Revista Digital Universitaria
01 de junio 2010 • Volumen 11 Número 6 • ISSN: 1067-6079

ARTICULO

# DIFUSIÓN ANÓMALA EN SISTEMAS COMPLEJOS

Carmen Varea y Damián Hernández
Instituto de Física, UNAM.

10 de junio 2010 • Volumen 11 Número 6 • ISSN: 1067-6079

# Difusión anómala en sistemas complejos


## Resumen

Reseñamos las propiedades esenciales de la difusión y describimos de manera muy suscinta algunas de nuestras contribuciones al estudio de sistemas de reacción difusión cuando la difusión es anómala.


**Palabras clave:** difusión anómala, reacción-difusión, patrones


## Abstract

We recount the main features of diffusion and we briefly describe some of our contributions to the study of reactiondiffusion systems when diffusion is anomalous.

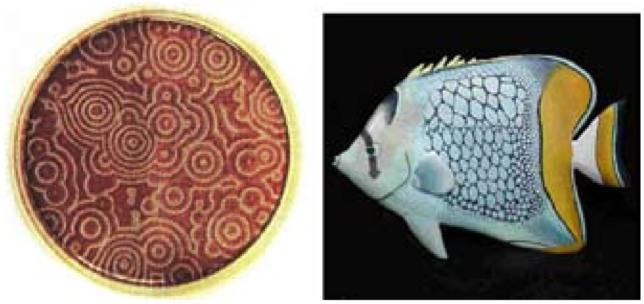

**Keywords:** anomalous diffusion, reaction-diffusion, patterns

## Introducción

Algunas de las preguntas más intrigantes de la ciencia son: ¿Cómo nacen las formas en la naturaleza? ¿cómo es que un conjunto de entidades, ya sean partículas, moléculas, etc. que interactúan entre sí, pueden organizarse formando estructuras cuya extensión excede por mucho las dimensiones de de dichos seres y de sus interacciones? ¿Cómo es que aún cuando las condiciones a las que se encuentran sujetos estos conjuntos, no exhiben ninguna estructura espacial ni temporal o ninguna influencia externa que escoja una dirección o introduzca una escala espacial particular, estos sistemas logran tener comportamientos periódicos, cuasiperiódicos e incluso caóticos en el espacio y en el tiempo? ¿Cómo logran desarrollar estructuras espaciales con escalas bien definidas? En la fig.1 damos ejemplos de estas estructuras espaciales.

La mayoría de las respuestas a estas preguntas son desconocidas, aunque se han encontrado respuestas parciales y, en algunos casos, respuestas sólidas a algunas de ellas, sobre todo en sistemas físicos que se encuentran cerca del equilibrio termodinámico, ya que, en este caso, dichos sistemas pueden ser descritos por un número relativamente pequeño de variables macroscópicas independientes, cuya evolución está determinada por la minimización de cantidades tales como la producción de entropía [1, 2], o la energía libre, lo cual tiene como consecuencia que el estado final de la evolución temporal de estos sistemas sea generalmente único y estacionario.

El hecho de que en dichos sistemas aparezcan las clases de fenómenos antes mencionados, sugiere que la dinámica bajo la cual estos evolucionan es no lineal; reconocer este hecho ha tenido como consecuencia un gran avance de la física y las matemáticas no lineales de las últimas décadas. Las consecuencias más importantes de la no linearidad en la evolución de estos sistemas, aparecen cuando éstos se encuentran fuera del equilibrio termodinámico.



(a)(b)

**Figura 1: (a) Patrón de un cultivo de bacterias, análoga a la reacción de BelousovZhavotinskii.(b) Patrón en la piel de un pez.**

En general, el comportamiento de un sistema físico es más complicado tanto espacial como temporalmente entre más lejos del equilibrio termodinámico se encuentre. Por lo tanto, si asociamos al equilibrio termodinámico estados que son homogéneos tanto en el espacio como en el tiempo, dichos sistemas tienen que experimentar varios rompimientos de las simetrías que los caracterizan para llegar a los comportamientos complicados de los sistemas fuera de equilibrio (por ejemplo, éstos dejan de ser invariantes ante cualquier traslación espacial o temporal).

Estos rompimientos de simetría son espontáneos, en el sentido que la dinámica del sistema no cambia su forma explícita y son solamente consecuencia de la naturaleza nolineal de su evolución. Lo único que cambia en la descripción de los distintos estados en los que éste se encuentra es, generalmente, el valor de uno o varios parámetros que miden que tan lejos se está del equilibrio termodinámico.

Cuando los sistemas están lejos del equilibrio, su evolución temporal puede no estar determinada por la minimización de la energía libre, ya que es común que esta cantidad no exista, y aún existiendo sus valores extremales no aseguran la unicidad del estado final del sistema.

Así el estado final del sistema está determinado por las condiciones iniciales y por su interacción con el mundo exterior. Aunque compuestos por muchas unidades independientes que interactúan entre sí, estos sistemas están descritos por pocas variables macroscópicas, tales como el volumen, la temperatura, presión, número de partículas etc., lo que permite estudiarlos mediante ecuaciones de evolución que dependen de pocas variables.

Como ejemplo podemos mencionar los sistemas químicos en los que la difusión juega un papel importante. Estos sistemas se conocen como sistemas de reacción difusión, y fue hasta 1952 cuando el matemático ingles Alan Turing [3], se dio cuenta que podían servir como un modelo para explicar la aparición de las estructuras espaciales características de un embrión en desarrollo. Desde la publicación de este importante artículo, los sistemas de reacción difusión se han utilizado para modelar la formación de patrones y en general el desarrollo de estructuras espacio temporales coherentes en química [4, 5], biología [6,7],física [8], ecología [7],[9], etc.

En este artículo exploramos, de manera teórica el comportamiento de de los sistemas de reacción difusión cuando la difusión es anómala. Es decir, cuando el desplazamiento cuadrático medio no crece linealmente en el tiempo. La razón de esto es que la manera tradicional de modelar la difusión en estos sistemas hace muchas suposiciones a priori acerca del medio donde se lleva acabo la difusión, en particular, la homogeneidad e isotropía del espacio y las propiedades estocásticas específicas que tienen como consecuencia el movimiento difusivo.

Esto hace que los modelos de reacción difusión sean poco realistas para la descripción de reacciones químicas en medios desordenados y/o en medios fuera de equilibrio termodinámico, características típicas de muchos sistemas físicos y biológicos. Nuestro estudio se enfoca en las consecuencias que tiene la difusión anómala en los fenómenos de formación de patrones y propagación de ondas químicas en sistemas de reacción difusión.

10 de junio 2010 • Volumen 11 Número 6 • ISSN: 1067-6079

La manera en la que en este trabajo se modela la difusión es mediante derivadas fraccionarias y ecuaciones de difusión generalizadas. Las derivadas fraccionaras son operadores no locales que aparecen como una generalización del concepto de derivada. Estos operadores dependen de un parámetro que puede variar de manera continua y se reducen a los operadores diferenciales típicos cuando dicho parámetro es un número entero.

Cuando queremos estudiar un fenómeno con difusión anómala es conveniente empezar con un modelo de reacción difusión normal, como el propuesto por Barrio et al., conocido como el modelo BVAM [6]. Es importante entonces estudiar las diferencias esenciales que existen entre la difusión normal y la difusión anómala. Lo siguiente sería tratar los modelos de reacción difusión generalizados y su análisis, estudiando así las consecuencias que tiene la difusión anómala en la formación de patrones y en la propagación de frentes de onda en sistemas biestables [16]. Cuando es posible esto se hace de manera analítica y cuando no, el estudio se lleva a cabo de forma numérica.

## Difusión y movimiento browniano

El poema científico del romano Lucrecio (ver figura 2) "sobre la Naturaleza de las Cosas"(año 60 a. C) tiene una descripción extraordinaria del movimiento Browniano de partículas de polvo y usa esto como prueba de la existencia de los átomos.

"Observa lo que ocurre cuando los rayos del Sol entran en un edificio e iluminan las partes sombreadas. Verás una multitud de partículas moviéndose en una multitud de maneras...su danza es de hecho la indicación de movimientos de la materia que están ocultos a nuestra vista. El fenómeno se origina con los átomos que a su vez se mueven en forma espontánea. Los múltiples golpes invisibles contra las partículas en el aire las ponen en movimiento ya que son un poco mayores. Así el movimiento aumenta desde los átomos y gradualmente emerge al nivel de nuestros sentidos de tal forma que los cuerpos que están en movimiento, que nosotros vemos en los rayos del Sol se ponen en movimiento por golpes que permanecen invisibles."

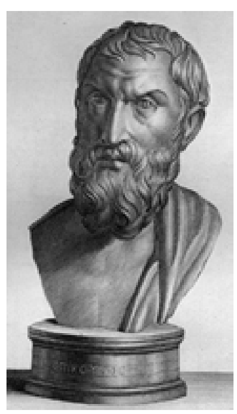


**Figura 2: Busto del filósofo Titus Lucretius.**

En épocas más recientes, Jan Ingenhousz había ya descrito el movimiento irregular de partículas de polvo de carbón el la superficie del alcohol en 1785. Sin embargo, el descubrimiento del movimiento Browniano se asigna a el botanista Robert Brown en 1827. Se cree que Brown estaba estudiando paríporculas de polen flotando en el agua bajo el microscopio. Observó que las diminutas partículas ejecutaban un movimiento errático tembloroso. Brown repitió el experimento con polvo obteniendo los mismos resultados y así pudo excluir la posibilidad de que el fenómeno se debía a el hecho de que el polen estaba vivo. Sin embargo no propuso ninguna explicación del origen de estos movimientos.

Fue Albert Einstein (en su artículo de 1905) y Marian Smoluchowski (1906) quienes independientemente atrajeron la solución de este problema a la atención de los físicos, y presentaron esta solución como una manera indirecta de confirmar la existencia de átomos y moléculas.

Específicamente, Einstein predijo que el movimiento Browniano de una partícula en un fluído en equilibrio térmico a una temperatura termodinámica *T* se caracteriza por un coeficiente de difusiσn $D = k_B T/b$, donde $k_B$ es la constante de Boltzmann y *b* es un coeficiente de fricciσn sobre la partνcula. Como consecuencia la raiz cuadrada del desplazamiento medio en cualquier direcciσn despuιs de un tiempo *t* es $\sqrt{(2Dt)}$ [11].

(Ver la liga para un experimento real del movimiento browniano)

Las predicciones de Einstein fueron confirmadas en una serie de experimentos por Chaidesaigues in 1908 y Perrin en 1909. Esta confirmación constituyó un progreso empírico para la Teoría cinética del calor y confirmó que la segunda ley de la termodínamica es esencialmente una ley estadística [12].

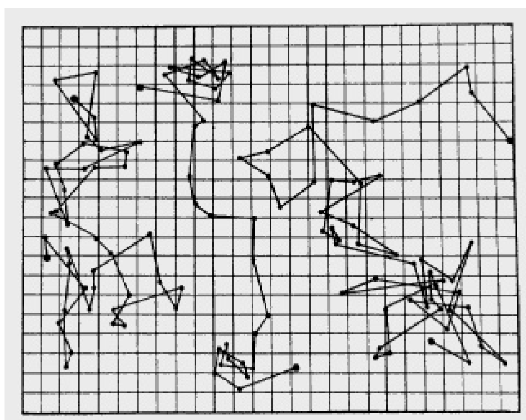


**Figura 3: Representación del movimiento browniano.**

Una consecuencia de la teoría cinéticaesla ecuación de difusión, que describe las fluctuaciones de la densidad en un material a lo largo del tiempo. La ecuación usualmente se escribe como:

$$\frac{\partial \phi(r,t)}{\partial t} = D\nabla^2 \phi(r,t), \qquad (1)$$

donde φ(r, t) es la densidad del material que se está difundiendo en un punto r del espacio y al tiempo t, D es el coeficiente de difusión que se supone constante.
Esta es una ecuación lineal entonces si queremos incluir reacciones químicas en una teoría de reacción-difusión tenemos que añadir el término de reacción:

$$\frac{\partial \phi_i(r,t)}{\partial t} = D_i\nabla^2 \phi_i(r,t) + f_i(\phi_j) \qquad (2)$$

10 de junio 2010 • Volumen 11 Número 6 • ISSN: 1067-6079

donde hemos generalizado para muchos componentes *i* y *fi(φj )* representan las ecuaciones del reacción nolineales en este sistema multicomponnente.

En su importante trabajo de 1905 Einstein presentó una nueva derivación de la ecuación de difusión. En esta derivación hay dos clases de distribuciones. Una es la probabilidad *f(x, t)dx* de encontrar una partícula Browniana en un intervalo [*x, x + dx*], al tiempo *t*, y otra es la densidad de probabilidad *φ(Δ)*, para un desplazamiento *Δ* de la partícula dentro de un sólo paso en el tiempo discreto. La ecuación básica de evolución es la siguiente:

$$f(x,t+\tau)dx = dx\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta f(x+\Delta,t)\phi(\Delta) \qquad (3)$$

donde φ(Δ) satisface la condición *φ(Δ) = φ( Δ)*. Es claro que esta ecuación es consistente con condiciones de normalización sobre *f(x, t) y φ(Δ).* Suponiendo analiticidad de *f(x, t)*, Einstein derivó la ecuación de difusión $\partial f/\partial t = D\partial^2 f/\partial x^2$ donde la constante de difusión está dada por

$$D = \frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \frac{\Delta^2}{2}\phi(\Delta). \qquad (4)$$

Y como mencionábamos antes, el desplazamiento medio crece en el tiempo como

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{2Dt} \qquad (5)$$

donde los paréntesis representanvalor de expectacióncon respecto a *f(x, t).* Ahora, en muchos sistemas naturales encontramos con frecuencia procesos de difusión que no satisfacen la ecuación anterior sino que el ancho de la distribución crece como $t^{\alpha}$ con un exponente α diferente de 1/2 .Uno se refie re a los fenómenos con *α = 1/2* como “difusión anómala” y existen varios ejemplos en la naturaleza que exhiben difusión anómala.

## Difusión Anómala

Hoy se pueden describir un número creciente de procesos por esta difusión anómala. Desde la emisión de señales de celdas biológicas al comportamiento de forrajeo en animales, parece que el movimiento global de un objeto se describe mejor por pasos que no son independientes y que se ejecutan en unos tiempos muy diversos

La mejor manera de estudiar desviaciones de la difusión normal gaussiana es graficando la distribución del camino medio de una partícula y el tiempo que toma viajar este camino. Estas distribuciones tienen un ancho: si el ancho es estrecho casi todos los valores están concentrados cerca del valor medio. Sin embargo, si el ancho es grande el valor medio no representa el comportamiento típico. La distribución de riqueza en una población es muy ancha como lo notó el economista italiano Vilfredo Pareto. Efectivamente la extensión entre pobreza extrema y riqueza es tan grande que la media de distribución de Pareto no tiene sentido. Las distribuciones de Pareto también aparecen en la Física. En 1920 el matemático frances Paul Lévi descubrió una familia especial de distribuciones, que ahora se conocen como distribuciones de Pareto–Lévy, que ocurren cuando se suman muchas cantidades independientes que siguen una ley de Pareto.

Situaciones físicas distintas corresponden a modificaciones distintas de el esquema más general de Pearson, donde todos los intervalos de distancias y tiempos son los mismos. Por ejemplo un caminante al azar puede detenerse entre dos pasos sucesivos, en cuyo caso los pasos en el tiempo pueden estar distribuidos de acuerdo a una ley de Pareto–Lévy. Lo que estas situaciones tienen en común es que el comportamiento del caminante está dominado por los pasos más grandes o por los tiempos más largos en los que no hay movimiento. Esto quiere decir que la “memoria” acerca de estos eventos poco comunes nunca seborra.Así que ¿cómo todo esto afectaala simpleecuación de difusión? La naturaleza anómala de la difusión lleva a una sorpresa, porque resulta que las derivadas ordinarias de la ecuación de Fick se tienen que remplazar por derivadas fraccionarias como $\frac{\partial^{1/2}y}{\partial x^{1/2}}$

Los matemáticos han estado conscientes de las derivadas fraccionales por mas de 300 años pero, comoas distribuciones de Pareto no tienen un valor acotado de su ancho, este concepto de derivadas fraccionarias, no encontró su camino en las ciencias físicas antes de que se tuvieran las recientes observaciones de la difusión anómala.

Figura 4: El albatros.

Harvey Sche y Elliot Montroll, en Xerox y en la Universidad de Rochester, respectivamente, se dieron cuenta que las cargas moviéndose en un medio amorfo tienden a quedarse atrapadas por imperfecciones locales y después son liberadas por fluctuaciones térmicas. Esto quiere decir que los tiempos de atrapado seguramente están descritos por una distribución de Pareto, lo que significa que las cargas se mueven mas despacio de lo que lo harían en el caso de difusión normal. Este tipo de difusión anómala se llama subdifusión ya el desplazamiento medio cuadrado de las partículas crece más despacio que la primera potencia del tiempo característica de la ley de Fick.

Sin embargo, existe otra posibilidad de difusión anómala esta es aquella en la que el caminante al azar permanezca en movimiento sin cambiar de dirección por un tiempo de espera que siga una distribución de Pareto– Lévy.

En este caso las longitudes de paso y los tiempos de espera tienen una distribución ancha. Estos “caminantes de Lévy”, corresponden a procesos en los que el desplazamiento cuadrado medio crece más rápido que en la difusión normal. Estos procesos se llaman superdifusivos. El vuelo de los albatros se puede describir por un modelo de Lévy, tal como Eugene Stanley y coautores de la Universidad de Boston descubrieron en 1996.

Estos pájaros grandes de mar (ver figura 4) vuelan a una velocidad aproximadamente constante, y con una distribución ancha de tiempos entre cambios de dirección que lleva a un patrón de lineas rectas largas interrumpidas por movimientos localizados al azar. Estas trayectorias se pueden racionalizar como una estrategia eficiente de búsqueda que lleva a los pájaros a áreas nuevas, en vez de una difusión simple en la que hay lugares que se visitan muchas veces. Los patrones de búsqueda en muchos animales se parecen a la de los albatros y Gabriel RamosFernández y coautores en la Universidad de México encontraron que el movimiento de los monos araña también sigue un movimiento de Lévy.[13]

10 de junio 2010 • Volumen 11 Número 6 • ISSN: 1067-6079

## Reacción-Difusión Anómala

Las expresiones para ecuaciones de reaccióndifusión para dos substancias químicas se pueden generalizar al caso de difusión anómala utilizando derivadas fraccionarias tanto en el tiempo como en el espacio, lo cual introduce la posibilidad de que las concentraciones u y v de los químicos cambien de manera anómala es

$$\frac{{}^{c}\partial^{\alpha} u}{\partial u^{\alpha}} = \nabla^{\beta} u + \eta f(u,v) \quad (6)$$

$$\frac{{}^{c}\partial^{\gamma} v}{\partial u^{\gamma}} = \nabla^{\delta} u + \eta g(u,v) \quad (7)$$

$$\nabla^{\beta} = \sum_{i=1}^{3} \left( s_{x_i} \left( {}_{-\infty}D^{\beta}_{x_i} \right) + (1 - s_{x_i}) \left( {}_{x_i}D^{\beta}_{\infty} \right) \right), \quad (8)$$

$$\nabla^{\delta} = \sum_{i=1}^{3} \left( r_{x_i} \left( {}_{-\infty}D^{\delta}_{x_i} \right) + (1 - r_{x_i}) \left( {}_{x_i}D^{\delta}_{\infty} \right) \right) \quad (9)$$

donde las derivadas fraccionarias en el tiempo modelan subdifusión y las derivadas en el espacio modelan superdifusión. *f* y *g* son funciones que modelan la cinética química de acuerdo a la ley de acción de masas. Si los exponentes anómalos[*α, β*] y [*γ, δ*]son uno y dos respectivamente recuperamos la ecuación de reacción difusión normal.

Hemos analizado las ecuaciones anteriores con la cinética propuesta por el modelo BVAM [6].

$$f(u,v) = a_{11}u + a_{12}v - r_2uv - r_1uv^2 \quad (10)$$

$$g(u,v) = a_{22}v + a_{21}u + r_2uv + r_1uv^2; \quad (11)$$

en los artículos [14, 15] obtenemos patrones viajeros con velocidades que dependen de las asimetrías r y s en las ecuaciones de difusión. Un caso especial es el que se obtiene sobre la superficie de una esfera y la difusión anómala está en la dirección del ángulo θ. Ver película de la difusión anómala en la superficie de una esfera.

En el artículo [16] estudiamos el comportamiento del movimiento de frentes en un modelo Ising y encontramos, por ejemplo, que en ciertas circunstancias los patrones con magnetización negativa pueden crecer en un campo externo positivo.

En el artículo [17], examinamos la dinámica de sistemas de reacción difusión con derivadas fraccionales en el tiempo. Mostramos que en estas condiciones se obtiene subdifusión. Estudiamos las condiciones para la aparición de una inestabilidad forzada por la difusión y mostramos que las condiciones restrictivas para una inestabilidad de Turing citesiete se relajan. Demostramos nuestros resultados con cálculos numéricos en dos dimensiones.

**Agradecimientos**

Agradecemos a R.A. Barrio la invitación a escribir este artículo y el apoyo financiero de CONACYT a través del proyecto 79461.

## Bibliografía

Grégoire Nicolis, Ilya Prigogine, "Exploring complexity", W.H Freeman and Company, New York (1989).

__________________________, *SelfOrganization in Nonequilibrium Systems*, Jonh Wiley and Sons (1977).

A.M.Turing, *Philos.Trans.R.Soc.London, (B237),* (1952)

V.Castets, E.Dulos, J.Biossonade, and P.D. Kepper, *Phys.Rev.Lett. 642953*, (1990)

Y.Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*, Dover Publications, Mineola New York, 2003.

R.A.Barrio, C.Varea, J.L.Aragón and P.K.Maini, *Bulletin of Mathematical Biology, 61* (1999).

J.D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer Verlag, (2003)

K.G. Altmann, G.E. Gorman, W.V. Saarloos, *Physics Reports, Volume 301, Number 1*, (1998).

J. von Hardenberg, E. Meron, M.Shachak, and Y.Zarmi, *Phys.Rev.Lett. 87, 19801,* (2001).

Lucretius, *On The Nature of Things*, translated by William Ellery Leonard. (see online version).

Einstein, A. (1905), "Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen.", *Annalen der Physik 17: 549–560*

J. Perrin, "Mouvement brownien et réalité molé culaire". *Ann. Chim. Phys. 8ième série 18, 5–114* (1909); (see also Perrin's book *Les Atomes*, (1914)).

R. Fernandez etal.Lévy walk patterns in the foraging movements of spider monkeys (Ateles geoffroyi) Behav. *Ecol. Sociol. 55 223–230* (2004 ).

C. Varea y R. Barrio. Traveling Turing Patterns with anomalous diffusion, *J. Condens. Matter 16, 1,* (2004).
---------------------------, "Nonlinear systems", *Physica A 372, 210223,* (2006).

D. Hernández, R. Barrio and C. Varea, Wavefront dynamics in systems with directional anomalous diffusion, *Phys. Rev. E 74, 046116* (2006).

-----------------------------------------------, Dynamics of reactiondiffusion systems in a subdiffusive regime, *Physical Review E79, 026109*(2009),

10 de junio 2010 • Volumen 11 Número 6 • ISSN: 1067-6079