

# **Propuesta: Proyecto Divisional (DCNI)**

Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas  
División de Ciencias Naturales e Ingeniería  
Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Cuajimalpa

## **1. TÍTULO DEL PROYECTO:**

**SISTEMAS FUERA DE EQUILIBRIO: MODELADO, ANÁLISIS Y APLICACIONES**

**LÍNEA DE INVESTIGACIÓN DEL CUERPO ACADÉMICO O GRUPO DE INVESTIGACIÓN, O DE POSGRADO:**

- **Cuerpo Académico 1:** Dinámica de sistemas: modelado, análisis y simulación

LGAC 1: Teoría cinética, flujos y modelos relacionados

LGAC 2: Teoría cinética

LGAC 3: Solución numérica de modelos matemáticos

- **Cuerpo Académico 2: Modelos Matemáticos Continuos y Aplicaciones en Física y Geometría**

LGAC 1: Física estadística dentro y fuera de equilibrio

LGAC 2: Geometría diferencial de superficies

LGAC 3: Solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales

LGAC 4: Teoría cinética relativista

**RESPONSABLE DEL PROYECTO:** Dra. Ana Laura García Perciante

**PARTICIPANTES Y ADSCRIPCIÓN DE CADA UNO:**

- **Alma Rosa Méndez Rodríguez, Dra. Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas UAM Cuajimalpa**
- **Ana Laura García Perciante, Dra. Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas UAM Cuajimalpa**
- **Diana Assaely León Velasco, Dra. Departamento de Matemáticas**

## **Aplicadas y Sistemas UAM Cuajimalpa**

- **Guillermo Chacón Acosta, Dr. Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas UAM Cuajimalpa**

### **ORIENTACIÓN:**

- **Investigación básica ( X )**
- **Investigación aplicada ( )**
- **Desarrollo o adaptación ( )**
- **Transferencia de tecnología ( )**
- **Desarrollo de tecnología ( )**
- **Otros ( ), especificar: \_\_\_\_\_**

**FECHA DE INICIO Y DURACIÓN: Del trimestre 23l al trimestre 25O.  
Duracion por 3 años.**

## **2. Propuesta:**

### **2.1 Resumen.**

En este proyecto se explorarán diversos sistemas fuera de equilibrio principalmente desde el punto de vista micro, meso y macroscópico. Para ello, se proponen diversos modelos para la interacción de sus componentes individuales y se definen las cantidades macroscópicas que determinan el estado del sistema a nivel macroscópico a partir de promedios estadísticos ponderados por una función de distribución.

El modelado que se plantea, al basarse en una propuesta detallada y fundamentada sobre las interacciones individuales, permite abordar una amplia variedad de sistemas, teniendo la potencialidad de ser útil en el estudio de problemas de relevancia actual como lo son la difusión en sistemas biológicos, el comportamiento de gases atmosféricos, problemas de economía, el transporte electrónico y otras características de los nuevos materiales bidimensionales y la dinámica del tráfico vehicular y peatonal, etc. Pudiendo marcar todos estos en problemas nacionales como: socio-ecológicos, salud, energía y cambio climático, entre otros.

Las actividades a desarrollar en las primeras etapas del proyecto giran en torno a los fundamentos teóricos y aplicaciones potenciales. Como perspectivas a

mediano plazo, se plantea obtener las ecuaciones macroscópicas y los coeficientes de transporte correspondientes, y realizar un análisis que permita conocer el comportamiento de los sistemas abordados y establecer criterios que sean de utilidad en los problemas relevantes.

## **2.2 Antecedentes** (máximo 2 cuartillas).

La física estadística centra su atención en el estudio de sistemas macroscópicos en términos de sus componentes individuales. Es decir que estudia sistemas macroscópicos compuestos por una multitud de elementos individuales como átomos o moléculas en un gas, estrellas en una galaxia, vehículos en una carretera, peatones en un amontonamiento, agentes en una economía, etc.

Para ello, se caracteriza el sistema a través de una función de distribución la cual representa el número de elementos en cada celda del espacio fase correspondiente. En un sistema en equilibrio dicha densidad es estática y se llega a dicha configuración a través de las interacciones entre los componentes del sistema. Los sistemas fuera de equilibrio están caracterizados por una función de distribución que varía en el tiempo, lo cual resulta en que las cantidades macroscópicas que determinan el estado del sistema (variables de estado) lo hagan también. Las ecuaciones cinéticas son justamente las que establecen la evolución temporal de la función de distribución y por lo tanto son capaces de llevar a ecuaciones dinámicas para las cantidades macroscópicas. Adicionalmente, la función de distribución permite establecer de forma analítica las relaciones entre los flujos que llevan al sistema al equilibrio y las fuentes que los generan, arrojando también expresiones para las constantes involucradas en dichas relaciones. Dichas cantidades cuantifican la respuesta del sistema a gradientes de sus variables de estado y son por lo tanto fundamentales para el comportamiento de los sistemas irreversibles.

Las ecuaciones de evolución para las variables de estado integran en general un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que solamente en casos específicos permiten soluciones analíticas. Sin embargo, es posible en algunos casos llevar a cabo un análisis de estabilidad capaz de arrojar información relevante sobre el sistema.

La teoría que se menciona en los párrafos anteriores ha sido principalmente aplicada a gases diluidos y ha resultado ser altamente exitosa para estudiar el transporte en dichos fluidos. En ella se fundamentan las ecuaciones de Navier-Stokes-Fourier y permite establecer de manera formal las modificaciones a las mismas para sistemas específicos. También ha sido aplicada en diversos sistemas, desde la materia oscura que orbita objetos masivos hasta el tráfico peatonal.

Una perspectiva complementaria a la teoría cinética para intentar explicar los efectos de las componentes microscópicas sobre las propiedades macroscópicas es a través de la ecuación de Langevin, la cual es una ecuación diferencial con un término probabilístico conocido como ruido. La solución a esta ecuación deja de ser determinista y se vuelve ahora una variable aleatoria. Lo interesante es que es posible tener una ecuación para la función de distribución asociada a este tipo de variables, la cual es en el caso más simple una ecuación de difusión, aunque en general son llamadas ecuaciones de tipo Fokker-Planck. La conexión con la teoría cinética es que este tipo de ecuaciones también es posible obtenerlas como aproximaciones a la ecuación de Boltzmann de la teoría cinética.

Las ecuaciones de difusión y de Fokker-Planck son ecuaciones diferenciales parciales parabólicas que aparecen en diferentes aplicaciones que van desde la biología hasta las finanzas. Pequeñas variantes de las ecuaciones de difusión sirven para plantear esta diversidad en los modelos, así por ejemplo, al sumar un término de crecimiento o producción puede modelarse la dinámica de tumores, al acoplar con otra ecuación de difusión para una especie reactiva, es posible describir la aparición de patrones espacio temporales, si sus coeficientes son variables pueden modelar la dinámica del mercado. Es posible plantearlas en dominios más complicados como superficies encajadas en el espacio y que por tanto tienen curvatura para modelar el transporte sobre membranas lipídicas, e incluso si se les agrega un término que las convierta en elípticas, modelan propagaciones a velocidades finitas. Así mismo con los problemas de inversos y de control se pueden modelar problemas de difusión los cuales analizan dinámica de tumores, identificación de actividad bioeléctrica en el cerebro a partir de señales electroencefalográficas, retroceso en el tiempo, entre otros.

### **2.3 Objetivo general y objetivos particulares. Objetivo general.**

Estudiar, analizar y aplicar los aspectos fundamentales de los sistemas fuera de equilibrio desde la perspectiva de la física estadística y el modelado matemático.

#### **Objetivos específicos.**

- **Teoría Cinética**

Estudiar la teoría cinética de diversos sistemas de interés. En particular se abordarán algunos problemas como los fluidos relativistas, fluidos ionizados, fluidos cuánticos, flujo vehicular y peatonal, sistemas de agentes económicos, etc.

- **Procesos de difusión.**

Estudiar modelos difusivos que ocurren en sistemas confinados como superficies bidimensionales encajadas en el espacio tridimensional y en canales estrechos formados por distintos tipos de fronteras, así como sistemas que presenten formación de patrones con el mecanismo de reacción-difusión. En particular, modelos que puedan llegar a ser de interés futuro en el ámbito de la salud y/o las finanzas.

## **2.4 Descripción, incluyendo hipótesis y metodología (máximo 2 cuartillas).**

**Teoría Cinética.** La teoría cinética modela la evolución de un sistema de varios componentes considerando principalmente el caso diluído. Para ello se requiere que el sistema tenga un número lo suficientemente grande de componentes como para poder considerar a las cantidades medibles como promedios sobre las características y dinámica de los mismos. En este proyecto se utilizará principalmente la ecuación de Boltzmann, la cual adicionalmente incluye la hipótesis de que el sistema, aún siendo numeroso, tenga una densidad lo suficientemente baja como para que las interacciones de a pares sean las más relevantes pudiéndose descartar las que involucren encuentros de tres o más integrantes del sistema. Los sistemas que se abordarán se deberán encontrar dentro de dicha hipótesis.

La metodología a emplear en esta parte del proyecto, es utilizar la herramienta de la teoría de Boltzmann en la cual primeramente es necesario definir las cantidades medibles del sistema en términos de promedios estadísticos sobre la función de distribución. Una vez identificadas dichas cantidades, se requiere un modelo de interacción para luego plantear la ecuación de Boltzmann. Esta se resolverá utilizando principalmente el método de Chapman-Enskog o alternativamente el método de los momentos. Para ambos, es necesario establecer una función de distribución de equilibrio o de referencia. La solución de la ecuación cinética será empleada para establecer las relaciones constitutivas así como los coeficientes de transporte. Por otra parte, los momentos de la ecuación de Boltzmann llevarán a las ecuaciones de transporte que, al ser complementadas con las ecuaciones constitutivas, constituyen un sistema cerrado de ecuaciones para la evolución de las variables observables. Estas últimas serán analizadas para encontrar criterios de estabilidad y ponderar la posibilidad de formación de estructuras en los sistemas en los casos inestables.

**Procesos de difusión.** La ecuación de difusión ha mostrado tener innumerables aplicaciones en áreas del conocimiento que van desde la física, la biología, la química y hasta la economía y las finanzas. Ciertamente en los sistemas vivos muchos procesos de transporte pueden ser estudiados muy bien con la ecuación de difusión. Sin embargo, casi todos ellos ocurren en confinamiento, donde la difusión libre no puede aplicarse directamente. Por ejemplo, la difusión en

sistemas aglomerados como el medio intracelular, transporte en fluidos viscoelásticos, modelado de propagación de tumores, liberación controlada de productos farmacéuticos, difusión en nano-confinamiento en zeolitas y marcos metal-orgánicos, pero también en confinamientos como superficies cerradas como la difusión sobre la membrana celular misma u otras membranas interfaciales en lípidos que además tienen el componente de la curvatura. Aplicaciones por supuesto pueden hallarse en ecuaciones de tipo difusión en sistemas económicos como la ecuación de Black-Scholes para el modelado del precio de opciones financieras, también en procesos sociales y en general todo tipo de sistemas complejos. Se estudian también interacciones de largo alcance, procesos de búsqueda, difusión en sistemas relativistas, control en ecuaciones diferenciales parciales, etc.

En esta parte del proyecto la metodología es muy variada ya que requiere de diversas herramientas matemáticas y numéricas que incluyen pero no se limitan a, herramientas de geometría diferencial en el estudio de difusión en superficies a través del operador de Laplace-Beltrami, la obtención de coeficientes de difusión efectivos dependientes de la posición y el tiempo como parte de la aproximación de Fick-Jacobs al estudio de la difusión en canales estrechos y medios porosos, hay que recordar que la ecuación de Fick-Jacobs es similar a la ecuación de Smoluchowski, pero en lugar de fuerzas externas, contiene los efectos de la geometría de las fronteras conocidos como efectos entrópicos. La dependencia espacial en el coeficiente de difusión puede ser reflejo de la heterogeneidad y complejidad del medio lo que da lugar a la difusión anómala, la cual se ha estudiado ampliamente introduciendo operadores generalizados conocidos en su conjunto como derivadas fraccionarias. Por otra parte, al añadir términos de producción o decaimiento para una mezcla de especies que se difunden es posible obtener patrones espacio temporales fuera de equilibrio mediante el mecanismo de reacción-difusión de Turing. Los problemas inversos sobre procesos de difusión están relacionados con la determinación de las condiciones iniciales, las condiciones de frontera, las fuentes o los sumideros, ya sean móviles o estáticos, y para determinar propiedades físicas como los coeficientes de difusión y arrastre. La principal dificultad en la resolución de los problemas inversos en procesos de difusión es que son extremadamente mal planteados, es decir, puede suceder que no tenga solución, que las soluciones no sean únicas, o que la solución sea inestable, es decir, que perturbaciones arbitrariamente pequeñas en los datos del problema pueden conducir a errores amplificados en las soluciones. Afortunadamente, el crecimiento del error en las soluciones, es decir el mal planteamiento del problema, se puede controlar mediante métodos de regularización, los cuales buscan restaurar la estabilidad de las soluciones con relación a los datos; el método de regularización más común es el de Tikhonov. Por otro lado, la teoría de control en procesos de difusión, tiene como objetivo "llevar al sistema" a un estado preciso, a satisfacer un cierto criterio, o dirigir el estado del sistema para que se adhiera a una trayectoria

preestablecida. Si esto es posible, decimos que el sistema es controlable. Cabe resaltar que los problemas de controlabilidad, en general, tienen múltiples soluciones y para forzar la unicidad se buscan soluciones minimizando un funcional definido sobre el espacio de control.

## **2.5 Formación de recursos humanos.**

Se desea formar un alumno de algún nivel que podría ser desde licenciatura o especialidad, maestría o doctorado, siempre y cuando este alumno exista y esté interesado en trabajar en estos temas. También, de haber alumnos interesados, se desea tener proyectos de servicio social en partes específicas del proyecto para alumnos de las licenciaturas de la DCNI (o del DMAS).

## **2.6 Productos esperados. Artículos, congresos y tesis**

Se espera publicar un artículo por año en una revista internacional indexada en JCR con arbitraje estricto y factor de impacto relevante.

Se espera que cada participante presente un trabajo en al menos\* un evento académico nacional o internacional, por cada año de duración del proyecto.

\*Sujeto a la disponibilidad presupuestal.

Presentar al menos un producto de divulgación por cada participante y/o en conjunto.

## **2.7 Impacto esperado del proyecto (problemática nacional abordada).**

Nuestro proyecto impacta de forma directa en la problemática relacionada con la calidad y el acceso universal a la educación. Parte de los objetivos de este proyecto es la divulgación temprana (a nivel primaria, secundaria y preparatoria) de la ciencia en la comunidad mediante artículos y charlas de difusión del conocimiento. Adicionalmente, tanto la divulgación de la ciencia como nuestra participación en la generación de conocimiento e investigación y la formación de recursos humanos a nivel superior garantizan el acceso universal a la educación de calidad. De manera que, nuestro proyecto pretende impactar en la problemática nacional a través de la formación de recursos humanos de alta calidad que puedan dedicarse en un futuro a abordar las problemáticas nacionales.

Otro tema de interés nacional que abordaremos a través de nuestras actividades, es la igualdad de género. Pretendemos contribuir a eliminar esta

disparidad, participando activamente, con charlas y talleres científicos, en eventos como el “Día internacional de la mujer y la niña en la ciencia”, dedicados a la difusión de los trabajos hechos por científicas y para fomentar la participación de las alumnas de la comunidad.

Otra problemática, es el impulso a comunidades sostenibles. El desarrollo sostenible es viable en la medida de cómo se construyan y administren adecuadamente los espacios urbanos, en este sentido, mediante la mecánica estadística abordamos el modelado de los flujos vehicular y peatonal contribuyendo así a la generación de conocimiento y quizá proponiendo estrategias para la construcción y gestión de infraestructura adecuada que lleve a optimizar la movilidad en ciudades y otros asentamientos humanos.

Hemos de agregar que impactamos en el problema climático, con el estudio del flujo peatonal, el flujo vehicular y el estudio de fenómenos climáticos. La idea sería modelar matemáticamente estos fenómenos de forma tal que lleven a proponer medidas para la evaluación de estrategias de evacuación de espacios públicos, por otra parte, con el alertamiento temprano de fenómenos meteorológicos, así como el control de congestionamientos viales que generan importantes emisiones de contaminantes.

Los procesos de difusión pueden aplicarse a diferentes sistemas biológicos relacionados con problemas de salud, por mencionar dos ejemplos de sistemas que se han trabajado, los modelos de difusión en confinamiento pueden aplicarse para el estudio de la liberación controlada de fármacos. Las ecuaciones de reacción-difusión se han utilizado para estudiar diversas etapas en la evolución de tumores. Por esto, los estudios en esta área pueden llegar a impactar positivamente en los problemas nacionales de salud pública.

## **2.8 Recursos necesarios para el proyecto:**

### **Financiamiento e infraestructura física y humana actual en el proyecto:**

- 4 profesores investigadores del Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas
- No se cuenta con financiamiento externo ni de ningún tipo para la realización de este proyecto, más allá de aquel que la división y el departamento tengan a bien proporcionar, sujeto a su disponibilidad presupuestal.
- La infraestructura consiste en los pizarrones, aulas y material bibliográfico ya existente en la Unidad Cuajimalpa de la UAM, como es el Laboratorio de Cómputo Móvil e Inteligencia Artificial, así como el equipo de escritorio y de cómputo individual de cada profesor renovado de vez en cuando por el DMAS.

### **Presupuesto calendarizado.**

- ❖ Se solicitará recursos económicos para la participación de los investigadores en eventos académicos. La fecha dependerá de a qué eventos se asistirán cada año,



esto varía dependiendo cada evento aunque por lo general los eventos ocurren en los periodos de enero-febrero, mayo-julio y octubre-diciembre.

- ❖ Se solicitarán recursos para la publicación de resultados de este proyecto en revistas indexadas de acceso abierto. La fecha de solicitud dependerá de la fecha de aceptación de los trabajos, lo que puede ocurrir a lo largo de todo el año.

### 3. CALENDARIO DE ACTIVIDADES EN PERÍODOS TRIMESTRALES:

<b>Trimestre</b>	<b>Actividades</b>
<i>23 I</i>	Realizar investigación básica alrededor de los temas del proyecto incluyendo desarrollo de artículos de investigación, tesis de licenciatura y quizá de posgrado, servicios sociales.
<i>23P</i>	Realizar investigación básica alrededor de los temas del proyecto incluyendo desarrollo y escritura de artículos de investigación, tesis de licenciatura y quizá de posgrado, servicios sociales.
<i>23O</i>	Presentaciones en eventos especializados y de divulgación, tanto nacionales e internacionales. Presentación del informe correspondiente.
<i>24I</i>	Realizar investigación básica alrededor de los temas del proyecto incluyendo desarrollo, escritura y publicación de artículos de investigación, tesis de licenciatura y quizá de posgrado, servicios sociales.
<i>24P</i>	Realizar investigación básica alrededor de los temas del proyecto incluyendo desarrollo, escritura y publicación de artículos de investigación, tesis de licenciatura y quizá de posgrado, servicios sociales.
<i>24O</i>	Presentaciones en eventos especializados y de divulgación, tanto nacionales e internacionales. Presentación del informe correspondiente.
<i>25I</i>	Realizar investigación básica alrededor de los temas del proyecto incluyendo desarrollo, escritura y publicación de artículos de investigación, tesis de licenciatura y quizá de posgrado, servicios sociales.
<i>25P</i>	Realizar investigación básica alrededor de los temas del proyecto incluyendo desarrollo, escritura y publicación de artículos de investigación, tesis de licenciatura y quizá de posgrado, servicios sociales.

250	Presentaciones en eventos especializados y de divulgación, tanto nacionales e internacionales. Presentación del informe correspondiente.
-----	--

#### 4. Información para el seguimiento del proyecto:

##### 4.1 Calendarización de productos esperados a lo largo del proyecto:

Se espera la publicación de artículos y presentaciones de congresos anualmente.

Trimestre	Publicación de artículos	Presentaciones en congreso	Formación de recursos humanos
23I			
23P		1 asistencia a evento	
23O	1 artículo enviado	3 asistencias a eventos	
24I			
24P		1 asistencia a evento	
24O	1 artículo enviado	3 asistencias a eventos	1PT y/o tesis de licenciatura o posgrado
25I			
25P		1 asistencia a evento	
25O	1 artículo enviado	3 asistencias a eventos	1PT y/o tesis de licenciatura o posgrado

**4.2 Resultados esperados, según sea el caso, en términos de conocimiento producido, productividad científica, desarrollo tecnológico, formación de recursos humanos e impacto, o cualquier otra que, a juicio de la persona que funja como responsable y de las personas participantes en el proyecto, sirva para realizar una adecuada evaluación de seguimiento:**

- Se espera publicar un artículo por año en una revista internacional indexada en JCR con arbitraje estricto y factor de impacto relevante.
- Se espera que cada participante presente un trabajo en al menos\* un evento académico nacional o internacional, por cada año de duración del proyecto. Entre los eventos a los que se asistirá se encuentran: Congreso Nacional de Física, Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico, Encuentro de Modelado Matemático en Física y Geometría, Winter Meeting on Statistical Physics, StatPhys, Rarefied Gas Dynamics (RGD), Granada Seminar, International Conference on Statistical Physics, Diffusion Fundamentals, Fluctuation in small complex systems, Society for Industrial and Applied Mathematics Conferences  
\*Sujeto a la disponibilidad presupuestal.
- Se espera la participación de los miembros de este proyecto en diversos foros nacionales y/o internacionales en la difusión del conocimiento científico.
- Se espera la participación de al menos 2 estudiantes que puedan realizar su servicio social en alguno de los muchos vértices de este proyecto, o al menos 2 alumnos de Proyecto Terminal o, de ser el caso, de posgrado. Con esto se llevaría a cabo la formación de recursos humanos de alta calidad de nivel licenciatura y posgrado.