



## **1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:**

**Título:** Modelado estocástico en Química y Biología

**Descripción general** (resumen y metodología):

Los modelos cuantitativos para describir reacciones químicas tienen gran utilidad en multitud de ámbitos científicos. Habitualmente estas descripciones se formulan en términos de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias. Para que este punto de vista sea adecuado, es necesario que las cantidades de reactivos presentes sean suficientemente altas, de forma que esta descripción queda invalidada cuando la cantidad de moléculas presentes de alguno de los reactivos es reducida. Este último escenario es particularmente relevante en Bioquímica, pero también en otra serie de situaciones afines donde se puede aplicar el mismo formalismo matemático (modelos de poblaciones ecológicas y modelos de transcripción génica entre otros). Para describir este tipo de situaciones, donde los efectos aleatorios cobran gran importancia, se puede adoptar el punto de vista de la cinética química estocástica. El objetivo principal de este trabajo es que el estudiante sea capaz de integrar las herramientas que ha adquirido en diversas asignaturas del grado en Matemáticas, para con ello dar una descripción de los algoritmos de simulación en cinética química estocástica, comprender la base en la que se sustentan y aplicarlos a ejemplos didácticos de interés con origen en Química y Biología.

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

**Objetivos planteados:**

- Proponer modelos estocásticos asociados a sistemas provenientes de otras ciencias (Química, Biología, ...)
- Describir el algoritmo de Gillespie para cinética química estocástica en sistemas espacialmente homogéneos, explicando su fundamentación matemática.
- Realizar simulaciones computacionales de sistemas estocásticos representativos.
- Comparar resultados con modelos deterministas análogos.

**Bibliografía básica:**

- D. T. Gillespie, Exact Stochastic Simulation of Coupled Chemical Reactions, The Journal of Physical Chemistry, Vol. 81, Nº 25, 403-436 (1977).
- P.C. Bresloff, Stochastic Processes in Cell Biology, Vol. I, 2nd Ed., Springer Nature Switzerland, Cham, Switzerland, 2021.
- R. Erban, S. J. Chapman, P. K. Maini, A practical guide to stochastic simulations of reaction-diffusion processes. ArXiv preprint.

**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:**

**5. DATOS DEL ESTUDIANTE:**

**Nombre y apellidos:** CARLOTA LOPEZ QUESADA

**Correo electrónico:** clopezquesada@correo.ugr.es