



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2021/2022



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	El método de simulación estocástica multiescala para sistemas estocásticos rígidos en Química.		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	MA-21/22-01	TIPOLOGÍA ⁽²⁾	A1

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden

⁽²⁾ Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="checkbox"/>
	Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución	<input type="checkbox"/>

DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Departamento de Matemática Aplicada		
DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾	Sección de Matemáticas, Campus de Fuentenueva		
LOCALIDAD ⁽³⁾	Granada	C.P. ⁽³⁾	18071

⁽³⁾ A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS	Juan Calvo Yagüe		
DEPARTAMENTO	Matemática Aplicada		
CARGO ⁽⁴⁾	Contratado programa de reincorporación de doctores		
TELÉFONO	43192	E-MAIL	juancalvo@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2			
NOMBRE Y APELLIDOS			
DEPARTAMENTO			
CARGO ⁽⁴⁾			
TELÉFONO		E-MAIL	
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

⁽⁴⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

El formalismo matemático habitual para describir reacciones químicas se basa en ecuaciones diferenciales ordinarias, y por tanto no tiene en cuenta ni la naturaleza discreta de los reactantes ni los posibles efectos estocásticos que podrían tener lugar en presencia de un bajo número de reactivos. Habitualmente estas consideraciones no juegan un papel relevante y la descripción mediante ecuaciones diferenciales ordinarias es satisfactoria. Aún así, durante los años 90 se realizaron gran cantidad de trabajos que evidenciaron la importancia de los efectos estocásticos y el carácter discreto en sistemas bioquímicos. El algoritmo de Gillespie es capaz de reproducir estas características. Aún así, en los sistemas celulares es común encontrar situaciones en la que las escalas temporales involucradas son muy dispares. En estas situaciones el método de Gillespie es tremendamente ineficiente. Proponemos implementar modificaciones del mismo capaces de tratar de manera eficiente las situaciones anteriormente comentadas.

Objetivos.

Establecer una formulación estocástica para describir reacciones químicas.

Implementar el método de Gillespie para generar realizaciones de un proceso de Markov con espacio de estados discreto.

Modificar el anterior método para simular sistemas de reacciones químicas con escalas temporales muy dispares.

Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

Revisión del formalismo matemático del método de Gillespie (dificultad media-alta).

Implementación del algoritmo de Gillespie (dificultad media).

Implementación del método de simulación estocástica multiescala (dificultad alta)

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf al correo: gradoquimica@ugr.es. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

TIPOLOGÍA⁽²⁾

A Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:

- 1 Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
- 2 Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
- 3 Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.

B Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:

- 1 Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
- 2 Elaboración de un plan de empresa.
- 3 Simulación de encargos profesionales.

C Trabajos bibliográficos (C)