

# Actividad formativa de doctorado

## Modelos Matemáticos en la Ciencia y la Naturaleza

**Número de créditos:** 3

**Palabras clave:** Formación de patrones; Modelos matemáticos en Ecología y Dinámica Tumoral; Reacción-Difusión; Difusión anómala; Quimiotaxis; Microfluídica.

**Introducción:** En este curso se introducirán distintos paradigmas de modelado matemático con capacidad predictiva dirigidos al estudio de problemas que surgen en las distintas ciencias de la naturaleza. Se introducirán los modelos en contextos específicos de motivación junto con técnicas necesarias para realizar su análisis y su implementación numérica. Se presentarán todos estos contenidos a través del estudio de varias aplicaciones concretas de interés: dinámica de poblaciones ecológicas, cinética química, movilidad celular, procesos de agregación y fragmentación, fenómenos difusivos y de transporte, modelos de reacción difusión, micro/nanofluídica. El curso cubre la descripción mediante procesos estocásticos, sistemas dinámicos, ecuaciones diferenciales y en diferencias, junto con técnicas de análisis y simulación numérica, teoría de perturbaciones, separación de escalas de tiempo y reducción de modelos, límites de escala y tratamiento de datos sobre grafos y redes.

**Programa:** El desarrollo y complejidad de cada contenido se adaptará a la formación previa de los alumnos asistentes al curso. El programa de teoría se estructura en los siguientes bloques de conocimiento:

1. Introducción al modelado en Ciencias de la naturaleza. Perspectivas y paradigmas de modelado.
2. Sistemas de reacción-difusión.
  - 2.1 Dinámica de poblaciones. Aplicaciones en Ecología.
  - 2.2 Cinética química determinista. Ley de acción de masas. Cinética de Michaelis-Menten y ecuación de Hill.
  - 2.3 Movimiento por difusión. Formación de patrones. Modelos de morfogénesis de Turing.
  - 2.4 Descripción estocástica de sistemas de reacción-difusión.
  - 2.5 El papel de la IA y el “machine learning” en el modelado matemático.
3. Dinámica tisular.
  - 3.1 Introducción a la dinámica tumoral.
  - 3.2 Procesos de quimiotaxis. Modelos de tipo Keller-Segel y extensión a otras áreas científicas.
  - 3.3 Introducción a la biomecánica.
  - 3.4 Introducción a los modelos macroscópicos.
4. Modelos fluidos y viscoelásticos.
  - 4.1 Interacción fluido- partícula.
  - 4.2 Introducción a la micro/nanofluídica.
  - 4.3 Transporte electrocinético de partículas en microfluidos y nanofluidos.

4.4 De lo micro a lo macro: interacciones moleculares y límites de escala. Modelos sobre grafos y redes.

**Prácticas:** Se utilizarán modelos matemáticos y simulaciones numéricas para resolver problemas de física, química, biología y matemáticas, de forma intercalada con los desarrollos teóricos correspondientes.

- P1.** Introducción a la utilización del software de modelización numérica ([MatLab](https://es.mathworks.com/)<sup>1</sup>, [COMSOL Multiphysics](https://www.comsol.com/)<sup>2</sup>, [StochSS](http://stochss.org/)<sup>3</sup>, [FEniCSx](https://fenicsproject.org/)<sup>4</sup>, o [FreeFEM](https://freefem.org/)<sup>5</sup>).
- P2.** La ecuación de Hill, Cinética de Michaelis-Menten y Modelos de Saturación.
- P3.** Sistemas de Reacción-Difusión.
- P4.** Modelos de Keller-Segel para la Quimiotaxis
- P5.** Sistemas de Microfluídica.

### **Profesorado involucrado en el curso:**

Juan Soler, Departamento de Matemática Aplicada (1 crédito)

Juan Calvo, Departamento de Matemática Aplicada (1 crédito)

René Fábregas, Departamento de Matemática Aplicada (1 crédito)

**Seminarios:** el desarrollo de la materia se verá complementado con varios seminarios orientados al tratamiento de aplicaciones específicas en la frontera del conocimiento actual. Se prevén ponencias a cargo de:

- José M. Gómez, Estación Experimental de Zonas Áridas-CSIC, Departamento de Ecología
- Óscar Sánchez, Departamento de Matemática Aplicada (procesos de transcripción génica)
- David Poyato, Departamento de Matemática Aplicada (dinámica de grafos y redes en neurociencia)
- Juan Antonio Marchal, Departamento de Anatomía y Embriología Humana (aplicaciones de la microfluidica en biomedicina)
- Juan Campos, Departamento de Matemática Aplicada (epidemiología cuantitativa)

### **Referencias:**

- [1] M. Alber, A. Buganza Tepole, W.R. Cannon, et al. Integrating machine learning and multiscale modeling-perspectives, challenges, and opportunities in the biological, biomedical, and behavioral sciences. *npj Digit. Med.* 2 (2019), 115.
- [2] F. Black, M. Scholes, The pricing of options and corporate liabilities. *J Polit Econ* 81 (1973), 637-654; reprinted in F. Black, M. Scholes, *Financial Risk Measurement and Management*, International Library of Critical Writings in Economics (Edward Elgar, Cheltenham, UK) 267 (2012), 100-117.
- [3] D. Bray: *Cell motility*, Taylor and Francis, 2001.
- [4] R. E. Bellman, *Dynamic Programming*. Princeton Univ Press; Princeton: 1957

---

<sup>1</sup> <https://es.mathworks.com/>

<sup>2</sup> <https://www.comsol.com/>

<sup>3</sup> <http://stochss.org/>

<sup>4</sup> <https://fenicsproject.org/>

<sup>5</sup> <https://freefem.org/>

- [5] R. Escalante, J.J. Vicente, Dictyostelium discoideum: a model system for differentiation and patterning. *Int. J. Dev. Biol.* 44 (2000), 819-835.
- [6] I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville. *Deep Learning*. MIT Press, Cambridge, 2016.
- [7] J. Han, A. Jentzen, W. E, Solving high-dimensional partial differential equations using deep learning, *Proc Natl Acad Sci U S A.* 115(34) (2018), 8505-8510.
- [8] M. Herrero, The Mathematics of chemotaxis. *Handbook of Differential Equations, Evolutionary equations*, Vol. 3. Eds. C.M.Dafermos, E. Feireisl, Elsevier 2007.
- [9] S Kondo, T. Miura T. Reaction-diffusion model as a framework for understanding biological pattern formation. *Science (80- )*. 2010;329(5999):1616-1620.
- [10] A.D. Lander, Q. Nie, F.Y.-M. Wan, Do morphogen gradients arise by diffusion?, *Developmental Cell* 2 (2002), 785–796.
- [11] PA. Lawrence, Morphogens: How big is the big picture? *Nat Cell Biol.* 2001;3(7).
- [12] Y. LeCun, Y. Bengio, G. Hinton. Deep learning. *Nature*, 521 (2015), 436-444.
- [13] D. Li, *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*, Springer US, 2008.
- [14] H. Liu, P. Markowich, Selection dynamics for deep neural networks, arXiv:1905.09076
- [15] R. Metzler, J. Klafter, The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics Reports* 339 (2000), 1-77.
- [16] J.D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer 2002.
- [17] J. Newman and K. E. Thomas-Alyea, *Electrochemical Systems*, Wiley, 2012.
- [18] B. Perthame, *Transport Equations in Biology*, Birkhäuser Verlag, Basel-Boston-Berlin, 2007.
- [19] S. Qian and Y. Ai, *Electrokinetic Particle Transport in Micro-/Nanofluidics: Direct Numerical Simulation Analysis*, CRC Press, 2012.
- [20] A.M. Turing, The chemical basis of morphogenesis. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. B Biol. Sci.* 237 (1952), 37–72.

**Horario:**

Adaptable a las necesidades de los matriculados

- Lunes 5 y 12: 9-10:30; 11-12:30; 16:00-17:30
- Martes 6 y 13: 10-11:30; 16-17:30
- Miércoles 7 y 14: 9-10:30;11-12:30
- Jueves 8 y 15: 10-11:30
- Viernes 9 y 16: 9-10:30; 11-12:30

**Lugar:** aula de computación FisyMat, Facultad de Ciencias (junto al salón de grados)

**Matriculación:** del 17 al 26 de Enero.