre los aspectos académicos del Curso, consultar la página web <http://www.anamat.ull.es/sctm03> o contactar con el Equipo Coordinador a través del correo electrónico sctm03@anamat.csi.ull.es.

Matrícula

La matrícula se formalizará en el Vicerrectorado de Extensión Universitaria, C/ Viana, 50 - 38201 La Laguna (Tenerife), de 9:30 a 14:00 horas (lunes a viernes). Las tasas de matrícula son las siguientes:

Un Módulo:

Estudiantes, desempleados, jubilados: 25,24€ (4200 pts).

Profesorado y PAS de la Universidad de La Laguna: 28,85€ (4800 pts) - 32,45€ (5400 pts) [consultar].

Tarifa General: 36,06€ (6000 pts).

Módulos sucesivos:

10% de reducción sobre las tasas anteriores.

Para más información sobre los aspectos administrativos del Curso, dirigirse al Vicerrectorado de Extensión Universitaria a través del correo electrónico cdvera@ull.es o el teléfono 922 319 616, de 8:00 a 15:00 horas (lunes a viernes).

Programa

Módulo 2: *Matemáticas y Ciencia Básica*

24 de marzo - 4 de abril, 18:00-20:00 horas

Coordinadores: *María Isabel Marrero Rodríguez, Rodrigo Trujillo González*

lunes 24



La investigación en Matemáticas, ¿para qué?

José M. Méndez Pérez

Catedrático de Análisis Matemático de la Universidad de La Laguna

martes 25



Física y Matemáticas

Daniel Alonso Ramírez

Profesor Titular de Física Aplicada de la Universidad de La Laguna

miércoles 26

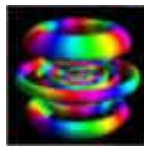


Espectroscopía y Procesos Estocásticos

Justo R. Pérez Cruz

Profesor Titular de Física Aplicada de la Universidad de La Laguna

jueves 27



Mecánica Cuántica: ¿Intuición o Matemáticas?

Rafael Sala Mayato

Profesor Titular de Física Aplicada de la Universidad de La Laguna



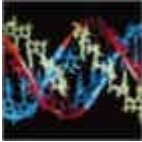


viernes 28



La Teoría de la Relatividad y las Teorías “Gauge”

Jesús González de Buitrago Díaz

Profesor Titular de Astronomía y Astrofísica de la Universidad de La Laguna e Investigador del Instituto de Astrofísica de Canarias

- lunes 31  **Métodos de Inversión en Astrofísica**
Basilio Ruiz Cobo
Profesor Titular de Astronomía y Astrofísica de la Universidad de La Laguna
e Investigador del Instituto de Astrofísica de Canarias
- martes 1  **Introducción a la Biología Matemática**
José C. Sabina de Lis
Catedrático de Matemática Aplicada de la Universidad de La Laguna
- miércoles 2  **Modelización matemática y optimización de bioprocesos: Métodos y aplicaciones**
Néstor V. Torres Darías
Profesor Titular de Bioquímica y Biología Molecular de la Universidad de La Laguna
- jueves 3  **Las Matemáticas en el I+D galénico**
Matías Llabrés Martínez
Catedrático de Farmacia y Tecnología Farmacéutica de la Universidad de La Laguna
- viernes 4  **Las Matemáticas y la Química: Quimiometría y Cualimetría**
Miguel Á. Rodríguez Delgado
Profesor Titular de Química Analítica de la Universidad de La Laguna

La investigación en Matemáticas, ¿para qué?



José M. Méndez Pérez

Catedrático de Análisis Matemático
Departamento de Análisis Matemático
Universidad de La Laguna

Resumen

Bajo el título de esta conferencia alguien podría sospechar que se esconde la dicotomía matemáticas puras y matemáticas aplicadas, ya que parece que se pregunta si la investigación matemática tiene que tener un *para qué*, es decir, una utilidad inmediata. Y ciertamente es así, pero no en un sentido de enfrentamiento, de exclusión, sino como aspectos diferentes de una misma ciencia. Siempre hablaré de *matemáticas*, así en plural, no para poner en duda su unidad como cuerpo científico, sino para incluir todo tipo de actividad matemática.

Dividiré mi intervención en tres partes. En la primera se analizará el origen y la evolución de las matemáticas, haciendo un somero repaso de su historia; en la segunda se expondrá la visión que algunos matemáticos excepcionales tienen sobre la investigación en este campo y, finalmente, en la tercera se ilustrará la presencia de las matemáticas en diversos dominios, algunos de ellos insospechados hasta no hace tanto tiempo.

Bibliografía

- A.D. Aleksandrov et al.: *La Matemática: Su contenido, métodos y significado, Vol. 1*. Alianza Editorial, Madrid, 1973.
- J. Dieudonné: *En honor del espíritu humano: Las matemáticas hoy*. Alianza Editorial, Madrid, 1989.
- G.H. Hardy: *Autojustificación de un matemático*. Ariel, Barcelona, 1981.
- D. Kirschner: Using Mathematics to understand HIV immune dynamics. *Notices of the A.M.S.* **43** (1996), 191-202.
- M. Martin-Deschamps, P. Le Tallec (editores): *L'explosion des mathématiques*. S.M.F. y S.M.A., Paris, 2002.
- A. Martínón (editor): *Las matemáticas del siglo XX: Una mirada en 101 artículos*. Nivola, Madrid, 2000.
- J.L. Montesinos: *Las matemáticas en la historia y la historia de las matemáticas*. Conferencia en la Universidad Internacional Menéndez Pelayo, S/C de Tenerife, 1999.
- J.R. Newman: *Sigma: El mundo de las matemáticas, Vol. 5*. Ediciones Grijalbo, Barcelona, 1976.
- J.R. Ockendon: The changing face of mathematics in industry. *Boletín SEMA* **9** (1996), 23-30.
- L.M.K. Vandersypen et al.: Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance. *Nature* **414** (2001), 883-887.

En Internet

<http://www.claymath.org>

Clay Mathematics Institute
Cambridge, Massachusetts (USA).

<http://www.msri.org>

Mathematical Sciences Research Institute
Berkeley, California (USA).

Física y Matemáticas



Daniel Alonso Ramírez

Profesor Titular de Física Aplicada
Departamento de Física Fundamental y Experimental, Electrónica y
Sistemas
Universidad de La Laguna

<http://eru.dfis.ull.es>

Resumen

En este seminario se discutirán algunas relaciones que existen entre la Física y las Matemáticas a través de algunos ejemplos en el contexto de la Física y el papel de las Matemáticas en su desarrollo y formalización.

En el estadio inicial de una teoría física el papel de las Matemáticas es, fundamentalmente, el de un lenguaje, aquél en el que se expresan las ideas e intuiciones del científico. En un estadio posterior, la teoría necesita de una mayor formalización y por tanto de un mayor rigor en la definición de las hipótesis de partida y ulterior desarrollo. En este punto el carácter generativo de las Matemáticas pasa a un primer plano, ampliando las capacidades de la teoría desde el punto de vista metodológico y fundamental.

El paso desde una teoría primigenia hasta su completa axiomatización en unos cuantos elementos requiere de las Matemáticas. No obstante, sería algo radical pensar que las Matemáticas son un lenguaje que contiene todo lo que la Física ha descubierto. De la misma forma que algún diccionario histórico de nuestra lengua contiene seguramente todas las palabras que están en el Quijote, pero no contiene *El Quijote*.

Nos interesaremos en particular en algunos sistemas físicos cuánticos, algunos mecánico-estadísticos y algunos fenómenos no lineales, intentando poner énfasis en la relación que existe entre la definición de las nociones físicas y los objetos matemáticos asociados a dichas nociones.

Bibliografía

- D. Alonso: *Semiclassical Quantization of Classically Chaotic Systems*. Tesis Doctoral, Universidad Libre de Bruselas, 1995.
- D. Alonso: Escape dynamics of photons from black-holes. *En preparación* (2003).
- V.I. Arnold, A. Avez: *Ergodic Problems of Classical Mechanics*. W.A. Benjamin, 1968.
- N.L. Balasz, A. Voros: *Phys. Rep.* **143**, 109 (1986).
- A. Bohm: *Quantum Mechanics: Foundations and Applications (3ª edición)*. Springer, 1994.
- R.P. Feynman: *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948).
- P. Gaspard: *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics*. Cambridge University Press, 1998.
- P. Gaspard, D. Alonso: *Phys. Rev. A* **45**, 8383 (1992).
- P. Gaspard, D. Alonso, I. Bughardt: *Adv. Chem. Phys.* **90**, 105 (1995).
- M.C. Gutzwiller: *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer, 1990.
- B.O. Koopman: *Proc. Natl. Acad. Sci.* **17**, 315 (1931).
- L.D. Landau, E. Lifshitz: *Statistical Physics*. Butterworth-Heinemann, 1980.
- L.D. Landau, E. Lifshitz: *Mecánica*. Reverté, 1985.

-
- G. Ludwig: *Wave Mechanics*. Pergamon Press, 1968.
- I. Marcikic et al.: *Nature* **421**, 509 (2003).
- M.L. Metha: *Random Matrices*. Academic Press, 1991.
- M.A. Nielsen, I.L. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- M. Pollicot: *Invent. Math.* **81**, 413 (1986).
- M. Pollicot: *Invent. Math.* **85**, 147 (1986).
- M. Reed, B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics: I, Functional Analysis*. Academic Press, 1980.
- L. Reichl: *The Transition to Chaos: In Conservative Classical Systems: Quantum Manifestations*. Springer, 1992.
- D. Ruelle: *Phys. Rev. Lett.* **56**, 405 (1986).
- E. Schrödinger: *Annalen der Physik* **79**, 361 (1926).
- E. Schrödinger: *Annalen der Physik* **79**, 489 (1926).
- A. Selberg: *J. Ind. Math. Soc.* **20**, 47 (1956).
- C.E. Shannon, W. Weaver: *The mathematical theory of communication*. The University of Illinois Press, 1949.
- A. Terras: *Harmonic Analysis on Symmetric Spaces and Applications, Vols. I, II*. Springer, 1985.
- J. Von Neumann: *Proc. Natl. Acad. Sci.* **18**, 70 (1932).
- E. Wigner: *Comm. Pure Appl. Math.* **13**, 1 (1960).
- [Disponible en <http://nedwww.ipac.caltech.edu/level5/March02/Wigner/Wigner.html>].

Espectroscopía y Procesos Estocásticos



Justo R. Pérez Cruz

Profesor Titular de Física Aplicada
Departamento de Física Fundamental y Experimental, Electrónica y
Sistemas
Universidad de La Laguna

Resumen

La relación de la espectroscopía molecular a la estructura molecular es un campo muy estudiado desde hace bastante tiempo. Sin embargo, el uso de la espectroscopía molecular para estudiar procesos dinámicos en sistemas moleculares en fases condensadas es un campo de mucha más reciente aparición.

El desarrollo de la tecnología láser y de los ordenadores y su utilización en la experimentación permiten que los espectros, tanto de absorción como de dispersión, sean medidos con elevada precisión. Asimismo, en los últimos años se han desarrollado diversas técnicas espectroscópicas, basadas fundamentalmente en la posibilidad de generar pulsos de láser cada vez más cortos.

El objetivo que nos ocupa es el de revelar desde dichos experimentos propiedades fundamentales de las moléculas que constituyen los sistemas materiales, no sólo desde un punto de vista estructural, sino desde el punto de vista de sus interacciones y propiedades dinámicas.

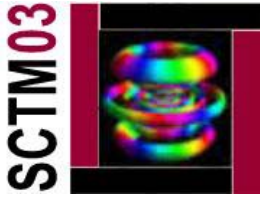
En un experimento espectroscópico, el investigador perturba el sistema material con un campo externo (usado como sonda), y analiza el efecto producido por la perturbación en el sistema material. El efecto inducido puede ser expresado en términos de una cierta función de correlación temporal, que describe el comportamiento dinámico de las fluctuaciones espontáneas en torno al estado de equilibrio.

De forma cualitativa, una función de correlación temporal describe la persistencia de una determinada propiedad del sistema hasta que es promediada por las fluctuaciones espontáneas debidas al movimiento microscópico de las moléculas del sistema.

Por tanto, la comprensión de un experimento espectroscópico está íntimamente relacionada al entendimiento de los procesos de fluctuación espontánea dependientes del tiempo, lo que nos lleva a detenernos en el análisis de los procesos estocásticos.

En la presente charla se hace un repaso de conceptos básicos relativos a los procesos estocásticos, se detallan distintos tipos de procesos estocásticos y se toma la espectroscopía infrarroja de moléculas disueltas en líquidos simples como ejemplo de su aplicación.

Mecánica Cuántica: ¿Intuición o Matemáticas?



Rafael Sala Mayato

Profesor Titular de Física Aplicada
Departamento de Física Fundamental II
Universidad de La Laguna

Resumen

La mecánica cuántica es, sin lugar a dudas, la principal teoría física del siglo XX. Un buen número de campos de la física moderna, tales como la física atómica y molecular, el estado sólido y la “ciencia de materiales”, la física nuclear, la física de partículas, o la física del láser, son, en definitiva, aplicaciones de la mecánica cuántica. La teoría cuántica subyace, además, en la explicación microscópica de todos los fenómenos químicos y biológicos, y es la base de gran parte de la tecnología más avanzada.

Desde el punto de vista matemático sus aspectos formales han sido siempre de gran interés. El papel que han desempeñado las matemáticas en su proceso de aparición y posterior desarrollo ha sido crucial. Presentamos aquí un breve resumen de las herramientas matemáticas básicas usadas en la mecánica cuántica. No se hará hincapié tanto en sus aspectos más formales, sino en su relación con la física del mundo que trata de explicar.

Bibliografía

- M. Beller: *The Quantum Dialogue*. The University of Chicago Press.
D. Bohm: *Quantum Theory*. Dover.
R. Courant, D. Hilbert: *Methods of Mathematical Physics*. Wiley-Interscience.
B. D’Spagnat: *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*. Benjamin.
R.P. Feynman: *Lecturas de Física, Vol. III*. Addison-Wesley Iberoamericana.
R.P. Feynman: *The Character of the Physical Law*. Modern Library.
A. Galindo, P. Pascual: *Mecánica Cuántica*. Eudema Universidad.
M. Jammer: *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*. Princeton University Press.
J.M. Jauch: *Foundations of Quantum Mechanics*. Addison-Wesley.
J. von Neumann: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer.
R. Omnès: *The Interpretation of Quantum Mechanics*. Princeton University Press.

En Internet

<http://phys.educ.ksu.edu>

Visual Quantum Mechanics
National Science Foundation (USA).

<http://plato.stanford.edu/entries/qm>

Quantum Mechanics
Stanford Encyclopedia of Philosophy.

http://www-gap.dcs.st-and.ac.uk/~history/HistTopics/The_Quantum_age_begins.html

A history of Quantum Mechanics

The MacTutor History of Mathematics archive.

<http://www.chemistry.ohio-state.edu/betha/qm>

An introduction to Quantum Mechanics

Betha Chemistry Tutorial at The Ohio State University.

La Teoría de la Relatividad y las Teorías “Gauge”



Jesús González de Buitrago Díaz

Profesor Titular de Astronomía y Astrofísica del Departamento de Astrofísica de la Universidad de La Laguna
Investigador del Instituto de Astrofísica de Canarias

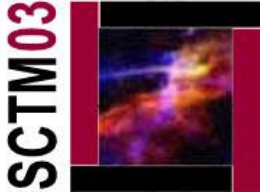
Resumen

En esta charla exponemos, en forma sucinta, las bases conceptuales de la Relatividad General y de las teorías “gauge”. En la forma más elemental posible, presentamos las Ecuaciones de Einstein del campo gravitatorio así como el desarrollo histórico inicial que, posteriormente, daría lugar a las modernas teorías “gauge” que describen las interacciones entre partículas elementales. También incluimos una breve introducción a los aspectos más esenciales de dichas teorías.

Bibliografía

- I.J.R. Aitchison, A.J.G. Hey: *Gauge Theories in Particle Physics*. Adam Hilger, 1989.
F. London: Quantenmechanische Deutung der Theorie von Weyl. *Z. Phys.* **42** (1927), 375-389.
C.W. Misner, K.S. Thorne, J.A. Wheeler: *Gravitation*. Freeman & Company, 1973.
W. Pauli: *Theory of Relativity*. Dover, 1981.
H. Weyl: Zur Gravitationstheorie. *Ann. Phys.* **54** (1917), 117-145.
H. Weyl: Gravitation und Elektrizität. *Sitz. Preuss. Akad. Wiss.* (1918), 465-480.

Métodos de Inversión en Astrofísica



Basilio Ruiz Cobo

Profesor Titular de Astronomía y Astrofísica del Departamento de
Astrofísica de la Universidad de La Laguna
Investigador del Instituto de Astrofísica de Canarias

Introducción a la Biología Matemática



José C. Sabina de Lis

Catedrático de Matemática Aplicada
Departamento de Análisis Matemático
Universidad de La Laguna

Resumen

Las relaciones esporádicas entre la matemática y la biología son tan antiguas como la propia matemática. Puede afirmarse, sin embargo, que sólo muy recientemente se han realizado esfuerzos para crear un cuerpo de doctrina especializado en estudiar y pronosticar el comportamiento de los seres vivos y de los complejos sistemas asociados con la vida. Si bien gran parte de las matemáticas empleadas – a partir del siglo XIX con Mendel y Darwin – en el estudio de la biología tienen que ver con la Estadística, es todavía más reciente aún el uso de las ecuaciones diferenciales y las técnicas de la mecánica de medios continuos en la modelización de fenómenos biológicos. La charla describirá algunos escenarios donde se usa este último enfoque “determinista”. A saber: la dinámica de poblaciones (modelos discretos, continuos y estructurados por edades), cinética de reacciones catalizadas enzimáticamente (ciclos de feedback, osciladores químicos, osciladores biológicos, osciladores acoplados), transmisión de impulsos nerviosos, y algunos modelos sobre morfogénesis (sistemas de reacción-difusión, inestabilidad de Turing, “pattern formation”).

Bibliografía

- T. D'Arcy: *On Growth and Form* (reimpresión). Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
V.I. Arnold: *Catastrophe Theory*. Springer, Berlin, 1984.
E. Beltrami: *Mathematics for Dynamic Modeling*. Academic Press, New York, 1987.
M. Braun: *Differential Equations and its Applications*. Springer Verlag, Berlin, 1978.
J. Cronin: Some mathematics of biological oscillators. *SIAM Review* **19** (1977), no. 1, 100-138.
J. Cronin: *Mathematical aspects of Hodgkin-Huxley neural theory*. Cambridge Studies on Mathematical Biology, Cambridge, 1987.
R.L. Devaney: *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*. Addison-Wesley, Massachusetts, 1989.
P.C. Fife: *Mathematical aspects of reacting and diffusing systems*. Lecture Notes in Biomathematics **28**, Springer Verlag, New York, 1979.
A. Gierer, H. Meinhardt: A theory of Biological Pattern Formation. *Kybernetik* **12** (1972), 30-39.
S.P. Hastings: Some mathematical problems from neurobiology. *Amer. Math. Monthly* **82** (1975), 881-895.
S.P. Hastings, J.D. Murray: The existence of oscillatory solutions in the Field-Noyes model for the Belousov-Zhabotinskii reaction. *SIAM J. Appl. Math.* **28** (1975), 678-688.
F.C. Hoppensteadt: *Mathematical models in population biology*. New York University Courant Institute, New York, 1976.

-
- C.S. Peskin: *Mathematics in Medicine and the Life Sciences*. Texts in Applied Mathematics **10**, Springer-Verlag, New York, 1992.
- T.Y. Li, J. Yorke: Period three implies chaos. *Amer. Math. Monthly* **82** (1975), 985-992.
- C.C. Lin, L.A. Segel: *Mathematics applied to deterministic problems in the natural sciences. With material on elasticity by G.H. Handelman*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 1988.
- J. Maynard Smith: *Mathematical Ideas in Biology*. Cambridge University Press, London, 1968.
- J. Maynard Smith: *Models in Ecology*. Cambridge University Press, London, 1974.
- J.D. Murray: *Nonlinear Differential Equations Models in Biology*. Clarendon Press, Oxford, 1977.
- J.D. Murray: *Mathematical Biology*. Biomathematics **19**, Springer-Verlag, Berlín, 1993.
- J. Smoller: *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*. Springer, Berlín, 1983.
- A. Turing: The chemical basis for morphogenesis. *Phil. Trans. Roy. Soc. B* **237** (1952), 37-72.

En Internet

<http://www.eb.tuebingen.mpg.de/abt.4/meinhardt/theory.html>

Theoretical aspects of pattern formation and neuronal development
Simulación de modelos en morfogénesis.

Modelización matemática y optimización de bioprocesos: Métodos y aplicaciones



Néstor V. Torres Darias

Profesor Titular de Bioquímica y Biología Molecular
Departamento de Bioquímica y Biología Molecular
Universidad de La Laguna

Resumen

Si el objetivo implícito de cualquier disciplina científica es la comprensión y el control del comportamiento de los sistemas, cuando se trata de biosistemas esta afirmación equivale a reconocer la necesidad de los modelos matemáticos como herramienta esencial de cualquier proyecto de investigación. Partiendo de esta evidencia en esta lección se ilustrará, utilizando como ejemplo la producción de L-(-)-carnitina por medio de un cultivo de *E. coli*, el ciclo completo de una investigación dirigida a la mejora de la producción de L-(-)-carnitina que incluye entre sus etapas la modelización matemática del bioproceso y su optimización.

A partir de los datos disponibles sobre el metabolismo de *E. coli* en condiciones de producción de carnitina junto con la información acumulada sobre el funcionamiento del biorreactor en el que tiene lugar la biosíntesis, se construirá un modelo matemático del proceso.

Este modelo inicial, se reformulará posteriormente a un tipo de representación (*S-system*) particularmente adecuada para el análisis y la optimización del biosistema. Una vez realizados los preceptivos análisis de calidad del modelo (test de calidad imprescindible para certificar su fiabilidad), éste servirá de base para el diseño de un programa de optimización lineal que permitirá encontrar el conjunto de parámetros que maximizan los rendimientos en la biosíntesis de carnitina. La optimización de un sistema no lineal como el que nos ocupa es, en general, sumamente difícil, y en ocasiones impracticable. Sin embargo, mediante la utilización de modelos en versión *S-system* resulta no solamente factible, sino totalmente accesible en virtud de las propiedades de esta representación.

La última fase del ciclo consiste en la verificación experimental de las predicciones de mejora del modelo. La implementación del perfil de parámetros óptimo en el biorreactor da resultados coincidentes con las predicciones.

La lección termina con algunas reflexiones de carácter general sobre la necesidad de un enfoque multidisciplinar en el que se maximicen las sinergias que sin duda surgen de la colaboración de distintas disciplinas en el campo de las biociencias.

Bibliografía

- F. Alvarez-Vasquez, M. Cánovas, J.L. Iborra, N.V. Torres: Modelling And Optimization Of Continous L-(-)-Carnitine Production By High-Density *Escherichia Coli* Cultures. *Biotechnology and Bioengineering* **80**, no. 7 (2002), 794-805.
- N.V. Torres, E.O. Voit: *Pathway Analysis and Optimization in Metabolic Engineering*. Cambridge University Press, 2003.

En Internet

<http://webpages.ull.es/users/sympbst>

Grupo de Tecnología Bioquímica de la Universidad de La Laguna

<http://www.udl.es/usuarios/q3695988/WebPL/main.htm>

The Power-Law Formalism

<http://correio.cc.fc.ul.pt/~aenf/plas.html>

PLAS (Power-Law Analysis and Simulation)

Las Matemáticas en el I+D galénico



Matías Llabrés Martínez

Catedrático de Farmacia y Tecnología Farmacéutica
Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica
Universidad de La Laguna

Resumen

Tal como hoy lo conocemos, el medicamento es fruto del desarrollo científico del siglo XX. Es durante este período cuando el empirismo que sustentaba la búsqueda de nuevos fármacos y su empleo en el tratamiento de las enfermedades empieza a dar paso al conocimiento científico, y cuando la preparación artesanal da paso a la manufactura industrial.

Si tuviéramos que sintetizar las características del I+D en el sector farmacéutico actual, no dudaríamos en resaltar la rápida incorporación de los avances científicos al desarrollo de nuevos fármacos. Dos datos para avalar esta hipótesis: en el informe de la OCDE *Knowledge Based Economy*, la industria farmacéutica se incluye dentro del grupo de alta tecnología, junto con la industria aeroespacial, computadoras y ofimática, y electrónica y comunicaciones; el desarrollo de un nuevo fármaco supone una inversión de unos 500 millones de euros y 11 años de investigación.

Sin embargo, detrás del coste de desarrollo de un nuevo fármaco se esconde la historia de un fracaso: tan sólo 1 de cada 2000 nuevas moléculas ensayadas llegan finalmente al mercado, y es precisamente la constatación de este fracaso la que está promoviendo nuevos métodos para el desarrollo de fármacos. No es de extrañar por tanto que las nuevas estrategias primen los requisitos relacionados con la absorción y la biodistribución, y en segundo lugar con la toxicidad, así como el uso de modelos teóricos que permitan diferenciar las moléculas aceptables como fármacos de aquellas que no lo son.

Mi experiencia personal se ha centrado en la evaluación de la biodisponibilidad y bioequivalencia, centro de la disciplina conocida con el nombre de Biofarmacia. Esta parcela del desarrollo galénico nos permite diseñar formas de dosificación de medicamentos para modular la velocidad de absorción, comparar la biodisponibilidad de dos o más formulaciones o estudiar el efecto de los alimentos sobre la biodisponibilidad, por citar algunos ejemplos representativos. Este tipo de ensayo está estrechamente relacionado con la evaluación de la calidad de los medicamentos, y sujeto a normas legales tanto en Europa, a través de la Agencia Europea para la Evaluación de los Medicamentos, como en los EEUU, a través de la Food and Drug Administration.

En Europa todavía es de aplicación el método clásico para la evaluación de la bioequivalencia, basado en un diseño experimental cruzado y en la interpretación de los resultados mediante el análisis de la varianza. En el año 2001 entró en vigor en EEUU una nueva directiva en la que se especifica el uso de estadísticos no lineales basados en los componentes de la varianza. La evaluación de la absorción de formulaciones de cesión modificada se basa en el empleo de modelos lineales y en la aplicación de las técnicas de convolución y de deconvolución. Ambos grupos de técnicas serán analizados sobre los datos

obtenidos en el Laboratorio de Farmacia Galénica de la Universidad de La Laguna a lo largo de los últimos años.

Las Matemáticas y la Química: Quimiometría y Cualimetría



Miguel Á. Rodríguez Delgado

Profesor Titular de Química Analítica
Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología
Universidad de La Laguna

Resumen

En esta charla se pretende dar una visión lo más amplia posible de la quimiometría, siempre enlazada con la cualimetría.

En primer lugar, nos introduciremos en la quimiometría, una disciplina científica que usa preferentemente datos analíticos con diferentes objetivos, ya sea control de calidad, estudio de agrupamientos, diseño experimental, optimización de procesos, etc. Veremos como el uso de técnicas quimiométricas permite mejorar el rendimiento del proceso analítico, contribuyendo a hacer realidad diversas tendencias de la química analítica actual: rapidez, abaratamiento de costes, miniaturización o transportabilidad de instrumentos. La quimiometría nos servirá para generar valor añadido en dos sentidos: 1) permite diseñar y realizar experimentos más eficaces, y extraer más información a partir de los datos; 2) potencia la incorporación del químico, y en general, del profesional del laboratorio, a la cadena de control del proceso productivo. Es así en la medida en que dicho profesional deja de ser un mero productor de datos, y se convierte en alguien que genera, interpreta y comunica información relevante para la toma de decisiones.

Seguidamente se verá como el establecimiento de sistemas de calidad contrastados que generen la imprescindible confianza puede considerarse como un indicador del nivel social, tecnológico y económico de un Estado, de un servicio o de una industria. En este sentido, los laboratorios químico-analíticos no pueden sustraerse de la calidad, sino que esta característica debe ser una guía diaria si se quiere que los resultados generados sean reconocidos y aceptados y que sean la base firme para la toma de decisiones. Es, por tanto, fundamental tener los conocimientos y herramientas que sirvan para desarrollar y evaluar la calidad del análisis químico, y así asegurar la garantía de calidad.

Finalmente, se expondrán ejemplos prácticos de uso de las técnicas quimiométricas para hacer análisis de agrupamientos de distintos casos reales que se han efectuado en nuestros laboratorios. Se verá que las posibilidades de la quimiometría continúan siendo enormes, y que es necesaria una mayor colaboración con los matemáticos con el objetivo de diseñar nuevos programas informáticos que sean capaces de aplicarse con éxito a la resolución de problemas reales.

Bibliografía

- M. Valcárcel, A. Ríos: *La calidad en los laboratorios analíticos*. Reverté, 1992.
G. Ramis Ramos, M.C. García Alvarez-Coque: *Quimiometría*. Síntesis, 2001.
M. Blanco, R. Boque, R. Cela, J. Coello, S. Paspocho, M.C. Ortiz, J. Riba, F.X. Rius, A. Ruiz, L.A. Sarabia y X. Tomás: *Avances en Quimiometría Práctica*. Universidad de Santiago de Compostela, 1991.

J.C. Miller, J.N. Miller: *Estadística y Quimiometría para Química Analítica* (4ª edición).
Prentice Hall, 2002.

En Internet

<http://www.ub.es/gesq/spchso>

Sociedad Española de Quimiometría y Cualimetría

<http://iris4.chem.ohiou.edu>

North American Chapter of the International Chemometrics Society

<http://argo.urv.es/quimio/cat/maincat.html>

Grupo de Quimiometría y Cualimetría de la Universidad Pública de Tarragona