

Primer Simposio de las Licenciaturas de la División de Ciencias Naturales e Ingeniería

Modelación de consorcios bacterianos

Ismael Velázquez Ramírez* y Jorge X. Velasco Hernández**

*Departamento de Matemáticas Aplicadas, veri@correo.cua.uam.mx, **Alumno de Matemáticas Aplicadas, alum@gmail.com

Abstract

El modelo de Ising es un sistema de la Física Estadística el cual se ha usado para entender diversos fenómenos sociales, como conflictos bélicos y comerciales. En en este trabajo se muestra una analogía entre el modelo de Ising y la teoría de juegos. Además este modelo se usa para estudiar un tratado de libre comercio entre dos países. En este ejemplo, los países pueden escoger entre seguir políticas proteccionistas o de libre mercado.

Introducción

Ciertos tipos de consorcios bacterianos denominados genéricamente como biopelículas tienen importancia médica e industrial debido a los efectos tanto positivos como negativos que ejercen en el entorno en que se forman. Las biopelículas pueden crecer casi donde quiera, desde tubos de agua, piedras en los ríos, cascos de barcos, dientes, etc. (ver [?] y [?])

Nuestro objetivo es describir un modelo de agregación de un consorcio bacteriano cuando existe sensibilidad de quórum y existencia de deterioro ambiental inducido por algún bactericida. La estrategia de modelación que seguiremos consiste en introducir las ecuaciones que describen el crecimiento local de las bacterias, seguidas de la modelación del proceso quimiotáctico considerando el fenómeno de sensibilidad de quórum, que es el problema central del presente proyecto. Finalmente se modelará el deterioro ambiental representado por la acción de un biocida.

Modelo de Ising

El modelo de Ising es uno de los pocos modelos de partículas interactuantes para el cual se conoce una solución exacta. Es de gran utilidad ya que, aunque originalmente fue formulado para resolver problemas físicos (ferromagnetismo) tiene muchísima aplicaciones en el modelado de problemas de otras áreas como la biología, finanzas, etc.

En una dimensión, el Hamiltoniano del modelo de Ising puede ser escrito como

$$\mathbb{H} = -\epsilon \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu B \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$$
 (3.1)

donde $\sigma=\pm 1$ y estos valores indican cada uno de los estados posibles: Si la partícula apunta hacia arriba o hacia abajo. Se usa también la siguiente representación matricial: Supongamos que las bacterias, además de moverse aleatoriamente en la región, tienden a dirigirse a regiones donde la concentración de sustrato es mas elevada, es decir se presenta taxis. Para modelar este fenómeno, al flujo que dedujimos anteriormente debe añadírsele el efecto quimiotáctico que posee una dirección opuesta al del flujo de difusión, es decir

 $J(x,t) = -D\frac{\partial}{\partial x}p_2 + \mu \frac{\partial}{\partial x}p_2.$

En este caso μ , que representa el movimiento de las bacterias hacia altas concentraciones de recurso, no es una constante pues el flujo inducido por taxis es ciertamente proporcional a la densidad local de bacterias. Es aquí precisamente donde introduciremos la sensibilidad de quórum. En general tomaremos $\mu = \mu(p_1, p_2)$. Así la ecuación para la bacteria será.

$$\frac{\partial}{\partial t}p_2 = f(p_1)p_2 - \delta p_2 + D_2 \frac{\partial^2 p_2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu(p_1, p_2) \frac{\partial p_1}{\partial x} \right)$$

En resumen tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t}p_1 = \Lambda - f(p_1)p_2 - ep_1 + D_1\nabla^2 p_1,
\frac{\partial}{\partial t}p_2 = f(p_1)p_2 - \delta p_2 + D_2\nabla^2 p_2 -
\nabla \cdot (\mu(p_1, p_2)\nabla p_1),$$
(3.2)

La forma específica de μ e hipótesis básicas que nos interesan para el análisis del modelo serán especificados a continuación.

Teoría de Juegos

En fenómeno llamado sensibilidad de quórum las bacterias responden de manera colectiva y coordinada a estímulos del medio cuando la agregación poblacional, y el consecuente incremento local en densidad poblacional, alcanzan un cierto umbral. Es posible, en principio, modelar parte de este proceso usando como base las ecuaciones (??). Consideremos la función

$$\mu(p_1, p_2) = \chi(p_1)\phi(p_2)p_2,$$

donde $\chi > 0$ es una función que mide intensidad de atracción del sustrato; $\phi(0) > 0$, y existe una $\hat{p}_2 > 0$ tal que $\phi(\hat{p}_2) = 0$. La propiedad de acotamiento impuesta a la función ϕ constituye una manera de simular el umbral de densidad asociado con la sensibilidad de quórum: cuando $p_2 = \hat{p}_2$, $\mu = 0$ y la actividad de atracción hacia zonas de alta concentración de bacteria o recurso se suspende.

Esto no es todavía suficiente para la modelación de sensibilidad de quórum. Debido a que el operador de difusión permite que una bacteria responda a concentraciones de bacterias muy alejadas del lugar en que se encuentra, de hecho, responde a concentraciones en cualquier región de Ω . Así supondremos que la velocidad de dispersión es finita lo que hará que la respuesta a la densidad umbral sea de naturaleza esencialmente local.

Para incorporar este proceso primero consideremos una caminata aleatoria para la bacteria en Ω . La bacteria con densidad p_2 tiene una velocidad constante γ y una tasa constante de cambio de dirección κ . Si suponemos que $p_2^+(x,t)$ y $p_2^-(x,t)$ son las densidades de las bacterias, cuyo movimiento inicial fue a la derecha o la izquierda, en la posición x al tiempo t, respectivamente, estas dos funciones tienen la siguiente dinámica en n = 1(ver [?], [?] y [?]).

$$\frac{\partial p_2^+}{\partial t} + \gamma \frac{\partial p_2^+}{\partial x} = \kappa(p_2^- - p_2^+) + \frac{1}{2}Q_2(p_1, p_2^+ + p_2^-)$$
$$\frac{\partial p_2^-}{\partial t} - \gamma \frac{\partial p_2^+}{\partial x} = \kappa(p_2^+ - p_2^-) + \frac{1}{2}Q_2(p_1, p_2^+ + p_2^-)$$

donde las bacterias creadas escogen cualquiera de las dos direcciones posibles en R con la misma probabilidad. Resolviendo nuestro sistema en términos de p_2 y de q obtenemos

$$\frac{1}{\kappa} \frac{\partial}{\partial t} q + q = -\frac{\gamma^2}{2\kappa} \frac{\partial p_2}{\partial x}$$
$$\frac{\partial p_2}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = Q(p_1, p_2)$$

Cuando n=2 las ecuaciones tendrán la siguiente forma

$$\tau \frac{\partial}{\partial t} q + q = -D\nabla p_2$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p_2 + \nabla q = f(p_1)p_2 - \delta p_2$$

Para introducir taxis en nuestro modelo, el flujo tendrá que ser $J(x,t)=-D\nabla p_2+\mu(p_1,p_2)\nabla p_2$ en vez de sólo $J(x,t)=-D\nabla p_2$ por los que nuestro sistema será

$$\frac{\partial}{\partial t}p_{1} = \Lambda - f(p_{1})p_{2} - ep_{1} + D_{1}\nabla^{2}p_{1},$$

$$\tau \frac{\partial}{\partial t}q + q = -D_{2}\nabla p_{2} + \mu(p_{1}, p_{2})\nabla p_{1},$$

$$\frac{\partial}{\partial t}p_{2} + \nabla q = f(p_{1})p_{2} - \delta p_{2},$$
(4.1)

Aplicaciones: un tratado bilateral de libre comercio

hábitat) será añadido. Deterioro significará para nosotros no falta de sustrato, sino la acción negativa (inhibitoria de crecimiento) de una variable ambiental sobre la constitución de la biopelícula. Denotemos por b a la concentración de algún agente biocida (un antibiótico por ejemplo). Las modificaciones a los modelos (??) y (??) quedan entonces como sigue para el modelo de reacción difusión

Sólo nos resta incorporar la forma en que el biocida (deterioro de

$$\frac{\partial}{\partial t} p_1 = \Lambda - \theta(b) f(p_1) p_2 - e p_1 + D_1 \nabla^2 p_1,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p_2 = \theta(b) f(p_1) p_2 - \delta p_2 + D_2 \nabla^2 p_2 -$$

$$\nabla \cdot (\mu(p_1, p_2) \nabla p_1),$$

$$\frac{\partial}{\partial t} b = \lambda - e b + D_b \nabla^2 b.$$
(5.1)

y para el modelo de reacción transporte

$$\frac{\partial}{\partial t}p_{1} = \Lambda - \theta(b)f(p_{1})p_{2} - ep_{1} + D_{1}\nabla^{2}p_{1},$$

$$\tau \frac{\partial}{\partial t}q + q = D_{2}\nabla p_{2} - \mu(p_{1}, p_{2})\nabla p_{1},$$

$$\frac{\partial}{\partial t}p_{2} + \nabla q = \theta(b)f(p_{1})p_{2} - \delta p_{2},$$

$$\frac{\partial}{\partial t}b = \lambda - eb + D_{b}\nabla^{2}b.$$
(5.2)

donde

$$\theta(b) = e^{-\alpha b}.$$

La ecuación para el biocida es simple: éste es suministrado a una tasa λ que puede depender de la concentración del biocida en el caso de que consideremos una biopelícula en un quimióstato; se pierde a una tasa e igual a la correspondiente del substrato y se difunde en el ambiente con coeficiente de difusión D_b . El biocida afecta la tasa del consumo de recurso y, por lo tanto, a la tasa de crecimiento de la bacteria a través del termino $\theta(b)$.

Existen varios tipos de frontera que se ocupan en biología, sin embargo las Neumann son las más indicadas para nuestro sistema pues esperamos que la dinámica de las ecuaciones sea esencialmente producto de las ecuaciones y no la inducida por las condiciones de la frontera; además supondremos que las partículas sean reflejadas al llegar a la frontera.

Conclusiones

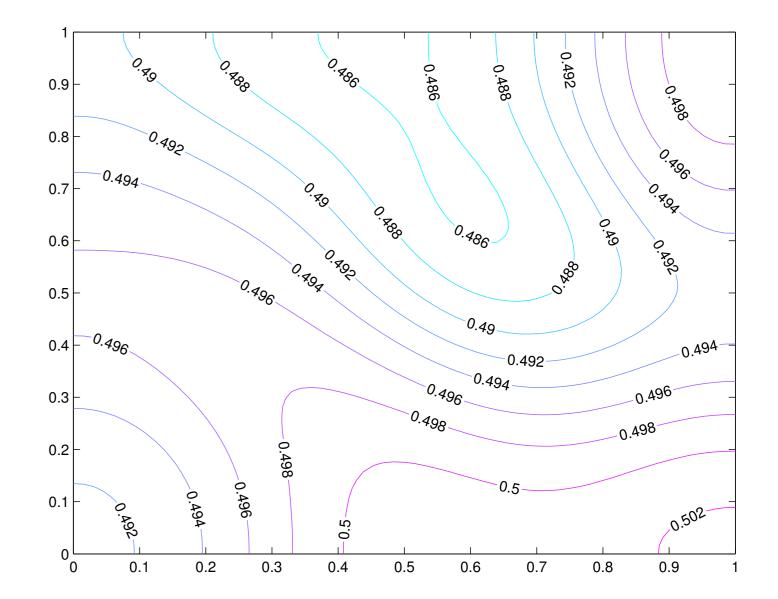


FIGURA 1: Densidad de bacterias en un cuadrado con los parámetros Lambda=300, e=.001 y delta=10

AAA