



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA QUÍMICA – POLÍMEROS

“ANÁLISIS DE ESTABILIDAD EN EL TRANSPORTE DE BACTERIAS EN UN MEDIO
POROSO”

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:
OSMAR GABRIEL LEYVA LÓPEZ

TUTOR: DR. ÁNGEL ENRIQUE CHÁVEZ CASTELLANOS
FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM

MÉXICO, D. F. JUNIO 2013



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Gracia Fadrique Jesús

Secretario: Dr. Durán Moreno Alfonso

Vocal: Dr. Herrera Nájera Rafael

1^{er.} Suplente: M. I. Vázquez Islas Manuel

2^{d o.} Suplente: Dr. Chávez Castellanos Ángel Enrique

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Facultad de Química, Edificio E. UNAM.

TUTOR DE TESIS:

Dr. Ángel Enrique Chávez Castellanos.

FIRMA

Índice

Índice	3
Nomenclatura	5
1. Antecedentes	6
1.1 Justificación.	6
1.2 Bacterias.	10
1.3 Rhodococcus sp.	10
1.4 Crecimiento microbiano.	12
1.5 Modelos continuos de población para especies simples.	16
1.6 Modelos continuos de crecimiento.	17
1.7 Ondas Biológicas: Modelos de especies simples.	20
1.8 Sistemas no lineales.	22
1.9 El plano de fase.	23
1.10 Sistemas lineales tridimensionales.	26
1.11 Sistemas hamiltonianos.	30
2. Descripción de los sistemas	32
2.1 Morfología de un medio poroso.	32
2.2 Transporte de bacterias en medios porosos.	33
2.3 Descripción del sistema	36
2.4 Desarrollo del modelo.	38
2.5 Escalas y simplificación.	41
2.6 Soluciones de ondas viajeras.	52

3. Resultados y discusión	55
3.1 Análisis cualitativo de los puntos de equilibrio	55
3.2 Linealización de los sistemas de ecuaciones	59
3.3 Análisis de estabilidad de los sistemas linealizados	63
3.4 Funciones de Hamilton en los sistemas linealizados	66
3.5 Plano de fase de los sistemas linealizados.....	71
3.6 Sistemas lineales	74
3.7 Hamiltonianos de los sistemas de ecuaciones lineales	78
3.8 Plano de fase de los sistemas lineales	80
4. Solución Numérica	85
4.1 Solución numérica de los sistemas de ecuaciones no lineales.....	85
5. Conclusiones.....	92
6. Referencias	96

Nomenclatura

- A Concentración de bacterias en la interfase [Número de células/L³]
- A_s Área superficial específica de la fase sólida [L²/M]
- C Concentración de bacterias en la fase líquida [Número de células/L³]
- D Coeficiente de difusión de bacterias [L²/T]
- k_a Constante de adhesión de bacterias en la interfase agua-aire [1/T]
- k_{ca} Constante de deposición de bacterias en la interfase agua-aire [1/T]
- k_s Constante de adsorción de bacterias en la superficie del sólido [1/T]
- k₂ Constante de desorción de bacterias de la superficie del sólido [1/T]
- K Capacidad de soporte de la población [Número de células/L³]
- r Constante de rapidez de crecimiento de bacterias [1/T]
- S Concentración de bacterias en la fase sólida [número de células/L²]
- t Tiempo [T]
- V Velocidad de propagación de bacterias [L/T]
- z Coordenada espacial [L]

Símbolos griegos

- θ Porcentaje de volumen poroso llenado con agua [1]
- v Velocidad de onda [L/T]
- ρ Densidad del líquido [M/L³]
- φ Porosidad de la superficie sólida [1]

1. Antecedentes

1.1 Justificación.

Durante la última década, el transporte de bacterias en superficies ambientales ha tenido una atención considerable, éste se ha extendido a asuntos que incluyen el transporte de patógenos o bacterias genéticamente modificadas dentro de reservas de aguas subterráneas y la propagación de contaminantes peligrosos, metales pesados y radioactivos mediante el transporte coloidal.

Algunas técnicas de biorremediación de suelos contaminados requieren de la utilización de bacterias especializadas; para alcanzar el éxito de las actividades mencionadas anteriormente es crucial que la bacteria introducida alcance el área contaminada, por lo tanto, el conocimiento de los factores que afectan el movimiento de las bacterias es de suma importancia.

Cabe mencionar que en años recientes las matemáticas han tenido un impacto considerable como herramienta para describir y predecir fenómenos biológicos. La biología se ha enfrentado a una gran variedad de problemas matemáticos, los cuales han estimulado desarrollos significativos en la teoría de ecuaciones diferenciales no lineales.

El creciente uso de matemáticas en biología es inevitable, la biología se ha convertido cada día en una ciencia más cuantitativa.¹ Uno de los temas que requiere un involucramiento interdisciplinario es el modelado del transporte de microorganismos, dirigido a la interpretación física fundamentada en fenómenos de transporte en medios biológicos.

Para describir el transporte de bacterias en geomateriales granulares, se han desarrollado modelos matemáticos complejos, la complejidad de estos sistemas

radica en que el transporte ocurre en un medio poroso, en el cual se presentan fenómenos de adsorción y desorción.

Los medios porosos se encuentran presentes en nuestra vida diaria, así como en diferentes ramas de la ciencia y la tecnología, su característica fundamental es su singular estructura, la cual consiste en poros huecos que generalmente están interconectados a manera de red dentro de una matriz sólida.

La estructura de los sólidos porosos y de los procesos que en ellos ocurren despierta un gran interés tanto científico como económico, por lo que su estudio experimental y teórico se ha practicado durante décadas.² El estudio de esta clase de sistemas es importante, no sólo por la necesidad de desarrollar nuevos métodos teóricos para comprender su comportamiento, sino también por su aplicación a procesos de interés práctico.³

Los primeros trabajos en medios porosos que involucraban bacterias fueron desarrollados por diversos investigadores, Corapcioglu y Jiang,⁴ trataron un modelo unidimensional, donde el transporte bacteriano lo describen mediante la suposición de que las bacterias se comportan como partículas coloidales, es decir, la adsorción y desorción de las mismas fue modelado como un proceso cinético de primer orden.

Johnson y Elimelech⁵ desarrollaron un modelo en el cual se incorpora una función de deposición dinámica de la partícula, con la finalidad de tomar en cuenta la adhesión de bacterias en la superficie del sólido.

Saiers y sus colaboradores⁶ investigaron la cinética de adherencia de primer y segundo órdenes en partículas que se ubican en las columnas empacadas. Song y Elimelech⁷ consideraron la influencia de las cargas de la superficie sólida respecto al proceso de transporte; Sun y sus colaboradores⁸ tomaron en cuenta el geomaterial y los efectos químicos y heterogéneos que éste produce.

La acumulación de bacterias en la interfase agua-aire fue estudiada por Blanchard y Sysdek⁹, Marshall y Cruickshank¹⁰, Dahlbäck y et al.¹¹ y Powelson y Mills¹². Por otra parte Roland W. Lewis, William K. S. Pao y Xin-She Yang¹³ realizaron un análisis de estabilidad en el transporte de difusión reacción de bacterias, donde no sólo describen los procesos de absorción y desorción de las bacterias sino también toma en cuenta la retención y las características de reproducción de las mismas.

Objetivo

Analizar la estabilidad del transporte de bacterias en un medio poroso mediante tres sistemas de ecuaciones diferenciales lineales y no lineales, así como en sus respectivas funciones hamiltonianas, con la finalidad de conocer el comportamiento de las funciones que describan el transporte de bacterias alrededor de los puntos de equilibrio.

Metas

- Evaluar el comportamiento del transporte de bacterias tomando como referencia la bacteria *Rhodococcus sp.*
- Comparar la estabilidad en diferentes sistemas de ecuaciones diferenciales no lineales, así como en sus correspondientes ecuaciones lineales y funciones hamiltonianas.
- Comparar el sistema de ecuaciones de Roland Lewis¹³ con las propuestas en este proyecto.
- Evaluar la rapidez de crecimiento de las bacterias (**R**) en la zona donde existe una solución única y su efecto en la estabilidad del sistema.
- Describir la variación de la concentración de bacterias en la interfase agua-aire, en la superficie sólida y en la fase líquida y conocer las posibles condiciones de saturación.

1.2 Bacterias.

Las bacterias son organismos unicelulares (entre 0.2 y 2 μm , por lo general) y relativamente sencillos, cuyo material genético no está rodeado por una membrana nuclear especial, por ello se llaman procariotas.¹⁴ Un examen superficial del mundo microbiano revela que las bacterias son uno de los grupos más importantes, desde cualquier criterio: número de organismos, importancia ecológica general o importancia práctica para los seres humanos. La mayor parte de nuestro conocimiento sobre los fenómenos bioquímicos y de biología molecular proceden de la investigación con bacterias.¹⁵ La mayoría de las bacterias conocidas poseen una o dos formas. Los cocos son células casi esféricas. Pueden existir como células individuales, pero se asocian también en agrupaciones características que son útiles frecuentemente para identificarlas. Otra forma bacteriana común es la de bastoncillo, denominada bacilo. Los bacilos varían considerablemente en la proporción entre longitud y anchura. La forma del extremo del bacilo a menudo varía entre especies; puede ser plana, redondeada, en forma de puro o bifurcada.

1.3 Rhodococcus sp.

El género *Rhodococcus* se caracteriza por agrupar bacterias de forma bacilar, las cuales pueden llegar a formar filamento vegetativo ramificado, el cual es septado y se fragmenta en formas bacilares y cocoidales.¹⁶ Los microorganismos agrupados en este género se encuentran ampliamente distribuidos en el medio ambiente, de manera particular en suelos, agua estancada, ríos, lagos y otros ambientes acuáticos. Algunos microorganismos del género *Rhodococcus* pueden causar infecciones en humanos. Este tipo de microorganismos también pueden utilizarse para beneficio propio en los procesos de biorremediación.

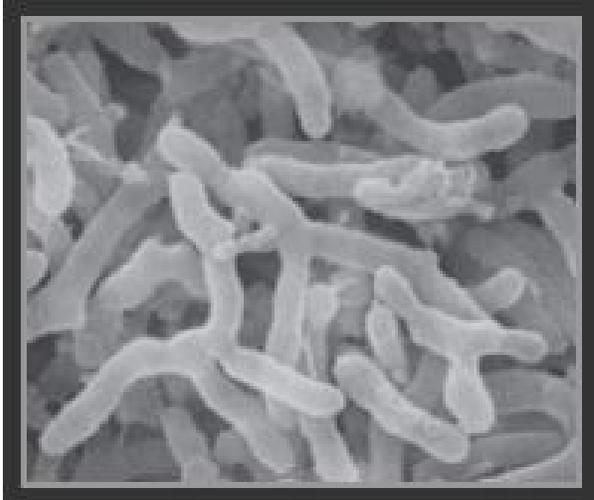


Figura 1. *Rhodococcus* sp exhibe crecimiento de filamentos ramificados²⁷

El proceso de biorremediación consiste en el uso de agentes biológicos como microorganismos, en la descontaminación del medio ambiente. Los principales agentes biológicos utilizados son las enzimas producidas por los microorganismos¹⁷. La extracción continua de petróleo y la combustión generada por su utilización como materia prima y fuente de energía ha provocado cambios verdaderamente grandes en el medio. La generación de dióxido de carbono está implicada en fenómenos como el calentamiento global del planeta. Tanto los óxidos de nitrógeno como los de azufre son responsables de la lluvia ácida, la cual afecta los bosques, contamina los lagos y trae repercusiones graves en construcciones, tales como edificios. Nuestro planeta contiene alrededor de 1,5 x 10 millones de toneladas de carbono, y alrededor de 15% de éste se encuentra en yacimientos subterráneos. Aunado a los altos índices de contaminantes generados por el petróleo, se encuentran el uso de pesticidas y la contaminación generada por la acumulación excesiva de contaminantes derivados del petróleo, que se acumulan en el suelo, ríos y lagos, y que no son tratados en forma adecuada para evitar su contaminación o facilitar su degradación. Entre las alternativas que pueden surgir para disminuir el índice de contaminantes se encuentra el uso de microorganismos.¹²

La diversidad metabólica que presentan los microorganismos del género *Rhodococcus* los hace ser candidatos ideales para su utilización en bioprocesos, con un gran potencial tanto en aplicaciones industriales como ambientales.¹⁸

1.4 Crecimiento microbiano.

El crecimiento puede definirse como un aumento de los constituyentes celulares. Si un microorganismo es cenocítico, es decir, multinucleado, en el que las divisiones nucleares no se acompañan de divisiones celulares, el crecimiento produce un incremento de tamaño, pero no del número de células. El crecimiento ocasiona un aumento del número de células cuando los microorganismos se multiplican por procesos como gemación o fisión binaria. En el último caso, las células individuales se agrandan y dividen para originar dos células hijas de un tamaño aproximadamente igual. No suele ser eficaz investigar el crecimiento y la multiplicación de microorganismos individuales debido a su pequeño tamaño. En consecuencia, los microbiólogos, cuando estudian el crecimiento, siguen normalmente los cambios observados en el número total de la población.

Curva de Crecimiento

Cuando los microorganismos se cultivan en un medio líquido, crecen normalmente en un cultivo discontinuo o sistema cerrado, es decir, se incuban en un recipiente cerrado al que no se añade más cantidad de medio que la inicial; en consecuencia, las concentraciones de nutrientes disminuyen y las de residuos aumentan. Se puede representar el crecimiento de los microorganismos que se multiplican por fisión binaria como el logaritmo del número de células frente al tiempo de incubación; el crecimiento de una población se estudia analizando la curva de crecimiento de un cultivo microbiano, la curva resultante tiene cuatro fases diferentes (figura 2).

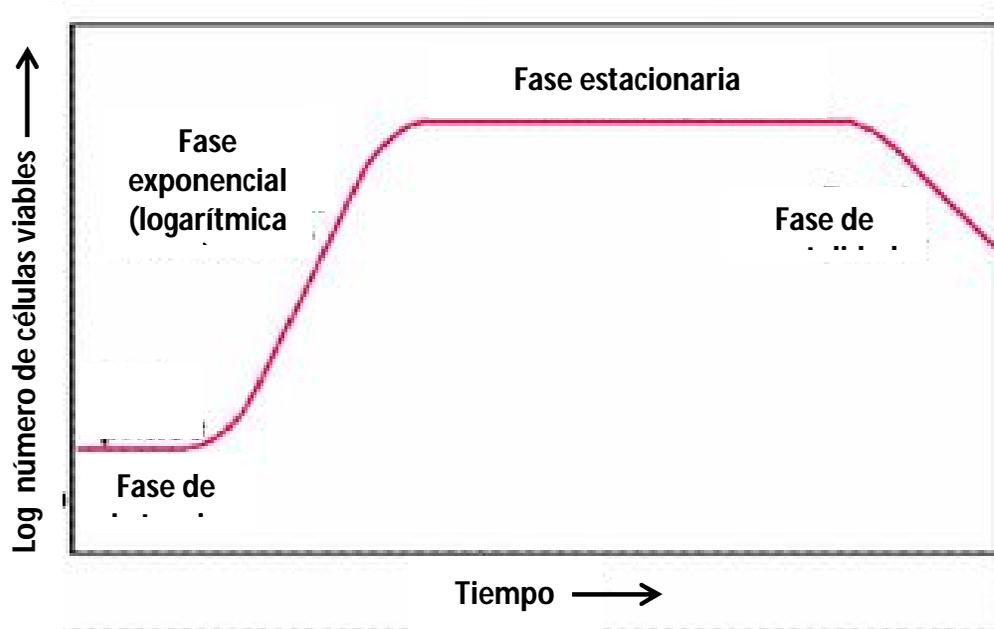


Figura 2. Curva de crecimiento microbiano en un sistema cerrado. Las cuatro fases de la curva de crecimiento que se describen en el texto están identificadas en esta curva.¹⁵

Fase de Latencia

Cuando se introducen microorganismos en un medio de cultivo fresco, normalmente no se produce un aumento inmediato del número de células o de masa; periodo que se denomina fase de latencia. Aunque la división celular no se produce inmediatamente y no hay un incremento neto de masa, la célula está sintetizando nuevos componentes.

La duración de la fase de latencia varía considerablemente según la condición de los microorganismos y la naturaleza del medio. Esta fase puede ser larga si el inóculo procede de un cultivo viejo o de uno que haya sido refrigerado. La inoculación de un cultivo en otro químicamente diferente provoca también una fase de latencia mayor

Fase exponencial

Durante la fase exponencial o logarítmica, los microorganismos crecen y se dividen hasta el nivel máximo posible, en función de su potencial genético, el tipo de medio y las condiciones en que crecen. La rapidez de crecimiento es constante durante la fase exponencial; los microorganismos se dividen y duplican en número a intervalos regulares. Como cada célula se divide en un momento ligeramente diferente del resto, la curva de crecimiento aumenta suavemente, en lugar de realizar saltos discretos. Durante esta fase, la población es más uniforme, química y fisiológicamente; es la fase exponencial donde se efectúan normalmente los estudios bioquímicos y fisiológicos.

Fase estacionaria

Finalmente, el crecimiento de la población cesa y la curva de crecimiento se vuelve horizontal. Las bacterias llegan normalmente a esta fase estacionaria cuando el nivel de la población es de aproximadamente 10^9 células por mL. El tamaño final de la población depende, por supuesto, de la disponibilidad de nutrientes y otros factores, así como del tipo de microorganismo. En la fase estacionaria el número total de microorganismos viables permanece constante. Este hecho puede ser resultado del equilibrio entre la división y la mortalidad de las células o que la población deje de dividirse, aunque siga activa metabólicamente.

Las poblaciones microbianas entran en fase estacionaria por varias razones. Un factor es la limitación de nutrientes; si se reduce intensamente la concentración de un nutriente esencial, la población crecerá lentamente. Los organismos aerobios están limitados a menudo por la disponibilidad de oxígeno. El oxígeno no es muy soluble y puede reducirse tan rápidamente que sólo la superficie del cultivo tenga una concentración de oxígeno adecuada para el crecimiento.

En este caso, las células situadas por debajo de la superficie no podrán crecer, salvo que el cultivo se agite o reciba oxígeno de otra forma. El crecimiento de una población puede también cesar debido a la acumulación de productos residuales tóxicos. Parece ser que este factor limita el crecimiento de muchos cultivos anaerobios (cultivos que crecen en ausencia de oxígeno). Otros factores que pueden alterar el crecimiento de las bacterias son los cambios de temperatura y presión así como la radiación electromagnética. En definitiva, un cultivo entra en fase estacionaria como consecuencia de varios factores que actúan conjuntamente.

Fase de mortalidad

Lo que caracteriza la fase de muerte son los cambios ambientales como son la privación de nutrientes y la acumulación de residuos tóxicos, los cuales originan la disminución del número de células viables. A menudo, la única forma para decidir si una bacteria es viable consiste en incubarla en un medio fresco, si ésta no crece ni se multiplica y por el contrario se observa que la población disminuye conforme pasa el tiempo, se considera que está en la fase de muerte. Aunque la mayor parte de una población de bacterias muere en forma logarítmica, la rapidez de la mortalidad puede disminuir después de reducirse drásticamente la población. Esto se debe a la supervivencia prolongada de algunas células particularmente resistentes.

1.5 Modelos continuos de población para especies simples.

Se investigan sistemas de organismos que son cuidadosamente seleccionados para un problema particular, los datos experimentales obtenidos son reunidos e incorporados en modelos conceptuales, diagramáticos o computacionales que son utilizados para organizar y analizar estos resultados, asimismo las teorías formales abstractas llegan a la vida en la forma de modelos predictivos y formales.¹⁹

El creciente estudio de modelos matemáticos útiles y realistas en poblaciones biológicas, por ejemplo con poblaciones humanas con o sin su distribución de edad, población de especies en peligro de extinción, crecimiento de bacterias o virus, es un reflejo de su uso y ayuda para entender los procesos dinámicos involucrados y en la creación de predicciones. El estudio de los cambios en una población tienen una historia muy antigua: en 1202 un ejercicio en un libro de aritmética escrito por Leonardo de Pisa involucró la construcción de un modelo matemático para el crecimiento de una población de conejos. En ecología, fundamentalmente el estudio de la interrelación entre especies y su ambiente, en áreas como sistemas presa-depredador e interacciones de especies en competencia, administración de recursos renovables, evolución de cepas resistentes a pesticidas, ecológica y genéticamente modificados para control de plagas, sociedades de especies múltiples, sistemas herbívoro-planta, es ahora un campo de estudio muy amplio. La lista de la expansión continua de aplicaciones es extensa como lo son el número de libros sobre diversos aspectos de este campo. Existen también muchas aplicaciones prácticas de modelos de especies simples en ciencias biomédicas²⁰.

1.6 Modelos continuos de crecimiento.

Los modelos de especies simples pueden reflejar una influencia de eventos basados en las dinámicas de población. La variable $N(t)$ es la población de individuos al tiempo t , entonces la rapidez de cambio es:

A continuación se muestra la ecuación de conservación de la población (1). La forma de varios términos del lado derecho de necesita determinarse para la situación de interés. El modelo más sencillo no tiene migración y los términos de nacimientos y mortandad son proporcionales a N . Así que,

$$\frac{dN}{dt} = \text{nacimientos} - \text{muertes} + \text{migración}, \quad (1)$$

$$\frac{dN}{dt} = bN - dN \quad \Rightarrow \quad N(t) = N_0 e^{(b-d)t} \quad (2)$$

Donde b , d son constantes positivas y la población inicial $N(0) = N_0$. Por lo tanto si $b > d$ la población crece exponencialmente mientras si $b < d$ se extingue. Esta aproximación, propuesta por Malthus en 1798, es inapropiada para nuestros tiempos. Sin embargo, si consideramos el pasado y predecimos estimaciones de crecimiento para el total de la población mundial del siglo XVII al siglo XXI es quizás la menos irreal, pues desde 1900 la población ha tenido un crecimiento exponencial.

Es necesario conocer los principales factores que deben incluirse en el modelo para así hacerlo un predictor confiable, ya que de lo contrario sería difícil representar el crecimiento de una población tanto en periodos largos como cortos.

Ecuación de crecimiento logístico

El modelo de crecimiento logístico propuesto por Verhulst en 1845, explica que a mayor población x , menor tasa de crecimiento, donde r y K son constantes positivas. En este modelo la rapidez de nacimiento per cápita es $r\left(1 - \frac{x}{K}\right)$; que es dependiente de x . La constante K es la capacidad de soporte del medio, el cual es determinado mediante los recursos disponibles. Inicialmente, la población crece rápido y pierde su capacidad de crecer al volverse muy numerosa, debido a interacciones entre los miembros de la población así como a los recursos disponibles. Lo anterior está representado mediante ecuación (3).

$$\frac{dx}{dt} = rx\left(1 - \frac{x}{K}\right) \quad (3)$$

A diferencia del modelo de crecimiento exponencial, donde la población siempre crece, este modelo se apega más a la realidad para calcular la población de cada sistema. En la figura 3 se observa la variación de la población x en función de la rapidez de crecimiento de la población r , gráfica también conocida como diagrama de bifurcaciones.

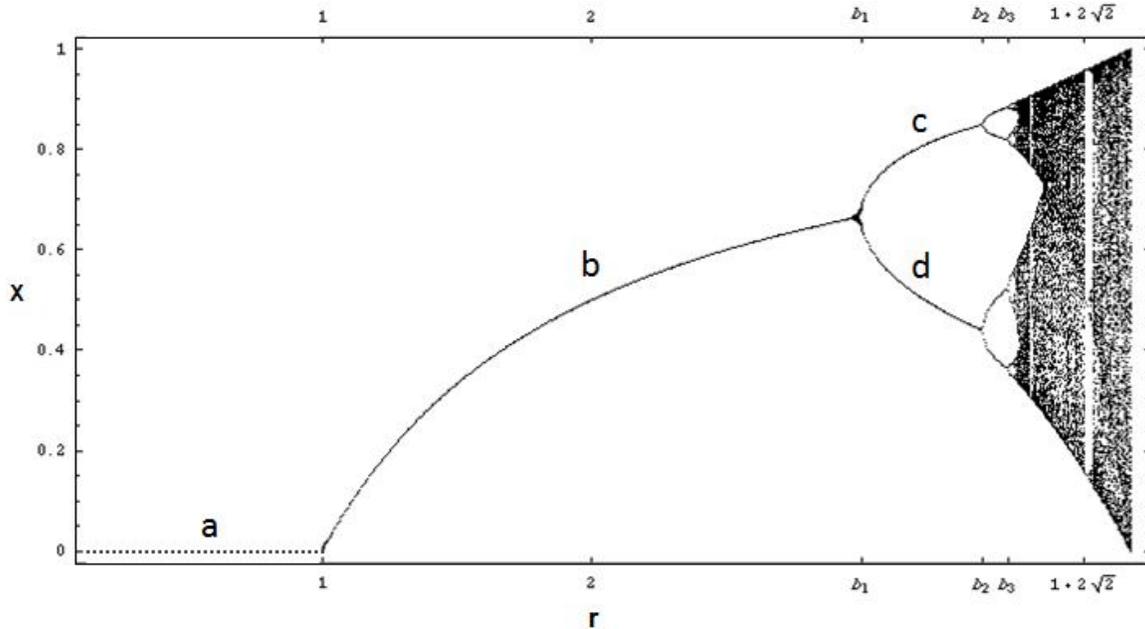


Figura 3. Diagrama de bifurcaciones²⁰

Aquí se observan las zonas más importantes de este diagrama, la región **a** donde $0 < r < 1$ es conocida como la zona de extinción y se refiere a que la población que decrece hasta alcanzar el valor de cero, cuando la rapidez de crecimiento se encuentra en este intervalo. La zona **b** es la región de un solo valor y corresponde al rango de $1 < r < b_1$, donde $b_1 = 3$. Para valores de r mayores a tres se entrará a la zona de bifurcaciones, así que para $3 < r < b_2$ existen dos valores de población para una rapidez de crecimiento y corresponde a la primera bifurcación representada por las ramificaciones **c** y **d** donde $b_2 = 3.3$, la siguiente bifurcación es para $b_3 \approx 3.5699$ donde existen cuatro ramificaciones; la función continuará de manera consecutiva hasta llegar a una región caótica.

Hay dos estados estacionarios o estados de equilibrio para (3), $x = 0$ y $x = K$, que es donde $\frac{dx}{dt} = 0$. La capacidad de soporte K determina el tamaño de la población en estado estacionario, mientras r es una medida de la rapidez de crecimiento de la población. Así r^{-1} es un tiempo de escala representativo de respuesta del modelo para cualquier cambio en la población.

Si $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ la solución de la ecuación (3) es

$$x(t) = \frac{x_0 K e^{rt}}{[K + x_0(e^{rt} - 1)]} \rightarrow K \quad (4)$$

cuando $t \rightarrow \infty$.

1.7 Ondas Biológicas: Modelos de especies simples.

Hay un gran número de fenómenos en biología en el cual un elemento clave o precursor para un proceso parece ser la aparición de una onda viajera, de concentración química o deformación mecánica. Del análisis sobre la difusión de bacterias podemos esperar fenómenos de onda, también en la interacción de modelos poblacionales donde los efectos espaciales son importantes. Otro ejemplo, relacionado con la interacción de poblaciones, son las ondas progresivas que existen en una epidemia, como la propagación geográfica de la peste negra en Europa que puede modelarse mediante ondas viajeras y se conoce como onda epidémica. El movimiento de microorganismos en una fuente alimenticia, quimiotácticamente dirigido, es otro ejemplo de las ondas biológicas.

El punto en el cual se quiere hacer énfasis es la amplia existencia de fenómenos de ondas en las ciencias biológicas, los cuales requieren un estudio profundo de las ondas viajeras, así como del modelado y el análisis involucrado. Durante el desarrollo de los sistemas vivientes es casi continuo el intercambio de información que existe a nivel inter e intracelular. Así como la comunicación es necesaria para el desarrollo secuencial y generación del patrón requerido y la forma. La propagación de ondas de variaciones de concentración bioquímica es un medio de transmisión de información bioquímica utilizado por microorganismos.

Debido a que la difusión es relevante en el fenómeno que se está estudiando se habla de ondas viajeras. La propagación de ondas de concentraciones bioquímicas variables es un medio de transmisión como de información bioquímica. Así que los coeficientes de difusión pequeños implican que para cubrir distancias macroscópicas del orden de varios milímetros, se requiere un tiempo muy grande si la difusión es el principal proceso involucrado.

Una onda viajera es considerada como aquella que viaja sin cambio de forma. Así que una solución $u(x,t)$ representa una onda viajera, la forma de la solución será la misma para todo el tiempo y la velocidad de propagación de esta forma es una constante, la cual se denota mediante c . Si esta onda se mueve a una velocidad c en un marco viajero, ésta aparecerá como estacionaria.

$$u(x, t) = u(x - ct) = u(z), \quad z = x - ct$$

Entonces $u(x,t)$ es una onda viajera que se mueve con una velocidad constante c en la dirección positiva x . Si $x - ct$ es constante, entonces es u . Esto significa que el sistema coordenado se mueve con una velocidad c . La velocidad de onda c tiene que ser experimentalmente determinada. Así las ecuaciones diferenciales parciales en x y t se convierten en ecuaciones diferenciales ordinarias en z . Para tener una representación físicamente correcta $u(z)$ tiene que ser positiva para todas las z , debido a las cantidades con las cuales se está restringido, como son sustancias químicas, poblaciones, bacterias y células.

1.8 Sistemas no lineales.

Hay dos tendencias principales en el tratamiento de sistemas de ecuaciones diferenciales. La primera y más antigua se caracteriza por la búsqueda de soluciones explícitas, ya sea de forma cerrada, o bien, en términos de series de potencias. En la segunda es poco probable resolver ecuaciones en el sentido tradicional y, en su lugar se busca información cualitativa sobre el comportamiento general de las soluciones. El interés en las ecuaciones diferenciales no lineales es que muchos sistemas físicos y las ecuaciones que los describen son no lineales.²¹

Los sistemas no lineales son generalmente más complejos en su tratamiento en comparación con los sistemas lineales así como su relación con las técnicas analíticas y algebraicas que se han desarrollado, debido a esto se usan las matemáticas de sistemas lineales para entender el comportamiento de las soluciones de los sistemas originales cerca de sus puntos de equilibrio.⁶

Aun cuando una ecuación diferencial sea difícil o imposible de resolver explícitamente, en muchos casos es posible extraer información cualitativa acerca de las propiedades generales de sus soluciones.²²

1.9 El plano de fase.

Una amplia variedad de fenómenos naturales se describen por medio de sistemas de primer orden de la forma.

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= F(x, y) \\ \frac{dy}{dt} &= G(x, y)\end{aligned}\tag{5}$$

En los cuales la variable independiente t no aparece explícitamente del lado derecho del sistema de ecuaciones. Normalmente se piensa en las variables dependientes x y y como variables de posición en el plano xy , y en t como la variable del tiempo. Un sistema de ecuaciones diferenciales como el que se menciona, en donde los valores de las derivadas son independientes (o “autónomas”) del tiempo t , se conoce como sistema autónomo.

Por lo general se supone que las funciones F y G son continuas y derivables en una región R del plano xy . De acuerdo con los teoremas de existencia y unicidad, dado t_0 y cualquier punto (x_0, y_0) de R , existe sólo una solución $x = x(t)$, $y = y(t)$ de (5) definida en algún intervalo abierto (a, b) que contiene t_0 y que satisface las condiciones iniciales

$$x(t_0) = x_0, \quad y(t_0) = y_0$$

Las ecuaciones $x = x(t)$, $y = y(t)$ describen una curva solución parametrizada en el plano de fase. Cualquier curva solución de este tipo se denomina trayectoria del sistema en (5); y precisamente la trayectoria pasa a través de cada punto de la región R . Un punto crítico del sistema en (5) es un punto (x^*, y^*) tal que

$$F(x^*, y^*) = G(x^*, y^*) = 0$$

Una familia de trayectorias se denomina diagrama de plano de fase. La condición inicial determina la posición inicial de un punto sobre la trayectoria y al crecer el tiempo el punto o un punto representativo se desplaza sobre la trayectoria. La representación en el plano de fase de un sistema autónomo presenta la totalidad de todos los estados posibles y por lo tanto, en el diagrama de plano de fase se muestra la naturaleza de la respuesta del sistema. Esto permite que cualquier trayectoria que no consista de un solo punto es una curva no degenerada sin intersecciones propias. Puede mostrarse cualitativamente el comportamiento de las soluciones de sistema autónomos construyendo un diagrama que muestre sus puntos críticos junto con una colección de curvas solución típicas o trayectorias en un plano.

Estabilidad de los puntos de equilibrio.

El comportamiento de un sistema lineal autónomo como el representado por (5) puede determinarse con dos valores propios λ_1 y λ_2 . Para el caso en que se tengan dos valores propios distintos no nulos y reales λ_1 y λ_2 puede decirse que

- ❖ Si $\lambda_1 < \lambda_2 < 0$, entonces el punto de equilibrio es un pozo. Todas las soluciones tienden a ese punto de crítico cuando t tiende a infinito
- ❖ Si $\lambda_1 < 0 < \lambda_2$, entonces el punto de equilibrio es un punto silla. Si hay dos líneas en el plano fase que corresponden a soluciones de línea recta. Las soluciones a lo largo de una línea tienden hacia el punto crítico cuando t se incrementa y las que se encuentran sobre la otra línea se alejan del punto crítico. Las demás soluciones llegan de y se dirigen al infinito.
- ❖ Si $\lambda_1 > \lambda_2 > 0$, entonces el punto de equilibrio es una fuente. Todas las soluciones se alejan del punto de equilibrio cuando t tiende a infinito y lo hacen siguiendo la dirección del vector propio.

Se dice que un pozo es estable porque los puntos iniciales cercanos conducen a soluciones cuya tendencia es regresar hacia el punto de equilibrio conforme transcurre el tiempo. Por lo tanto si el sistema sufre una perturbación alejándose del punto de equilibrio, la solución resultante no diverge del punto inicial. Los puntos de equilibrio de un punto silla y fuente son llamados inestables porque hay condiciones iniciales arbitrarias cercanas al punto de equilibrio cuyas soluciones se alejan. Por consiguiente una pequeña perturbación de una condición inicial puede tener enormes consecuencias. Para una fuente, toda condición próxima al punto de equilibrio corresponde a una solución que se aleja. Por consiguiente un desplazamiento pequeño de una condición inicial puede tener enormes consecuencias.

Para una fuente, toda condición próxima al punto de equilibrio corresponde a una solución que se aleja. Para un punto silla, toda condición inicial, excepto aquellas sobre la solución de la línea recta que tiende al punto de equilibrio corresponde a una solución que se aleja. En la tabla 1 se muestra la clasificación de los diferentes puntos críticos que pueden obtenerse, incluso el caso en que los valores propios son complejos conjugados en cuyos casos se genera en el plano de fase una fuente espiral o un pozo espiral.

Valores propios λ_1 y λ_2 para un sistema linealizado	Tipos de puntos críticos del sistema lineal
$\lambda_1 < \lambda_2 < 0$	Nodo impropio estable (pozo)
$\lambda_1 = \lambda_2 < 0$	Nodo estable o punto espiral
$\lambda_1 < 0 < \lambda_2$	Punto silla inestable
$\lambda_1 = \lambda_2 > 0$	Nodo inestable o punto espiral
$\lambda_1 > \lambda_2 > 0$	Nodo impropio inestable (fuente)
$\lambda_1, \lambda_2 = a \pm bi$ ($a < 0$)	Punto espiral estable (pozo espiral)
$\lambda_1, \lambda_2 = a \pm bi$ ($a > 0$)	Punto espiral inestable (fuente espiral)
$\lambda_1, \lambda_2 = \pm bi$	Centro

Tabla 1. Clasificación de puntos críticos en un sistema lineal.

1.10 Sistemas lineales tridimensionales.

Es común el estudio de sistemas lineales con dos variables dependientes. El comportamiento de las soluciones y la naturaleza del plano fase de éstos pueden determinarse calculando los valores y vectores propios de la matriz de coeficientes de 2×2 . Una vez que se han encontrado las dos soluciones con condiciones iniciales linealmente independientes, se puede dar la solución general. Lo mismo ocurre con los sistemas lineales con tres variables dependientes. Los valores y vectores propios de la matriz de coeficientes de 3×3 determinan el comportamiento de las soluciones particulares y de la general. Los sistemas tridimensionales tienen tres valores propios, por lo que la lista de los espacios de fase cualitativamente distintos y posibles es más larga que para los sistemas planos.

Clasificación de los sistemas tridimensionales

Aunque hay más tipos posibles de gráficas de espacios de fase para los sistemas tridimensionales que para los bidimensionales, la lista aún es finita. Igual que para dos dimensiones, la naturaleza del sistema queda determinada por los valores propios. Cuando son reales y negativos, corresponden a soluciones de línea recta que tienden hacia el origen. Los valores propios complejos pertenecen al movimiento en espiral. Las partes reales negativas indican un desplazamiento en espiral hacia el origen, mientras que las partes reales positivas señalan un movimiento en espiral alejándose del origen.²³

Como el polinomio característico es una función cúbica, habrá tres valores propios (que pueden no ser todos distintos si hay raíces repetidas). Siempre se encuentra por lo menos un valor propio real. Los otros dos pueden ser reales o un par complejo conjugado.

Los tipos más importantes de los sistemas lineales tridimensionales pueden dividirse en tres categorías: pozos, fuentes y puntos silla.

Pozos

Un pozo es un punto de equilibrio en el origen al que tienden todas las soluciones cuando se incrementa el tiempo. Si los tres valores propios son reales y negativos, entonces habrá tres soluciones de línea recta, que tienden todas hacia el origen. Como cualquier otra solución es una combinación lineal de esas soluciones, todas las soluciones tienden al origen cuando el tiempo se incrementa. La otra posibilidad para un pozo es que tenga un valor propio real negativo y dos valores propios complejos con partes reales negativas. Esto significa que habrá una solución de línea recta que tiende al origen y un plano de soluciones que se mueven en espiral también hacia ese punto. Las restantes exhiben esos dos comportamientos.

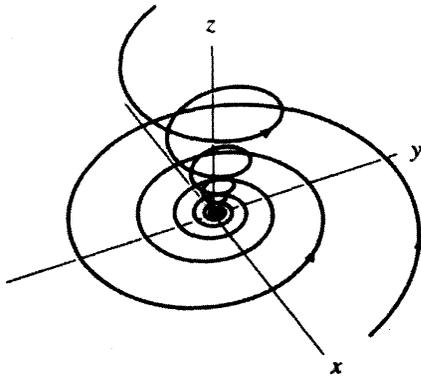


Figura 4. Espacio fase para un pozo espiral²³

Fuentes

También hay dos posibilidades para las fuentes. Se pueden tener tres valores propios reales y positivos o un valor propio real positivo y un par complejo conjugado con partes reales positivas. Un ejemplo de este espacio fase se muestra en la figura (5). Este sistema se ve tal como el pozo de la figura (4), excepto que las direcciones de las flechas han sido invertidas, por lo que las soluciones se alejan del origen conforme el tiempo se incrementa.

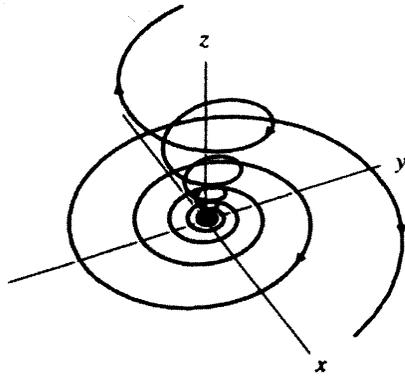


Figura 5. Espacio fase para una fuente espiral²³

Puntos silla

El punto de equilibrio en el origen es un punto silla, si cuando el tiempo crece hasta el infinito algunas soluciones tienden a él, mientras que otras soluciones se alejan de él. Esto puede ocurrir de cuatro maneras diferentes. Si todos los valores propios son reales, entonces se puede tener uno positivo y dos negativos o dos positivos y uno negativo. En el primer caso, uno positivo y dos negativos, habrá una línea recta de soluciones que tienden a alejarse del origen cuando el tiempo crece y un plano de soluciones que tiende hacia el origen cuando el tiempo crece. En el otro caso, dos positivos y uno negativo, habrá un plano de soluciones que tiende a alejarse del origen cuando el tiempo crece y una línea de soluciones que tiende hacia el origen cuando el tiempo crece. En ambos casos, al final todas las otras soluciones se alejarán del origen cuando el tiempo crezca o decrezca figura (6).

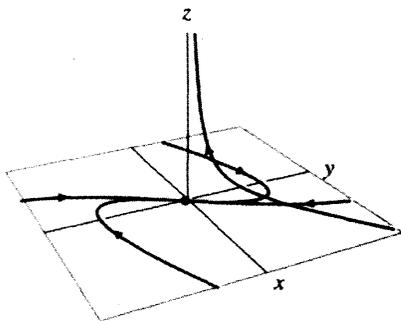


Figura 6. Punto silla con un valor propio positivo y dos negativos²³

Los otros dos casos ocurren si hay sólo un valor propio real y los otros dos son un par de complejos conjugados. Si el valor propio real es negativo y las partes reales de los valores propios complejos son positivas, entonces al incrementar el tiempo, habrá una línea recta de soluciones que tienden hacia el origen y un plano de soluciones que se alejan de él. Todas las otras soluciones son una combinación de esos comportamientos, por lo que al aumentar el tiempo se mueven en espiral alrededor de la línea recta de soluciones en trayectorias cada vez más amplias (ver figura 6). La otra posibilidad es que el valor propio real sea positivo y los valores propios complejos tengan partes reales negativas. En este caso se tiene una línea recta de soluciones que tienden a alejarse del origen y un plano de soluciones que se mueven en espiral hacia el origen cuando el tiempo crece. Toda otra solución se mueve en espiral alrededor de la línea recta de soluciones mientras se aleja del origen (vea figura 7).

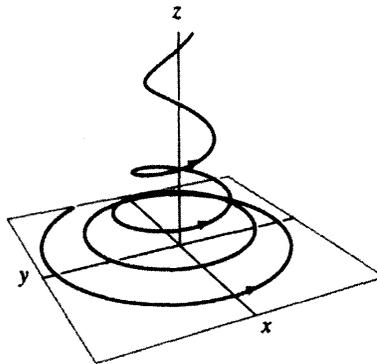


Figura 7. Punto silla con valor propio real y un par de valores propios complejos conjugados²³

1.11 Sistemas hamiltonianos.

Los sistemas no lineales de ecuaciones diferenciales difícilmente se resuelven de manera explícita. Las curvas solución de los sistemas pueden comportarse de muchas maneras diferentes y no hay procedimientos cualitativos que funcionen en todos los casos. Hay ciertos tipos de sistemas no lineales que aparecen a menudo en la práctica, y para los que existen procedimientos especiales mediante los cuales pueden entenderse el plano de fase.

Una función de valor real $\mathbf{H(x, y)}$ de dos variables \mathbf{x} y \mathbf{y} es una cantidad conservada para un sistema de ecuaciones diferenciales si \mathbf{H} es constante a lo largo de todas las curvas de solución del sistema. Es decir, si $(\mathbf{x(t), y(t)})$ es una solución del sistema, entonces $\mathbf{H(x(t), y(t))}$ es constante. En otras palabras,

$$\frac{d}{dt}H(x(t), y(t)) = 0$$

Un sistema de ecuaciones diferenciales se llama sistema hamiltoniano si existe una función real $\mathbf{H(x, y)}$ tal que

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial y} \\ \frac{dy}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x}\end{aligned}$$

para toda \mathbf{x} y \mathbf{y} . La función \mathbf{H} se llama función hamiltoniana para el sistema. Así que \mathbf{H} es una cantidad que siempre se conserva para un sistema como éste. Se puede verificar lo anterior si se considera que $\mathbf{H(x(t), y(t))}$ es cualquier solución del sistema. Entonces

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}H(x(t), y(t)) &= \frac{\partial H}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial t} \\ &= \frac{\partial H}{\partial x} \left(\frac{\partial H}{\partial y} \right) + \frac{\partial H}{\partial y} \left(-\frac{\partial H}{\partial x} \right) \\ &= 0\end{aligned}$$

La primera igualdad es la regla de la cadena y la segunda aplica el hecho de que el sistema es hamiltoniano y que $\mathbf{H}(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t))$ es una solución para reemplazar $\frac{dx}{dt}$ por $\frac{\partial H}{\partial y}$ y $\frac{dy}{dt}$ por $-\frac{\partial H}{\partial x}$. Entonces, las curvas de solución del sistema se encuentran a lo largo de las curvas de nivel de H . Representar el plano de fase para un sistema hamiltoniano se compara con dibujar los conjuntos de nivel de la función hamiltoniana.

Ejemplos de dinámica hamiltoniana incluye no sólo los casos conocidos de sistemas mecánicos en la ausencia de fricción, sino también las trayectorias seguidas por las líneas de campo magnético en un plasma describiendo así las trayectorias de propagación de ondas. Además, el caos en sistemas hamiltonianos es el corazón de preguntas fundamentales tales como los fundamentos de la mecánica estadística y la estabilidad del sistema solar. En suma, la mecánica hamiltoniana y su estructura son reflejadas en la mecánica cuántica.²⁴

2. Descripción de los sistemas

2.1 Morfología de un medio poroso.

Se puede definir un medio poroso como aquel material compuesto por dos fases: una matriz sólida y en su interior un sistema de huecos (poros) que pueden o no estar interconectados entre sí. Estos últimos pueden tener geometrías, tamaños y topologías variadas, dependiendo del origen de su formación.

La propiedad más simple de un sistema poroso es su porosidad ϕ , la cual se define como la fracción de su volumen ocupada por los poros. La porosidad de un medio puede ser medida por diversos métodos. El más simple es el método directo, en el cual el volumen total del sistema es medido y posteriormente la muestra es compactada para remover todo el espacio poroso. La diferencia de estos volúmenes proporciona la porosidad total del sistema. La porosidad del sistema depende del arreglo y forma de partículas que lo constituyen, así como de su distribución por tamaño y grado de compactación.

Otra propiedad importante de un medio poroso es el área superficial específica de un sólido, A_s es definido como el área intersticial de la superficie de los poros por unidad de masa y es una de las principales propiedades para evaluar la capacidad adsorptiva de los sólidos.

La formación del medio poroso del sistema en estudio consiste en empaquetar partículas de diferentes formas y tamaños. Las fuerzas dispersivas y eléctricas son las que se encargan de mantener juntas a las partículas, dejando intersticios que constituyen el medio poroso. Los espacios no ocupados por material sólido se llenan con agua y aire o únicamente con agua y se dice que el sistema está saturado.

2.2 Transporte de bacterias en medios porosos.

El transporte de microorganismos en medios porosos granulares es de fundamental importancia en una gran variedad de campos, incluyendo el tratamiento de aguas residuales, separaciones cromatográficas y transporte de contaminantes en superficies ambientales. El desarrollo de la capacidad de precisar un modelo de transporte de bacterias y la cuantificación de esa concentración ha tomado vital importancia en estas áreas.

Las técnicas de biorremediación in situ requieren la introducción de bacterias especializadas²⁵. Para tener éxito en éstas es crucial que al introducir la bacteria, ésta alcance el área de contaminación. Por lo tanto, se requiere conocer los factores que afectan el movimiento de bacterias y cuantificarlos.

Las bacterias son transportadas mediante el flujo de agua hasta que son retenidas por la interacción con interfases. La atracción de bacterias a superficies sólidas ha sido explicada mediante la teoría de Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO) de estabilidad coloidal³, la cual describe la interacción entre la bacteria cargada negativamente y las superficies sólidas cargadas negativamente aunadas a las fuerzas atractivas de Van der Waals y las fuerzas repulsivas electrostáticas. Las interacciones hidrofóbicas entre partículas y células, pueden promover una atracción adicional. Además, las fuerzas de atracción y repulsión de las bacterias no son las únicas consideradas, sino también el nivel de superficie bacteriana, los cuales pueden promover o dificultar la atracción bacteriana²⁶. La suma de estas interacciones permite explicar la retención de bacterias en medios porosos llenos de agua.

La presencia de aire como una fase adicional hace suponer la presencia de interfases agua-aire. La bacteria que tiende a acumularse en la interfase agua-aire,^{7, 8, 9, 10} sugiere una influencia del aire en el transporte de bacterias. Sin embargo, el número de estudios que lo reportan como una influencia es escaso.

Experimentalmente se ha encontrado que existe una influencia del grado de porosidad del medio sobre el movimiento de bacteriano a través de columnas llenadas con tierra. Las mediciones de la penetración de bacterias a través de columnas llenadas con arena demuestran estos efectos del medio poroso así como que la observación de acumulación de bacterias en las burbujas de aire.

Uno de los principales problemas en la investigación del transporte de bacterias en un medio poroso es el armado y mantenimiento de sistemas de columnas con un flujo en estado estacionario y un llenado de agua uniforme. Los modelos que describen el transporte bacteriano son una extensión de la llamada “teoría coloidal”. Este es un mecanismo, el cual involucra una combinación de los siguientes tres fenómenos:

1. Mecanismo de colisión incluyendo la acción hidrodinámica, sedimentación, intercepción y difusión browniana.
2. Mecanismo de atracción, el cual es descrito mediante la teoría Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO) la cual toma en cuenta para diferentes escalas las fuerzas de interacción electrostáticas, fuerzas de Van der Waals y fuerzas repulsivas de Born.
3. Mecanismo de repulsión, el cual es introducido mediante una variación en el flujo, presiones locales, salinidad del fluido, intensidad luminosa, etc.

Combinaciones de estos tres mecanismos constituyen la ecuación de difusión-convección-reacción para transporte bacteriano. Los investigadores involucrados no tomaron en cuenta el hecho de que microorganismos bacterianos pueden reproducirse conforme pasa el tiempo. En efecto, bajo ciertas condiciones, la concentración de las bacterias puede multiplicarse exponencialmente. Por lo tanto, los modelos que no toman en cuenta el proceso de crecimiento en la población de bacterias, no pueden ser físicamente correctos cuando el tiempo considerado excede un cierto límite.

El presente trabajo intenta desarrollar un modelo para la movilidad de las bacterias en un medio poroso, tomando como base el modelo utilizado por Roland W. Lewis y colaboradores¹¹. Una de las contribuciones más importantes de este trabajo es la adición de una ecuación diferencial que toma en cuenta a las bacterias que se encuentran en la interfase agua-aire. Por lo tanto, el sistema es descrito mediante un sistema de tres ecuaciones diferenciales parciales acopladas no lineales, a diferencia del sistema de dos ecuaciones; además se proponen dos modelos semejantes al del artículo base que se diferencian por la forma en que se adimensionaliza el sistema. Se presenta un análisis de estabilidad del sistema de R. Lewis¹¹ y del propuesto en este trabajo, asimismo se analizarán los casos más importantes en los mismos.

2.3 Descripción del sistema

El sistema experimental usado por Anker Schäfer²⁵ y colaboradores consta de una columna cilíndrica de PVC (longitud: 20 cm, diámetro interno: 5.34 cm) para los experimentos de transporte de bacterias. La columna está equipada con un dispositivo aspersor para suministrar homogéneamente la suspensión de bacterias al límite superior (figura 8), el cual asegura un flujo regular y controlado bajo condiciones donde la columna se encuentra llena de agua, así como cuando la columna no lo está. El límite inferior consiste de una membrana de poliéster (tamaño de poro: 15 μ m) que es permeable para la bacteria y permite succionar a una presión de 7kPa. La columna tiene 2 puertos de presión a 3.7cm y 13.7 cm del límite inferior para medir la presión del agua mediante el uso de tensiómetros.

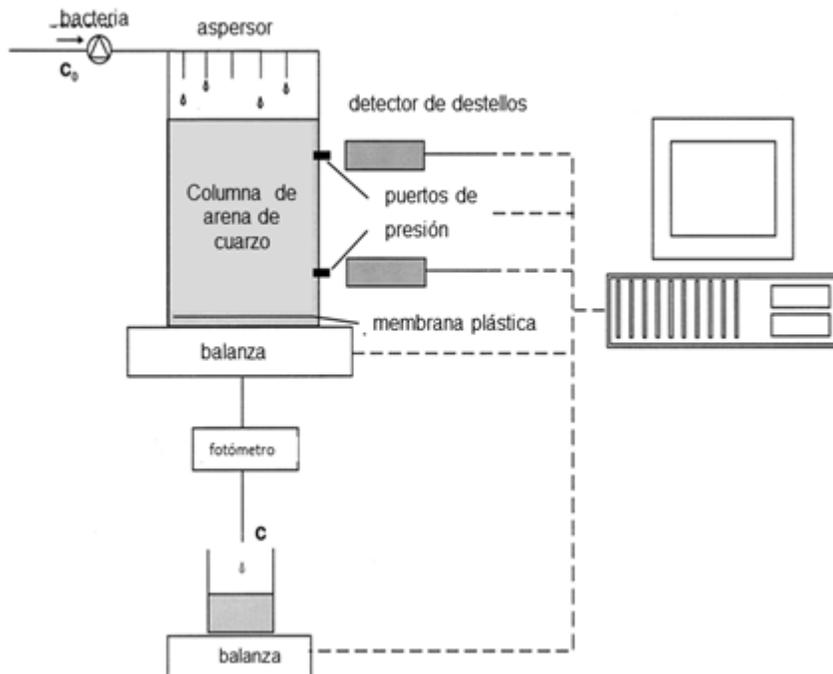


Figura 8. Montaje de una columna de experimentos²⁵

El peso del agua de la columna y el flujo del líquido fue medido continuamente mediante el uso de las balanzas. La columna fue empacada, para cada experimento, usando arena de cuarzo con tamaño granular de 250 y 500 μ m. La columna fue empacada hasta una longitud de 15.8 cm y saturada mediante la evacuación de aire y subsecuentemente llenada a ras de la superficie con agua

desgasificada. Para los experimentos en condiciones insaturadas, la columna fue drenada después y llenada de nuevo a $\theta = 0.86$ (86% del volumen poroso lleno con agua). Este es la máxima saturación de agua que se puede conseguir de forma natural ya que las burbujas de aire residual quedan atrapadas en el medio poroso de la columna. La tabla 2 muestra los parámetros de la columna de experimentos.

Tabla 2. Parámetros de la columna de experimentos utilizados por Schäfer.²⁵

Propiedades	Valor
Área superficial específica de la fase sólida (A_s)	60.6 cm ² /g
Densidad de la suspensión (ρ)	1.61 g/cm ³
Porosidad (ϕ)	0.39
Porcentaje de volumen poroso llenado con agua (θ)	0.86

Mediante la suposición de que el proceso ocurre en una matriz sólida no deformable con coeficientes de difusión, saturación y permeabilidad constantes, se puede simplificar el proceso de transporte de bacterias como un proceso de reacción-difusión en un medio poroso. En este caso las concentraciones de bacterias en la fase líquida y sólida son las dos variables dependientes. Este modelo simplificado todavía conserva características importantes del proceso de transporte bacteriano mientras que reproduce muchos de los procesos físicos típicos observables involucrados en la movilidad de la bacteria. Las ecuaciones resultantes son originalmente una pareja de ecuaciones de reacción-difusión que se amplía a un sistema de tres ecuaciones con tres variables dependientes. En este trabajo se presenta la solución de las ondas viajeras de las ecuaciones gobernantes así como el análisis de estabilidad.

2.4 Desarrollo del modelo.

Las bacterias son transportadas junto con el flujo de agua en un medio poroso, las cuales chocan con las partículas del sólido debido a la convección, difusión y sedimentación y a su vez pueden ser susceptibles a la atracción.

La movilidad de las bacterias en un medio poroso puede ser descrita como un proceso de reacción-difusión-convección. Donde las variables **c** y **s** representan las concentraciones bacterianas en el líquido y en la superficie sólida respectivamente. Denotando a **t** y **z** como las variables de tiempo y espacio, se muestran las siguientes ecuaciones diferenciales parciales acopladas no lineales.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - V \frac{\partial c}{\partial z} - (k_0 + k_1)c + \frac{k_2}{B}s + r \left(1 - \frac{c}{K}\right)c \quad (6)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = k_1 Bc - k_2 s \quad (7)$$

Donde **V** representa al flujo del líquido, **D** representa el coeficiente de difusión aparente, **k₀** muestra la rapidez de adsorción a la interfase agua-aire, **k₁** es el factor de filtración que toma en cuenta la adsorción de la bacteria en la superficie sólida, **B** es dependiente de otras propiedades y **k₂** es el factor de desorción de la bacteria. Debido a que en la ecuación (7) no se encuentra la variable **D** se considera que no existe la difusión en la fase sólida.

La ecuación (6) contiene el término $r \left(1 - \frac{c}{K}\right)c$, que representa la ecuación de crecimiento logístico, donde **r** es la rapidez con la que crecen las bacterias y la capacidad de soporte que tienen las mismas se representa a través de **K**, que indica las condiciones que necesita una población para poder sobrevivir, sin embargo, las bacterias pueden perder capacidad de soporte debido a que no cuentan con las condiciones necesarias y favorables para su desarrollo.

La supervivencia está determinada por varios factores como son: la limitación de nutrientes, la disponibilidad de oxígeno, la acumulación de productos residuales tóxicos, los cambios de temperatura, de presión, así como la radiación y el espacio. El coeficiente **B** depende de otras propiedades como la porosidad ϕ y el grado de saturación θ , por otra parte A_s es el área de superficie específica de la fase sólida, y ρ es la densidad del líquido y se representa de la siguiente manera:

$$B = \frac{\phi\theta}{A_s\rho} \quad (8)$$

Donde:

$$k_1 = k_s\theta \left(1 - \frac{s}{S_{max}}\right) \quad (9)$$

k_1 depende de k_s que es la constante de deposición de bacterias a la superficie sólida sin cubrirse ($1/T$), y a su vez de la variable s ; S_{max} es la máxima concentración de bacterias en la superficie del sólido (células/L²). En esta ecuación cuando $s \rightarrow S_{max}$ la rapidez de deposición tiende a cero debido a la competencia entre bacterias por adsorberse en el sólido. La constante θ representa la fracción volumétrica del agua, k_1 es linealmente proporcional a θ y a la concentración de las bacterias en la fase sólida.

En este trabajo se probaron dos planteamientos diferentes, los cuales incrementaron la capacidad para describir las interacciones de las bacterias con la interfase agua-aire.

$$k_0 = k_a(1 - \theta) \quad (10)$$

$$k_0 = k_{ca} \left(1 - \frac{a}{A_{max}}\right) (1 - \theta) \quad (11)$$

En las ecuaciones (10) y (11) k_0 es proporcional al área de la interfase agua-aire, la cual a su vez es directamente proporcional al contenido de aire ($1 - \theta$). Roland¹³ únicamente considera la ecuación (10); este trabajo toma en cuenta la ecuación (11).

En las ecuaciones (10) y (11), k_a (1/T) es la constante de deposición de las bacterias en la interfase agua-aire, k_{ca} es la constante de deposición de las bacterias en la interfase agua-aire que no está cubierta de bacterias (células/L²) y A_{max} es la concentración de bacterias máxima en la interfase agua-aire. Mientras que la ecuación (10) es una constante de deposición de la bacteria en la interface agua-aire, la ecuación (11) toma en cuenta que la interfase agua-aire está parcialmente cubierta por bacterias durante el curso del experimento.

En la fase líquida se presenta una reducción en la concentración de bacterias debido a que éstas son adsorbidas en la interfase agua-aire, por lo anterior la siguiente ecuación muestra los cambios que presentará la concentración de bacterias en la interfase en función del tiempo.

$$\frac{\partial A}{\partial t} = k_0 \frac{\phi \theta}{A_a} C \quad (12)$$

En la ecuación (12) se utiliza la variable A_a (L²/L³) que es la relación existente entre el área específica de la interfase agua-aire y el volumen de la columna.

Como el cálculo de A_a aún no está bien definido, la siguiente relación empírica se presenta en la publicación de Schäfer²⁵, donde rc es el radio colector (cm).

$$A_a = 80 \frac{cm^2}{cm^3} (1 - \theta) \frac{0.025 cm}{rc} \quad (13)$$

2.5 Escalas y simplificación.

Se sustituye la ecuación (9) en las ecuaciones (6) y (7), por lo que se obtiene el siguiente sistema:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - V \frac{\partial c}{\partial z} - k_0 c - k_s \theta \left(1 - \frac{s}{S_{max}}\right) c + \frac{k_2}{B} s + r \left(1 - \frac{c}{K}\right) c \quad (14)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = k_s \theta B \left(1 - \frac{s}{S_{max}}\right) c - k_2 s \quad (15)$$

Mediante el sistema de coordenadas referido al movimiento de la onda viajera $t = t$ y $\zeta = z - Vt$ y debido a que el flujo del líquido es constante, se puede eliminar el término convectivo de la siguiente forma:

$$c(z, t) \rightarrow c(\zeta, t) \rightarrow c[\zeta(z, t), t]$$

$$c(\zeta, t) \rightarrow c[(z - Vt), t]$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_z = \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_\zeta + \left(\frac{\partial c}{\partial \zeta}\right)_t \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_z = \frac{\partial c}{\partial t} - V \frac{\partial c}{\partial \zeta} \quad (16)$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)_t = \left(\frac{\partial c}{\partial \zeta}\right)_t \left(\frac{\partial \zeta}{\partial z}\right)_t = \frac{\partial c}{\partial \zeta} \quad (17)$$

$$\left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right)_t = \frac{\partial^2 c}{\partial \zeta^2} \quad (18)$$

Sustituyendo (16) y (18) en la ecuación (14).

$$\frac{\partial c}{\partial t} - V \frac{\partial c}{\partial \zeta} = D \frac{\partial^2 c}{\partial \zeta^2} - V \frac{\partial c}{\partial \zeta} - k_0 c - k_s \theta \left(1 - \frac{s}{S_{max}}\right) c + \frac{k_2}{B} s + r \left(1 - \frac{c}{K}\right) c$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial \zeta^2} - k_0 c - k_s \theta \left(1 - \frac{s}{S_{max}}\right) c + \frac{k_2}{B} s + r \left(1 - \frac{c}{K}\right) c \quad (19)$$

Adimensionalización del sistema

Para adimensionalizar el sistema se eligieron tres formas de adimensionalización. El primero se basó en la forma reportada en el artículo de Roland W. Lewis¹³ et al. Mediante la suposición de una escala de tiempo típica, D/V^2 , y una escala de longitud D/V . También se adimensionalizaron las concentraciones de bacterias en el líquido y en el sólido de la siguiente forma:

$$C = \frac{c}{K}, \quad S = \frac{s}{BK}, \quad t^* = \frac{V^2}{D} t, \quad \zeta^* = \frac{V}{D} \zeta$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t^*} \frac{\partial t^*}{\partial t} = \frac{KV^2}{D} \frac{\partial C}{\partial t^*} \quad (20)$$

$$\frac{\partial c}{\partial \zeta} = \frac{\partial C}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial \zeta^*} \frac{\partial \zeta^*}{\partial \zeta} = \frac{KV}{D} \frac{\partial C}{\partial \zeta^*} \quad (21)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial \zeta^2} = \frac{\partial \zeta^*}{\partial \zeta} \frac{\partial}{\partial \zeta^*} \left[\frac{KV}{D} \frac{\partial C}{\partial \zeta^*} \right] = \frac{KV^2}{D^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} \quad (22)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\partial S}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial t^*} \frac{\partial t^*}{\partial t} = \frac{BKV^2}{D} \frac{\partial S}{\partial t^*} \quad (23)$$

Sustituyendo en las ecuaciones (20), (22) y (23) en las ecuaciones (15) y (19) tenemos:

$$\frac{KV^2}{D} \frac{\partial C}{\partial t^*} = \frac{KV^2}{D^2} D \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - k_0 KC - k_s \theta K \left(1 - \frac{BKS}{S_{max}}\right) C + \frac{k_2 BK}{B} S + rK \left(1 - \frac{KC}{K}\right) C \quad (24)$$

$$\frac{BKV^2}{D} \frac{\partial S}{\partial t^*} = Bk_s \theta K \left(1 - \frac{BKS}{S_{max}}\right) C - k_2 BKS \quad (25)$$

Simplificando

$$\frac{KV^2}{D} \frac{\partial C}{\partial t^*} = \frac{KV^2}{D} \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - k_0 KC - k_s \theta K \left(1 - \frac{BKS}{S_{max}}\right) C + k_2 KS + rK(1 - C)C \quad (26)$$

$$\frac{BKV^2}{D} \frac{\partial S}{\partial t^*} = Bk_s \theta K \left(1 - \frac{BKS}{S_{max}}\right) C - k_2 BKS \quad (27)$$

Multiplicando por $\frac{D}{KV^2}$ la ecuación (26) y por $\frac{D}{BKV^2}$ la ecuación (27)

$$\frac{\partial C}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - \frac{k_0 D}{V^2} C - \frac{k_s \theta D}{V^2} \left(1 - \frac{BKS}{S_{max}}\right) C + \frac{k_2 D}{V^2} S + \frac{rD}{V^2} (1 - C)C \quad (28)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t^*} = \frac{k_s \theta D}{V^2} \left(1 - \frac{BKS}{S_{max}}\right) C - \frac{k_2 D}{V^2} S \quad (29)$$

Agrupando términos:

$$\delta = \frac{k_s \theta D}{V^2}, \quad b = \frac{BK}{S_{max}}, \quad \beta = \frac{k_0 D}{V^2}, \quad \alpha = \frac{k_2 D}{V^2}, \quad R = \frac{rD}{V^2}$$

Por simplicidad en la notación se eliminan los asteriscos, así que:

$$t^* = t, \quad \zeta^* = \zeta$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \beta C - \delta(1 - bS)C + \alpha S + R(1 - C)C \quad (30)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \delta(1 - bS)C - \alpha S \quad (31)$$

De lo anterior resulta un sistema de ecuaciones de reacción-difusión, donde las principales propiedades controladoras de la movilidad de la bacteria son el coeficiente de difusión D y las diferentes velocidades de adsorción al sólido y la desorción del sólido al líquido. La no linealidad se debe principalmente a la rapidez de crecimiento logístico de la bacteria en el fluido.

El término \mathbf{R} utilizado en la ecuación (30) $\mathbf{R} = \frac{rD}{v^2}$ representa a las tres constantes siguientes: r se refiere a la rapidez de crecimiento de bacterias y a su vez forma parte de la ecuación de crecimiento logístico, D es el coeficiente de difusión de bacterias y V la propagación de las mismas. Este término es relevante para esta investigación debido a los fenómenos de transporte que describe; donde el numerador representa al transporte por difusión mientras que el denominador al transporte por convección. En función del valor de \mathbf{R} es posible conocer cuál de estos fenómenos es el que domina, por ejemplo, cuando $\mathbf{R} < 1$ el fenómeno dominante es el convectivo, por otra parte cuando $\mathbf{R} > 1$ el transporte por difusión es el que predomina, cabe resaltar que la probabilidad de que \mathbf{R} sea igual a uno no es muy común, sin embargo, cuando esto sucede ambos fenómenos tienen la misma importancia.

En este trabajo se proponen otras formas de adimensionalizar el sistema de ecuaciones, basándose en la manera en la que se realiza para el sistema presa-depredador elaborado por Dumbar²⁰, el cual matemáticamente es semejante al sistema de ecuaciones A.

$$C = \frac{c}{K}, \quad S = \frac{s}{S_{max}}, \quad t^* = rt, \quad \zeta^* = \left(\frac{r}{D}\right)^{1/2} \zeta$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t^*} \frac{\partial t^*}{\partial t} = Kr \frac{\partial C}{\partial t^*} \quad (32)$$

$$\frac{\partial c}{\partial \zeta} = \frac{\partial c}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial \zeta^*} \frac{\partial \zeta^*}{\partial \zeta} = K \left(\frac{r}{D}\right)^{1/2} \frac{\partial C}{\partial \zeta^*} \quad (33)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial \zeta^2} = \frac{\partial \zeta^*}{\partial \zeta} \frac{\partial}{\partial \zeta^*} \left[K \left(\frac{r}{D}\right)^{1/2} \frac{\partial C}{\partial \zeta^*} \right] = K \left(\frac{r}{D}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{D}\right)^{1/2} \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} = \frac{Kr}{D} \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} \quad (34)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\partial s}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial t^*} \frac{\partial t^*}{\partial t} = S_{max} r \frac{\partial S}{\partial t^*} \quad (35)$$

Sustituyendo (32), (34) y (35) en las ecuaciones (15) y (19)

$$Kr \frac{\partial C}{\partial t^*} = \frac{Kr}{D} D \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - k_0 KC - k_s \theta K \left(1 - \frac{S_{max} S}{S_{max}}\right) C + \frac{k_2 S_{max}}{B} S + rK \left(1 - \frac{KC}{K}\right) C \quad (36)$$

$$S_{max} r \frac{\partial S}{\partial t^*} = B k_s \theta K \left(1 - \frac{S_{max} S}{S_{max}}\right) C - k_2 S_{max} S \quad (37)$$

Simplificando

$$Kr \frac{\partial C}{\partial t^*} = Kr \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - k_0 KC - k_s \theta K (1 - S) C + \frac{k_2 S_{max}}{rBK} S + rK(1 - C) C \quad (38)$$

$$S_{max} r \frac{\partial S}{\partial t^*} = B k_s \theta K (1 - S) C - k_2 S_{max} S \quad (39)$$

Multiplicando por $\frac{1}{Kr}$ la ecuación de (38) y por $\frac{1}{S_{max}r}$ la ecuación (39).

$$\frac{\partial C}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - \frac{k_0}{r}C - \frac{k_s\theta}{r}(1-S)C + \frac{k_2 S_{max}}{rBK}S + (1-C)C \quad (40)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t^*} = \frac{k_s\theta BK}{rS_{max}}(1-S)C - \frac{k_2}{r}S \quad (41)$$

Agrupando términos

$$\delta = \frac{k_s\theta}{r}, \quad b = \frac{BK}{S_{max}}, \quad \beta = \frac{k_0}{r}, \quad \alpha = \frac{k_2}{r}$$

$$t^* = t, \quad \zeta^* = \zeta$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \beta C - \delta(1-S)C + \frac{\alpha}{b}S + (1-C)C \quad (42)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \delta b(1-S)C - \alpha S \quad (43)$$

A continuación se muestra en tabla 3 un cuadro comparativo de los sistemas de ecuaciones diferenciales (30), (31), (42) y (43) que son obtenidas mediante sus respectivas formas de adimensionalización:

Tabla 3. Cuadro comparativo de los sistemas de ecuaciones diferenciales A y B.

Adimensionalización de A	Adimensionalización de B
$C = \frac{c}{K}, \quad S = \frac{s}{BK}, \quad t^* = \frac{V^2}{D}t, \quad \zeta^* = \frac{V}{D}\zeta$	$C = \frac{c}{K}, \quad S = \frac{s}{S_{max}}, \quad t^* = rt, \quad \zeta^* = \left(\frac{r}{D}\right)^{1/2} \zeta$
Términos agrupados de A	Términos agrupados de B
$\delta = \frac{k_s \theta D}{V^2}, \quad b = \frac{BK}{S_{max}}, \quad \beta = \frac{k_0 D}{V^2}, \quad \alpha = \frac{k_2 D}{V^2}, \quad R = \frac{rD}{V^2}$	$\delta = \frac{k_s \theta}{r}, \quad b = \frac{BK}{S_{max}}, \quad \beta = \frac{k_0}{r}, \quad \alpha = \frac{k_2}{r}$
Sistema de ecuaciones diferenciales parciales A	Sistema de ecuaciones diferenciales parciales B
30) $\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \beta C - \delta(1 - bS)C + \alpha S + R(1 - C)C$	42) $\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \beta C - \delta(1 - S)C + \frac{\alpha}{b}S + (1 - C)C$
31) $\frac{\partial S}{\partial t} = \delta(1 - bS)C - \alpha S$	43) $\frac{\partial S}{\partial t} = \delta b(1 - S)C - \alpha S$

Existen dos diferencias principales entre la actual propuesta y la realizada por Dumbar. La primera radica en la escala de tiempo y posición mientras que la segunda se refiere a la forma en que la concentración de bacterias en el sólido se vuelve adimensional.

La diferencia principal es la acotación de la concentración de bacterias en el sólido tomando en cuenta que existe un límite físico llamado concentración máxima de bacterias la cual es capaz de adsorberse en el sólido. Ésta tiene la ventaja de que S_{max} es un valor conocido que fue medido experimentalmente por lo que se espera que c y s tengan variaciones entre 0 y 1.

Las ecuaciones (30) y (31) difieren de las ecuaciones (42) y (43) ya que el primer sistema se encuentra la constante R antes mencionada, mientras que en el B ya no existe éste término. También cambiaron algunos términos de las ecuaciones y están marcados en negritas.

El siguiente sistema de ecuaciones describe las fases de adsorción de las bacterias mediante las ecuaciones (44), (45) y (46).

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial \zeta^2} - k_0 \left(1 - \frac{a}{A_{max}}\right) c - k_s \theta \left(1 - \frac{s}{S_{max}}\right) c + \frac{k_2}{B} s + r \left(1 - \frac{c}{K}\right) c \quad (44)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = k_s \theta B \left(1 - \frac{s}{S_{max}}\right) c - k_2 s \quad (45)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = k_0 F \left(1 - \frac{a}{A_{max}}\right) c \quad (46)$$

Gracias a los experimentos realizados por Schäfer et al.²⁵ se encontró que las bacterias *Rhodococcus sp* y *P. putida mt2* tienen una afinidad de cinco a diez veces superior a la interfase agua-aire que a la superficie sólida.

Por tanto, \mathbf{A}_{max} es considerablemente mayor que \mathbf{S}_{max} , con lo cual se concluye que el fenómeno de adsorción es de menor importancia en la interfase agua-aire. Este fenómeno se refiere a la manera en que las bacterias se adsorben en la superficie e interfase respectivamente, es decir, que conforme pasa el tiempo la disponibilidad de espacios en ambas disminuye, lo cual provoca que la adsorción de las mismas sea más difícil.

Existen dos diferencias entre lo que ocurre con las bacterias tanto en la superficie como en la interfase, la primera nos habla sobre la adherencia que poseen las bacterias en el sólido puesto que ésta es mayor que en el agua; la segunda diferencia es consecuencia del fenómeno de adherencia, ya que la movilidad de las bacterias en la superficie sólida es menor que en la interfase agua-aire, por lo cual en esta última se forman agregados bacterianos.

El coeficiente **F** que aparece en la ecuación 46 depende de otras variables como la porosidad ϕ y el grado de saturación θ de la siguiente forma:

$$F = \frac{\phi\theta}{A_a} \quad (47)$$

Éste es equivalente al coeficiente **B** el cual se describió anteriormente (ver página 37), donde A_a es el área específica de la interfase agua-aire. La adimensionalización de las ecuaciones (44), (45) y (46) quedaría de la siguiente forma:

$$C = \frac{c}{K}, \quad S = \frac{s}{S_{max}}, \quad A = \frac{a}{A_{max}}, \quad t = rt, \quad \zeta = \left(\frac{r}{D}\right)^{1/2} \zeta$$

Donde **c** y **s** son las mismas variables que se utilizaron de la ecuación (32) a la (35). Por otra parte la adimensionalización de **a** es como se muestra a continuación:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial a}{\partial A} \frac{\partial A}{\partial t^*} \frac{\partial t^*}{\partial t} = A_{max} r \frac{\partial A}{\partial t^*} \quad (48)$$

Sustituyendo las ecuaciones (32), (34), (35) y (48) en las ecuaciones (44), (45) y (46) se obtiene:

$$Kr \frac{\partial C}{\partial t^*} = \frac{Kr}{D} D \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - k_0 \left(1 - \frac{A_{max} A}{A_{max}}\right) KC - k_s \theta K \left(1 - \frac{S_{max} S}{S_{max}}\right) C + \frac{k_2 S_{max}}{B} + rK \left(1 - \frac{KC}{K}\right) C \quad (49)$$

$$S_{max} r \frac{\partial S}{\partial t^*} = B k_s \theta K \left(1 - \frac{S_{max} S}{S_{max}}\right) C - k_2 S_{max} S \quad (50)$$

$$A_{max} r \frac{\partial A}{\partial t} = k_0 F K \left(1 - \frac{A_{max} A}{A_{max}}\right) C \quad (51)$$

Simplificando

$$Kr \frac{\partial C}{\partial t^*} = Kr \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - k_0 K(1-A)C - k_s \theta K(1-S)C + \frac{k_2 S_{max}}{rBK} S + rK(1-C)C \quad (52)$$

$$S_{max} r \frac{\partial S}{\partial t^*} = Bk_s \theta K(1-S)C - k_2 S_{max} S \quad (53)$$

$$A_{max} r \frac{\partial A}{\partial t} = k_0 FK(1-A)C \quad (54)$$

Se multiplica la ecuación (52) por $\frac{1}{Kr}$, la ecuación (53) por $\frac{1}{S_{max}r}$ y la ecuación (54) por $\frac{1}{A_{max}r}$.

$$\frac{\partial C}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^{*2}} - \frac{k_0}{r}(1-A)C - \frac{k_s \theta}{r}(1-S)C + \frac{k_2 S_{max}}{rBK} S + (1-C)C \quad (55)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t^*} = \frac{k_s \theta BK}{rS_{max}}(1-S)C - \frac{k_2}{r} S \quad (56)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{k_0 FK}{rA_{max}}(1-A)C \quad (57)$$

Se agrupan los términos en:

$$\delta = \frac{k_s \theta}{r}, \quad b = \frac{BK}{S_{max}}, \quad f = \frac{FK}{A_{max}}, \quad \beta = \frac{k_0}{r}, \quad \alpha = \frac{k_2}{r}$$

$$t^* = t, \quad \zeta^* = \zeta$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \beta(1-A)C - \delta(1-S)C + \frac{\alpha}{b} S + (1-C)C \quad (58)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \delta b(1-S)C - \alpha S \quad (59)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \beta f(1 - A)C \quad (60)$$

Al comparar los tres sistemas de ecuaciones que representan el transporte de bacterias en un medio poroso, esto debido a que los tres son adimensionalmente correctos pero permiten apreciar la variación de la concentración de bacterias en **c**, **s** y **a** con respecto al tiempo y la posición. Posteriormente se explicará el análisis de estabilidad que se utilizó para seleccionar una ecuación. A continuación se muestra un cuadro comparativo de los sistemas de ecuaciones diferenciales A y C obtenidos mediante sus respectivas formas de adimensionalización:

Tabla 4. Cuadro comparativo de los sistemas de ecuaciones diferenciales A y C.

Adimensionalización de A	Adimensionalización de C
$C = \frac{c}{K}, \quad S = \frac{s}{BK}, \quad t^* = \frac{V^2}{D}t, \quad \zeta^* = \frac{V}{D}\zeta$	$C = \frac{c}{K}, \quad S = \frac{s}{S_{max}}, \quad A = \frac{a}{A_{max}}, \quad t = rt, \quad \zeta = \left(\frac{r}{D}\right)^{1/2} \zeta$
Términos agrupados de A	Términos agrupados de C
$\delta = \frac{k_s \theta D}{V^2}, \quad b = \frac{BK}{S_{max}}, \quad \beta = \frac{k_0 D}{V^2}, \quad \alpha = \frac{k_2 D}{V^2}, \quad R = \frac{rD}{V^2}$	$\delta = \frac{k_s \theta}{r}, \quad b = \frac{BK}{S_{max}}, \quad f = \frac{FK}{A_{max}}, \quad \beta = \frac{k_0}{r}, \quad \alpha = \frac{k_2}{r}$
Sistema de ecuaciones diferenciales parciales A	Sistema de ecuaciones diferenciales parciales C
30) $\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \beta C - \delta(1 - bS)C + \alpha S + R(1 - C)C$	58) $\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \beta(1 - A)C - \delta(1 - S)C + \frac{\alpha}{b}S + (1 - C)C$
31) $\frac{\partial S}{\partial t} = \delta(1 - bS)C - \alpha S$	59) $\frac{\partial S}{\partial t} = \delta b(1 - S)C - \alpha S$
	60) $\frac{\partial A}{\partial t} = \beta f(1 - A)C$

La diferencia entre las ecuaciones (30) y (31) de Roland W. Lewis respecto a las ecuaciones (58), (59) y (60) es que en la ecuación (58) no existe la constante R la cual está presente en la ecuación (30). La constante **R**, se refiere a la rapidez de crecimiento de las bacterias, ésta forma parte de la ecuación de crecimiento logístico.

2.6 Soluciones de ondas viajeras.

Con el fin de encontrar las soluciones de ondas viajeras, se presentan las siguientes definiciones:

- $C = C(\xi)$
- $S = S(\xi)$
- $\xi = \zeta + vt$

Donde ξ se refiere a un cambio de variable que toma en cuenta el tiempo y la posición, representados por t y ζ respectivamente, y v es la velocidad de onda. Si las soluciones del tipo $\xi = \zeta + vt$ existen, representan soluciones de ondas viajeras moviéndose a la izquierda en el plano ζ . Si éstas se sustituyen en las ecuaciones (30) y (31) da como resultado un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para el primer sistema adimensional:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial C(\xi)} \frac{\partial C(\xi)}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = v \frac{dC(\xi)}{d\xi} \quad (61)$$

$$\frac{\partial C}{\partial \zeta} = \frac{\partial C}{\partial C(\xi)} \frac{\partial C(\xi)}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \zeta} = \frac{dC(\xi)}{d\xi} \quad (62)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} = \frac{\partial \xi}{\partial \zeta} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{dC(\xi)}{d\xi} \right] = \frac{d^2 C(\xi)}{d\xi^2} \quad (63)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial S}{\partial S(\xi)} \frac{\partial S(\xi)}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = v \frac{dS(\xi)}{d\xi} \quad (64)$$

Se sustituyen las ecuaciones (61), (63) y (64) en el primer sistema adimensional.

$$v \frac{dC}{d\xi} = \frac{d^2C}{d\xi^2} - \beta C - \delta(1 - bS)C + \alpha S + R(1 - C)C \quad (65)$$

$$v \frac{dS}{d\xi} = \delta(1 - bS)C - \alpha S \quad (66)$$

Si consideramos que $u = \frac{dC}{d\xi}$, se pueden escribir las ecuaciones anteriores como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales de primer orden.

A continuación se presentan el siguiente sistema de ecuaciones:

- Sistema de ecuaciones A

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (67)$$

$$v \frac{dS}{d\xi} = \delta(1 - bS)C - \alpha S \quad (68)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C + \delta(1 - bS)C - \alpha S - R(1 - C)C + vU \quad (69)$$

Si se realiza el mismo procedimiento para la pareja de ecuaciones (42) y (43) se obtiene el siguiente sistema:

- Sistema de ecuaciones B

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (70)$$

$$v \frac{dS}{d\xi} = \delta b(1 - S)C - \alpha S \quad (71)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C + \delta(1 - S)C - \frac{\alpha}{b}S - (1 - C)C + vU \quad (72)$$

Al realizar el mismo procedimiento para las ecuaciones (58), (59) y (60) se obtienen las siguientes ecuaciones:

- Sistema de ecuaciones C

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (73)$$

$$v \frac{dS}{d\xi} = \delta b(1 - S)C - \alpha S \quad (74)$$

$$v \frac{\partial A}{\partial \xi} = \beta f(1 - A)C \quad (75)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta(1 - A)C + \delta(1 - S)C - \frac{\alpha}{b}S - (1 - C)C + vU \quad (76)$$

3. Resultados y discusión

3.1 Análisis cualitativo de los puntos de equilibrio

El sistema de ecuaciones A (ver página 51) consiste en ecuaciones diferenciales de primer orden autónomas, donde la variable independiente ξ no aparece explícitamente. Por lo tanto las soluciones de las ecuaciones $\mathbf{f}(\xi) = \mathbf{0}$, $\mathbf{g}(\xi) = \mathbf{0}$ y $\mathbf{h}(\xi) = \mathbf{0}$ juegan un papel importante y son llamados puntos de equilibrio o puntos críticos, es decir, son las soluciones del sistema de ecuaciones homogéneas que proporcionan los puntos de equilibrio en el plano de fase. De estos puntos de equilibrio se derivan las siguientes ecuaciones diferenciales autónomas:

$$\frac{dC}{d\xi} = U = f(C, S, U) \quad (67)$$

$$\frac{dS}{d\xi} = \frac{\delta}{v}(1 - bS)C - \frac{\alpha}{v}S = g(C, S, U) \quad (68)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C + \delta(1 - bS)C - \alpha S - R(1 - C)C + vU = h(C, S, U) \quad (69)$$

La técnica conocida como linealización permite aproximar un sistema no lineal a un punto de equilibrio a través de un sistema lineal. Si se estudia la aproximación lineal, puede predecirse el comportamiento de las soluciones de dicho sistema, por lo menos cerca del punto de equilibrio.

En el sistema de ecuaciones A se tienen dos puntos de equilibrio, el primer punto crítico $(\mathbf{C}_0, \mathbf{S}_0, \mathbf{U}_0)$ es el $(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})$, en este punto de equilibrio no hay bacterias en la fase líquida ni en la sólida, por lo tanto la variación de las bacterias (\mathbf{U}) también es cero, este punto de equilibrio es trivial ya que no se presentan bacterias en ninguna de las fases.

El segundo punto de equilibrio es $(X, Y, 0)$ donde:

$$X = 1 - \frac{\beta}{R}, \quad Y = \frac{\delta X}{\alpha + \delta b X}$$

En este punto de equilibrio $U = 0$, lo cual significa que no hay variación de C respecto a ξ , es decir, la concentración de bacterias permanece constante. Sin embargo, aquí sí hay bacterias, tanto en la fase líquida como en la sólida. El punto de equilibrio $(X, Y, 0)$ es de interés particular pues su existencia indica la posibilidad de que las bacterias coexistan en el equilibrio en la fase líquida y sólida. El segundo punto de equilibrio está conformado por constantes, que a su vez son agrupaciones de otras constantes y que están definidas de la siguiente forma:

$$X = 1 - \frac{\beta}{R} = 1 - \frac{\frac{k_0 D}{V^2}}{\frac{r D}{V^2}} = 1 - \frac{k_0}{r}$$

$$Y = \frac{\delta X}{\alpha + \delta b X} = \frac{\frac{k_s \theta D}{V^2} X}{\frac{k_2 D}{V^2} + \frac{k_s \theta D B K}{V^2 S_{max}} X} = \frac{k_s \theta X}{k_2 + \frac{k_s \theta B K}{S_{max}} X}$$

En el sistema de ecuaciones B (ver página 51) también se tienen dos puntos de equilibrio. El primero coincide con el sistema de ecuaciones A $(0, 0, 0)$ y se le da la misma interpretación física que al anterior. Como se realizó con el sistema de ecuaciones A se determina el segundo punto de equilibrio $(X, Y, 0)$, en este sistema ni X ni Y dependen de R (rapidez de crecimiento de bacterias), además se diferencia del sistema de ecuaciones A por la presencia de la constante b en el punto de equilibrio Y en el numerador.

Se muestra el punto de equilibrio $(X, Y, 0)$ para el sistema B de las ecuaciones (70 a 72):

$$X = 1 - \beta = 1 - \frac{k_0}{r}$$

Si se desarrollan los valores de las constantes se obtiene:

$$Y = \frac{\delta b X}{\alpha + \delta b X} = \frac{\frac{k_s \theta B K}{r S_{max}} X}{\frac{k_2 \theta}{r} + \frac{k_s \theta B K}{r S_{max}} X} = \frac{\frac{k_s \theta B K}{S_{max}} X}{k_2 \theta + \frac{k_s \theta B K}{S_{max}} X}$$

Este punto de equilibrio es diferente al anterior, es un caso de interés porque se puede apreciar que la diferencia existente entre los dos sistemas de ecuaciones, es la forma en que la variable adimensional S está definida. Para este sistema S está acotada por la máxima concentración de bacterias en el sólido (S_{max}), por lo tanto existe una diferencia en el segundo punto de equilibrio precisamente en el valor de Y puesto que corresponde al valor de S .

De igual forma en el sistema de ecuaciones C existen dos puntos de equilibrio, el primero (C_0, S_0, A_0, U_0) es el $(0, 0, 0, 0)$, en otras palabras no hay bacterias en ninguna de las tres fases, por lo tanto la variación de las bacterias U también es cero.

El segundo punto de equilibrio en este sistema es $(X, Y, Z, 0)$ donde:

$$X = 1, \quad Y = \frac{\delta b}{\alpha + \delta b}, \quad Z = 1$$

Este punto de equilibrio es diferente a los dos anteriores; es evidente que no existe un punto de equilibrio con una coordenada **Z**, pues se tiene una pareja de ecuaciones diferenciales en el sistema A y B, pero una diferencia importante y que es comparativa es en el punto **X**, pues en el sistema C no existe dependencia respecto a β , la cual es una constante que toma en cuenta la adsorción de bacterias en la interfase agua-aire; los sistemas de ecuaciones A y B coinciden porque la constante β está presente en el segundo punto de equilibrio en **X**, a su vez β considera la adsorción de bacterias en la interfase agua-aire debido a que ambos sistemas muestran interés por describir la variación que existe en la concentración de bacterias en la fase líquida. La razón por la que β ya no aparece en el segundo punto de equilibrio del sistema de ecuaciones C, se debe a que existe la variable **A**, la cual toma en cuenta aquellas bacterias que se ubican en la interfase.

3.2 Linealización de los sistemas de ecuaciones

Para entender las soluciones que inician cerca de los dos puntos de equilibrio se linealiza el sistema de ecuaciones A. En consecuencia el sistema linealizado en el punto de equilibrio $(\mathbf{C}_0, \mathbf{S}_0, \mathbf{U}_0)$ es:

$$\begin{pmatrix} \frac{dC}{d\xi} \\ \frac{dS}{d\xi} \\ \frac{dU}{d\xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial C}(C_0, S_0, U_0) & \frac{\partial f}{\partial S}(C_0, S_0, U_0) & \frac{\partial f}{\partial U}(C_0, S_0, U_0) \\ \frac{\partial g}{\partial C}(C_0, S_0, U_0) & \frac{\partial g}{\partial S}(C_0, S_0, U_0) & \frac{\partial g}{\partial U}(C_0, S_0, U_0) \\ \frac{\partial h}{\partial C}(C_0, S_0, U_0) & \frac{\partial h}{\partial S}(C_0, S_0, U_0) & \frac{\partial h}{\partial U}(C_0, S_0, U_0) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C \\ S \\ U \end{pmatrix}$$

La matriz de 3x3 de las derivadas parciales en esta expresión se le conoce como matriz jacobiana del sistema en $(\mathbf{C}_0, \mathbf{S}_0, \mathbf{U}_0)$. Este sistema de linearización se usa para estudiar el comportamiento de soluciones del sistema no lineal cerca del punto de equilibrio $(\mathbf{C}_0, \mathbf{S}_0, \mathbf{U}_0)$. Para crear el sistema linealizado se requieren conocer las derivadas parciales de los componentes del campo vectorial en el punto de equilibrio.

La derivada de una función no lineal únicamente proporciona un acercamiento lineal en el punto crítico, es decir, las soluciones linealizadas están próximas al sistema no lineal cerca del punto de equilibrio. Evaluando la matriz jacobiana para el sistema de ecuaciones A se obtiene:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta}{v}(1 - bS) & -\frac{\delta bC}{v} - \frac{\alpha}{v} & 0 \\ \beta + \delta(1 - bS) - R(1 - 2C) & -\delta bC - \alpha & v \end{bmatrix}$$

De acuerdo al primer punto de equilibrio $(0, 0, 0)$ se consigue:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta}{\nu} & -\frac{\alpha}{\nu} & 0 \\ \beta + \delta - R & -\alpha & \nu \end{bmatrix}$$

A continuación se sustituye el segundo punto de equilibrio $(X, Y, 0)$ en la matriz jacobiana:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta}{\nu}(1 - bY) & -\frac{\delta bX}{\nu} - \frac{\alpha}{\nu} & 0 \\ \beta + \delta(1 - bY) - R(1 - 2X) & -\delta bX - \alpha & \nu \end{bmatrix}$$

El sistema de ecuaciones B se define mediante las funciones $f(\xi)$, $g(\xi)$ y $h(\xi)$ por lo que queda de la siguiente forma:

$$\frac{dC}{d\xi} = U = f(C, S, U) \quad (70)$$

$$\frac{dS}{d\xi} = \frac{\delta b}{\nu}(1 - S)C - \frac{\alpha}{\nu}S = g(C, S, U) \quad (71)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C + \delta(1 - S)C - \frac{\alpha}{b}S - (1 - C)C + \nu U = h(C, S, U) \quad (72)$$

La linealización para dicho sistema se muestra a continuación:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta b}{\nu}(1 - S) & -\frac{\delta bC}{\nu} - \frac{\alpha}{\nu} & 0 \\ \beta + \delta(1 - S) - (1 - 2C) & -\delta C - \frac{\alpha}{b} & \nu \end{bmatrix}$$

Al evaluar los dos puntos de equilibrio en la matriz jacobiana se observa lo siguiente:

Punto de equilibrio **(0, 0, 0)**

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta b}{v} & -\frac{\alpha}{v} & 0 \\ \beta + \delta - 1 & -\frac{\alpha}{b} & v \end{bmatrix}$$

Punto de equilibrio **(X, Y, 0)**

$$X = 1 - \beta, \quad Y = \frac{\delta b X}{\alpha + \delta b X}$$

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta b}{v}(1 - Y) & -\frac{\delta b X}{v} - \frac{\alpha}{v} & 0 \\ \beta + \delta(1 - Y) - (1 - 2X) & -\delta X - \frac{\alpha}{b} & v \end{bmatrix}$$

La linealización también se realiza de la siguiente forma para el sistema de ecuaciones C:

$$\frac{\partial C}{\partial \xi} = U = f(C, S, A, U) \quad (73)$$

$$\frac{\partial S}{\partial \xi} = \frac{\delta b}{v}(1 - S)C - \frac{\alpha}{v}S = g(C, S, A, U) \quad (74)$$

$$\frac{\partial A}{\partial \xi} = \frac{\beta f}{v}(1 - A)C = h(C, S, A, U) \quad (75)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} = \beta(1 - A)C + \delta(1 - S)C - \frac{\alpha}{b}S - (1 - C)C + vU = i(C, S, A, U) \quad (76)$$

El sistema C consta de cuatro ecuaciones diferenciales parciales cuya matriz jacobiana es:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta b}{v}(1-S) & -\frac{\delta b}{v}C - \frac{\alpha}{v} & 0 & 0 \\ \frac{\beta f}{v}(1-A) & 0 & -\frac{\beta f}{v}C & 0 \\ \beta(1-A) + \delta(1-S) - (1-2C) & -\delta bC - \frac{\alpha}{b} & -\beta C & v \end{bmatrix}$$

Al evaluar el punto de equilibrio $(0, 0, 0, 0)$ en la matriz jacobiana para el sistema de ecuaciones C, se genera lo siguiente:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta b}{v} & -\frac{\alpha}{v} & 0 & 0 \\ \frac{\beta f}{v} & 0 & 0 & 0 \\ \beta + \delta - 1 & -\frac{\alpha}{b} & 0 & v \end{bmatrix}$$

Lo mismo se realiza en el punto de equilibrio $(X, Y, Z, 0)$, es decir, el punto $(1, \frac{\delta b}{\alpha + \delta b}, 1, 0)$.

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta b}{v}(1-Y) & -\frac{\delta b}{v} - \frac{\alpha}{v} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\beta f}{v} & 0 \\ \delta(1-Y) + 1 & -\delta b - \frac{\alpha}{b} & -\beta & v \end{bmatrix}$$

3.3 Análisis de estabilidad de los sistemas linealizados

La estabilidad de un sistema en los puntos de equilibrio se determina al conocer los valores propios del mismo. Con la finalidad de calcular los puntos de equilibrio y los valores propios, se utilizaron los siguientes parámetros para los tres sistemas de ecuaciones diferenciales.

Tabla 5. Parámetros utilizados por Schäfer para sus cálculos de bacteria *Rhodococcus* sp.²⁵

VARIABLE O PARÁMETRO	SÍMBOLO	VALOR
Constante de desorción de bacterias de la superficie del sólido	k_2	0.0002 min^{-1}
Constante de deposición de bacterias en la interfase agua-aire	k_a	1.03 min^{-1}
Constante de deposición de bacterias en la interfase agua-aire	k_{ca}	1.273 min^{-1}
Constante de adsorción de bacterias en la superficie del sólido	k_s	0.127 min^{-1}
Capacidad de soporte de la población	K	$4 \times 10^{10} \text{ células/cm}^3$
Concentración máxima de bacterias en la superficie del sólido	S_{max}	$4.5 \times 10^7 \text{ células/cm}^2$
Concentración máxima de bacterias en la interfase agua-aire	A_{max}	$1.4 \times 10^7 \text{ células/cm}$
Área de superficie específica del sólido	A_s	$60.6 \text{ cm}^2/\text{g}$
Coefficiente de difusión aparente	D	$0.031 \text{ cm}^2/\text{min}$
Velocidad de flujo	V	1.64 cm/min
Porosidad	ϕ	0.39
Porcentaje de poro volumen llenado con agua	θ	0.86
Densidad del líquido	ρ	1.61 g/cm^3

Estos valores corresponden a una situación real de la bacteria *Rhodococcus* sp utilizada en el trabajo experimental de Anke Schäfer. Estas constantes se refieren a las condiciones de operación de la columna (V , D y θ), así como a las características de la arena de cuarzo (ϕ y A_s) y a la densidad del fluido (ρ); con estos valores se obtuvieron las constantes α , β , δ , b y R , las cuales agrupan términos y son definidas de diferente forma en los tres sistemas de ecuaciones.

En este apartado se presentan las tablas para cada uno de los sistemas con sus respectivos valores:

Tabla 6. Para el sistema de ecuaciones A.

r	α	β	δ	b	R
86.76	2.305E-06	1.662E-03	1.259E-03	3.3613	1
173.52	2.305E-06	1.662E-03	1.259E-03	3.3613	2
260.28	2.305E-06	1.662E-03	1.259E-03	3.3613	3

Se asignaron tres valores a r, con el objetivo de conocer el comportamiento del sistema en los puntos cuando el valor de R es 1, 2 y 3.

Tabla 7. Para el sistema ecuaciones B.

r	α	β	δ	b
86.76	2.305E-06	1.662E-03	1.259E-03	3.3613
173.52	1.153E-06	8.310E-04	6.294E-04	3.3613
260.28	7.683E-07	5.540E-04	4.196E-04	3.3613

Tabla 8. Para el sistema de ecuaciones C.

r	α	β	δ	b	f
86.76	2.305E-06	2.054E-03	1.259E-03	3.3613	9411.7
173.52	1.153E-06	1.027E-03	6.294E-04	3.3613	9411.7
260.28	7.684E-07	6.847E-04	4.196E-04	3.3613	9411.7

En el sistema A utilizado en el artículo de Lewis¹³ las constantes son las mismas para cualquier valor de r, sin embargo, en los sistemas B y C los valores de las constantes α , β y δ cambian en función de r. Una de las ecuaciones del primer sistema contiene la constante R en la ecuación de crecimiento logístico $R(1 - C)C$. Cuando $R = 1$ se obtiene el mismo sistema de ecuaciones diferenciales del sistema B eliminando así las diferencias entre ambos.

Las siguientes tablas muestran los valores propios de los puntos de equilibrio y los valores propios de los tres sistemas de ecuaciones:

Tabla 9. Valores propios del sistema de ecuaciones A para $v = 1$

Punto de equilibrio	λ_1	λ_2	λ_3
(0, 0, 0)	5.0146E-4 +0.99853i	5.0146E-4 -0.99853i	-2.3081E-03
(0.9983, 0.2973, 0)	-0.99866	-4.2266	0.99966

Tabla 10. Valores propios del sistema de ecuaciones B para $v = 1$

Punto de equilibrio	λ_1	λ_2	λ_3
(0, 0, 0)	5.0146E-4 +0.99854i	5.0146E-4 -0.99854i	-2.3081E-03
(0.9983, 0.9995, 0)	-0.99867	-4.2267	0.99967

Tabla 11. Valores propios del sistema de ecuaciones C para $v = 1$

Punto de equilibrio	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
(0, 0, 0, 0)	0.5 +0.86539i	0.5 - 0.86539i	-7.69E-07	0
(1, 0.9995, 1, 0)	1.618	-0.61803	-1.411E-03	-6.4444

A través de éstas se corrobora que el segundo punto de equilibrio en los tres sistemas es diferente en cada caso, es decir, el punto de equilibrio del sistema C se diferencia de los otros dos por el valor de X , mientras que el sistema de ecuaciones A y B coinciden en este mismo valor pero se distinguen por el valor de Y , el cual corresponde a la concentración de bacterias en la interfase agua-aire.

La estabilidad es la misma para los tres sistemas de ecuaciones, pues si bien es cierto existen diferencias en el valor numérico de los valores propios, los tres sistemas tienen el mismo tipo de valores propios en los puntos de equilibrio **(0, 0, 0)** y **(0, 0, 0, 0)** respectivamente. Así mismo los sistemas coinciden en que λ_3 es un valor propio real negativo para el primer punto de equilibrio, mientras que λ_1 y λ_2 son un par de complejos conjugados y sus partes reales son positivas, debido a las características de los valores propios cuando se incrementa ξ , habrá un línea recta de soluciones que tienden hacia el origen, así como un plano de soluciones que se alejan de él, lo cual genera un punto silla inestable.

En los sistemas A y B, el segundo punto de equilibrio $(X, Y, 0)$ tiene tres valores reales, dos negativos que se encuentran en λ_1 y λ_2 y un positivo que corresponde a λ_3 , de estos valores se deriva un punto silla. Un punto silla refleja que cuando ξ crece, la línea recta de soluciones se aleja en dirección \mathbf{U} y el plano de soluciones (C, S) tiende hacia el origen, lo anterior es un punto estable en dicho plano y se vuelve inestable en dirección \mathbf{U} , por lo tanto los sistemas son semiestables. La estabilidad de los sistemas no depende de la forma en que se adimensionalizaron pues, a pesar de que son diferentes, conservan la misma estabilidad, por lo tanto hay consistencia en lo que se refiere a la estabilidad de los mismos y ésta no es un criterio que sirva para elegir alguno en particular.

3.4 Funciones de Hamilton en los sistemas linealizados

Como se mencionó anteriormente, la onda viajera se utilizó para transformar los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, definiendo $\xi = \zeta + vt$, donde v es la velocidad de onda que en sistemas biológicos se considera como una constante positiva, aunque también el sistema puede analizarse como un caso particular cuando $v = 0$. Al realizar esta suposición el sistema de ecuaciones A se simplifica de la siguiente forma:

$$v \frac{dS}{d\xi} = \delta(1 - bS)C - \alpha S \quad (63)$$

Para $v = 0$

$$\delta(1 - bS)C - \alpha S = 0$$

Esto modifica a la ecuación (64) y el sistema cambia a un par de ecuaciones diferenciales parciales acopladas con sólo dos variables dependientes, **C** y **U**.

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (77)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C - R(1 - C)C \quad (78)$$

Lo mismo se realiza para el sistema de ecuaciones B y C.

Sistema de ecuaciones B

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (79)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C - (1 - C)C \quad (80)$$

Sistema de ecuaciones C

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (81)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = -(1 - C)C \quad (82)$$

Mediante la suposición de que $\mathbf{v} = \mathbf{0}$, los sistemas B y C se diferencian del sistema de A por la presencia de la constante **R**. Para el sistema A los puntos de equilibrio son $(\mathbf{0}, \mathbf{0})$ y $(1 - \frac{\beta}{R}, \mathbf{0})$, el par de ecuaciones obtenidas forman un sistema conservativo y por tanto se utiliza la función hamiltoniana para generar el plano de fase.

Análisis de estabilidad del sistema hamiltoniano A.

$$\frac{dC}{d\xi} = U = f(C, U) \quad (77)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C - R(1 - C)C = g(C, U) \quad (78)$$

A continuación se aprecia la linealización del sistema hamiltoniano A:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial C}{\partial \xi} \\ \frac{\partial U}{\partial \xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial C}(C_0, U_0) & \frac{\partial f}{\partial U}(C_0, U_0) \\ \frac{\partial g}{\partial C}(C_0, U_0) & \frac{\partial g}{\partial U}(C_0, U_0) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C \\ U \end{pmatrix}$$

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \beta - R(1 - 2C) & 0 \end{bmatrix}$$

En seguida se observa la evaluación del punto de equilibrio **(0, 0)** en la matriz jacobiana:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \beta - R & 0 \end{bmatrix} = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ \beta - R & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + R - \beta$$

$$\lambda = \mp \sqrt{\beta - R}$$

Dado que $\beta = 1.662 \times 10^{-3}$ y los valores dados a **R** son 1, 2 y 3, cuando **R = 1** la difusión y convección tienen la misma relevancia, mientras que para **R = 2** ó **3** existe un fenómeno dominante llamado difusión (ver páginas 40-42). En el punto crítico **(0, 0)** se tienen valores propios complejos, los cuales corresponden a un centro, es decir, a un sistema periódico.

Cuando se evalúa el punto de equilibrio $(1 - \frac{\beta}{R}, 0)$ se obtiene lo siguiente:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ R - \beta & 0 \end{bmatrix} = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ R - \beta & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - R + \beta$$

$$\lambda = \mp \sqrt{R - \beta}$$

Al sustituir los valores correspondientes de β y R se tienen dos valores propios reales, uno positivo y otro negativo lo cual corresponde a un punto silla, es decir un sistema inestable. Si al sistema de ecuaciones A se le asigna el valor de $R = 1$ se obtiene el sistema de ecuaciones B, es decir, que la estabilidad del sistema siempre es la misma pues estamos considerando los valores de $R > \beta$ en todos los casos. Se puede generar el sistema C utilizando el sistema A al darle los valores de $R = 1$ y $\beta = 0$, en este caso, la estabilidad es la misma en los dos puntos de equilibrio.

Aprovechando de que se tiene un sistema conservativo se genera la función hamiltoniana, de la siguiente forma:

$$\frac{dC}{d\xi} = \frac{\partial H}{\partial U} = U$$

$$\frac{dU}{d\xi} = -\frac{\partial H}{\partial C} = (\beta - R)C + RC^2$$

$$H(C, U) = \frac{1}{2}U^2 + \frac{1}{2}(R - \beta)C^2 - \frac{1}{3}RC^3$$

La función **H(C, U)** es una cantidad conservada para el sistema en consideración, esto significa que las curvas de solución siempre se encuentran a lo largo de las curvas de nivel **H**. El sistema de ecuación B es igual al sistema A si se le asigna a la constante **R** el valor de uno. Así la función hamiltoniana que describe el sistema es la siguiente:

$$H(C, U) = \frac{1}{2}U^2 + \frac{1}{2}(1 - \beta)C^2 - \frac{1}{3}C^3$$

Y para el sistema C la función hamiltoniana es:

$$H(C, U) = \frac{1}{2}U^2 + \frac{1}{2}C^2 - \frac{1}{3}C^3$$

3.5 Plano de fase de los sistemas linealizados

La función hamiltoniana B es equivalente a la función A cuando la rapidez de crecimiento logístico R es igual a uno. Mientras que las funciones A y B son equivalentes a la función C cuando R es igual a uno y β es igual a cero. El campo de direcciones para los sistemas A y B se muestra en la figura (9), como ya se mencionó existen dos puntos de equilibrio, uno en el origen y otro en $\mathbf{C} = 1$ y $\mathbf{U} = 0$. El origen es un centro y el punto de equilibrio $(\mathbf{C}, \mathbf{U}) = (1, 0)$ es un punto silla.

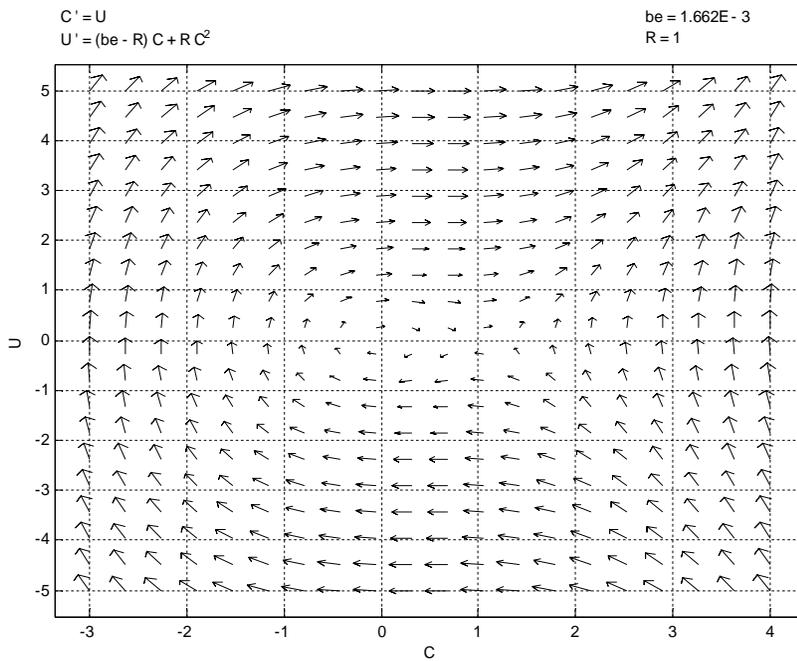


Figura 9. Campo de direcciones del sistema hamiltoniano A para $R = 1$ y $\beta = 1.662 \times 10^{-3}$

Este es uno de los casos en donde el comportamiento a largo plazo de las soluciones del sistema no lineal cerca del punto de equilibrio no está completamente determinado por linealización. Gracias a que la función hamiltoniana muestra líneas en el plano de fase en vez de vectores es posible descubrir el comportamiento del sistema no lineal cerca del punto de equilibrio $(0, 0)$, ya que éste puede ser el de un pozo espiral, el de una fuente espiral o el de un centro.

La función hamiltoniana proporciona el plano de fase mostrado en la figura (10), en la cual se observa un comportamiento muy regular. Las soluciones con condiciones iniciales cerca de $(0, 0)$ parecen formar trayectorias cerradas correspondientes a soluciones periódicas, por otra parte del punto silla en $(1, 0)$ emergen trayectorias que se dirigen al origen y parecen formar un sola.

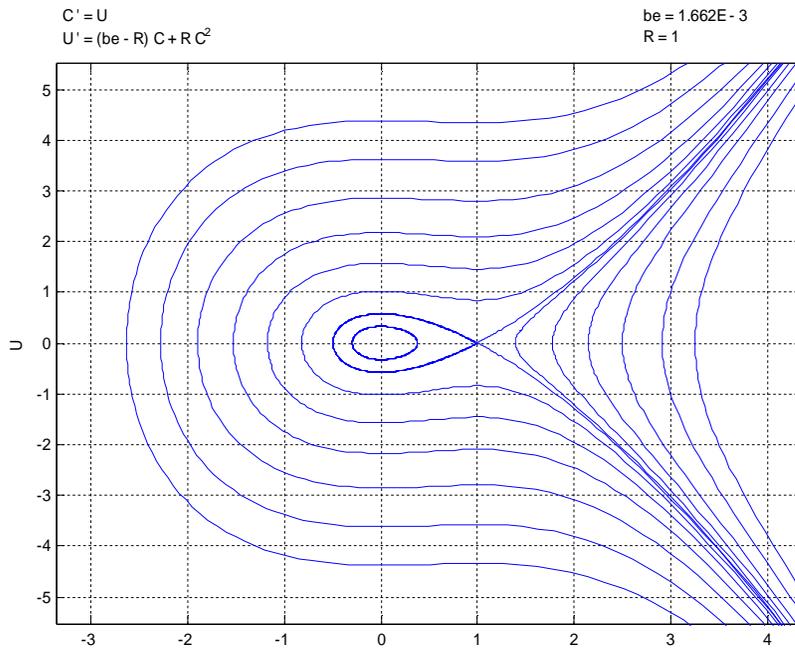


Figura 10. Plano de fase del sistema hamiltoniano A para $R = 1$ y $\beta = 1.662 \times 10^{-3}$

Es muy especial el hecho de que las ramas izquierdas de las trayectorias estables e inestables del punto $(1, 0)$ formen una sola al juntarse, este tipo de curvas de solución dan como resultado una conexión de punto silla.

Este plano de fase es un diagrama que intenta mostrar los puntos de equilibrio cuando $R = 1$, sin embargo, sólo una parte del diagrama de fase tiene sentido físico para valores de C entre cero y uno, puesto que no existe concentración de bacterias negativas y el sistema está acotado por la capacidad de soporte de la población de bacterias $C = c/K$.

El plano de fase de la figura (10) también corresponde al sistema de ecuaciones B, pues el sistema A y B son iguales para $R = 1$, es decir, se genera un único plano de fase por lo que la interpretación es la misma en ambos casos.

El sistema de ecuaciones C tiene un plano de fase prácticamente idéntico al de la figura (10), la única diferencia reside en que β vale cero. Como el valor de β es igual a 1.662×10^{-3} para los sistemas A y B, la diferencia no es muy significativa razón por la que poseen planos de fase semejantes.

El plano de fase para el sistema A, sufre pequeños cambios al variar los valores de la constante de rapidez de crecimiento de la población de bacterias. La figura (11) muestra el plano de fase para $R = 2$ del sistema hamiltoniano A y la figura (12) para $R = 3$. En ambos planos se aprecian los puntos de equilibrio $(0, 0)$ y $(1, 0)$ y con ellos se comprueba que la estabilidad de los sistemas no cambia aunque el valor de R se modifique.

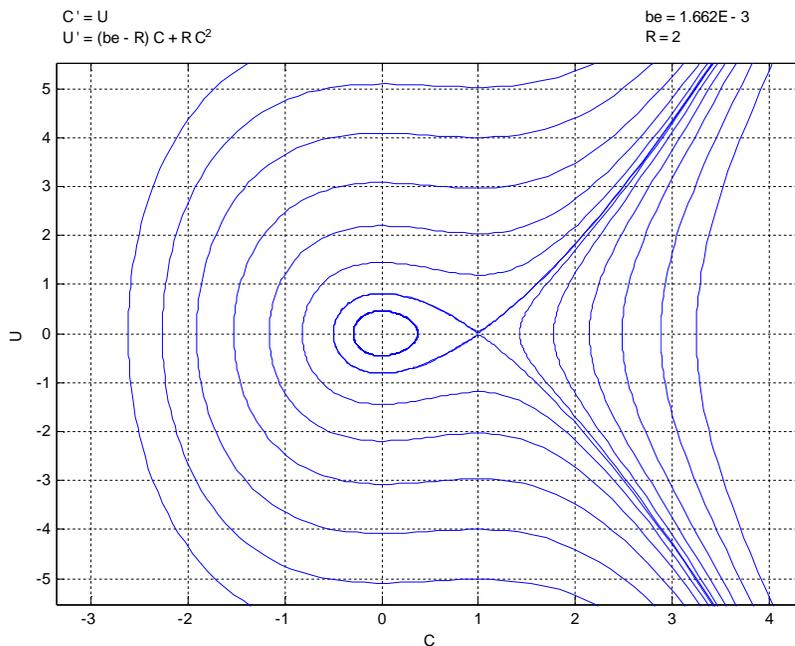


Figura 11. Plano de fase del sistema hamiltoniano A para $R = 2$ y $\beta = 1.662 \times 10^{-3}$

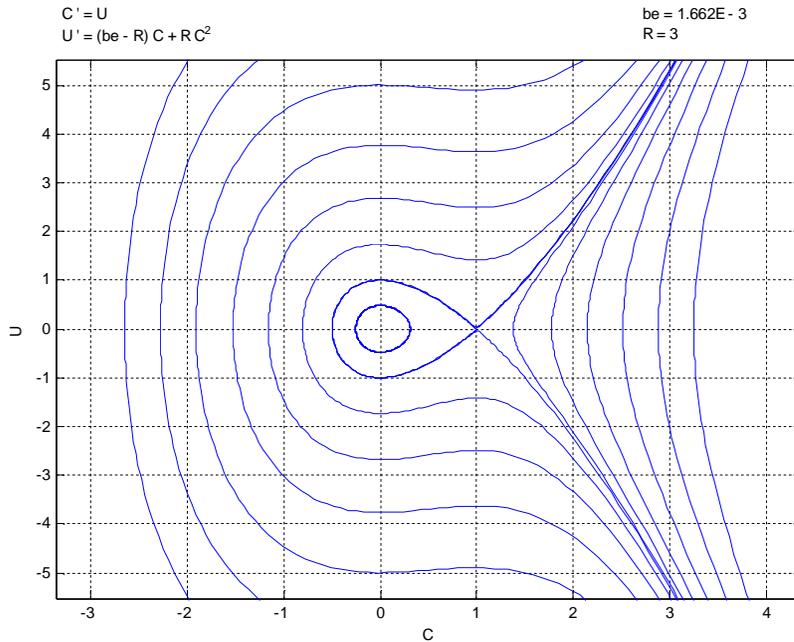


Figura 12. Plano de fase del sistema hamiltoniano A para $R = 3$ y $\beta = 1.662 \times 10^{-3}$

En los planos de fase se puede apreciar en que al incrementarse el valor de R , estos sufren una pequeña deformación, sin embargo, la estabilidad es la misma y los cambios relevantes podrán verse al realizar la solución numérica de las ecuaciones diferenciales.

3.6 Sistemas lineales

El análisis de estabilidad (ver página 61) de los tres sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarios, aportó que la parte no lineal de éstos corresponde al término de crecimiento logístico $f(C) = C(1 - C)$. Por otro lado, es interesante ver cómo diferentes funciones de $f(C)$ cambian la concentración mediante la suposición de $f(C) = C$, por lo que se obtiene un sistema de ecuaciones lineal; por lo tanto para el sistema de ecuaciones A la función $f(C) = RC(1 - C)$ se simplifica a $f(C) = RC$.

Mediante este cambio a la ecuación de crecimiento logístico, el sistema de ecuaciones queda como sigue:

Sistema de ecuaciones A lineal:

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (79)$$

$$v \frac{dS}{d\xi} = \delta(1 - bS)C - \alpha S \quad (80)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C + \delta(1 - bS)C - \alpha S - RC + vU \quad (81)$$

Sistema de ecuaciones B lineal:

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (82)$$

$$v \frac{dS}{d\xi} = \delta b(1 - S)C - \alpha S \quad (83)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta C + \delta(1 - S)C - \frac{\alpha}{b}S - C + vU \quad (84)$$

Sistema de ecuaciones C lineal:

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (85)$$

$$v \frac{dS}{d\xi} = \delta b(1 - S)C - \alpha S \quad (86)$$

$$v \frac{\partial A}{\partial \xi} = \beta f(1 - A)C \quad (87)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = \beta(1 - A)C + \delta(1 - S)C - \frac{\alpha}{b}S - C + vU \quad (88)$$

Estos tres sistemas de ecuaciones lineales coinciden en que solamente tienen un punto de equilibrio, para el sistema A y B el punto de equilibrio es $(0, 0, 0)$, para C el punto crítico es $(0, 0, 0, 0)$. Este punto de equilibrio corresponde al caso en el que no hay bacterias en el sistema como se discutió en el apartado de análisis cualitativo de los puntos de equilibrio.

Para determinar la estabilidad de los tres sistemas de ecuaciones diferenciales se realiza la linealización de los mismos, gracias a ella se encuentra que los tres coinciden con sus respectivos sistemas no lineales porque uno de sus puntos de equilibrio se encuentra en el origen.

Al evaluar la matriz jacobiana para el sistema de ecuaciones lineal A se obtiene:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta}{v}(1 - bS) & -\frac{\delta bC}{v} - \frac{\alpha}{v} & 0 \\ \beta + \delta(1 - bS) - R & -\delta bC - \alpha & v \end{bmatrix}$$

Al calcular el punto de equilibrio $(0, 0, 0)$ se consigue la siguiente matriz:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta}{v} & -\frac{\alpha}{v} & 0 \\ \beta + \delta - R & -\alpha & v \end{bmatrix}$$

La matriz jacobiana del sistema de ecuaciones A lineal utilizada en el punto de equilibrio $(0, 0, 0)$ es una matriz idéntica a la del sistema no lineal que se evaluó en el mismo punto. Como consecuencia de lo anterior los valores propios del sistema A lineal también coinciden con el caso no lineal y por lo tanto la estabilidad es la misma, es decir, se tienen dos valores propios complejos

conjugados con la parte real positiva y un valor propio real negativo; como se mencionó anteriormente, en este punto de equilibrio el sistema es inestable y su plano de fase es un punto silla.

La siguiente matriz se genera al desarrollar la matriz jacobiana del sistema de ecuaciones B lineal en su punto crítico **(0, 0, 0)**:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{\delta b}{v} & -\frac{\alpha}{v} & 0 \\ \beta + \delta - 1 & -\alpha & v \end{bmatrix}$$

Esta matriz jacobiana es igual a la del sistema de ecuaciones B no lineal, por lo cual se tienen los mismos valores propios que en el caso anterior y por ende la misma estabilidad; para el sistema de ecuaciones C lineal ocurre lo mismo que su correspondiente sistema de ecuaciones no lineales; es decir, la única diferencia en cuanto a estabilidad de los sistemas de ecuaciones lineales A, B, y C de sus respectivos sistemas de ecuaciones no lineales, es que en los sistemas lineales existe un sólo punto de equilibrio mientras que en los sistemas no lineales existen dos puntos. Los puntos de equilibrio de los tres sistemas tanto lineales como no lineales coinciden en un punto crítico que se trata del origen. Por lo tanto puede decirse que, en este caso y en específico la no linealidad no afecta la estabilidad del sistema en el origen. El cambio que se observa de un sistema lineal de uno no lineal radica en la cantidad de puntos de equilibrio que tiene cada uno y por tanto el plano de fase del sistema lineal respecto al no lineal es diferente.

3.7 Hamiltonianos de los sistemas de ecuaciones lineales

Al definir $\mathbf{C} = \mathbf{C}(\xi)$, $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\xi)$, $\xi = \zeta + vt$, se generó un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, donde v es la velocidad de onda positiva la cual debe determinarse. Si suponemos que $v = 0$ el sistema de ecuaciones A lineal se simplifica generando un sistema conservativo que consta de un par de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales acopladas.

A continuación se muestra el sistema de ecuaciones A lineal:

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (89)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = (\beta - R)C \quad (90)$$

Mediante la misma suposición se simplifican los sistemas de ecuaciones lineales B y C que enseguida se muestran:

Sistema de ecuaciones B lineal

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (91)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = (\beta - 1)C \quad (92)$$

Sistema de ecuaciones C lineal

$$\frac{dC}{d\xi} = U \quad (93)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = -C \quad (94)$$

Las ecuaciones anteriores muestran un sistema hamiltoniano, para el cual se obtiene una función $\mathbf{H}(\mathbf{C}(\xi), \mathbf{U}(\xi))$; la cual es constante a lo largo de todas las curvas de solución del sistema, por lo tanto, si $\mathbf{C}(\xi)$ y $\mathbf{U}(\xi)$ es una solución del sistema, entonces \mathbf{H} es constante.

Debido a lo anterior la función hamiltoniana del sistema A lineal es:

$$H(C, U) = \frac{1}{2}U^2 + \frac{1}{2}(R - \beta)C^2$$

Esta función, a diferencia de su correspondiente sistema no lineal, carece del término cúbico; una de las características principales de los sistemas lineales es que al realizar la integración de los términos de su función hamiltoniana, éstos son cuadráticos.

Como el sistema lineal A es igual al sistema lineal B para $R = 1$, su función hamiltoniana es:

$$H(C, U) = \frac{1}{2}U^2 + \frac{1}{2}(1 - \beta)C^2$$

Así mismo cuando $R = 1$ y $\beta = 0$, la función hamiltoniana de los tres sistemas es la siguiente:

$$H(C, U) = \frac{1}{2}U^2 + \frac{1}{2}C^2$$

Estas tres funciones hamiltonianas además de representar sistemas conservativos, ayudan a realizar los planos de fase.

3.8 Plano de fase de los sistemas lineales

Los tres pares de ecuaciones diferenciales ordinarias poseen un sólo punto de equilibrio, el origen $(0, 0)$, el cual representa el caso en donde no hay bacterias en la fase líquida y por tanto la velocidad de propagación de las mismas es cero. Estos tres sistemas son ecuaciones diferenciales ordinarias, lineales, homogéneas y autónomas que pueden ser representadas mediante notación vectorial. Al usar vectores se puede construir la ecuación característica para el sistema de ecuaciones A lineal como se muestra:

$$\frac{d}{d\xi} \begin{pmatrix} C \\ U \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \beta - R & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C \\ U \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ \beta - R & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \beta + R = 0$$

$$\lambda = \pm\sqrt{\beta - R}$$

La ecuación característica del sistema de ecuaciones B lineal es la siguiente:

$$\frac{d}{d\xi} \begin{pmatrix} C \\ U \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \beta - 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C \\ U \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ \beta - 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \beta + R = 0$$

$$\lambda = \pm\sqrt{\beta - 1}$$

La ecuación característica del sistema de ecuaciones diferenciales del sistema C lineal es:

$$\frac{d}{d\xi} \begin{pmatrix} C \\ U \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C \\ U \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0$$

$$\lambda = \pm\sqrt{-1} = \pm i$$

Los valores propios del sistema lineal A son números complejos de signos opuestos sin parte real puesto que $R > \beta$, al menos para los valores que se han asignado a la constante R . Estos valores propios indican que el sistema es un sistema con comportamiento periódico y su plano de fase es un centro en el origen, lo mismo ocurre para el sistema lineal B pues $1 > \beta$, por lo tanto para $R = 1$ le corresponde el mismo plano de fase del sistema lineal A. Con la ayuda de la función hamiltoniana y mediante la asignación de valores a la constante H , se puede generar el plano de fase de los sistemas hamiltonianos lineales. El campo de direcciones para el sistema de ecuaciones A lineal cuando $R = 1$ se muestra en la figura (13). Aquí se aprecia que los vectores se mueven en sentido de las manecillas del reloj.

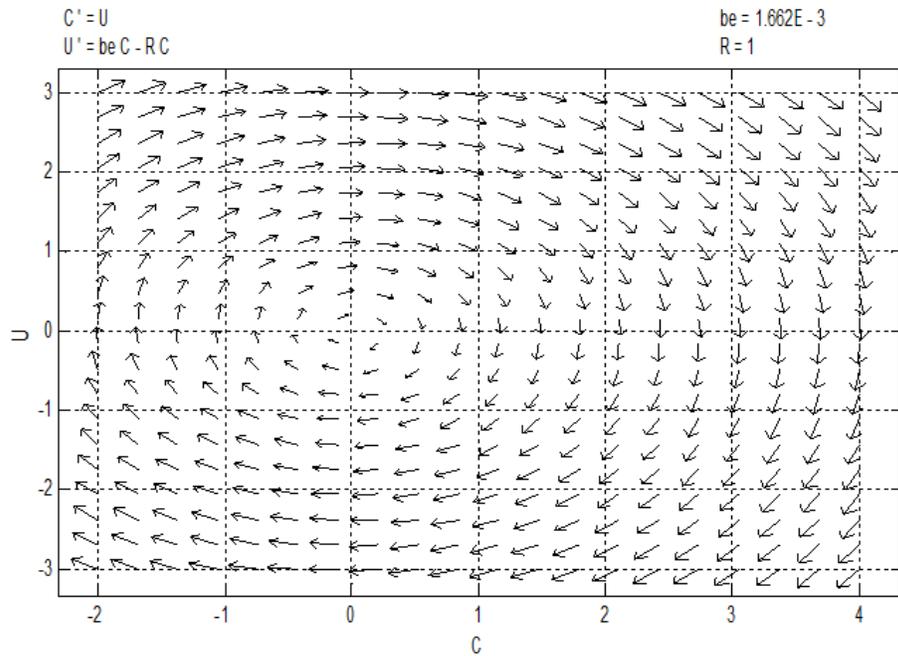


Figura 13. Campo de direcciones del sistema hamiltoniano A lineal para $R = 1$ y $\beta = 1.662 \times 10^{-3}$

La figura (14) muestra el plano de fase de los sistemas hamiltonianos A y B lineales debido a que $R = 1$. Con este plano se corrobora gráficamente que se trata de un centro, es decir, de un sistema con comportamiento periódico, el plano de fase consta enteramente de elipses centradas alrededor del origen. En este tipo de sistemas las soluciones son periódicas, es decir, vuelve exactamente a sus condiciones iniciales en el plano de fase y repiten la misma curva cerrada una y otra vez.

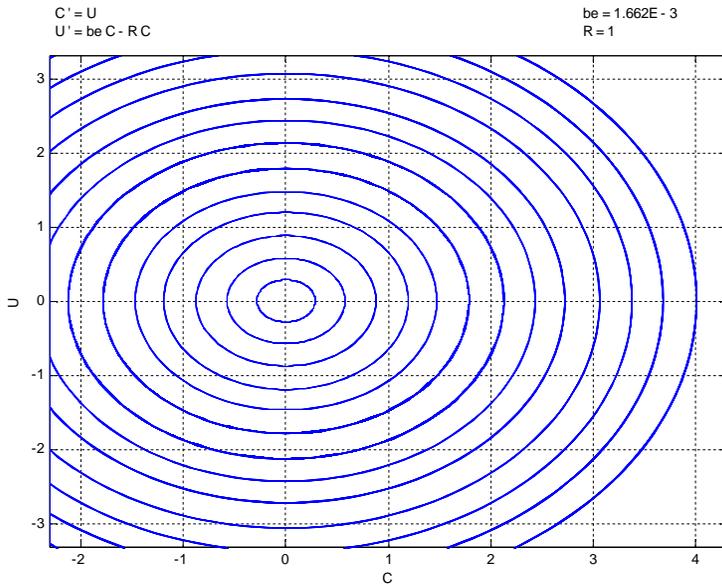


Figura 14. Plano de fase del sistema hamiltoniano A lineal para R=1

Las figuras (15) y (16) son los planos de fase del sistema hamiltoniano A lineal para $R = 2$ y $R = 3$; como ya se mencionó anteriormente el valor de la constante de rapidez de crecimiento logístico no afecta la estabilidad del sistema sin embargo, sí provoca pequeños cambios en el plano de fase.

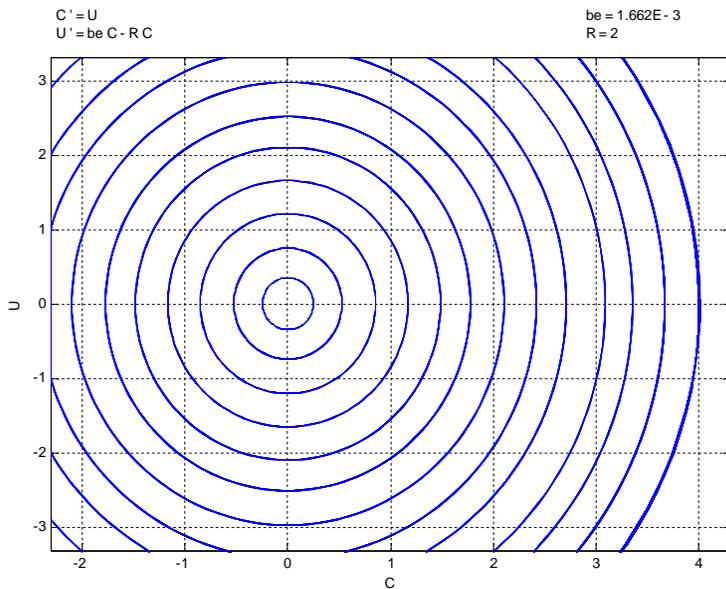


Figura 15. Plano de fase del sistema hamiltoniano A no lineal para R=2

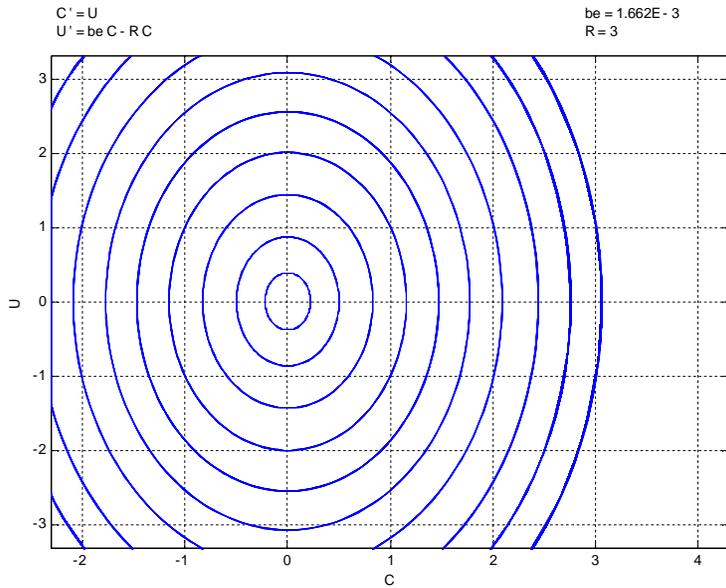


Figura 16. Plano de fase del sistema hamiltoniano A no lineal para $R=3$

La diferencia entre el plano de fase de la figura (14) y la figura (15), es el tránsito de un sistema compuesto por elipses a un sistema compuesto por circunferencias; mientras que la figura (16) donde $R = 3$ muestra que el plano se encuentra compuesto por elipses al igual que en la figura (14) donde $R = 1$, sin embargo, en la primera las elipses se encuentran en posición vertical.

4. Solución Numérica

4.1 Solución numérica de los sistemas de ecuaciones no lineales

En las próximas figuras se presenta la solución numérica del sistema A, B y C de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas descritas en las ecuaciones (67) a la (76). Los cálculos de las ecuaciones se realizaron con el programa *Matlab* donde se integraron los tres sistemas con $N = 200$ utilizando el método de Runge Kutta. En la figura (17) se muestra la variación de concentración de bacterias en la fase líquida respecto a ξ para los tres sistemas de ecuaciones diferenciales, en esta gráfica se aprecia que el comportamiento de los sistemas A y B es el mismo. Debido a que lo más importante para el sistema C es la pérdida de bacterias por adsorción en la interfase agua-aire, la concentración de bacterias en la fase líquida de este sistema es menor que en los dos anteriores.

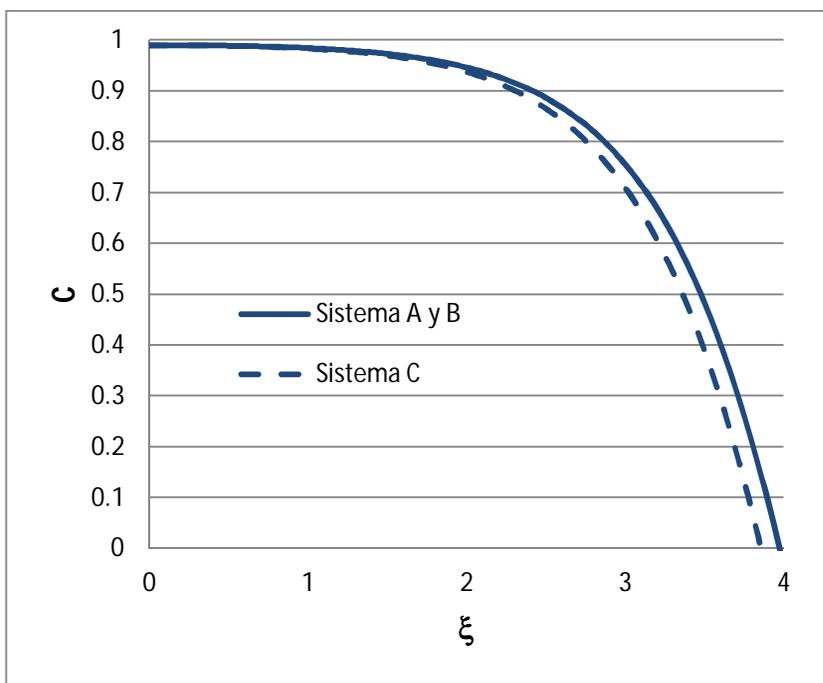


Figura 17. Variación de C con respecto a ξ para los sistemas A, B, y C para $R = 1$.

En la figura (18) se muestran los perfiles de concentración adimensional de bacterias en la superficie sólida en función de la coordenada ξ para los tres sistemas de ecuaciones diferenciales. La interpretación de la gráfica es más clara para el sistema de ecuaciones B y C pues la concentración de bacterias en la superficie del sólido está acotada por S_{\max} por lo tanto sólo puede variar entre cero y uno, es decir, en los sistemas B y C únicamente se puede cubrir el 1.4% de la superficie del sólido de lo que es posible.

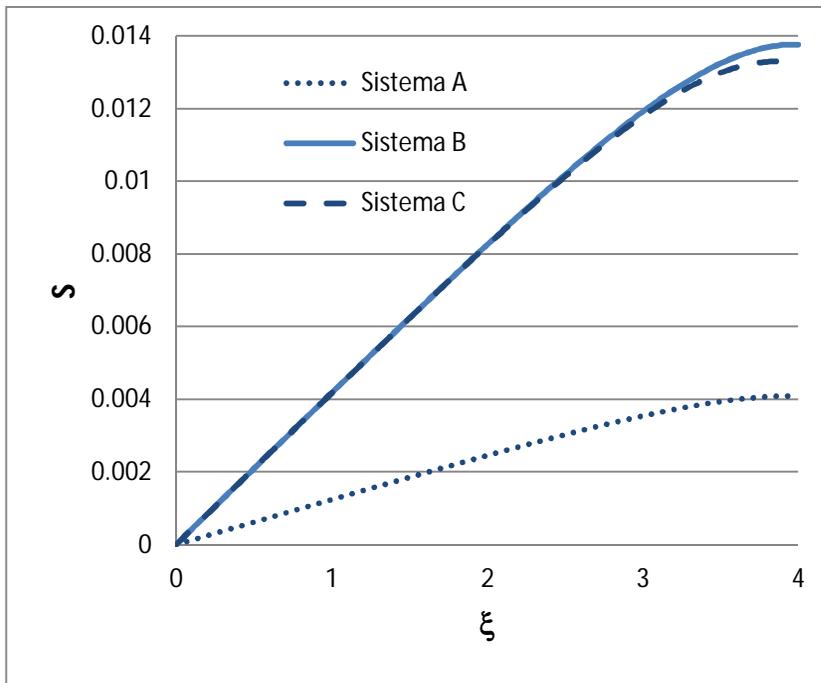


Figura 18. Variación de S con respecto a ξ para los sistemas A, B, y C con $R = 1$.

El modelo más importante propuesto en este trabajo es el sistema de ecuaciones C, cuya característica principal es que toma en cuenta la variación de la concentración de bacterias en la interfase agua-aire, a diferencia de los sistemas A y B los cuales consideran que la concentración de bacterias en esta zona no cambia.

La figura (19) muestra los cambios en la concentración de bacterias en la interfase agua-aire; aquí es claro que la interfase queda saturada a diferencia de la superficie sólida la cual sólo es cubierta a un 1.4% de su capacidad total.

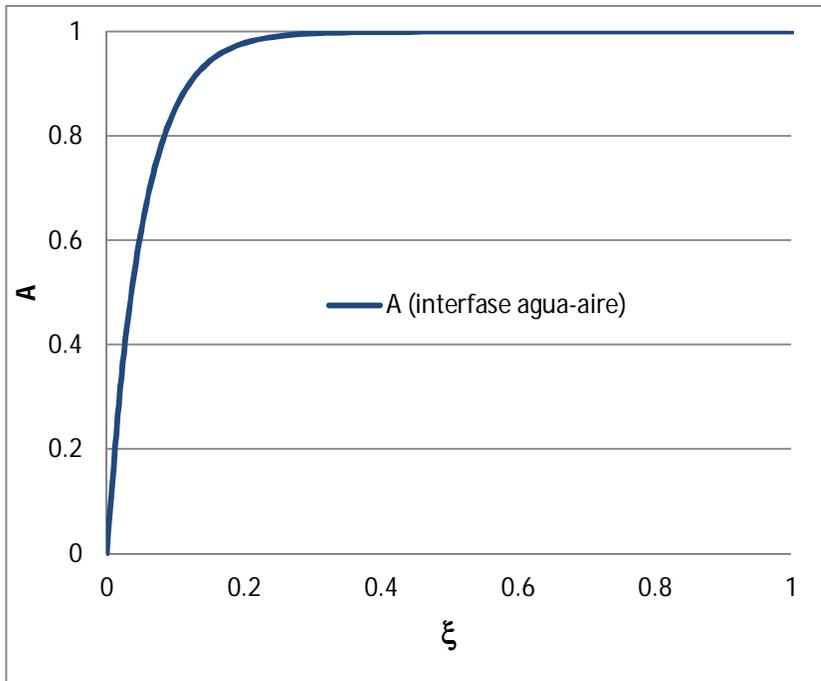


Figura 19. Variación de **A** con respecto a ξ para el sistema C.

Dependiendo del grado de porosidad que exista en el sistema habrá mayor cantidad de huecos, los cuales propician la presencia de aire y por tanto la existencia de la interfase, conforme mayor sea la porosidad se puede esperar que la interfase disponible para la adsorción de bacterias sea superior.

Si la superficie sólida es mayor que la interfase, será más fácil cubrir los espacios de esta última, es por esta razón que la interfase se llena en su totalidad mientras que la superficie del sólido sólo se cubre en el porcentaje ya mencionado.

El sistema de ecuaciones C sólo toma en cuenta la adsorción de bacterias en la interfase y supone que no hay desorción de las mismas, esta suposición explica en parte por qué logra saturarse la interfase agua-aire. Por lo tanto, la interpretación física, es que ésta se satura debido a que ya no existe la capacidad para que las bacterias puedan adsorberse puesto que ya no hay espacio disponible para adsorber más de ellas.

Al analizar la variación de la concentración de bacterias respecto a ξ en la interfase, se puede decir que se llega a una concentración constante a intervalos de ξ menores respecto a la adsorción de bacterias en el sólido. Esto tiene una explicación física citada en el artículo de Anke Schäfer²⁵ en donde se menciona que la bacteria *Rhodococcus sp* tiene una afinidad mayor en la interfase agua-aire que en la superficie sólida. Esto demuestra que la solución numérica describe acertadamente la realidad mostrada experimentalmente. La constante **R** únicamente aparece en el sistema de ecuaciones A, razón por la cual debe suponerse un valor para la misma a diferencia de los sistemas B y C, donde la inexistencia de dicha constante facilita el modelaje ya que ésta no se tiene que determinar.

En este proyecto se utilizaron tres valores para la constante **R**, con la finalidad de conocer los efectos que provoca en la estabilidad del sistema, así como en la variación de la concentración de bacterias en el líquido. **R** sí tiene efectos importantes en la concentración de bacterias en la fase líquida tal y como se muestra en la figura (20), en ella se observa que al aumentar el valor de **R** la concentración de **C** disminuye rápidamente; este fenómeno está relacionado con el transporte de bacterias a través de la columna, si la rapidez de crecimiento de la población es grande, las bacterias se propagan a una mayor velocidad.

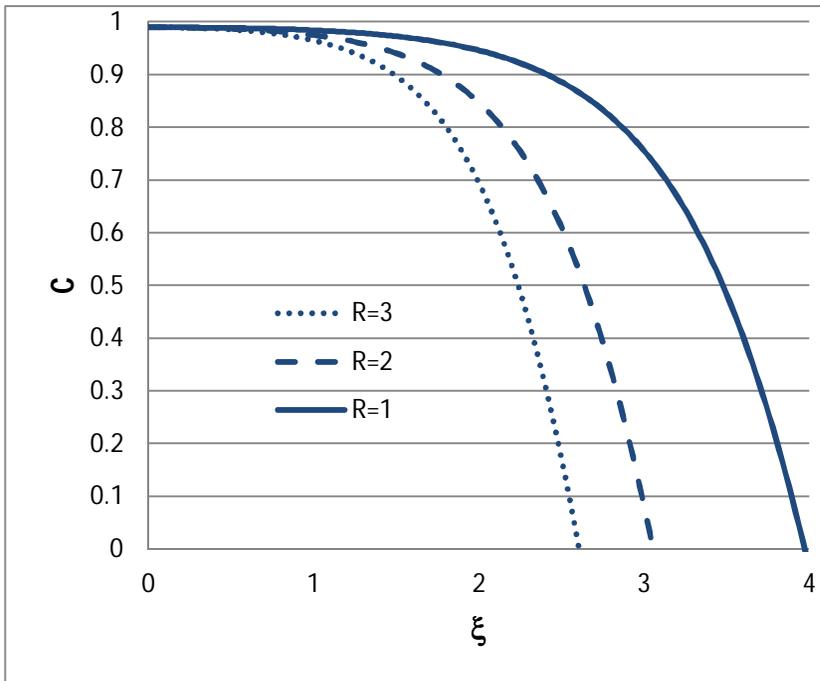


Figura 20. Variación de C con respecto a ξ para el sistema A, con $R = 1, 2, 3$.

Roland Lewis¹³ le asignó los valores 1, 2 y 3 a R , puesto que éstos únicamente generan una solución, razón por la cual para esta investigación se eligieron los mismos valores, ya que en el diagrama de bifurcaciones éstos le corresponden a la zona en la que existe un sólo valor (ver página 17). R forma parte de la ecuación de crecimiento logístico $R(1 - C)C$, mediante la cual es posible realizar el diagrama de bifurcación mostrado en la figura (3), en él se puede observar que para $R > 3$ existen dos o más soluciones de C e incluso se puede llegar a un sistema caótico.

Un sistema caótico se caracteriza por ser un sistema inestable donde los sistemas tienden a ser muy sensibles a pequeñas variaciones en las condiciones iniciales, es decir, estos diminutos cambios pueden implicar grandes diferencias en el comportamiento futuro del sistema, complicando así la predicción a largo plazo, por esta razón se determinó trabajar en la zona en la que existe una única solución. Por otra parte se tiene una ventaja adicional en los sistemas B y C, ya que al no incluir la constante R no es posible que éstos alcancen el caos.

La constante de rapidez de crecimiento de las bacterias también afecta a la adsorción de las mismas en la superficie sólida. Esto puede observarse en la figura (21) donde a mayores valores de R se adsorbe menor cantidad de bacterias en la superficie.

Lo anterior puede explicarse a partir de la figura (20), si la concentración de bacterias en el líquido se propaga rápidamente no existe el tiempo suficiente para que una cantidad mayor de microorganismos en el sólido se adsorban.

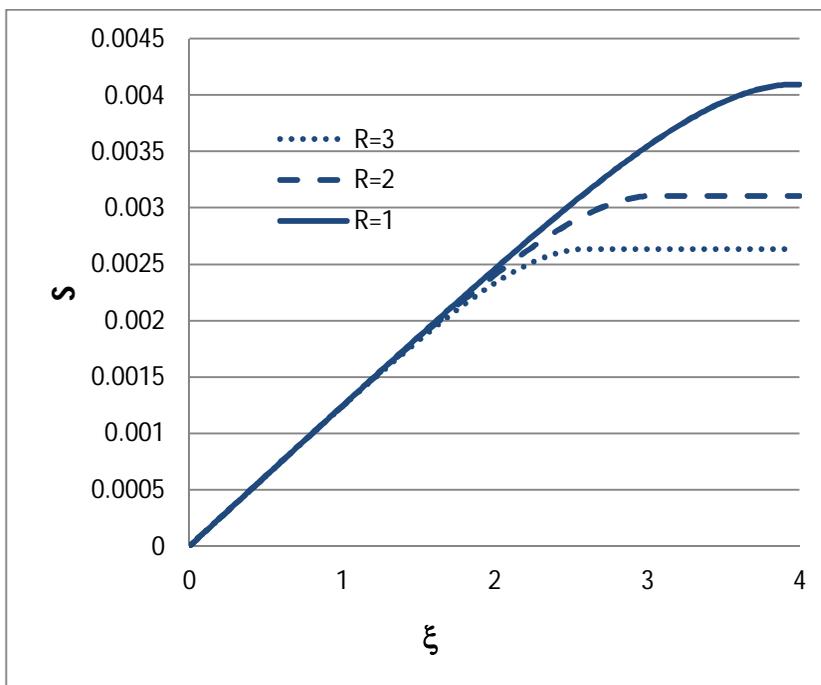


Figura 21. Variación de S con respecto a ξ para el sistema A, con $R = 1, 2, 3$.

Una de las constantes que debe determinarse experimentalmente es la velocidad de onda, v , pues se trata de una constante que se obtiene mediante el uso de la onda viajera.

Esta constante afecta sin duda el comportamiento del sistema; en las gráficas anteriores y en el análisis de estabilidad se le asignó el valor de uno, lo cual implica que la variación respecto a la posición y al tiempo son igual de importantes.

Para valores de v menores a uno, la variable espacial independiente ξ es más importante que la variación en la concentración respecto al tiempo. De igual forma cuando los valores de v son mayores a uno, se trata de un sistema donde la variación respecto al tiempo es más importante que su comportamiento unidireccional.

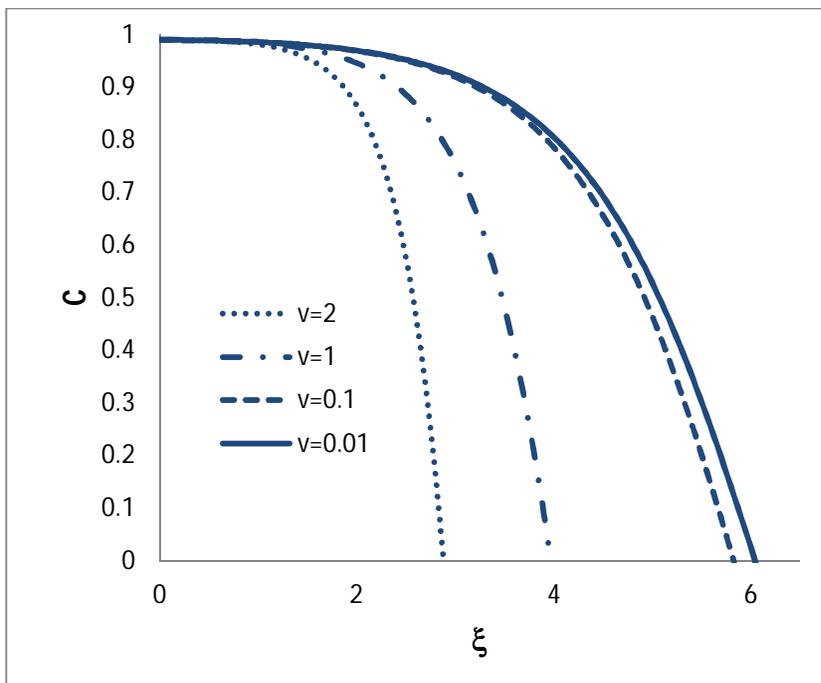


Figura 22. Variación de C con respecto a ξ para el sistema C , con $v = 0.001, 0.1, 1, 2$.

En la figura (22) se aprecia que para valores de $v < 1$ la concentración de microorganismos en el líquido disminuye lentamente respecto a ξ ; el flujo unidireccional tiene más relevancia en el sistema, esto provoca que la propagación sea más lenta, mientras que para los valores de $v > 1$ el efecto del tiempo es más significativo, lo que da como consecuencia que la propagación de bacterias sea más rápida.

5. Conclusiones

En esta investigación se presenta un modelo matemático simplificado para el transporte de bacterias en un medio poroso como el reportado por Roland W. Lewis,¹³ al cual se nombró sistema de ecuaciones A, así mismo se utilizaron varias constantes con valores reales a diferencia del artículo.

El sistema de ecuaciones A posee la constante de rapidez de crecimiento logístico (**R**); si a esta constante se le asignan los valores de las bifurcaciones se pueden estudiar los efectos de estabilidad que se producen en el sistema, así como el estudio del caos; sin embargo, ésta no se encuentra en los sistemas B y C, por lo que se considera una constante adicional que debe determinarse experimentalmente. Con el objetivo de analizar un sistema lo más cercano posible a la realidad se tomó como referencia los datos experimentales que obtuvo Anker Schäfer²⁵ para la bacteria *Rhodococcus sp.*²⁷

El sistema de ecuaciones B es uno de los modelos propuestos en este trabajo, se diferencia del sistema A por la forma en la que se adimensionalizó la concentración de bacterias en el sólido; para el sistema B esta concentración está acotada entre cero y uno y permite una interpretación gráfica más directa, pues a partir de la solución numérica, se sabe que solamente el 1.4% de la capacidad total de la superficie del sólido está cubierta por bacterias. Este sistema no tiene la constante **R**, la cual representa la rapidez de crecimiento poblacional, sin embargo, cuando en el sistema A, **R** es igual a uno, ambos sistemas son iguales.

El sistema de ecuaciones C, puede considerarse la mejor contribución de este trabajo debido a que es un modelo más completo y se propone a partir de los resultados experimentales del trabajo que reportó Schäfer. Este sistema considera la variación de la concentración de microorganismos que se encuentran en la interfase agua-aire.

Mediante la solución numérica, se encontró que la interfase se satura a diferencia de la superficie sólida; por otra parte se corroboró que la bacteria tiene mayor afinidad a la interfase que a la superficie del sólido, lo cual es congruente con lo reportado experimentalmente.

El medio poroso juega un papel importante en los fenómenos de transporte que ocurren a través de la columna, debido a que están presentes los fenómenos de adsorción y desorción en la superficie del sólido mientras que en la interfase los tres sistemas de ecuaciones A, B y C sólo toman en cuenta la adsorción, ya que consideran que la desorción es menos significativa. Dependiendo del nivel de porosidad que exista en el medio, la interfase disponible para la adsorción de bacterias cambia, puesto que la interfase es menor que la superficie sólida y es por ello que esta última no se cubre en su totalidad. Por otra parte, en los sistemas B y C la concentración de bacterias en la superficie del sólido S está acotada mediante S_{max} , la cual representa la máxima concentración de bacterias que pueden adsorberse en el sólido, cabe mencionar que ésta es una constante conocida; por esta razón S varía entre cero y uno.

Los tres sistemas de ecuaciones se expresaron de forma adimensional, se hizo su análisis de estabilidad de los cuales se concluye que la estabilidad es la misma para los tres sistemas de ecuaciones diferenciales en los dos puntos de equilibrio. Por otra parte, se corroboró que los valores de la constante R en el sistema de ecuaciones A no afectan la estabilidad del sistema.

Los puntos críticos coinciden como generalmente sucede, en que el primer punto es el origen para los tres, mientras que el segundo punto de equilibrio es diferente; los dos puntos de equilibrio son inestables pues sus espacios fase tienen un punto silla.

Para los tres sistemas se generó su función hamiltoniana mediante la suposición de que la velocidad de onda v es igual a cero, lo cual implica que el sistema se vuelve conservativo facilitando así la construcción de su plano de fase y convirtiéndose a su vez en un sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas.

En el análisis de estabilidad de los sistemas hamiltonianos se tienen nuevamente dos puntos de equilibrio uno de ellos es el origen, sus valores propios indican que se trata de un centro, es decir, cuenta con un comportamiento periódico. El segundo punto crítico es un punto silla que implica inestabilidad, estos puntos de equilibrio se pueden apreciar en los planos de fase correspondientes.

Asimismo se analizaron los casos lineales de los tres sistemas, se utilizaron las ecuaciones adimensionales y se realizó su respectivo análisis de estabilidad; en esta parte se encontró que al generar el sistema lineal uno de los puntos de equilibrio se elimina conservando únicamente el origen. Los valores propios del sistema son los mismos que en sus respectivos sistemas no lineales, por lo tanto se trata de un punto silla lo cual muestra un sistema inestable para este punto.

Del mismo modo se generó la función hamiltoniana para los sistemas suponiendo que la velocidad de onda es igual cero, es así como se tiene un sistema conservativo a partir del cual se construyó el plano de fase.

El análisis de estabilidad en el origen muestra un sistema periódico pues se trata de un centro, el cual se puede apreciar en el plano de fase, así como los cambios que tienen las trayectorias en el plano conforme se incrementa el valor de la constante R .

De lo expuesto en este trabajo, se puede concluir que el uso de cada uno de los sistemas depende total y exclusivamente del interés particular de cada persona, esto se debe a que cada sistema tiene diversas aportaciones, por ejemplo, el sistema A puede ser útil si se desea conocer el comportamiento del sistema donde existen bifurcaciones o al realizar un estudio sobre el régimen caótico mientras que el sistema B, no presenta más de una solución y posee la facilidad para conocer los cambios en la concentración de bacterias en el líquido y en el sólido, considerando que la variación de éstas en la interfase agua-aire no es tan significativa o importante.

Finalmente el sistema de ecuaciones C, es el más completo y resulta de gran interés cuando se quiere conocer cómo cambian las concentraciones de microorganismos en las tres fases pero haciendo énfasis en la interfase agua-aire.

6. Referencias

¹ Douglas Samuel Jones y B.D. Sleeman. Differential Equations and Mathematical Biology, London, first edition, 2003.

² Sahimi M. Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock, Wiley-VCH, first edition, 2008.

³ Davis Mark E. Ordered porous materials for emerging applications. Nature 2002; 21:408-417.

⁴ Corapcioglu MY, Jiang S. Colloid-facilitated groundwater contaminant transport. Water Resources Research 1993; 32: 3437-3449.

⁵ Johnson PR, Elimelech M. Dynamics of colloid deposition in porous media: blocking based on random sequential adsorption. Langmuir 1995; 11:801-812.

⁶ Saiers JE, Hornberger GM, Harvey C. Colloidal silica transport through structured, heterogeneous porous media. Journal of Hydrology 1994; 163:271-288.

⁷ Song L, Elimelech M. Transient deposition of colloid particles in heterogeneous porous media. Journal of Colloid and Interface Science 1994; 167:301- 313.

⁸ Sun N, Elimelech M., Sun NZ, Ryan JN. A novel two-dimensional model for colloid transport in physically and geochemically heterogeneous porous media. Journal of Contaminant Hydrology 2001; 49:173-199.

⁹ Blanchard DC, Syzdek LD. Concentration of bacteria in jet drops from bursting bubbles. Journal of Geophysical Research 1972; 77:5087-5099.

¹⁰ Marshall KC, Cruickshank RH. Cell surface hydrophobicity and the orientation of certain bacteria in interfaces. *Archives of Microbiology* 1973. 91:29-40.

¹¹ Dahlbäck B, Hermansson M, Kjelleberg S, Norkrans B. The hydrophobicity of bacteria-an important factor in their initial adhesion at the air-water interface. *Archive of Microbiology* 1981; 128:267-270.

¹² Powelson DK, Mills AL. Bacterial enrichment at the air-water interface or a laboratory apparatus. *Applied and Environmental Microbiology* 1996; 62:2593-2597..

¹³ Lewis R, Pao WKS, Yang X. Instability and reaction-diffusion transport of bacteria. *Communications in numerical methods in engineering* 2004; 20:777-787.

¹⁴ Raquel Granados Pérez, Carmen Villaverde Peris, *Bacteriología, características y clasificación bacteriana*, 1ra edición, 1996.

¹⁵ Lansing M. Prescott, John P. Harley, Donald A. Klein. *Microbiology*, 5ta edición, 2005.

¹⁶ Serrano JA, Tablante RV, de Serrano AA, de San Blas GC, Imaeda T. Physiological, chemical and ultrastructural characteristics of *Corynebacterium rubrum*. *J Gen Microbiol* 1972; 70: 339-49.

¹⁷ Fritsche W. The potential of microorganisms for bioremediation. In: *Procee. 6th. Euro. Congress on Biotechnol.* Ed. Alberghina, L; Frontali, L; P, Sensi. Elsevier. Sc. B.V. 1994.

¹⁸ Ellis LBM, Hershberger D, Bryan EM, Wackett LP. The University of Minnesota Biocatalysis/Biodegradation Database: emphasizing enzymes. *Nucleic Acids Research* 2001; 29(1): 340-3.

¹⁹ Laubichler MD, Müller GB, Modeling Biology: Structures, Behaviors, Evolution, Cambridge, Massachusetts: MIT, 2007; pp 3-35

²⁰ Murray JD. Mathematical Biology, Springer: NY, 3ra edición, 2002.

²¹ George F. Simmons. Differential Equations with applications and historical notes, E.U.A, 1980.

²² C. Henry Edwards, David E. Penney. Differential Equations and Boundary Value Problems: Computing and Modelling, 4ta edición, 2008.

²³ Paul Blanchard, Robert L. Devaney, Glen R. Hall. Differential Equations, 3ra edición, 2006.

²⁴ Edward Ott. Chaos in Dynamical Systems, Cambridge, 2da edición, 2002.

²⁵ Schäfer A, Ustohal P, Harms H, Staufer F, Dracos T, Zehner AJB. Transport of bacteria in unsaturated porous media. Journal of Contaminant Hydrology 1988; 33: 149-169.

²⁶ Rijnaarts HHM, Norde W, Bouver EJ, Lyklema J, Zehnder AJB. Reversibility and mechanism of bacterial adhesion. Colloid Surface B 1995; 4:5-22.

²⁷ McLeod MP, Warren RL, Hsiao WW, Araki N. "The complete genome of *Rhodococcus* sp. RHA1 provides insights into a catabolic powerhouse". *PNAS* 2006; 42: 15582–15587.