UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2025/2026

GRADO: Doble Grado en Física y Matemáticas

CÓDIGO DEL TFG: 295-028-2025/2026

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Teoría de redes de reacciones químicas

Descripción general (resumen y metodología):

Los sistemas de reacciones químicas complejas dan lugar a sistemas de ecuaciones diferenciales no lineales de análisis usualmente complejo. Ya en el Grado se ha estudiado que en sistemas con temperatura constante (usuales por ejemplo en Biología) se puede observar para sistemas concretos múltiples estados estacionarios que pueden ser estables, inestables, soluciones oscilatorias, sistemas caóticos, etc. El presente Trabajo de Fin de Grado pretende ser una introducción a la teoría de redes de reacciones químicas que lo que persigue es proporcionar herramientas para analizar este tipo de sistemas desde una perspectiva más amplia. Esta teoría, originada por Rutherford Aris en 1965 [Ari1965], ha recibido múltiples aportaciones durante los últimos 60 años y hoy día se se conocen resultados bien asentados recogidos tanto en textos recopilatorios [Fe2019] como implementados en bibliotecas de uso libre [FeToolbox], aunque siguen apareciendo aplicaciones que serán de interés en este trabajo [Gor2018].

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Esta memoria plantea revisar los conceptos básicos de esta teoría que permitirá describir la estructura de una red así como las propiedades dinámicas:

- Existencia de estados estacionarios (interruptores biológicos)
- Estabilidad de estados estacionarios
- Persistencia de especies

que se pueden deducir de resultados como el Teorema de deficiencia cero. Las implicaciones de este tipo de resultados en ambientes biológicos serán también de interés en el trabajo desarrollado. También planteamos profundizar en la relación de esta teoría con la termodinámica de este tipo de sistemas.

Bibliografía básica:

[Ari1965] R. Aris, Prolegomena to the rational analysis of systems of chemical reactions, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 1965, Volume 19, Issue 2, pp 81-99.

[Fe2019] M. Feinberg, Foundations of Chemical Reaction Network Theory, Springer International Publishing, March 2019, DOI 10.1007/978-3-030-03858-8, ISBNs 978-3-03-003857-1, 978-3-03-003858-8

[FeToolbox] M. Feinberg, Ph. Ellison, H. Ji, D. Knight, The Chemical Reaction Network Toolbox, Windows Version, DOI 10.5281/zenodo.5149265

[Gor2018] A.N.Gorban, Model reduction in chemical dynamics: slow invariant manifolds, singular perturbations, thermodynamic estimates, and analysis of reaction graph. Current Opinion in Chemical Engineering 2018 21C, 48-59.

Bibliografía complementaria:

M. Feinberg and F. J. M. Horn. Dynamics of open chemical systems and the algebraic structure of the underlying reaction network. Chemical Engineering Science, 29:775–787, 1974.

M. Feinberg. Chemical oscillations, multiple equilibria, and reaction network structure. In Warren E. Stewart, W. Harmon Ray, and Charles C. Conley, editors, Dynamics and Modeling of Reactive Systems, pages 59-130. Academic Press, New York, 1980

M. Feinberg. Chemical reaction network structure and the stability of complex isothermal reactors I. The deficiency zero and deficiency one theorems. Chemical Engineering Science, 42:2229–2268, 1987.

M. Feinberg. Chemical reaction network structure and the stability of complex isothermal reactors II. Multiple steady states for networks of deficiency one. Chemical Engineering Science, 43:1–25, 1988.

M. Feinberg. Mathematical aspects of mass action kinetics. In N. Amundson and L. Lapidus, editors, Chemical Reactor Theory: A Review, pages 1–78. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1977.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: JUAN CALVO YAGÜE

Ámbito de conocimiento/Departamento: MATEMÁTICA APLICADA

Correo electrónico: juancalvo@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos: ÓSCAR SÁNCHEZ ROMERO

Ámbito de conocimiento/Departamento: MATEMÁTICA APLICADA

Correo electrónico: ossanche@ugr.es

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: Minerva Bermúdez Ferrer

Correo electrónico: minervaberfer@correo.ugr.es