



## UN MODELO COMPUTACIONAL POSITIVO Y EFICIENTE EN LA SIMULACIÓN DE MATERIALES BIOLÓGICOS COMPLEJOS

J. E. Macías-Díaz<sup>a</sup>, I. E. Medina-Ramírez<sup>a</sup>,

<sup>a</sup>Departamento de Matemáticas y Física, Universidad Autónoma de Aguascalientes, [jemacias@correo.uaa.mx](mailto:jemacias@correo.uaa.mx)

<sup>a</sup>Departamento de Química, Universidad Autónoma de Aguascalientes, [iemedina@correo.uaa.mx](mailto:iemedina@correo.uaa.mx)

### RESUMEN:

Partiendo de un sistema complejo de ecuaciones diferenciales parciales alineales que modela la dinámica de crecimiento de películas biológicas, se proporcionará un modelo de diferencias finitas para aproximar sus soluciones. Las variables de interés se miden en escalas absolutas, de ahí que la necesidad de preservar la positividad de las soluciones sea una restricción matemática sumamente relevante. En este trabajo, ofrecemos una discretización numérica de nuestro modelo matemático que es capaz de preservar el carácter no negativo de aproximaciones cuando se satisfacen condiciones adecuadas en el modelo y los parámetros computacionales. Al contrario que el modelo no lineal que motiva este reporte, nuestra técnica numérica es un método lineal que puede ser representado vectorialmente. El hecho de que nuestro método es un esquema que conserva la positividad, se establece utilizando ciertas propiedades de matrices con inversas positivas. Las simulaciones de computadora corroboran la validez de las conclusiones teóricas.

### 1. INTRODUCCIÓN

El crecimiento de películas biológicas (tales como la proliferación de colonias de bacterias), así como el de películas delgadas en el contexto de la química analítica, son problemas de interés en las ciencias factuales y la tecnología en vista de las múltiples aplicaciones que poseen. Así, por ejemplo, la forma particular en la que se desarrolla una biopelícula tiene importancia vital en el análisis de eficiencia de procesos de bio-remediación, mientras que el crecimiento de biopelículas es de interés en el diseño de celdas fotovoltaicas, fotosensores y materiales semiconductores.

Desde un punto de vista matemático, la modelación del crecimiento de biopelículas y películas delgadas es un tema interesante, en vista de la complejidad que conlleva el describir cuantitativamente la participación de los agentes involucrados en dichos procesos. Ciertamente, existen varias perspectivas para atacar dichos problemas, algunas de ellas, de hecho, yacen en el terreno de la ciencia teórica de la computación (como el uso de autómatas y la teoría de dominios); sin embargo, desde un punto de vista más bien matemático, la modelación mediante sistemas acoplados de ecuaciones diferenciales es la perspectiva más socorrida, pues los procesos se pueden ver desde un punto de vista natural como fenómenos alineales genéricos de reacción-difusión.

Cabe mencionar que, en el contexto de las ecuaciones diferenciales parciales, los modelos propuestos distan aún de ser realistas. Más aún: los modelos existente, de hecho, aún cuando han sido simplificados fenomenológicamente, distan mucho de ser sencillos sino que, al contrario, son modelos en los que las soluciones exactas son desconocidas en su gran mayoría. Por esta razón, muchos estudios se han dedicado a proponer metodologías computacionales para aproximar las soluciones de dichas ecuaciones diferenciales.



El propósito inicial del presente estudio es tratar de proponer sistemas de ecuaciones diferenciales que describan más fielmente la dinámica de crecimiento de biopelículas y películas delgadas. Los modelos a obtenerse serán, evidentemente, complejos en su naturaleza, por lo que no es de esperarse que se puedan elucidar soluciones exactas para problemas arbitrarios de valor inicial y/o de frontera. En su defecto, parte de la investigación consistirá en tratar de establecer propiedades interesantes de las soluciones, tales como la positividad, la acotación y la monotonía de crecimiento. Hecho ésto, se diseñarán técnicas numéricas confiables que aproximen las soluciones de dichos modelos, y que garanticen la preservación de las principales características de las soluciones.

## 2. JUSTIFICACIÓN

En el contexto de las ciencias naturales, muchos problemas conllevan la medición de variables en escalas absolutas. Por ejemplo, un problema de esta naturaleza es la investigación de la evolución temporal de la distribución de temperaturas en un incendio forestal, donde la selección más evidente de escala para la variable de interés es Kelvin. En muchos casos, los modelos matemáticos realistas que involucran variables tales como la temperatura y la presión, pueden ser reformulados mediante un cambio de variables en términos de ecuaciones donde las variables dependientes de relevancia son medidas en escalas absolutas.

Otro ejemplo de modelos genéricos en los que las variables bajo investigación son medidas de manera natural en escalas absolutas, son aquellos sistemas de ecuaciones que describen la dinámica del crecimiento de tamaños de poblaciones o de densidades de población. En tales modelos, la noción de positividad es una condición inherente a los problemas, independientemente de si las ecuaciones gobiernan la dinámica de una población discreta o una población continua. Existe una gran variedad de ecuaciones matemáticas que modelan dinámicas poblacionales; para la mayoría de ellas, el diseño de un aparato analítico que garantice la existencia de soluciones positivas es un problema de gran trascendencia matemática, como lo evidencian algunos reportes recientes de investigación.

Es importante mencionar que la investigación analítica de muchos modelos poblacionales ha producido muchos manuscritos que reportan acerca de características cualitativas de las soluciones de dichas ecuaciones; sin embargo, la falta de expresiones analíticas exactas para las soluciones positivas de cada problema de valor inicial y/o de frontera asociado a estos modelos es un hecho bien conocido. En vista de esta limitante, el diseño de métodos numéricos confiables para aproximar las soluciones positivas de tales modelos se ha convertido en una alternativa plausible que ha arrojado resultados satisfactorios en el área de la física computacional.

En general, el problema de describir un fenómeno realista puede considerar la condición de acotación como una característica adicional de las soluciones. En el contexto de la dinámica de poblaciones, la noción de acotación es sumamente relevante. Aquí, las limitaciones espaciales así como las carencias de los recursos pueden limitar la velocidad de crecimiento de la población y, en última instancia, podrían acotar el tamaño mismo de la población. Desde un punto de vista físico, uno podría pensar en el crecimiento de colonias de bacterias dentro de un ambiente espacialmente cerrado o controlado (tal como una caja de Petri cerrada), o en un ambiente en el que el alimento es limitado.

Como en el caso de la positividad, existen muchos resultados cualitativos en la literatura acerca de la existencia de soluciones acotadas para muchos modelos poblacionales (algunos en forma de soluciones de onda viajera, de hecho); sin embargo, la solución exacta para cada condición inicial



y/o de frontera admisible es difícil de calcular. Como se mencionó arriba, dicha dificultad se ha resuelto numéricamente con el diseño de métodos numéricos que garanticen la conservación de la acotación de perfiles iniciales.

En vista de estas limitaciones físicas y matemáticas, se pretende partir de modelos matemáticos realistas que describan la dinámica de crecimiento de biopelículas y películas delgadas, para encontrar a continuación las características analíticas de sus soluciones, y diseñar ulteriormente métodos numéricos confiables que preserven dichas características (además de las consabidas condiciones de estabilidad, convergencia y consistencia que son esenciales en todo método computacional).

### **3. OBJETIVOS**

#### **OBJETIVOS MEDIATOS**

- Proponer modelos matemáticos en el estudio de biopelículas y películas delgadas, y estudiar las características de sus soluciones.
- Diseñar métodos numéricos en el estudio de la dinámica de biopelículas y películas delgadas.

#### **OBJETIVOS INMEDIATOS**

- Se propondrán modelos matemáticos realistas que describan el crecimiento de películas biológicas y películas delgadas.
- Se estudiarán las soluciones de dichos modelos, y se demostrarán proposiciones relacionadas con las características analíticas de dichas soluciones. Se probarán teoremas de existencia y unicidad de soluciones de los modelos considerados.
- Principalmente, se desarrollarán métodos computacionales basados en esquemas de diferencias finitas para aproximar las soluciones de los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales que rigen el crecimiento de biopelículas y de películas delgadas.
- Se validarán computacionalmente las técnicas numéricas propuestas, y se determinarán las principales propiedades analíticas de dichos métodos, tales como la preservación de la positividad, la acotación y la monotonía de las soluciones. Así mismo, se determinará la estabilidad de los métodos, su consistencia y su convergencia.

### **4. RESULTADOS**

En el presente proyecto, se propusieron modelos matemáticos para la descripción física de la dinámica de crecimiento de películas biológicas y películas delgadas. Los modelos están dados en términos de ecuaciones diferenciales parciales o, más generalmente, en términos de sistemas acoplados de ecuaciones diferenciales parciales en los que se consideran los distintos elementos que toman parte en dichos fenómenos. Se estudiaron las características de las soluciones de dichos modelos, tales como la existencia, unicidad, positividad, acotación y monotonía. Se propusieron métodos numéricos en diferencias finitas para aproximar las soluciones de dichas ecuaciones diferenciales, procurando que las características propias de las soluciones analíticas de los modelos se vean preservadas por las aproximaciones computacionales. Los resultados derivados de este protocolo serán sometidos para su consideración en revistas internacionales indizadas.

### **5. CONCLUSIONES**

Partiendo de un sistema complejo de ecuaciones diferenciales parciales alineales que modela la dinámica de crecimiento de películas biológicas, se proporcionó un modelo de diferencias finitas



para aproximar sus soluciones. Las variables de interés se miden en escalas absolutas, de ahí que la necesidad de preservar la positividad de las soluciones sea una restricción matemática sumamente relevante. En este trabajo, ofrecemos una discretización numérica de nuestro modelo matemático que es capaz de preservar el carácter no negativo de aproximaciones cuando se satisfacen condiciones adecuadas en el modelo y los parámetros computacionales. Al contrario que el modelo no lineal que motiva este reporte, nuestra técnica numérica es un método lineal que puede ser representado vectorialmente. El hecho de que nuestro método es un esquema que conserva la positividad, se establece utilizando ciertas propiedades de matrices con inversas positivas. Las simulaciones de computadora corroboran la validez de las conclusiones teóricas.

#### **BIBLIOGRAFÍA**

1. K. P. Hadeler; K. Dietz, Nonlinear hyperbolic partial differential equations for the dynamics of parasite populations, *Comp.Math. Appl.* 9, 415–430 (1983).