

Modelización y Simulación Numérica en Mecánica y Materiales

Ana Carpio, Universidad Complutense de Madrid

Agosto 2023

1 Contenido

- Testado no destructivo de materiales
 - Testado con ondas acústicas
 - Imagen con ondas amortiguadas y térmicas
 - Holografía e imagen por microondas
 - Tomografía de impedancia eléctrica
 - Cuantificación de incertidumbre
- Comportamiento mecánico de proteínas modulares
 - Plegamiento y desplegamiento
 - Curvas de fuerza-extensión
- Defectos en grafeno
 - Dislocaciones y defectos
 - Ondulaciones
- Dislocaciones en cristales
 - Modelos continuos para apilamientos de dislocaciones
 - Modelos discretos para dislocaciones aisladas
 - Nucleación de dislocaciones
- Nucleación de partículas y burbujas
 - Nucleación homogénea de partículas
 - Nucleación heterogénea
 - * Formación de burbujas de helio en residuos radioactivos
 - * Precipitación a partir de vapor y partículas

- Comportamiento mecánico y formación de patrones en agregados biológicos.
 - Espirales y filamentos en tubos.
 - Ondulaciones y champiñones en canales.
 - Arrugas en superficies.
- Propagación de impulsos eléctricos en semiconductores
 - Modelos discretos para dinámica de paredes de dominio en superredes
 - Modelos hiperbólicos y cinéticos para el efecto Gunn

Referencias

2 Testado no destructivo de materiales

En muchas situaciones necesitamos extraer información sobre la estructura interna de un medio a partir de observaciones externas indirectas. Se han desarrollado numerosas herramientas para distintos fines: prospecciones geofísicas, testado de materiales, detección de objetos . . . Todas ellas se basan en emitir algún tipo de onda que interactúa con el medio en estudio y a continuación se mide el resultado en una red de receptores. Conociendo los datos medidos en los receptores y las ondas emitidas, se trata de reconstruir la geometría interna y/o las propiedades materiales del medio. Consideramos aquí dos técnicas de testado no destructivo de materiales basadas en el uso de ondas acústicas, ondas térmicas, electromagnéticas y elásticas.

2.1 Testado con ondas acústicas

Consideremos un medio que contiene inclusiones en su interior. Para simplificar consideramos que la estructura del medio está definida por $\Omega_e := \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i$, donde $\Omega_i \subset \mathbb{R}^2$ son las inclusiones. Ω_i es un dominio abierto con frontera regular $\Gamma := \partial\Omega_i$ no necesariamente conexo. Puede constar de un número indeterminado de componentes aisladas $\Omega_i = \cup_{j=1}^d \Omega_{i,j}$ donde $\Omega_{i,j}$ son abiertos conexos que satisfacen $\overline{\Omega}_{i,l} \cap \overline{\Omega}_{i,j} = \emptyset$ para $l \neq j$.

Iluminamos esta configuración mediante una onda incidente armónica plana $U_{inc}(\mathbf{x}, t) = e^{i\omega t} \exp(i\kappa^0 \mathbf{x} \cdot \mathbf{d})$ con frecuencia ω , número de onda κ^0 y dirección de propagación \mathbf{d} , $|\mathbf{d}| = 1$. La onda incidente interactúa con el medio y los objetos, generando una onda dispersa y una onda transmitida. El campo de onda total se mide en detectores situados en Γ_{meas} , lejos de las inclusiones. Γ_{meas} puede ser un círculo que engloba las inclusiones o una colección de receptores en reconstrucciones más realistas. Normalmente, se conoce el campo total en una colección de receptores Γ_{meas} para diversas ondas incidentes \mathbf{d}^j .

La interacción entre las inclusiones, el medio y la onda incidente queda descrita mediante un modelo de transmisión para propagación de ondas acústicas. Al ser la onda incidente armónica en tiempo, la solución también es armónica

en tiempo $U(\mathbf{x}, t) = e^{i\omega t}u(\mathbf{x}, t)$. La amplitud $u = u_{inc} + u_{sc}$ en Ω_e y la amplitud transmitida $u = u_{tr}$ en Ω_i satisfacen

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\alpha_e \nabla u) + \lambda_e^2 u = 0, & \text{en } \Omega_e, \\ \nabla \cdot (\alpha_i \nabla u) + \lambda_i^2 u = 0, & \text{en } \Omega_i, \\ u^- - u^+ = 0, & \text{en } \Gamma, \\ \alpha_i \partial_{\mathbf{n}} u^- - \alpha_e \partial_{\mathbf{n}} u^+ = 0, & \text{en } \Gamma, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r^{1/2} (\partial_r (u - u_{inc}) - i\kappa^0 (u - u_{inc})) = 0, & r = |\mathbf{x}|, \end{cases}$$

con parámetros

$$\lambda_e(\mathbf{x}) \geq \lambda_e^1 > 0, \quad \lambda_i(\mathbf{x}) \geq \lambda_i^1 > 0, \quad \alpha_e(\mathbf{x}) \geq \alpha_e^1 > 0, \quad \alpha_i(\mathbf{x}) \geq \alpha_i^1 > 0.$$

El vector normal \mathbf{n} exterior a Ω_e apunta al interior de Ω_i . u^+ y u^- denotan los límites de u desde el exterior y el interior de Ω_i respectivamente. $\partial_{\mathbf{n}}$ y ∂_r representan derivadas normales y radiales.

Conociendo los valores de u en un número de receptores, u_{meas} , para diferentes ondas incidentes deseamos recuperar información sobre las inclusiones presentes en el medio. Esto nos conduce al problema de optimización

$$J(\mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i) := \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M \int_{\Gamma_{meas}} |u^j - u_{meas}^j|^2 dl,$$

siendo u^j las soluciones de M problemas de transmisión con ondas incidentes $u_{inc}^j(\mathbf{x}) = \exp(i\kappa^0 \mathbf{x} \cdot \mathbf{d}^j)$. Este funcional depende de la variable Ω_i a través del problema de transmisión, que actúa como una restricción.

Las derivadas topológicas del funcional de coste nos permiten obtener información sobre las inclusiones. Se define la derivada topológica de un funcional de forma $\mathcal{J}(\mathcal{R})$ como

$$D_T(\mathbf{x}, \mathcal{R}) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{J}(\mathcal{R}_\varepsilon) - \mathcal{J}(\mathcal{R})}{\mathcal{V}(\varepsilon)}, \quad \mathbf{x} \in \mathcal{R},$$

donde \mathcal{R}_ε es \mathcal{R} menos una bola centrada en \mathbf{x} con radio ε . $\mathcal{V}(\varepsilon)$ es la medida de la bola. En nuestro caso, $\mathcal{V}(\varepsilon) = -\pi\varepsilon^2$. Obtenemos fórmulas más fáciles de implementar mediante desarrollos asintóticos [22, 24]:

$$\begin{aligned} D_T(\mathbf{x}, \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^M \operatorname{Re} \left[\frac{2(\alpha_e(\mathbf{x}) - \alpha_i(\mathbf{x}))}{1 + \frac{\alpha_i(\mathbf{x})}{\alpha_e(\mathbf{x})}} \nabla u^j(\mathbf{x}) \nabla \bar{p}^j(\mathbf{x}) \right. \\ \left. + (\lambda_i^2(\mathbf{x}) - \lambda_e^2(\mathbf{x})) u^j(\mathbf{x}) \bar{p}^j(\mathbf{x}) \right], \end{aligned}$$

para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i$ cuando los coeficientes son funciones regulares. El campo directo u^j es solución del problema de transmisión con la j -ésima onda incidente.

El campo adjunto p^j es solución de

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla \cdot (\alpha_e \nabla p^j) + \lambda_e^2 p = (u_{meas}^j - u^j) \delta_{\Gamma_{meas}}, & \text{en } \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}_i, \\ \nabla \cdot (\alpha_i \nabla p^j) + \lambda_i^2 p^j = 0, & \text{en } \Omega_i, \\ (p^j)^- - (p^j)^+ = 0, & \text{en } \partial\Omega_i, \\ \alpha_i \partial_{\mathbf{n}}(p^j)^- - \alpha_e \partial_{\mathbf{n}}(p^j)^+ = 0, & \text{en } \partial\Omega_i, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r^{1/2} (\partial_r p^j + i\kappa^0 p^j) = 0. & \end{array} \right.$$

$\delta_{\Gamma_{meas}}$ es una masa de Dirac con soporte en Γ_{meas} . Visualizando la derivada topológica para $\Omega_i = \emptyset$, las inclusiones suelen estar localizadas en regiones de grandes valores negativos de la derivada topológica. Un procedimiento iterativo permite mejorarla [24, 30, 45]. Se pueden considerar condiciones diferentes en la interfaz, como Dirichlet o Neumann, cuando se trata de inclusiones ‘duras’ o ‘blandas’ al sonido [31, 22].

2.2 Imagen mediante ondas amortiguadas y ondas térmicas

En determinados medios, las ondas acústicas están sujetas a efectos de amortiguación. Por tanto, obedecen ecuaciones de ondas amortiguadas. Cuando la onda incidente es armónica en tiempo, su amplitud satisface ecuaciones de Helmholtz con números de onda complejos. En este caso, el alcance se limita únicamente a objetos próximos a la superficie desde donde se emiten las ondas. La resolución mejora al superponer frecuencias acústicas pesando convenientemente sus contribuciones [63].

Con las ondas térmicas se produce una situación similar. Se puede aplicar una estrategia similar a ondas térmicas dependientes del tiempo [26], considerando problemas de transmisión para ondas térmicas

$$\left\{ \begin{array}{ll} U_t - \kappa_e \Delta U = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N \setminus \overline{\Omega}_i \times (0, \infty), \\ U_t - \alpha_i \kappa_i \Delta U = 0, & \text{en } \Omega_i \times (0, \infty), \\ U^- - U^+ = U_{inc}, & \text{en } \partial\Omega_i \times (0, \infty), \\ \alpha_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} U^- - \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} U^+ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} U_{inc}, & \text{en } \partial\Omega_i \times (0, \infty), \\ U(\cdot, 0) = 0, & \text{en } \mathbb{R}^N, \end{array} \right.$$

Los métodos de derivadas topológicas nos permiten aproximar las inclusiones solución del problema inverso empleando estas ondas [26]. Combinando estas técnicas con métodos de gradiente podemos encontrar, no sólo la geometría de los objetos, sino también sus constantes materiales κ_i , α_i , véase [46].

2.3 Tomografía de impedancia eléctrica

La tomografía de impedancia eléctrica produce imágenes de las propiedades electromagnéticas de un medio aplicando corrientes eléctricas a la superficie exterior y midiendo el voltaje en ella. Su rango de aplicaciones es amplio, porque tejidos

diferentes tienen distintas propiedades electromagnéticas. Por ejemplo, podemos pensar en diagnosticar problemas pulmonares (embolias, coágulos, acumulación de fluidos) o flujo sanguíneo (sangrado interno, funcionamiento del corazón), explorar la presencia de cáncer de mama, determinar las fronteras entre células vivas y muertas, detectar cambios de temperatura en situaciones de hipertermia, ...

En términos matemáticos, deseamos reconstruir la admitividad γ dentro de Ω a partir de medidas en su superficie. Asumiendo que Ω contiene una colección de inclusiones $\Omega_{i,j}$, la admitividad γ es una función definida a trozos en Ω con discontinuidades en las paredes de las inclusiones. Sea $\Omega_i = \cup_{j=1}^d \Omega_{i,j}$ donde $\Omega_{i,j}$ son dominios abiertos y conexos que satisfacen $\bar{\Omega}_{i,l} \cap \bar{\Omega}_{i,j} = \emptyset$ para $l \neq j$. La admitividad de la matriz $\Omega_e = \Omega \setminus \bar{\Omega}_i$ es γ_e . Definimos γ_i en Ω_i mediante $\gamma_i = \gamma_{i,j}$ en $\Omega_{i,j}$. Para simplificar, asumimos que γ_e es conocido. Para reconstruir las inclusiones a partir de los datos medidos, consideramos el problema de optimización [40]

$$J(\Omega_i, \gamma_i) = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} |u - V_{meas}|^2 dl$$

donde u es solución de

$$\begin{cases} \nabla \cdot \gamma_e \nabla u = 0 & \text{en } \Omega_e, & \nabla \cdot \gamma_i \nabla u = 0 & \text{en } \Omega_i, \\ u^- - u^+ = 0 & \text{en } \partial\Omega_i, & \gamma_i \partial_{\mathbf{n}} u^- - \gamma_e \partial_{\mathbf{n}} u^+ = 0 & \text{en } \partial\Omega_i, \\ \gamma_e \partial_{\mathbf{n}} u = j & \text{on } \partial\Omega. \end{cases}$$

El vector normal unitario \mathbf{n} apunta hacia el exterior de Ω_e pero el interior de Ω_i . Denotamos los valores límite de u en $\partial\Omega_i$ desde dentro y fuera de Ω_i como u^- y u^+ , respectivamente. Los métodos de derivadas topológicas nos permiten aproximar las soluciones de este problema inverso. respectively. En lugar de señales electromagnéticas, otros métodos monitorizan la temperatura para localizar tejidos enfermos. Se pueden emplear técnicas topológicas para resolverlos empleando ondas térmicas gobernadas por ecuaciones del calor [26, 31].

2.4 Holografía e imagen por microondas

La holografía digital es una herramienta prometedora para obtener y procesar imágenes tri-dimensionales de células vivas y materia blanda a gran velocidad. Puede alcanzar una alta resolución temporal (microsegundos) y espacial (nanómetros), al tiempo que evita el uso de tintes tóxicos y marcadores fluorescentes. Los hologramas son patrones de interferencia luminosos que contienen información sobre las posiciones tridimensionales y las propiedades ópticas de un objeto o conjunto de objetos.

Cuando las ondas emitidas son armónicas en tiempo, es decir, $\mathcal{E}_{\text{inc}}(\mathbf{x}, t) = \text{Re}[e^{-i\omega t} \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{x})]$, la onda resultante también es armónica en tiempo $\mathcal{E}_{\Omega, \kappa}(\mathbf{x}, t) =$

$\text{Re}[e^{-i\omega t}\mathbf{E}_{\Omega,\kappa}(\mathbf{x})]$ y la amplitud compleja $\mathbf{E}_{\Omega,\kappa}(\mathbf{x})$ satisface una versión estacionaria de las ecuaciones de Maxwell

$$\begin{aligned} \mathbf{curl}\left(\frac{1}{\mu_e}\mathbf{curl}\mathbf{E}\right) - \frac{\kappa_e^2}{\mu_e}\mathbf{E} &= 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}, \\ \mathbf{curl}\left(\frac{1}{\mu_i}\mathbf{curl}\mathbf{E}\right) - \frac{\kappa_i^2}{\mu_i}\mathbf{E} &= 0 \quad \text{in } \Omega, \\ \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}^- &= \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}^+, \quad \text{on } \partial\Omega, \\ \frac{1}{\mu_i}\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{curl}\mathbf{E}^- &= \frac{1}{\mu_e}\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{curl}\mathbf{E}^+, \quad \text{on } \partial\Omega, \\ \lim_{|\mathbf{x}|\rightarrow\infty} |\mathbf{x}| \left| \mathbf{curl}(\mathbf{E} - \mathbf{E}_{\text{inc}}) \times \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} - i\kappa_e(\mathbf{E} - \mathbf{E}_{\text{inc}}) \right| &= 0, \end{aligned}$$

donde $\mu_i, \varepsilon_i, \kappa_i$ y $\mu_e, \varepsilon_e, \kappa_e$ son las permeabilidades, permitividades y números de onda $\kappa^2 = \omega^2\varepsilon\mu$ de los objetos y el medio ambiente, respectivamente. En medios biológicos, $\mu_i \sim \mu_e \sim \mu_0$, siendo μ_0 la permeabilidad del vacío. Los signos + y - denotan valores desde dentro y fuera de Ω . El vector $\hat{\mathbf{n}}$ representa el vector normal exterior. Esto define el llamado problema directo.

El problema de imagen inverso [53] se formula como: Encontrar Ω tal que se verifica

$$\mathbf{I}_{\text{meas}}(\mathbf{x}_j) = |\mathbf{E}_{\Omega}(\mathbf{x}_j)|^2, \quad j = 1, \dots, N.$$

Alternativamente, podemos reformular el problema como: Encontrar el mínimo global de

$$J(\mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N |\mathbf{I}_{\Omega}(\mathbf{x}_j) - \mathbf{I}_{\text{meas}}(\mathbf{x}_j)|^2.$$

donde $\mathbf{I}_{\Omega} = |\mathbf{E}_{\Omega}|^2$ y \mathbf{E}_{Ω} son soluciones del problema directo. Podemos encontrar aproximaciones iniciales a los objetos mediante técnicas de derivadas topológicas [53, 55]. Para estimar las propiedades del material cuando se desconocen podemos usar métodos de tipo gradiente, si bien requieren regularización para funcionar mínimamente [55].

Los métodos basados en iteraciones tipo ‘gradiente’ se suelen estancar en estos problemas antes de converger, tanto los basados en métodos de conjuntos de nivel, deformaciones o derivadas topológicas. Adicionalmente, el funcional que estamos usando puede presentar mínimos locales espúreos. Esto se soluciona regularizando el funcional por un lado y empleando métodos rápidos de Gauss-Newton por otro, siempre que el punto de partida sea lo suficientemente bueno. En una situación en la que queremos identificar un número indeterminado de objetos, la aproximación de partida puede contener un número incorrecto de componentes. Esto es algo que podemos solucionar actualizando el número de componentes mediante cálculos de derivadas topológicas adicionales cada vez que el proceso se estanca [59]. Una estrategia efectiva, propuesta en [59] consiste en identificar en primer lugar una aproximación inicial, dada por una parametrización q_{in} de los objetos, mediante derivadas topológicas. Con ella se regulariza el funcional de coste. Para objetos estrellados se considera una regularización de tipo Tikhonov, es decir, se añade un término dependiente de

las parametrizaciones de los objetos de la forma $\|q - q_{\text{in}}\|_{H^s}$, siendo H^s un espacio de Sobolev adecuado. A continuación se optimiza mediante un método de Gauss-Newton iterativamente regularizado (el peso del término de Tikhonov va decreciendo al iterar). Cuando la iteración se estanca en una parametrización q_{ap} , se calcula la derivada topológica del funcional de coste sin regularizar con objeto parametrizado por q_{ap} . Este proceso suele identificar nuevas componentes que se añaden a la parametrización y pasan a ser la nueva q_{in} . Se reinicializa el método de Gauss-Newton iterativamente regularizado y así sucesivamente hasta que el coste decrece por debajo de la tolerancia que hayamos fijado.

Estos esquemas híbridos que combinan derivadas topológicas y métodos de Gauss-Newton iterativamente regularizados son capaces de producir buenas reconstrucciones del número de objetos, su tamaño, ubicación y forma [59, 65]. La holografía es un caso extremo en el cual se usa una única onda incidente y los datos son limitados. Cuando se dispone de información procedente de múltiples ondas (procedentes de direcciones distribuidas y medidas en receptores distribuidos en un amplio rango de ángulos), la aproximación inicial que proporciona la derivada topológica constituye ya una buena reconstrucción en sí mismas, véase [62] para ensayos con microondas.

2.5 Cuantificación de incertidumbre

Los métodos presentados previamente son deterministas. Dados datos medidos, los métodos deterministas buscan objetos que generen datos sintéticos lo más próximos posible a los datos medidos. Sin embargo, los datos medidos están corrompidos por ruido, ruido que representa el desconocimiento del dispositivo de medida y la formulación del problema. Los métodos deterministas proporcionan una solución para cada realización de los datos. No dan información sobre cómo puede cambiar la solución para otras realizaciones, ni sobre qué confianza podemos tener sobre la solución propuesta. Las formulaciones Bayesianas del problema inverso se usan para cuantificar la incertidumbre en los resultados propuestos [61].

La formulación Bayesiana considera todas las incógnitas del problema inverso como variables aleatorias. Dado un holograma \mathbf{I}_{meas} buscamos un vector $\boldsymbol{\nu}$ de parámetros de dimensión finita que caracteriza los objetos bajo estudio. Asumiendo la presencia de L objetos, $\boldsymbol{\nu}$ está formado por L blocks, uno por objeto. Usando la fórmula de Bayes

$$p_{\text{pt}}(\boldsymbol{\nu}) := p(\boldsymbol{\nu}|\mathbf{I}_{\text{meas}}) = \frac{p(\mathbf{I}_{\text{meas}}|\boldsymbol{\nu})}{p(\mathbf{I}_{\text{meas}})} p_{\text{pr}}(\boldsymbol{\nu}),$$

donde $p_{\text{pr}}(\boldsymbol{\nu})$ representa la probabilidad a priori de las variables, que incorpora el conocimiento previo sobre ellas, mientras $p(\mathbf{I}_{\text{meas}}|\boldsymbol{\nu})$ es la probabilidad condicional de medir datos \mathbf{I}_{meas} dados parámetros $\boldsymbol{\nu}$. La solución del problema Bayesiano inverso es la probabilidad a posteriori $p_{\text{pt}}(\boldsymbol{\nu}|\mathbf{I}_{\text{meas}})$ de tener objetos descritos por parámetros $\boldsymbol{\nu}$ dados los datos. Muestreando esta distribución, obtenemos información estadística sobre los valores más probables

de los parámetros con incertidumbre cuantificada. Las técnicas de cadenas de Markov Monte Carlo nos proporcionan una herramienta para extraers y visualizar esta información [61]. Los problemas que dependen del tiempo, a través de ecuaciones de ondas, por ejemplo, se pueden tratar de forma similar [66].

3 Mecánica de proteínas modulares

La elasticidad de tejidos en organismos vivos resulta de la extensión y contracción de proteínas ensambladas en estructuras rígidas, que se mueven en respuesta a fuerzas aplicadas. Las proteínas modulares, tales como la titina, que desempeña un papel importante en la contracción muscular, la ubiquitina u otras proteínas relevantes, están formadas por módulos individuales repetidos unidos por péptidos. Una versión sencilla de la elasticidad de tejidos tiene lugar en los experimentos con moléculas individuales, como los experimentos con Microscopía de Fuerza Atómica (AFM), en los cuales una biomolécula se sujeta entre dos plataformas rígidas cuyo movimiento se controla. Los experimentos a fuerza fija o longitud fija proporcionan información sobre la estructura de la proteína, y se pueden interpretar mediante modelos matemáticos sencillos [39, 44, 47, 49].

En experimentos reales, la punta del voladizo del microscopio puede sujetar la proteína desde cualquier punto. Por tanto, el número N de monómeros de la proteína expuestos a la fuerza puede variar de uno a todos. Sean x_j , $j = 1, \dots, N$ las posiciones de los monómeros. Las extensiones relativas de los monómeros son $u_j = x_{j+1} - x_j$, $j = 1, \dots, N$. Fuerzas externas $\pm F$ aplicadas a los extremos de la cadena de monómeros crean un potencial $-F \sum_{j=0}^N u_j = Fx_0 - Fx_{N+1}$ y una fuerza efectiva externa igual F en cada extensión u_j . La energía libre del monómero j es $V(u_j; \delta_j)$, siendo $V(u; \delta)$ un potencial de doble pozo, cuyos mínimos corresponden al estado completamente plegado (entálpico) o desplegado (entrópico). El parámetro δ varía de monómero a monómero. Los monómeros se conectan al vecino siguiente mediante muelles armónicos (los enlaces) y pueden experimentar movimiento Browniano en el líquido en el que están inmersos. Asumimos que los efectos de inercia se pueden despreciar y, por tanto, que su dinámica es sobreamortiguada. El modelo resultante es [49]:

$$\begin{aligned} \gamma_j \dot{u}_j &= F - V'(u_j; \delta_j) - k_{j+1}(u_j - u_{j+1}) - k_j(u_j - u_{j-1}) + \sqrt{2k_B T \gamma_j} \xi_j(t), \\ \langle \xi_j(t) \rangle &= 0, \quad \langle \xi_j(t) \xi_l(t') \rangle = \delta_{jl} \delta(t - t'), \quad j = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Denotamos $V'(u; \delta) = dV(u; \delta)/du$, $k_j = k$ para $j = 1, \dots, N + 1$. Como explicamos anteriormente, la fuerza F generada por el microscopio afecta igualmente el potencial efectivo de todos los monómeros situados entre la punta del microscopio y la plataforma de sujeción. Hay dos posibles marcos experimentales: (i) la fuerza F se mantiene constante (experimentos a fuerza fija) y (ii) la longitud total de la cadena se controla y mantiene constante o se aumenta a una tasa uniforme (experimentos de fuerza-extensión). En este segundo caso, $F(t)$ es una nueva incógnita que ha de ser calculada. Las condiciones de contorno

para la cadena son

$$u_0 = 0, \quad u_N = 0.$$

Suponemos que los monómeros situados en x_1 y x_N están rígidamente pegados a la plataforma de modo que $u_0 = u_N = 0$. En el caso (ii) necesitamos añadir como restricción que la longitud total de la cadena de monómeros, L , se mantiene constante, lo que nos lleva a añadir la ecuación siguiente

$$\sum_{j=1}^N u_j = x_{N+1} - x_0 = L.$$

En experimentos de fuerza-extensión $L = \mu t + \nu$, con μ positivo.

3.1 Plegamiento y desplegamiento

En un experimento a fuerza fija típico, la fuerza se incrementa de entrada, se mantienen a un valor alto hasta que todos los elementos se despliegan y entonces se baja de forma abrupta a un valor pequeño. Inmediatamente después del aumento de fuerza, se sigue un despliegamiento abrupto o escalonado de la poliproteína. Por otra parte, después de que la fuerza disminuye, el repliegamiento de módulos de proteína individuales y para homopoliproteínas, el plegamiento no muestra trazas de plegamiento secuencial para la poliproteína.

Consideramos que muelles infinitamente rígidos conectan la proteína con el voladizo del microscopio y la plataforma, es decir, $u_0 = u_1$, $u_{N+1} = u_N$. A fuerza externa nula y temperatura T , usamos el potencial efectivo:

$$V(u) = U_0 \left[\left(1 - e^{-2b(u-R_c)/R_c} \right)^2 - 1 \right] + \frac{k_B T L_c}{4P} \left(\frac{1}{1 - \frac{u}{L_c}} - 1 - \frac{u}{L_c} + \frac{2u^2}{L_c^2} \right).$$

Se trata de una cúbica, con tres ceros, dos de los cuales son estables. Dada F , el menor $u^{(1)}(F)$ y el mayor $u^{(3)}(F)$ de los ceros representan los estados estables plegado y desplegado para cada módulo. Los fenómenos de plegamiento y despliegamiento se pueden explicar cualitativamente y cuantitativamente en términos de anclaje y desanclaje de frentes en este sistema [47].

3.2 Curvas de fuerza-extensión

A medida que se tira de la poliproteína, uno o más módulos se despliegan cuando se alcanza una fuerza crítica que mide su estabilidad mecánica. Conviene señalar que el despliegamiento de un dominio es un fenómeno estocástico que ocurre en cierto rango de fuerzas. Estos experimentos a longitud controlada proporcionan curvas fuerza-extensión en forma de dientes de sierra. Curvas similares se obtienen estirando ácidos nucleicos (DNA) u otras biomoléculas. Cuando se barre

la curva fuerza-extensión a una tasa finita, se observan saltos estocásticos entre estados plegados y desplegado, y la fuerza de desplegamiento crece con la tasa de extensión.

Al estudiar las soluciones estacionarias de modelos del tipo anteriormente propuesto [44], tenemos una restricción global en la formulación de minimización que representa los valores de equilibrio de las extensiones. Observamos que la curva de fuerza-extensión tiene como resultado ramas múltiples en ciertos rangos de fuerzas. La estabilidad de estas ramas está gobernada por la energía libre. Hay una serie de transiciones de fase en ciertos valores de la longitud total, en las cuales la energía libre es continua pero su primera derivada, la fuerza, tiene un salto finito. Esto nos lleva a observar dientes de sierra. Este comportamiento al observado en proteínas y otros sistemas complejos. El efecto del ruido y de la presencia de monómeros asimétricos se analiza en [49].

Un modelo sencillo dado por un oscilador acoplado a spins de Ising con dinámica de Glauber [37] en contacto con un baño térmico puede explicar cualitativamente algunas características de las curvas fuerza-extensión medidas en experimentos con biomoléculas [39]. Las curvas fuerza-extensión para el DNA corresponden a diferentes tasas de barrido de las curvas de la transición de primera fase del sistema spin-oscilador con la fuerza como parámetro de control. Sin embargo, este modelo es demasiado sencillo para explicar las curvas en dientes de sierra observadas en experimentos de longitud controlada.

4 Defectos en grafeno

Grafeno es el nombre de un material bidimensional con propiedades mecánicas y electrónicas prometedoras. Su estructura cristalina consiste en un retículo hexagonal formado por átomos de carbón en dos dimensiones. Distintos tipos de defectos alteran su estructura, influenciando sus propiedades mecánicas y electrónicas.

4.1 Dislocaciones y defectos

Los modelos de elasticidad discreta periodizada [25, 23] describen defectos típicos en grafeno y su dinámica, explicándolos en términos de dislocaciones.

Consideremos un retículo hexagonal plano e ignoremos las desviaciones en la dirección vertical. En el límite continuo, las deformaciones en el plano se describen mediante las ecuaciones de Navier de la elasticidad lineal para el vector de desplazamiento (u, v) ,

$$\begin{aligned}\rho_2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y}, \\ \rho_2 \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} &= \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y},\end{aligned}$$

donde ρ_2 es la densidad de masa en dos dimensiones λ y μ las constantes de Lamé bidimensionales ($\lambda = C_{12}$, $\mu = C_{66}$, $\lambda + 2\mu = C_{11}$).

A nivel de la red, obtenemos un modelo de elasticidad discreta para la dinámica de los átomos como sigue. Consideramos un punto A en la red hexagonal con coordenadas (x, y) . Sus 9 (3+6) vecinos próximos tienen coordenadas

$$\begin{aligned} n_1 &= \left(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2\sqrt{3}}\right), n_2 = \left(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a}{2\sqrt{3}}\right), n_3 = \left(x, y + \frac{a}{\sqrt{3}}\right), \\ n_4 &= \left(x - \frac{a}{2}, y - \frac{a\sqrt{3}}{2}\right), n_5 = \left(x + \frac{a}{2}, y - \frac{a\sqrt{3}}{2}\right), n_6 = (x - a, y), \\ n_7 &= (x + a, y), n_8 = \left(x - \frac{a}{2}, y + \frac{a\sqrt{3}}{2}\right), n_9 = \left(x + \frac{a}{2}, y + \frac{a\sqrt{3}}{2}\right). \end{aligned}$$

Definimos los siguientes operadores que actúan en función de las coordenadas (x, y) del nodo A :

$$\begin{aligned} Tu &= [u(n_1) - u(A)] + [u(n_2) - u(A)] + [u(n_3) - u(A)], \\ Hu &= [u(n_6) - u(A)] + [u(n_7) - u(A)], \\ D_1u &= [u(n_4) - u(A)] + [u(n_9) - u(A)], \\ D_2u &= [u(n_5) - u(A)] + [u(n_8) - u(A)], \end{aligned}$$

Realizando desarrollos de Taylor de estas combinaciones de diferencias finitas en torno a (x, y) obtenemos

$$\begin{aligned} Tu &\sim (\partial_x^2 u + \partial_y^2 u) \frac{a^2}{4}, \\ Hu &\sim (\partial_x^2 u) a^2, \\ D_1u &\sim \left(\frac{1}{4} \partial_x^2 u + \frac{\sqrt{3}}{2} \partial_x \partial_y u + \frac{3}{4} \partial_y^2 u\right) a^2, \\ D_2u &\sim \left(\frac{1}{4} \partial_x^2 u - \frac{\sqrt{3}}{2} \partial_x \partial_y u + \frac{3}{4} \partial_y^2 u\right) a^2, \end{aligned}$$

cuando $a \rightarrow 0$. A continuación, introducimos en las ecuaciones de movimiento Hu/a^2 , $(4T - H)u/a^2$ y $(D_1 - D_2)u/(\sqrt{3}a^2)$ en lugar de $\partial_x^2 u$, $\partial_y^2 u$ y $\partial_x \partial_y u$, respectivamente, con sustituciones similares para las derivadas de v . En cada punto de la red obtenemos las ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned} \rho_2 a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= 4\mu Tu + (\lambda + \mu) Hu + \frac{\lambda + \mu}{\sqrt{3}} (D_1 - D_2)v, \\ \rho_2 a^2 \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} &= 4(\lambda + 2\mu) Tv - (\lambda + \mu) Hv + \frac{\lambda + \mu}{\sqrt{3}} (D_1 - D_2)u. \end{aligned}$$

Las ecuaciones de Navier isotrópicas tienen soluciones singulares como e

$$\begin{aligned} u &= \frac{a}{2\pi} \left[\tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right) + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right], \\ v &= \frac{a}{2\pi} \left[-\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln \left(\frac{x^2 + y^2}{b^2} \right) + \frac{y^2}{2(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right], \end{aligned}$$

donde $\nu = \lambda/[2(\lambda + \mu)]$ para toda a . Estas soluciones representan dislocaciones en arista. Elegimos (x_0, y_0) distinto de un punto de la red y resolvemos una versión sobreamortiguada de las ecuaciones discretas

$$\begin{aligned}\rho_2 a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial u}{\partial t} &= 4\mu T u + (\lambda + \mu) H u + \frac{\lambda + \mu}{\sqrt{3}} (D_1 - D_2) v, \\ \rho_2 a^2 \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial v}{\partial t} &= 4(\lambda + 2\mu) T v - (\lambda + \mu) H v + \frac{\lambda + \mu}{\sqrt{3}} (D_1 - D_2) u,\end{aligned}$$

con $\gamma > 0$. Partiendo del valor inicial $(u(x - x_0, y - y_0), v(x - x_0, y - y_0))$ con velocidad cero, el sistema relaja a una solución estacionaria que contiene un típico defecto heptágono-pentágono (en ocasiones octágonos), comúnmente observado en grafeno.

Para permitir el movimiento y la interacción de estos defectos teniendo en cuenta las direcciones de la red efectuamos un cambio de variable. Pasamos de coordenadas cartesianas a las coordenadas primitivas de la red hexagonal. Tras ello periodizamos las diferencias en las direcciones primitivas (las sustituimos por funciones periódicas con periodo igual a la constante de red) [25, 23, 36]. De esa forma, los pares heptágono-pentágono orientados de forma diferente interactúan a través de sus campos elásticos, se atraen y se repelen, formando otros defectos conocidos tales como diferentes tipos de dipolos y lazos, incluyendo defectos que son sólo temporalmente estables como los defectos de Stone-Wales.

4.2 Ondulaciones

Las primeras visualizaciones de átomos suspendidos en hojas de grafeno revelaron su forma ondulada. Estas ondas tienen una longitud de nanómetros y no muestran direcciones privilegiadas. Se espera que sean relevantes para las propiedades de transporte eléctrico en grafeno. El estudio de su posible efecto en las propiedades mecánicas y eléctricas constituye un activo campo de investigación en la actualidad. Se cree que estas ondas están relacionadas con efectos térmicos y elásticos [41, 42].

Un modelo simple consiste en considerar que las deformaciones fuera del plano se pueden describir mediante un potencial de doble pozo que intenta mantener las deflexiones de la hoja $w(x, y)$ to $\pm \tilde{w}_0$ y contribuye a la energía elástica

$$F_{DW} = \frac{\tilde{\varphi}}{4} \int \rho_2 \left[1 - \left(\frac{w(x, y)}{\tilde{w}_0} \right)^2 \right]^2 dx dy,$$

donde ρ_2 es la masa 2D (masa por área unidad) y $\tilde{\varphi}$ tiene unidades de velocidad al cuadrado. La energía elástica libre del grafeno en el límite continuo corresponde a una membrana bidimensional [42]

$$\begin{aligned}F_g &= \frac{1}{2} \int [\tilde{\kappa} (\nabla^2 w)^2 + (\tilde{\lambda} u_{ii}^2 + 2\tilde{\mu} u_{ik}^2)] dx dy, \\ u_{ik} &= \frac{1}{2} (\partial_{x_k} u_i + \partial_{x_i} u_k + \partial_{x_i} w \partial_{x_k} w), \quad i, k = 1, 2,\end{aligned}$$

donde $(u_1, u_2) = (u(x, y), v(x, y))$, $\tilde{\kappa}$, $\tilde{\lambda}$ y $\tilde{\mu}$ representan los desplazamientos en el plazo, el coeficiente de rigidez y los coeficientes de Lamé 2D, respectivamente. $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$ es el gradiente 2D y ∇^2 el laplaciano 2D. Hemos ignorado contribuciones no lineales en el plano $\partial_{x_i} u \partial_{x_k} u + \partial_{x_i} v \partial_{x_k} v$.

De la energía libre total $F = F_g + F_{DW}$, obtenemos las ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned}\rho_2 \partial_t^2 u &= \tilde{\lambda} \partial_x \left(\partial_x u + \partial_y v + \frac{|\nabla w|^2}{2} \right) + \tilde{\mu} \partial_x [2\partial_x u + (\partial_x w)^2] \\ &+ \tilde{\mu} \partial_y (\partial_y u + \partial_x v + \partial_x w \partial_y w), \\ \rho_2 \partial_t^2 v &= \tilde{\lambda} \partial_y \left(\partial_x u + \partial_y v + \frac{|\nabla w|^2}{2} \right) + \tilde{\mu} \partial_y [2\partial_y v + (\partial_y w)^2] \\ &+ \tilde{\mu} \partial_x (\partial_y u + \partial_x v + \partial_x w \partial_y w),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\rho_2 \partial_t^2 w &= \tilde{P} \nabla^2 w - \tilde{\kappa} (\nabla^2)^2 w + \left(1 - \frac{w^2}{\tilde{w}_0^2} \right) \frac{\tilde{\varphi} \rho_2}{\tilde{w}_0^2} w \\ &+ \tilde{\lambda} \nabla \cdot \left[\left(\partial_x u + \partial_y v + \frac{|\nabla w|^2}{2} \right) \nabla w \right] \\ &+ \tilde{\mu} \partial_x [2\partial_x u \partial_x w + (\partial_y u + \partial_x v) \partial_y w + |\nabla w|^2 \partial_x w] \\ &+ \tilde{\mu} \partial_y [(\partial_y u + \partial_x v) \partial_x w + 2\partial_y v \partial_y w + |\nabla w|^2 \partial_y w] \\ &- (\tilde{\gamma} + \tilde{\eta} w^2) \partial_t w + \sqrt{2\tilde{\theta}(\tilde{\gamma} + \tilde{\eta} w^2)} \xi(x, y, t),\end{aligned}$$

$$\langle \xi(x, y, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(x, y, t) \xi(x', y', t') \rangle = \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(t - t'),$$

donde \tilde{P} es la tensión de la membrana, $\tilde{\theta}$ la temperatura y $-(\tilde{\gamma} + \tilde{\eta} w^2) \partial_t w$ es una fuerza no lineal de fricción. La intensidad $\sqrt{2\tilde{\theta}(\tilde{\gamma} + \tilde{\eta} w^2)}$ del ruido blanco $\xi(t)$ está relacionado con la fricción mediante el teorema de fluctuación-disipación. Todos los parámetros $\tilde{\lambda}$, $\tilde{\mu}$, ρ_2 , $\tilde{\kappa}$, \tilde{P} , \tilde{w}_0 , $\tilde{\varphi}$, $\tilde{\gamma}$, $\tilde{\eta}$ y $\tilde{\theta}$ son positivos.

Los operadores lineales se discretizan mediante elasticidad periodizada a lo largo de las direcciones primitivas del retículo de grafeno. Aparecen ondas que interactúan con eventuales defectos [38]. Otros posibles modelos representan condiciones ambientales mediante espines de Glauber [41, 37, 33, 34]. Insertando condiciones iniciales que corresponden a lazos de dislocación en estos modelos, podemos generar defectos con efectos de curvatura y campos de elasticidad en consonancia con observaciones experimentales [50].

5 Dislocaciones en cristales

Las dislocaciones son defectos soportados por curvas que se forman en los materiales cristalinos [6]. Cuando se aplica una tensión suficientemente grande, las dislocaciones se deslizan a lo largo de los planos cristalográficos del cristal e interactúan con otras dislocaciones que encuentran en su camino. Además,

se crean nuevas dislocaciones en ciertas posiciones. Como resultado, se forman en números muy grandes (10^{12} dislocaciones/cm² en metales muy trabajados) y modifican las propiedades mecánicas del material. En particular, se cree que las dislocaciones controlan las propiedades plásticas de los sólidos cristalinos a baja temperatura.

Es conocido que al aplicar una tensión los cristales se deforman elásticamente hasta alcanzar un valor crítico de la tensión. Para tensiones más altas, la deformación se convierte en plástica (irreversible) y termina eventualmente en fractura. Se cree que la tensión crítica es aquella para la cual se empiezan a mover grandes números de dislocaciones. Una vez en el régimen plástico, la creación, movimiento, e interacción de dislocaciones resulta en la formación de complicadas redes de defectos en la estructura microscópica del material. Cuando esas redes son tan densas que las dislocaciones no se pueden mover libremente, el cristal se endurece. Este efecto es muy importante al trabajar con metales, porque los metales muy trabajados son más duros que los no trabajados.

Podemos describir las dislocaciones de distintas formas, dependiendo de la escala en la que las estudiemos. A nivel microscópico, aparecen como defectos en la red cristalina. Si la separación entre dislocaciones no es demasiado pequeña, hay una escala mesoscópica en la que podemos modelarlas como singularidades del campo de tensiones de un material continuo. A escala macroscópica, podemos describir grandes números de dislocaciones en términos de densidades.

5.1 Modelos continuos para apilamientos

En plasticidad de metales, podemos definir una escala exterior en la que las dislocaciones pueden considerarse singularidades, es decir, soluciones exteriores de las ecuaciones de Navier de la elasticidad. El tensor de esfuerzos de segundo orden se define como

$$\boldsymbol{\epsilon} = (\nabla \mathbf{u})^S$$

donde \mathbf{u} es el desplazamiento elástico, y el superíndice S denota la parte simétrica. El tensor de esfuerzos se relacionan con el tensor de tensiones a través de la segunda ley de Hooke

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\epsilon}$$

donde λ y μ son las constantes de Lamé. Las ecuaciones de equilibrio elástico son

$$\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0.$$

Una dislocación aislada se puede modelar como una solución singular de estas ecuaciones en la que el desplazamiento no es univaluado [1]. Este es el modelo clásico del Volterra. En general, se pueden caracterizar por el vector tangente y un parámetro microscópico llamado el vector de Burgers, que mide la distorsión local de la red.

Consideramos a continuación un modelo para la interacción de dos familias de dislocaciones en arista. Tomamos la primera familia tangente a la dirección z con vector de Burgers en la dirección x . Tomamos la segunda familia tangente

a la dirección y con vector de Burgers en la dirección x . Por tanto, la primer familia desliza sobre el plano xz mientras que la segunda familia desliza sobre el plano xy . Si asumimos que las dislocaciones permanecen rectas, ambas familias se deslizan en la dirección x . Nos referimos a ellas como ‘dislocaciones de tipo 1’ y ‘dislocaciones de tipo 2’, respectivamente. Por simetría, el problema se puede convertir en un problema uni-dimensional [2], dando lugar a dos poblaciones con densidades $w_1(x, t)$ y $w_2(x, t)$, respectivamente. Deseamos determinar cómo esas densidades evolucionan con el tiempo.

La conservación de dislocaciones de cada familia implica [6]

$$\begin{aligned}\frac{\partial w_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(w_1 v_1) &= 0, \\ \frac{\partial w_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(w_2 v_2) &= 0,\end{aligned}$$

donde v_i es la velocidad de la familia i . En nuestro contexto, la primera familia de dislocaciones se puede ver como rectas paralelas al eje y -axis, y la segunda, como rectas paralelas al eje z . Sin embargo, a medida que las dislocaciones de la primera familia se mueven han de atravesar y cortar las de la segunda. Suponemos que hay una fuerte resistencia a este corte dependiendo de la densidad que consideremos, lo que nos lleva a velocidades de la forma [2]

$$\begin{aligned}v_1 &= \text{sign}(\sigma_{1,2})(|\sigma_{1,2}| - a\sqrt{w_1}), \\ v_2 &= \text{sign}(\sigma_{1,3})(|\sigma_{1,3}| - a\sqrt{w_2}),\end{aligned}$$

con $a > 0$. Resulta un sistema de leyes de conservación que puede cambiar tipo de hiperbólico a elíptico. Este cambio de tipo corresponde al inicio de un proceso de formación de patrones, la formación de apilamientos. Cuando regularizamos el modelo, obtenemos un problema de frontera libre parabólico que nos permite estudiar el proceso [6].

5.2 Modelos discretos para dislocaciones aisladas

Un modelo elemental para la dinámica de dislocaciones en redes cristalinas viene dado por las ecuaciones de Frenkel-Kontorova para el desplazamiento $u_n(t)$ de los átomos respecto a su posición de equilibrio siguiendo una fila de una red cúbica

$$m u_n'' + \alpha u_n' = d(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - Ag(u_n) + F.$$

Todos los parámetros son positivos: m representa la masa atómica, α la fricción, d los muelles elásticos entre átomos (fuerza de interacción) F la fuerza aplicada para poner en movimiento los defectos. $g(u_n)$ es una función periódica cuyo periodo viene dado por la constante de red a . En el equilibrio todos los átomos están situados en posiciones de la red separadas una distancia a en una red cúbica. En este marco, las dislocaciones se representan mediante soluciones de tipo frente, es decir, soluciones que crecen de un cero estable $z_1(F/A)$ de $-Ag(z)+F$ al siguiente cero estable $z_3(F/A)$, pasando a través del cero inestable $z_2(F/A)$. Cuando $F = 0$, $z_1(F/A) = 0$ y $z_3(F/A) = a$.

Si la fricción es alta, el movimiento es sobreamortiguado. Podemos tomar $m = 0$ para estudiarlo. En este caso, se puede encontrar un valor crítico $F_c(A)$ tal que [3]

- Si $|F| \leq F_c(A)$, tenemos soluciones de tipo frente estacionarias u_n que crecen monótonamente desde $z_1(F/A)$ en $-\infty$ a $z_3(F/A)$ en ∞ .
- Si $|F| > F_c(A)$ y está próximo a A , existen soluciones de tipo onda viajera $u_n(t) = u(n - ct)$ con velocidad $c(F)$ y perfil $u(z)$ solución de

$$-cu(z) = u(z - 1) - 2u(z) + u(z + 1) - Ag(u(z)) + F$$

que crece monótonamente desde $z_1(F/A)$ en $-\infty$ a $z_3(F/A)$ en ∞ . Esta solución es única módulo translaciones

- Frentes estacionarios y viajeros no pueden coexistir.

Los frentes estacionarios representan dislocaciones ancladas. Los frentes viajeros representan dislocaciones en movimiento. $F_c(A)$ representa la tensión de Peierls necesaria para mover dislocaciones en la red. A medida que $|F| \rightarrow F_c(A)$, tenemos que $c(F) \rightarrow 0$, los perfiles $u(z)$ desarrollan saltos y se hacen discontinuos en $F_c(A)$. Tiene lugar una bifurcación global en el sistema, que localmente es de tipo nodo silla y se puede usar para estimar las velocidades como $|c(F)| \sim \alpha(F_c)(|F| - F_c(A))^{1/2}$, véase [7, 12].

En ausencia de fricción, o, para fricción pequeña, debemos estudiar el problema con inercia. Para g lineal a trozos, por ejemplo, $g(u) = u + 1$ si $u < 0$ y $g(u) = u - 1$ si $u > 0$, es posible construir explícitamente todas las ramas de ondas viajeras [14]. En este caso, los perfiles de ondas desarrollan colas oscilatorias. En principio, son posibles diferentes perfiles y velocidades para el mismo valor de F . En la práctica, se puede probar que son estables las familias con frentes delanteros monótonos, en los que las oscilaciones se producen en la otra cola y cuya velocidad supera una velocidad mínima [15]. Encontramos dos umbrales, identificables con la tensión de Peierls estática $F_c(A)$ y la tensión de Peierls dinámica $F_d(A)$. Como antes, los frentes estacionarios existen si $|F| \leq F_c(A)$. Sin embargo, los frentes viajeros existen para $|F| > F_d(A)$. Ambos coexisten si $F_d(A) < |F| < F_c(A)$. Por tanto, el sistema presenta comportamientos de histéresis, Según incrementamos la fuerza aplicada desde cero, las soluciones tipo frente que representan las dislocaciones empiezan a moverse cuando F supera $F_c(A)$. Una vez las dislocaciones se mueven en la red, podemos decrecer la fuerza por debajo de $F_c(A)$. Las dislocaciones seguirán moviéndose aún cuando F caiga por debajo de $F_d(A)$. Estas simulaciones se hacen en redes finitas por razones computacionales y requieren condiciones de contorno no reflectantes como las derivadas en [32] por ejemplo.

Podemos estudiar dislocaciones bidimensionales en una red cúbica mediante redes bidimensionales [11, 13]. En su versión más simple, el desplazamiento de los puntos de la red $u_{i,j}(t)$ en la dirección de movimiento (digamos, la dirección x) obedece la dinámica

$$\frac{\partial u_{i,j}}{\partial t} = u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j} + A(\sin(u_{i,j-1} - u_{i,j}) \sin(u_{i,j+1} - u_{i,j})), \quad A > 0.$$

Soluciones que representan dislocaciones se pueden generar usando los campos elásticos de dislocaciones como datos iniciales y de contorno [11]. El sistema relaja a soluciones estacionarias que representan la distorsión en la red. Por ejemplo, si elegimos condiciones iniciales y de contorno dadas por $s_{i,j} = \theta(i, j/\sqrt{A}) + Fj$ donde θ es la función ángulo de 0 a 2π y $F > 0$ es un parámetro de control, obtenemos soluciones estacionarias que representan dislocaciones en arista para F pequeño. Según F crece, las soluciones estacionarias desaparecen y se observan los patrones viajeros [13]. Nótese que si linealizamos el operador espacial alrededor de $s_{i,j}$, tenemos un problema elíptico discreto para F pequeño que cambia de tipo a medida que F crece.

Esta idea se puede extender a situaciones plenamente bi y tridimensionales desarrollando modelos de elasticidad discreta periodizados [17, 20]. Discretizamos las derivadas que aparecen en la expresión del tensor de tensiones de la elasticidad con la simetría cristalina requerida mediante diferencias finitas en las direcciones principales del cristal, con paso igual a la constante de red, y entonces periodizamos, es decir, reemplazamos las diferencias por funciones periódicas de las mismas con periodicidad igual a la constante de red. Tras ello, derivamos las ecuaciones de movimiento usando el tensor de tensiones discreto y periódico resultante. Por ejemplo, en dos dimensiones tenemos

$$\begin{aligned} Mu_1'' &= C_{11}D_1^- [g(D_1^+ u_1)g'(D_1^+ u_1)] + C_{12}D_1^- [g(D_2^+ u_2)g'(D_1^+ u_1)] \\ &\quad + C_{44}D_2^- [(g(D_2^+ u_1) + g(D_1^+ u_2))g'(D_2^+ u_1)], \\ Mu_2'' &= C_{11}D_2^- [g(D_2^+ u_2)g'(D_2^+ u_2)] + C_{12}D_2^- [g(D_1^+ u_1)g'(D_2^+ u_2)] \\ &\quad + C_{44}D_1^- [(g(D_1^+ u_2) + g(D_2^+ u_1))g'(D_1^+ u_2)]. \end{aligned}$$

Ecuaciones similares se establecen para redes tridimensionales. Soluciones de tipo dislocación correspondientes a distintos tipos de cristales se generan usando los campos elásticos conocidos para cada una [17, 20].

6 Nucleación de dislocaciones

Podemos usar modelos de elasticidad discreta periodizados para comprender los procesos matemáticos que están detrás de la nucleación de defectos en una red. A diferencia de los modelos que se implementan en simulaciones de dinámica molecular de gran escala, que implementan truncamientos discontinuos para reducir el coste computacional, estos modelos involucran no linealidades regulares y pueden ser analizados.

Consideremos una red cúbica bidimensional con constante de red $a = 2\pi$. El desplazamiento $u_{i,j}(t)$ del punto (i, j) en la dirección x obedece las ecuaciones

$$\begin{aligned} m \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial t^2} + \alpha \frac{\partial u_{i,j}}{\partial t} &= u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j} \\ &\quad + A(\sin(u_{i,j-1} - u_{i,j}) \sin(u_{i,j+1} - u_{i,j})) \end{aligned}$$

en una red cuadrada $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$. Imponemos condiciones de contorno $u_{i,j} = F(j - (N_y + 1)/2)$ [21]. A medida que F crece, observamos

que la solución inicial nula se transforma lentamente en nuevas soluciones estacionarias hasta alcanzar un valor crítico F_c pasado el cual la estructura de la red se distorsiona en dos formas distintas. Linearizando el problema en $F = F_c$ encontramos un autovalor nulo para la matriz resultante, mientras que todos los autovalores eran negativos para $F < F_c$. La rama de soluciones estacionarias $s_{i,j}(F)$ es estable hasta $F = F_c$, cuando dos ramas distintas aparecen. Tiene lugar en el sistema una bifurcación de tipo pitchfork [21].

Cambiando la geometría podemos estudiar otros fenómenos, por ejemplo, el proceso de indentación del cristal. Denotamos ahora por $v_{i,j}(t)$ el desplazamiento vertical, gobernado por

$$m \frac{\partial^2 v_{i,j}}{\partial t^2} + \alpha \frac{\partial v_{i,j}}{\partial t} = v_{i-1,j} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j} + A(\sin(v_{i,j-1} - v_{i,j}) \sin(v_{i,j+1} - v_{i,j}))$$

en una red cuadrada $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$. Las condiciones de contorno representan el empuje de un indentador en la zona central superior:

- Lado izquierdo: $v_{1,j} = v_{0,j}$.
- Lado derecho: $v_{N_x,j} = v_{N_x+1,j}$.
- Parte izquierda de la pared superior ($1 \leq i < p_1$): $v_{i,N_y} = v_{i,N_y+1}$.
- Parte derecha de la pared superior ($p_2 < i \leq N_x$): $v_{i,N_y} = v_{i,N_y+1}$.
- Pared inferior: $v_{i,0} = 0$.
- Los átomos centrales ($p_1 \leq i \leq p_2$) son empujados hacia abajo: $v_{i,N_y+1} - v_{i,N_y} = -f(i)$, donde f tiene un perfil triangular. Se empuja hacia abajo, con magnitud $F > 0$.

A medida que F crece, observamos que la solución inicial nula para $F = 0$ desarrolla distorsiones localizadas en la red que se mueven hacia abajo. A medida que decrecemos F esas distorsiones viajan hacia arrib y pueden desaparecer salvo que queden ancladas en algún obstáculo [29]. La rama de soluciones estacionarias que comienza en $F = 0$ desarrolla bifurcaciones en valores específicos de F en los cuales se van creando nuevos defectos. Las nuevas ramas creadas son estables para algunos rangos de F , para los que los defectos existentes simplemente se recolocan. Cada vez que ha una nueva bifurcación un nuevo defecto se crea, y así sucesivamente. Cuando decrecemos F la situación se revierte. Los defectos creados se recolocan en posiciones más altas y pueden desaparecer.

7 Formación de partículas y burbujas

7.1 Nucleación homogénea de partículas

La nucleación homogénea se produce en muchos ejemplos de transiciones de primera fase, como la condensación de gotas líquidas a partir de un vapor supersaturado, la nucleación de cristales en líquidos subenfriados, la cristalización

de coloides, el crecimiento de agregados esféricos superada una concentración micelar o la segregación de aleaciones binarias.

Consideramos un modelo de nucleación en una red en la que hay más ubicaciones disponibles M , que partículas, N . Nos situamos en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, con una densidad de partículas fijada por ubicación $\rho = N/M$. Sea p_k el número de clusters con k partículas (k -clusters) y sea $\rho_k = p_k/M$ la densidad de k -clusters. La conservación de partículas implica que la densidad total de partículas es constante

$$\sum_{k=1}^{\infty} k\rho_k = \rho.$$

En la teoría cinética de Becker-Döring, un k -cluster puede crecer o decrecer capturando o emitiendo monómeros con el tiempo. La evolución con el tiempo viene dada por

$$\begin{aligned} \rho'_k &= j_{k-1} - j_k, \quad k \geq 2, \\ j_k &= d_k(e^{(\epsilon_{k+1}-\epsilon_k)/(K_B T)}\rho_1\rho_k - \rho_{k+1}). \end{aligned}$$

La densidad de monómeros ρ_1 se puede obtener a partir de la identidad de conservación que relaciona todas las densidades de los diferentes tipos de cluster. Se observan distintas eras en el proceso de formación de clusters que se pueden analizar mediante métodos asintóticos adecuados [16, 18].

7.2 Nucleación heterogénea

La nucleación heterogénea ocurre en sitios preferenciales donde se encuentran irregularidades.

7.2.1 Formación de burbujas en residuos radioactivos

La formación y crecimiento de burbujas de helio debidas a auto-irradiación en plutonio se ha modelado mediante ecuaciones cinéticas discretas para la densidad numérica de burbujas con k átomos. Éste es un importante fenómeno que ocurre en residuos radioactivos y puede dañar los contenedores creando contaminación radioactiva en el medio ambiente. A medida que una aleación envejece, se produce un estado transitorio inicial durante el cual la auto-irradiación produce lazoes de dislocación que saturan aproximadamente en dos años. Las partículas alpha que se crean durante este proceso se convierten en átomos de helio. Estos átomos migran hasta encontrar huecos sin rellenar generados durante el proceso, hasta que son capturados por las burbujas de helio existentes. Un átomo de helio se difunde hasta que encuentra otro átomo de helio y forma un dímero estable, o encuentra una burbuja de helio (un k -cluster estable con k átomos), que lo absorbe. Las burbujas de helio se anclan en los defectos, no se mueven y no emiten átomos de helio porque el balance energético es desfavorable.

Denotamos por $\rho_k(t)$ la densidad numérica de k -clusters que tienen radio efectivo a_k (cuando el centro de un monómero está a distancia a_k del centro del

cluster, se absorbe). $\rho_1(t)$ es el número de monómeros por unidad de volumen, D es el coeficiente de difusión y $g(t)$ el número de monómeros creados por unidad de volumen y por unidad de tiempo. El siguiente modelo cinético discreto describe el proceso

$$\begin{aligned}\rho'_k &= 4\pi D\rho_1 a_{k-1} \rho_{k-1} - 4\pi D\rho_1 a_k \rho_k, \quad k \geq 3, \\ \rho'_2 &= 8\pi D\rho_1^2 a_1 - 4\pi D\rho_1 a_2 \rho_2, \\ \rho_1 + \sum_{k=2}^{\infty} k\rho_k &= \int_0^t g(s) ds.\end{aligned}$$

Estudios asintóticos [19] muestran que este sistema genera un perfil de onda que describe la evolución del número de clusters de distintos tamaños con el tiempo. Un estudio analítico más riguroso es posible tras reformular el sistema mediante cambios de variable y transformaciones adecuadas [35].

7.2.2 Precipitación de vapor y partículas

Consideremos la condensación heterogénea de vapor mezclado con un gas portador en un flujo de punto de estancamiento cerca de una pared fría en presencia de partículas sólidas más grandes que el camino libre medio de las partículas de vapor. El vapor supersaturado se condensa en las partículas por difusión y las partículas y gotas se dirigen a la pared atraídas por termoforesis.

Tenemos vapor diluido con densidad numérica $c(x)$ en un gas portador con una pequeña cantidad de partículas sólidas individuales. La fracción de masa del vapor y de partículas sólidas es suficientemente pequeña con respecto a la fracción de masa del gas portador, de modo que la velocidad y la temperatura (estacionaria) $u(x)$ y $T(x)$ no están afectadas por el proceso de condensación y deposición. Las partículas sólidas pueden actuar como sitios de condensación del vapor. Sea n^* el volumen de una partícula dividido por el volumen molecular del vapor condensado, de modo que una partícula sólida equivale a n^* moléculas de vapor. Entonces, una gota de líquido que baña una partícula sólida equivale a $n(x)$ moléculas de vapor, en el sentido de que n es igual al volumen de una gota (partícula más vapor condensado) dividida por el volumen molecular del vapor condensado. Por tanto, el número de moléculas líquidas que bañan una partícula sólida es $n(x) - n^*$. Sea $\rho(x)$ la densidad numérica de gotas, de modo que $\rho(x)[n(x) - n^*]$ es la densidad numérica del condensado.

En una geometría de flujo de punto de estancamiento cerca de una pared,

las ecuaciones para $u(x)$, $n(x)$, $T(x)$ y $c(x)$ son[27]

$$\begin{aligned}
u''' + uu'' + 1 - (u')^2 &= 0, & x > 0, \\
u(0) = u'(0) = 0, & u'(\infty) = 1, \\
T'' + Pr uT' &= 0, & x > 0, \\
T(0) = T_w, & T(\infty) = 1, \\
\left(u + \alpha \frac{T'}{T}\right) \rho' &= -\alpha \rho \left(\frac{T'}{T}\right)', & x > 0, \\
\rho(\infty) &= 1, \\
\left(u + \alpha \frac{T'}{T}\right) n' &= -Nn^{1/3}(c - c_e) & x_* > x > 0, \\
n(x_*) &= 1, \\
c_e(x) &= \frac{T_d}{T(x)} \exp\left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{1}{T_d} - \frac{1}{T(x)}\right)\right], \\
c'' + Scuc' &= R\rho n^{1/3}(c - c_e), & 0 < x < x_*, \\
c(0) &= c_e(0), & c(x_*) = c_e(x_*), \\
c'' + Scuc' &= 0, & x > x_*, \\
c(x_*) &= c_e(x_*), & c'(x_*^-) = c'(x_*^+) & c(\infty) = 1,
\end{aligned}$$

donde el punto x^* viene dado como parte de la solución del problema de frontera libre [27].

8 Comportamiento mecánico y formación de patrones en agregados biológicos

Las biopelículas bacterianas son agregados de bacterias envueltos en una matriz polimérica segregada por ellas mismas que se adhieren a las superficies húmedas. La envoltura polimérica hace que sean muy difíciles de eliminar. En los hospitales, constituyen una de las principales causas de infecciones hospitalarias. En el ámbito industrial, producen cuantiosos daños en estructuras metálicas, plásticas, conductos, y material alimentario. Desde otro punto de vista, constituyen agregados celulares elementales que crecen y desarrollan patrones, con lo que nos proporcionan un entorno sencillo en el que testar modelos de desarrollo de ‘tejidos’.

Cuando crecen en flujos, las biopelículas se adaptan a la corriente formando hilos. La forma del filamento se adapta a las restricciones geométricas, buscando minimizar energías adecuadas. Se puede describir mediante modelos de barras discretas su evolución hasta que alcanzan una forma de equilibrio [51, 57]. Consideramos aquí dos contextos experimentales distintos: biopelículas en tubos cilíndricos y biopelículas en canales. En el segundo caso, modelos híbridos

que combinan descripciones de la actividad celular mediante autómatas celulares y descripciones continuas de campos macroscópicos para concentraciones químicas y flujos reproducen una rica variedad de parámetros [43, 52]. Mientras las biopelículas en flujos forman a menudo filamentos, las biopelículas que se expanden en interfaces agua/aire forman arrugas. Modelos híbridos que incorporan ecuaciones para los campos elásticos permiten reproducir el proceso de formación de tales estructuras arrugadas [48]. Esta sección se basa en [43, 48, 51, 52, 54, 57, 58, 64].

8.1 Espirales y filamentos en tubos

Consideremos los típicos circuitos usados en sistemas médicos. Inyectando bacterias del género *Pseudomonas* dentro, los tubos se llenan de biopelículas helicoidales que se enrollan en torno a las paredes [51]. Pequeños vórtices generados en el flujo por la presencia de cambios de diámetro llevan las bacterias a las paredes nucleando semillas de biofilm. La biopelícula se alarga siguiendo las líneas de corriente hasta que desarrolla una inestabilidad helicoidal.

Los modelos de barras discretos describen el proceso. Discretizamos el filamento usando una secuencia de nodos \mathbf{x}^i a lo largo del mismo, más un sistema de referencia en cada nodo (el sistema de referencia material) que mide el giro. Este sistema se obtiene en cada punto girando el sistema de referencia de Bishop (fijo, sin giro) un ángulo θ^i . La dinámica del filamento discreto está gobernada por ecuaciones para los ángulos θ^i y para las posiciones de los nodos \mathbf{x}^i .

Las ecuaciones para los ángulos se obtienen por métodos de energía. Cuando la configuración del filamento sin deformar es recta y su respuesta elástica es isótropa, la energía elástica debida a torsión y curvatura viene dada por

$$E = \sum_{i=1}^n \beta \frac{(\theta^i - \theta^{i-1})^2}{\bar{\ell}^i} + \sum_{i=1}^n \frac{\alpha}{2\bar{\ell}^i} \sum_{j=i-1}^i \|\mathbf{w}_i^j - \bar{\mathbf{w}}_i^j\|^2,$$

donde α y β son los módulos de curvatura y torsión, respectivamente. $\bar{\ell}^i$ es la longitud de los segmentos $\bar{\mathbf{e}}^i = \bar{\mathbf{x}}^{i+1} - \bar{\mathbf{x}}^i$ en una configuración de referencia sin deformar $\{\bar{\mathbf{x}}^0, \bar{\mathbf{x}}^1, \dots, \bar{\mathbf{x}}^{n+1}\}$. Los vectores $\mathbf{w}_i^j, \bar{\mathbf{w}}_i^j, j = i-1, i$, son curvaturas materiales en las configuraciones deformadas y sin deformar, respectivamente. El sistema de referencia material se actualiza de forma cuasiestática. Imponiendo

$$\frac{\partial E}{\partial \theta^i} = 0,$$

para todos segmento i no fijado por una condición de contorno, el sistema de ecuaciones resultante determina la configuración angular que minimiza la energía del filamento. La condición de extremos fijos se impone asignando el sistema de referencia en $i = 0, i = n$. Cuando no se asignan tenemos extremos libres.

La posición del filamento está determinada por la dinámica de los nodos, dada por la segunda ley de Newton:

$$\mathbf{M} \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = - \frac{dE}{d\mathbf{x}} + \mathbf{f},$$

donde \mathbf{f} representa las fuerzas externas y $-\frac{dE}{dx}$ las fuerzas elásticas. \mathbf{M} es la matriz de masa, dada por $\mathbf{M} = m\mathbf{I}$. Para imponer la restricción de permanecer dentro de un tubo usamos un método de penalización [51, 57]. De esta forma, podemos reproducir la formación de patrones helicoidales enroscados en paredes de tubos.

8.2 Ondulaciones y champiñones en canales

Los modelos de barras discretos nos permiten también reproducir la dinámica de filamentos de biofilm en otras geometrías, flujos de esquina [57], por ejemplo. Para describir la dinámica de capas de biopelícula que cubren paredes de canales [56] son más adecuados los modelos híbridos que acoplan descripciones continuas de flujos y concentraciones químicas con autómatas celulares que representan la actividad celular [43, 52, 58].

Los modelos de autómatas celulares proporcionan una estrategia simple para transferir información entre niveles microscópicos y macroscópicos. La biopelícula tridimensional se divide en una malla de celdas cúbicas, donde cada cubo representa una célula. Para cada una, hemos de decidir si se divide, si está muerta o inactiva, si se mueve o se desprende. Cuando se divide, se crea una nueva célula que desplaza a las demás en la dirección de mínima resistencia mecánica. Estas decisiones se toman en función de probabilidades calculadas en términos de concentraciones químicas y campos fluidos relevantes. Esta estrategia nos permite usar la misma malla cúbica para discretizar las ecuaciones continuas que gobiernan esos campos.

El fluido que rodea a la biopelícula se mueve según las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles

$$\begin{aligned}\rho \mathbf{u}_t - \mu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p &= 0, & \mathbf{x} \in \Omega_f, t > 0 \\ \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, & \mathbf{x} \in \Omega_f, t > 0\end{aligned}$$

donde $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ es la velocidad y $p(\mathbf{x}, t)$ la presión. ρ y μ representan la densidad y viscosidad del fluido. La velocidad satisface una condición de contorno de Dirichlet en las paredes del canal y el biofilm, se adhiere a ellas con su misma velocidad.

Las celdas de biofilm \mathcal{C} situadas en la superficie del mismo se desprenden debido a las fuerzas de cizalla ejercidas por el fluido con probabilidad

$$P_e(\mathcal{C}) = \frac{1}{1 + \frac{\gamma}{\tau(\mathcal{C})}} = \frac{\tau(\mathcal{C})}{\tau(\mathcal{C}) + \gamma}.$$

γ representa la cohesión de la biopelícula. $\tau(\mathcal{C})$ mide la fuerza de cizalla que experimenta \mathcal{C} . La probabilidad de que la celda se desplace en la dirección x viene dada por

$$P_x(\mathcal{C}) = \frac{1}{1 + \frac{\gamma}{|F_x(\mathcal{C})|}} = \frac{|F_x(\mathcal{C})|}{|F_x(\mathcal{C})| + \gamma},$$

donde F_x es la fuerza que ejerce el flujo en la dirección x (sobre paredes ortogonales a la dirección x direction) pesada con un factor que representa la protección de las celdas vecinas. Expresiones similares se usan en las direcciones y y z .

Las concentraciones de nutrientes y oxígeno dentro de la región que contiene la biopelícula y la capa límite con el fluido vienen dadas por

$$\begin{aligned} c_{s,t} - D_s \Delta^2 c_s &= k_2 \frac{c_s}{c_s + K_s} \frac{c_o}{c_o + K_o}, \\ c_{o,t} - D_o \Delta^2 c_o &= \omega k_2 \frac{c_s}{c_s + K_s} \frac{c_o}{c_o + K_o}, \end{aligned}$$

con condiciones de contorno nulas en la superficie del canal. Una de ellas actúa como concentración limitante c_l , es decir, la concentración que determina el crecimiento de la biopelícula. Las celdas se dividen con probabilidad

$$P_d(\mathcal{C}) = \frac{c_l(\mathcal{C})}{c_l(\mathcal{C}) + K_l},$$

donde c_l denota la concentración limitante y K_l el coeficiente de saturación en la ley de Monod. Siempre que hay celdas vecinas vacías, la célula hija se ubica en cualquiera de ellas con igual probabilidad. En otro caso, la nueva célula desplaza las células situadas en la dirección de mínima resistencia mecánica [43].

Este tipo de modelos híbridos nos permite reproducir una gran variedad de patrones observados, tales como ondas, montículos, ‘dedos’ que se mueven con la corriente, así como la erosión y el desprendimiento de fragmentos, en canales con geometrías y rugosidad variadas [43, 52, 56].

8.3 Arrugas en superficies

Podemos reproducir la formación de arrugas que se ramifican en biopelículas en expansión sobre una superficie gracias a ecuaciones de Föppl-Von Karman para la interfaz entre la biopelícula y el medio sobre el que crece (típicamente agar)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial t} &= \frac{1 - 2\nu_v}{2(1 - \nu_v)} \frac{h_v}{\eta_v} \left[D(-\Delta^2 \xi + \Delta C_M) + h \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\sigma_{\alpha,\beta}(\mathbf{u}) \frac{\partial \xi}{\partial x_\alpha} \right) \right] - \frac{\mu_v}{\eta_v} \xi, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} &= \frac{h_v h}{\eta_v} \nabla \cdot \sigma(\mathbf{u}) - \frac{\mu_v}{\eta_v} \mathbf{u}, \end{aligned}$$

donde h_v es el grosor del sustrato viscoelástico (agar) y μ_v , ν_v , η_v su módulo gomoso, el de Poisson y la viscosidad, respectivamente. El módulo de curvatura es $D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)}$, donde E y ν representan los módulos de Young y de Poisson de la biopelícula, mientras que h es el grosor del biofilm. ξ representa los desplazamientos fuera del plano y \mathbf{u} los desplazamientos en el plano. α y β representan a x, y y se usa la convención de suma con índices repetidos. Las tensiones σ y los esfuerzos ε se definen en términos de desplazamientos en el

plano $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$:

$$\varepsilon_{\alpha,\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \xi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \xi}{\partial x_\beta} \right) + \varepsilon_{\alpha,\beta}^0,$$

$$\sigma_{xx} = \frac{E}{1-\nu^2} (\varepsilon_{xx} + \nu \varepsilon_{yy}), \quad \sigma_{xy} = \frac{E}{1+\nu} \varepsilon_{xy}, \quad \sigma_{yy} = \frac{E}{1-\nu^2} (\varepsilon_{yy} + \nu \varepsilon_{xx}).$$

Los esfuerzos residuales $\varepsilon_{\alpha,\beta}^0$ se expresan en términos del tensor de crecimiento de la biopelícula como

$$\varepsilon_{\alpha,\beta}^0 = -\frac{1}{2} (g_{\alpha\beta} + g_{\beta\alpha} + g_{z\alpha} g_{z\beta}),$$

y se calculan a partir de la actividad celular.

Usando una dinámica de autómatas celulares para representar la actividad celular, podemos calcular los tensores de crecimiento debidos a la división y muerte celular, y a los procesos de absorción de agua, y estimar las tensiones residuales. Mediante medias sobre realizaciones del proceso estocástico de autómatas celulares, las tensiones promedio resultantes reproducen variaciones en sus estructura espacial que reflejan la actividad celular local. Filtrando los campos resultantes mediante técnicas de procesamiento de imágenes obtenemos aproximaciones regulares con una estructura espacial clara, promediando sólo unas pocas realizaciones. Estos campos filtrados son suficientemente regulares para introducirlos en las ecuaciones de Von Karman sin causar inestabilidades numéricas y nos permiten simular comportamientos que se asemejan a los patrones observados en experimentos [48, 58, 60]. Se puede establecer una teoría de existencia y estabilidad siguiendo [67].

9 Propagación de impulsos eléctricos en un semiconductor

Los semiconductores son materiales de gran interés en microelectrónica. Son la base de numerosos dispositivos que explotan los fenómenos de formación de patrones y oscilaciones en el campo eléctrico.

9.1 Modelos discretos para dinámica de paredes de dominio en superredes

Las superredes semiconductoras están formadas por una secuencia de capas alternas de distintos semiconductores. A menudo se forman en ellas paredes de dominio, que separan regiones con distinto campo eléctrico. La dinámica de estas paredes la gobiernan sistemas de la forma

$$\frac{dE_i}{dt} + \frac{v(E_i)}{\nu} (E_i - E_{i-1}) - \frac{D(E_i)}{\nu} (E_{i+1} - 2E_i + E_{i-1}) = J - v(E_i),$$

donde E_i es el campo eléctrico en el pozo i , siendo v, D funciones positivas y $\nu > 0$ grande. v es una cúbica que crece desde 0 a un máximo local, decrece a un mínimo positivo, y luego crece hacia el infinito. Para un rango de J tenemos tres ceros $z_1(J) < z_2(J) < z_3(J)$, dos de los cuales son estables. Para ν suficientemente grande, podemos construir soluciones de tipo frente [4], en una situación similar a la descrita para modelos de dislocaciones discretos. Encontramos umbrales $J_{c_1}(\nu) < J_{c_2}(\nu)$ tales que [8]

- Si $J_{c_1}(\nu) < J < J_{c_2}(\nu)$, tenemos frentes estacionarios E_i que crecen monótonicamente de $z_1(J)$ en $-\infty$ a $z_3(J)$ en ∞ .
- Si $J_{c_1}(\nu) > J$ o $J > J_{c_2}(\nu)$, tenemos frentes viajeros $E_i(t) = E(i - ct)$ con velocidad de onda $c(J)$ y perfil $E(z)$ que crece monótonamente de $z_1(J)$ en $-\infty$ a $z_3(J)$ en ∞ . Tales ondas viajan con velocidades de signo opuesto para cada rango de J , algunas de ellas en el sentido de los electrones, otras en sentido contrario.
- Frentes viajeros y estacionarios no pueden coexistir.

Los frentes estacionarios representan paredes de dominio ancladas. Los frentes viajeros representan paredes de dominio en movimiento. A medida que $J \rightarrow J_{c_1}(\nu)$ o $J \rightarrow J_{c_2}(\nu)$, $c(J) \rightarrow 0$, los perfiles $E(z)$ desarrollan escalones en los valores críticos de J . Este hecho está relacionado con una bifurcación global en el sistema, que es localmente una bifurcación de tipo nodo silla, lo que se puede usar para estimar la velocidad como $|c(J)| \sim |\alpha(J_c)|(|J - J_c|)^{1/2}$.

Podemos añadir ruido $\gamma\xi_i$ a la corriente aplicada J , donde $\gamma > 0$ caracteriza la magnitud del desorden y ξ_i es una variable aleatoria de media cero que toma valores en el intervalo $(-1, 1)$ con igual probabilidad [10]. Tomando $\gamma = 0$, tenemos una velocidad que escala como $|J - J_c|^{1/2}$. Sin embargo, cuando añadimos ruido, para cada realización del ruido, los umbrales J_c se desplazan ligeramente hacia arriba o hacia abajo. La velocidad observada será la media de las velocidades observadas para un número alto de realizaciones. Para $J > J_c$,

$$|c_R| \sim \frac{1}{\pi} \sqrt{\alpha(J_c)\beta(J_c)(J - J_c) + \gamma\beta(J_c)\xi_0}$$

la media

$$\bar{c} = \frac{1}{N} \sum_{R=1}^N |c_R| = \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 (\alpha\beta(J - J_c) + \gamma\beta\xi)^{1/2} d\xi \sim (J - J_c^*)^{3/2}$$

donde el nuevo valor crítico es $J_c^* = J_c - \frac{\gamma}{\alpha}$.

A medida que $\nu \rightarrow 0$, sólo persisten los frentes que viajan en una dirección, la misma que en el límite continuo, que toma la forma de una ecuación de reacción-convección-difusión

$$\frac{dE}{dt} + v(E)E_x - D(E)E_{xx} = J - v(E).$$

9.2 Modelos hiperbólicos y cinéticos para el efecto Gunn

Cuando añadimos paredes y deseamos describir efectos de tipo Gunn, es decir, la generación de sucesivos pulsos eléctricos autosostenidos. Se crean en un extremo, viajan hacia el otro, donde desaparecen para volver a generarse en el primer extremo [5]. A nivel macroscópico, este fenómeno se describe mediante el sistema

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E}{\partial x \partial t} + A \frac{\partial E}{\partial t} + B \frac{\partial E}{\partial x} + C \frac{\partial J}{\partial t} + D &= 0, & x \in (0, L), t > 0, \\ E(x, 0) &= 0, & x \in (0, L), \\ E(0, t) &= \rho J(t), & t \geq 0, \\ \int_0^L E(x, t) dx &= \phi, & t \geq 0, \end{aligned}$$

donde ρ, ϕ, L son positivos y A, B, C, D son funciones acotadas, siendo A y B positivas, mientras que C es negativa. $E(x, t)$ representa el campo eléctrico, $J(t)$ la corriente y ϕ el voltaje.

Modelos microscópicos más detallados de este fenómeno conducen a ecuaciones de tipo Boltzmann para semiconductores [9, 28]. La densidad de portadores $f(x, k, t)$ viene dada por

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{\Delta l}{2\hbar v_M} \sin(k) \partial_x f + \frac{\tau_e}{\eta} F \partial_k f &= \\ \frac{1}{\eta} \left[f^{FDa}(k; \mu(n)) - \left(1 + \frac{\nu_{imp}}{2\nu_{en}} \right) f + \frac{\nu_{imp}}{2\nu_{en}} f(x, -k, t) \right], \\ \partial_x^2 V = \partial_x F = n - 1 \\ n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x, k, t) dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f^{FDa}(k; \mu(n)) dk \\ f^{FDa}(k; \mu) = \alpha \ln [1 + \exp(\mu - \delta + \delta \cos(k))] \\ \eta = \frac{v_M}{\nu_{en} x_0} \quad \delta = \frac{\Delta}{2k_B T}. \end{aligned}$$

Las condiciones de contorno son, en $x = 0$:

$$f^+ = \beta F - \frac{f^{(0)}}{\int_0^\pi \sin(k) f^{(0)} dk} \int_{-\pi}^0 \sin(k) f^- dk$$

con

$$\beta = \frac{2\pi \hbar \sigma F_M}{e \Delta N_D}$$

y en $x = L/x_0$:

$$f^- = \frac{f^{(0)}}{(1/(2\pi)) \int_{-\pi}^0 f^{(0)} dk} \left(1 - \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi f^+ dk \right)$$

Las condiciones de contorno para el potencial eléctrico V son

$$V(0, t) = 0, \quad V(L, t) = \phi_L \sim \frac{\phi}{F_M} \frac{L}{x_0}.$$

La condición inicial es

$$f^{(0)}(k; n) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \exp(\iota j k) \frac{1 - \iota j F / \tau_e}{1 + j^2 (F)^2} f_j^{FD}(n)$$

$$f_j^{FD}(n) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} f^{FD}(k; \mu(n)) \cos(jk) dk$$

con $x \in [0, L = L/x_0]$ y f periodico en k con periodo 2π . La energía promedio E se define como

$$E = \frac{E}{k_B T} = \frac{\int_{-\pi/l}^{\pi/l} \varepsilon(k) f(x, k, t) dk}{k_B T \int_{-\pi/l}^{\pi/l} f(x, k, t) dk} = \delta \frac{\int_{-\pi}^{\pi} (1 - \cos k) f(x, k, t) dk}{\int_{-\pi}^{\pi} f(x, k, t) dk}.$$

Este modelo implementa una aproximación BGK del núcleo de colisión en la ecuación para la densidad de portadores. El modelo completo involucra un núcleo de colisión no local así como ecuaciones para distintos tipos de portadores de carga [9].

Referencias

- [1] A Carpio, SJ Chapman, SD Howison, JR Ockendon, Dynamics of line singularities, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 355(1731), 2013-2024, 1997
- [2] A Carpio, SJ Chapman, On the modelling of instabilities in dislocation interactions, Philosophical Magazine B 78 (2), 155-157, 1998
- [3] A Carpio, SJ Chapman, S Hastings, JB McLeod, Wave solutions for a discrete reaction-diffusion equation, European Journal of Applied Mathematics 11 (4), 399-412, 2000
- [4] A Carpio, LL Bonilla, A Wacker, E Schöll, Wave fronts may move upstream in semiconductor superlattices, Physical Review E 61 (5), 4866, 2000
- [5] A Carpio, P Hernando, M Kindelan, Numerical study of hyperbolic equations with integral constraints arising in semiconductor theory, SIAM Journal on Numerical Analysis 39 (1), 168-191, 2001
- [6] A Carpio, SJ Chapman, JJJ Velázquez, Pile-up solutions for some systems of conservation laws modelling dislocation interaction in crystals, SIAM Journal on Applied Mathematics 61 (6), 2168-2199, 2001

- [7] A Carpio, LL Bonilla, Wave front depinning transition in discrete one-dimensional reaction-diffusion systems, *Physical Review Letters* 86 (26), 6034, 2001
- [8] A Carpio, LL Bonilla, G Dell'Acqua, Motion of wave fronts in semiconductor superlattices, *Physical Review E* 64 (3), 036204, 2001
- [9] A Carpio, E Cebrian, FJ Mustieles, Long time asymptotics for the semiconductor Vlasov-Poisson-Boltzmann equations, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 11 (09), 1631-1655, 2001
- [10] A Carpio, LL Bonilla, A Luzón, Effects of disorder on the wave front depinning transition in spatially discrete systems, *Physical Review E* 65 (3), 035207, 2002
- [11] A Carpio, Wavefronts for discrete two-dimensional nonlinear diffusion equations, *Applied Mathematics Letters* 15 (4), 415-421, 2002
- [12] A Carpio, LL Bonilla, Depinning transitions in discrete reaction-diffusion equations, *SIAM Journal on Applied Mathematics* 63 (3), 1056-1082, 2003
- [13] A Carpio, LL Bonilla, Edge dislocations in crystal structures considered as traveling waves in discrete models, *Physical Review Letters* 90 (13), 135502, 2003
- [14] A Carpio, LL Bonilla, Oscillatory wave fronts in chains of coupled nonlinear oscillators, *Physical Review E* 67 (5), 056621, 2003
- [15] A Carpio, Nonlinear stability of oscillatory wave fronts in chains of coupled oscillators, *Physical Review E* 69 (4), 046601, 2004
- [16] JC Neu, LL Bonilla, A Carpio, Igniting homogeneous nucleation, *Physical Review E* 71 (2), 021601, 2005
- [17] A Carpio, LL Bonilla, Discrete models of dislocations and their motion in cubic crystals, *Physical Review B* 71 (13), 134105, 2005
- [18] LL Bonilla, A. Carpio, Y. Farjoun, JC Neu, Asymptotic and numerical studies of the Becker-Döring model for transient homogeneous nucleation, Markov processes and related fields, 12, 341-365, 2006
- [19] LL Bonilla, A Carpio, JC Neu, WG Wolfer, Kinetics of helium bubble formation in nuclear materials, *Physica D: Nonlinear Phenomena* 222 (1-2), 131-140, 2006
- [20] LL Bonilla, A Carpio, I Plans, Dislocations in cubic crystals described by discrete models, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 376, 361-377, 2007

- [21] I Plans, A Carpio, LL Bonilla, Homogeneous nucleation of dislocations as bifurcations in a periodized discrete elasticity model, *EPL (Europhysics Letters)* 81 (3), 36001, 2008
- [22] A Carpio, ML Rapún, Topological derivatives for shape reconstruction, In: Bonilla, L.L. (eds) *Inverse Problems and Imaging. Lecture Notes in Mathematics*, vol 1943. Springer, Berlin, Heidelberg, 2008
- [23] A Carpio, LL Bonilla, F de Juan, MAH Vozmediano, Dislocations in graphene, *New Journal of Physics* 10 (5), 053021, 2008
- [24] A Carpio, ML Rapún, Solving inhomogeneous inverse problems by topological derivative methods, *Inverse Problems* 24 (4), 045014, 2008
- [25] A Carpio, LL Bonilla, Periodized discrete elasticity models for defects in graphene, *Physical Review B* 78 (8), 085406, 2008
- [26] A Carpio, ML Rapún, Domain reconstruction using photothermal techniques, *Journal of Computational Physics* 227 (17), 8083-8106, 2008
- [27] JC Neu, A Carpio, LL Bonilla, Theory of surface deposition from boundary layers containing condensable vapour and particles, *Journal of fluid mechanics* 626, 183-210, 2009
- [28] E Cebrián, LL Bonilla, A Carpio, Self-sustained current oscillations in the kinetic theory of semiconductor superlattices, *Journal of Computational Physics* 228 (20), 7689-7705, 2009
- [29] I Plans, A Carpio, LL Bonilla, Toy nanoindentation model and incipient plasticity, *Chaos, Solitons & Fractals* 42 (3), 1623-1630, 2009
- [30] A Carpio, ML Rapún, An iterative method for parameter identification and shape reconstruction, *Inverse Problems in Science and Engineering* 18 (1), 35-50, 2010
- [31] A Carpio, BT Johansson, ML Rapún, Determining planar multiple sound-soft obstacles from scattered acoustic fields, *Journal of Mathematical Imaging and Vision* 36 (2), 185-199, 2010
- [32] A Carpio, B Tapiador, Nonreflecting boundary conditions for discrete waves, *Journal of Computational Physics* 229 (5), 1879-1896, 2010
- [33] A Prados, LL Bonilla, A Carpio, Phase transitions in a mechanical system coupled to Glauber spins, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* P06016, 2010
- [34] LL Bonilla, A Prados, A Carpio, Nonequilibrium dynamics of a fast oscillator coupled to Glauber spins, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* P09019, 2010

- [35] A Carpio, B Tapiador, Analysis of helium bubble growth in radioactive waste, *Nonlinear Analysis: Real World Applications* 11 (5), 4174-4184, 2010
- [36] LL Bonilla, A Carpio, Theory of defect dynamics in graphene: defect groupings and their stability, *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 23 (4), 337-346, 2011
- [37] LL Bonilla, A Carpio, A Prados, RR Rosales, Ripples in a string coupled to Glauber spins, *Physical Review E* 85 (3), 031125, 2012
- [38] LL Bonilla, A Carpio, Driving dislocations in graphene, *Science* 337 (6091), 161-162, 2012
- [39] A Prados, A Carpio, LL Bonilla, Spin-oscillator model for the unzipping of biomolecules by mechanical force, *Physical Review E* 86 (2), 021919, 2012
- [40] A Carpio, ML Rapún, Hybrid topological derivative and gradient-based methods for electrical impedance tomography, *Inverse Problems* 28 (9), 095010, 2012
- [41] LL Bonilla, A Carpio, Ripples in a graphene membrane coupled to Glauber spins *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* P09015, 2012
- [42] LL Bonilla, A Carpio, Model of ripples in graphene, *Physical Review B* 86 (19), 195402, 2012
- [43] D Rodriguez, B Einarsson, A Carpio, Biofilm growth on rugose surfaces, *Physical Review E* 86 (6), 061914, 2012
- [44] A Prados, A Carpio, LL Bonilla, Sawtooth patterns in force-extension curves of biomolecules: An equilibrium-statistical-mechanics theory, *Physical Review E* 88 (1), 012704, 2013
- [45] A Carpio, ML Rapún, Hybrid topological derivative-gradient based methods for nondestructive testing, *Abstract and applied analysis* 2013, 816134
- [46] A Carpio, ML Rapún, Parameter identification in photothermal imaging, *Journal of mathematical imaging and vision* 49 (2), 273-288, 2014
- [47] LL Bonilla, A Carpio, A Prados, Protein unfolding and refolding as transitions through virtual states, *EPL (Europhysics Letters)* 108 (2), 28002, 2014
- [48] DR Espeso, A Carpio, B Einarsson, Differential growth of wrinkled biofilms, *Physical Review E* 91 (2), 022710, 2015
- [49] LL Bonilla, A Carpio, A Prados, Theory of force-extension curves for modular proteins and DNA hairpins, *Physical Review E* 91 (5), 052712, 2015
- [50] LL Bonilla, A Carpio, C Gong, JH Warner, Measuring strain and rotation fields at the dislocation core in graphene, *Physical Review B* 92 (15), 155417, 2015

- [51] DR Espeso, A Carpio, E Martínez-García, V De Lorenzo, Stenosis triggers spread of helical *Pseudomonas* biofilms in cylindrical flow systems, *Scientific reports* 6, 27170, 2016
- [52] A. Carpio, B. Einarsson, D.R. Espeso, In G Russo, V Capasso, G Nicosia, Romano, V. (eds) *Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2014. Mathematics in Industry*, vol 22. Springer, 2016
- [53] A Carpio, TG Dimiduk, ML Rapún, V Selgás, Noninvasive imaging of three-dimensional micro and nanostructures by topological methods, *SIAM Journal on Imaging Sciences* 9 (3), 1324-1354, 2016
- [54] B Birnir, A Carpio, E Cebrián, P Vidal, Dynamic energy budget approach to evaluate antibiotic effects on biofilms, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 54, 70-83, 2018
- [55] A Carpio, TG Dimiduk, V Selgas, P Vidal, Optimization methods for in-line holography, *SIAM Journal on Imaging Sciences* 11, 923-956, 2018
- [56] Dynamics of *Pseudomonas putida* biofilms in an upscale experimental framework DR Espeso, E Martínez-García, A Carpio, V de Lorenzo *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology* 45 (10), 899-911, 2018
- [57] A. Carpio, E. Cebrián, D. R. Espeso, P. Vidal, Biofilm mechanics and patterns, in *Coupled Mathematical Models for Physical and Biological Nanoscale Systems and Their Applications*, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics 232, Springer Nature 2018
- [58] A Carpio, E Cebrián, P Vidal, Biofilms as poroelastic materials, *International Journal of Non-Linear Mechanics* 109, 1-8, 2019
- [59] A Carpio, TG Dimiduk, F Le Louër, ML Rapún, When topological derivatives met regularized Gauss-Newton iterations in holographic 3D imaging, *Journal of Computational Physics* 388, 224-251, 2019
- [60] A Carpio, E Cebrián, Incorporating Cellular Stochasticity in Solid-Fluid Mixture Biofilm Models, *Entropy* 22 (2), 188, 2020
- [61] A Carpio, S Iakunin, G Stadler, Bayesian approach to inverse scattering with topological priors, *Inverse Problems* 36 (10), 105001, 2020
- [62] A Carpio, M Pena, ML Rapún, Processing the 2D and 3D Fresnel experimental databases via topological derivative methods, *Inverse Problems* 37 (10), 105012, 2021
- [63] A Carpio, ML Rapún, Multifrequency topological derivative approach to inverse scattering problems in attenuating media, *Symmetry* 13 (9), 1702, 2021

- [64] A. Carpio, R. González-Albaladejo, Immersed Boundary Approach to Biofilm Spread on Surfaces Communications in Computational Physics 31 (1), 257-292, 2022
- [65] A. Carpio, Seeing the invisible: digital holography, EMS Magazine 125, 4-12, 2022
- [66] A. Carpio, E. Cebrián, A. Gutiérrez, Object based Bayesian full-waveform inversion for shear elastography, Inverse Problems 39, 075007, 2023
- [67] A. Carpio, G. Duro, Well posedness of fluid-solid mixture models for biofilm spread, Applied Mathematical Modelling 124, 64-85, 2023