XV Congreso de Física Estadística

Salamanca, 27 a 29 de Marzo de 2008

Libro de resúmenes

Departamento de Física Aplicada **Universidad de Salamanca**

Organismos patrocinadores





Organiza

Grupo de Termodinámica y Física Estadística Departamento de Física Aplicada Universidad de Salamanca

© FisEs08, 2008.

Cubierta: Fachada de la Universidad de Salamanca y Logo FisEs (composición: Juan A. White)

Maquetación y compilación, Juan A. White

Comité científico

- Ricardo Brito (U. Complutense)
- Carlos Cabrillo (IEM-CSIC)
- Pere Colet (IFISC-CSIC-UIB)
- José A. Cuesta (U. Carlos III)
- Fernando Falo (U. Zaragoza)
- Pedro L. Garrido (U. Granada)
- Elvira Guàrdia (U. P. Catalunya)
- Enrique de Miguel (U. Huelva)
- Conrad Pérez (U. Barcelona)
- Miguel A. Rodríguez (U. Cantabria)
- María José Ruiz (U. Sevilla)
- Juan A. White (U. Salamanca)

Comité local

- Antonio Calvo
- Antonio González
- Borja Jiménez de Cisneros
- José M. Mateos Roco
- Alejandro Medina
- Francisco L. Román
- Santiago Velasco
- Juan A. White

Programa

Hora	Jueves, 27 de marzo	Viernes, 28 de marzo	Sábado, 29 de marzo
8:30-9:00	Inscripción		
9:00-9:30	Inauguración	L D Hanger (L ()	N. Companyfold (I.5)
9:30-10:00	P. Derrida (I.3)	J. I. Hallsen (1-0)	N. Gersnennend (1-5)
10.00 10.20	D. Defilda (13)	C. Cerdeiriña (O-2)	G. Fdez. García (O-5)
10:00-10:50		I. Hörger (O-8)	M. Pradas (O-16)
10.20 11.00	M. Palassini (O-12)	Colore (L2)	R. Planet (O-14)
10.30-11.00	F. de los Santos (O-3)	5. Calelo (1-2)	I. Llopis (O-10)

11:00-11:30

Café

11:30-12:00	L. Santos (I-10)	A. Arbe (I-1)	L. López (I-7)
12.00 12.20	D. Gomila (O-7)	V. Garzó (O-6)	A. Sicilia (O-19)
12:00-12:30	L. Dinis (O-4)	A. Prados (O-17)	M. S. de la Lama (O-18)
12:30-12:45	J. A. Anta (O-1)	I. Zuriguel (O-21)	Clausura

12:45-15:00

Comida

Paneles (sesión 1) Paneles (se 15:00-16:30 P 1-60 P 61-1	esión 2) 121
--	-----------------

16:30-17:00

Café

17:00-18:00	M. San Miguel (I-9)	J. García-Ojalvo (I-4)
18:00-18:30	E. Moro (O-11)	J. M. Pacheco (I-8)
19.20 10.00	J. Poncela (O-15)	C. P. Roca (O-13)
18.30-19:00	A. Turiel (O-20)	Jiménez de Cisneros (O-9)

Índice general

Ι	Conferencias invitadas	15
1.	Combining Neutron Scattering and Molecular Dynamics Simulations to Unravel the Structure and Dynamics of Polymer Systems A. Arbe and J. Colmenero	e 17
2.	Estudios de procesos de adsorción y difusión molecular en materiales cristalinos utilizando simulación molecular Sofia Calero	2 18
3.	Fluctuations and large deviations in non-equilibrium systems Bernard Derrida	19
4.	Excitabilidad en circuitos genéticos: un mecanismo de toma de decisión en células Gürol M. Süel, Rajan P. Kulkarni, Michael B. Elowitz y Jordi García-Ojalvo	20
5.	Programming Bits and Atoms Neil Gershenfeld	21
6.	Multi-blob Representation of Concentrated Polymer Solutions Jean-Pierre Hansen	22
7.	Procesos de activación térmica en nanoestructuras ferromagnéticas Luis López Díaz, L. Torres, Eduardo Martínez y Óscar Alejos	23
8.	Evolutionary games on self-organizing populations Jorge M. Pacheco	24
9.	Fenómenos colectivos en dinámica social Maxi San Miguel	25
10). Gases ultrafríos: de los condensados de Bose-Einstein a sistemas altamente correlacionados Luis Santos	26
Π	Contribuciones orales	27
1.	Estudio de las propiedades de transporte en materiales nanoestructurados mediante simulación por marcha aleatoria Juan Antonio Anta ; Juan Bisquert; Ivan Mora-Seró; Víctor Morales-Flórez	1 29
2.	The Yang-Yang Anomaly in Fluid Criticality: An Exactly Soluble Model Claudio A. Cerdeiriña, Gerassimos Orkoulas, and Michael E. Fisher	30
3.	Critical wetting out of equilibrium: from high to low system dimensionalities Francisco de los Santos, Elvira Romera and Miguel Angel Muñoz	31
4.	Rectificación e inversión de corriente inducidos por inestabilidad en el estado fundamental L. Dinis, E.M. González, J.V. Anguita, J.M.R. Parrondo y J.L. Vicent	32
5.	Experimento de Faraday en medio activo. Difusión anómala Guillermo Fernández García, Vicente Pérez Muñuzuri y V. Pérez-Villar	33
6.	Segregación en un gas granular denso bajo la acción de la gravedad Vicente Garzó	34
7.	Vortex Nucleation in Bose-Einstein Condensates due to Effective Magnetic Fields Douglas R. Murray, Stephen M. Barnett, Patrik Öhberg, Damià Gomila	35
8.	El anillo de fuerza y su papel en la división celular bacteriana	36

9.	Máquinas térmicas acopladas y sistemas brownianos B. Jiménez de Cisneros y A. Calvo Hernández	37
10.	Modelización hidrodinámica de partículas autopropulsadas y de rotores. Movimiento de bac- terias. Isaac Llopis, Ignacio Pagonabarraga	38
11.	Influencia del comportamiento humano en la transmisión de información: Marketing viral y redes sociales José Luis Iribarren, Esteban Moro	39
12.	The Jarzynski free-energy estimator from the Random Energy Model Matteo Palassini and Felix Ritort	40
13.	Juegos evolutivos y cooperación en poblaciones estructuradas: el papel de la estructura social y la dinámica evolutiva Carlos P. Roca, José A. Cuesta, Angel Sánchez	41
14.	Dynamics of a fluid interface in imbibition experiments. Part 1: Local waiting time fluctuations along the interface R. Planet, S. Santucci, K.J. Måløy and J. Ortín	42
15.	Complex Cooperative Networks through Evolutionary Preferential Attachment Julia Poncela, Jesús Gómez-Gardeñes, Angel Sánchez, Luis M. Floría, Yamir Moreno	43
16.	Scaling growth and dynamic crossover lengths in viscous fluid fronts Marc Pradas, and A. Hernández-Machado	44
17.	Fenómeno de envejecimiento en el estado de enfriamiento homogéneo de un fluido granular de partículas duras A. Prados, M.I. García de Soria, P. Maynar y J. J. Brey	45
18.	Dynamical transition in the relaxation of elastic strings at finite temperatures M.S. de La Lama, J.J. Ramasco, J.M. López, and M.A. Rodríguez	46
19.	Exact results in two-dimensional domain growth Alberto Sicilia, Leticia F. Cugliandolo, Alan J. Bray and Jeferson J. Arenzon	47
20.	El Formalismo Multifractal Microcanónico: Un nuevo paradigma para el tratamiento de datos en turbulencia Antonio Turiel, Oriol Pont y Conrad Pérez-Vicente	48
21.	Cadenas de fuerza en pilas granulares Iker Zuriguel y Tom Mullin	49
III	Paneles	51
1.	Transiciones de fase en sistemas de dipolos con desorden espacial Juan J. Alonso y Julio F. Fernández	53
2.	Oscillatory regime in excitatory media with global coupling. Application to cardiac dynamics. E. Alvarez-lacalle, and B. Echebarria	54
3.	Coupling with delay: collective processes control period and pattern in vertebrate segmentation Saúl Ares, Luis G. Morelli, Leah Herrgen, Christian Schröter, Frank Jülicher y Andrew C. Oates	55
4.	Un modelo analítico sencillo para las propiedades reológicas de un gas granular en el régimen no estacionario del flujo tangencial uniforme Antonio Astillero y Andrés Santos	56
5.	Denoising de señales mediante modelos probabilísticos Raúl Benítez Iglesias	57

6.	Realistic model of action potential propagation in rabbit heart: Application to defibrillation studies Jean Bragard	58
7.	Supervivencia de un blanco rodeado por trampas subdifusivas Santos Bravo Yuste y Katja Lindenberg	59
8.	Potencial de vaciamiento en sistemas diluidos Santos Bravo Yuste, Andrés Santos y Mariano López de Haro	60
9.	Modelling extrinsic and intrinsic noise by means of Langevin description O. Canela-Xandri, F. Sagués, J. Buceta	61
10	. Dinámica evolutiva de ecosistemas J. A. Capitán y J. A. Cuesta	62
11	Funcional de medidas fundamentales para mezclas de cilindros duros paralelos J. A. Capitán, Y. Martínez-Ratón y J. A. Cuesta	63
12	. Transición de la estabilidad de Turing a Hopf mediante la aplicación de un flujo externo en un sistema micelar Jorge Carballido-Landeira, Pablo Taboada y A. P. Muñuzuri	64
13	. Language competition as an example of the consensus problem Xavier Castelló, Víctor M. Eguíluz and Maxi San Miguel	65
14	¿Qué desencadena la invasión de tumores cerebrales? Mario Castro, Carmen Molina-París, y Thomas S. Deisboeck	66
15	. Hamiltonianos efectivos de interfases libres en la teoria del funcional de la densidad P.Tarazona, R.Checa, E.Chacón.	67
16	. Interaction of oscillating dissipative solitons in nonlinear optical cavities Adrian Jacobo, Damià Gomila, Manuel A. Matías and Pere Colet	68
17	. Sincronización de dos láseres de semiconductor sometidos a retroalimentación óptica filtrada y acoplados unidireccionalmente Miguel Cornelles Soriano, Pere Colet, Claudio Mirasso	69
18	 Estudio numérico experimental de la formación de agregados en la deposición de partículas anisótropas. R.C. Hidalgo, I. Zuriguel, D. Maza I. Pagonabarraga 	70
19	. Emergence of chaos and criticality in a Neural Network with time dependent connections Sebastiano de Franciscis, J. Marro and Joaquín J. Torres	71
20	. Diagrama de fases de un crista líquido en una celda híbrida D. de las Heras, L. Mederos y E. Velasco	72
21	. Histéresis en un flujo turbulento de von Kármán A. De la Torre, M. Miranda, J. Burguete	73
22	. Dinámica de ondas capilares de tamaño molecular R. Delgado-Buscalioni, E. Chacon and P. Tarazona	74
23	 Microestructura de una suspensión magneto-reológica depositada. P. Domínguez-García, J. M. Pastor, Sonia Melle y Miguel A. Rubio. 	75
24	. Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol +agua}: Propiedades termodinámicas A. Dopazo-Paz, P. Gómez-Álvarez, L. Romaní y D. González-Salgado	76
25	. Difusión en la interfaz líquido-vapor Daniel Duque, Pedro Tarazona y Enrique Chacón	77

26.	Mechanisms for Initiation of Cardiac Discordant Alternans Blas Echebarria and Alain Karma	78
27.	Dynamics of Tidal Synchronization and Orbit Circularization of Celestial Bodies Bruno Escribano, Jozsef Vanyo, Idan Tuval, Julyan Cartwright, Diego L. González, Oreste Piro and Tamás Tél	79
28.	Dinámica de Escala de las Superficies no Euclídeas Carlos Escudero	80
29.	Modelo para el movimiento "hand-over-hand" de motores moleculares Javier Munarriz, Juan José Mazo, Fernando Falo	81
30.	Control retardado de una flashing ratchet M. Feito y F. J. Cao	82
31.	Information and performance in a feedback controlled Brownian ratchet M. Feito and F. J. Cao	83
32.	Inter and intracellular interactions for embryonic pattern formation Pau Formosa Jordan, Marta Ibañes Miguez	84
33.	Análisis de modelos ecológicos para la biodiversidad en redes complejas Javier Galeano, M. A. Muñoz, J.M. Pastor, J.M. Iriondo	85
34.	Funcionales cinéticos adecuados para la realización de dinámica molecular en sistemas electrónicos David García Aldea, José Enrique Alvarellos Bermejo	86
35.	Computer Simulation of Interfacial Tensions Noé G. Almarza	87
36.	Descripción hidrodinámica de un sistema disipativo: el modelo PBA M.I. García de Soria, P. Maynar, G. Schehr, A. Barrat y E. Trizac.	88
37.	Estudio computacional de procesos de separación de gas natural en mofs. E. García-Pérez, A. Martín-Calvo y S. Calero	89
38.	Fluctuaciones en el flujo de material granular a través de un orificio Angel Garcimartín, R. Harich, P. Cixous, A. Janda, I. Zuriguel, D. Maza	90
39.	Sobre la relación de Einstein en gases granulares densos forzados Vicente Garzó	91
40.	Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol + agua}: Estructura A. Dopazo-Paz, P. Gómez-Álvarez, L. Romaní y D. González-Salgado	92
41.	Evolutionary Preferential Attachent as a mechanism of social network growth. Julia Poncela, Jesús Gómez Gardeñes, Y. Moreno, A. Sánchez, and L.M. Floría.	93
42.	Dynamical instabilities of dissipative solitons in nonlinear optical cavities with nonlocal meta- materials Lendert Gelens, Guy Van der Sande, Jan Danckaert, Damià Gomila, Manuel A. Matías, Pere Colet	94
43.	Modelo de Ising en una red co-evolutiva. González-Avella Juan Carlos, Eguíluz M. Victor y San Miguel Maxi.	95
44.	Estructura de fluidos confinados en microcanales A. González, F.L. Román, J.A. White y S. Velasco	96
45.	Scaling properties in protein evolution E. Alejandro Herrada, Claudio J. Tessone, Víctor M. Eguíluz, Emilio Hernández-García and Carlos M. Duarte	97

46.	Regime changes in competing floating-submerged plant ecosystems F. S.Bacelar , JM. Zaldívar-Comenges, S. Dueri, E. Hernández-Garcia	98
47.	Discusión sobre la Markovianicidad de una descripción de grano grueso de una cadena unidi mensional de osciladores no armónicos C. Hijón, M. Serrano, P. Español	- 99
48.	Current Large Deviations in the Kipnis-Marchioro-Presutti Model of Heat Conduction Pablo I. Hurtado, Pedro L. Garrido	100
49.	Hysteresis in planar liquid crystal cells illuminated by polarized light Adrian Jacobo, Giampaolo D´ Alessandro, Damià Gomila and Pere Colet	101
50.	Probabilidad de atasco de un medio granular al pasar a través de un orificio A. Janda, I. Zuriguel, C. Mankoc, J.M. Pastor, A. Garcimartín y D. Maza	102
51.	Estadística de atascos temporales en descarga de silos sometidos a vibraciones C. P. Mankoc, A. Janda, E. Clément, A. Garcimartín y D. Maza	103
52.	Constructive Chaos in Excitable Networks with Tuneable Topologies Samuel Johnson, Joaquín Marro, and Joaquín J. Torres	104
53.	Estado de Fourier de un gas granular diluido Nagi Khalil y J. Javier Brey	105
54.	Diversity in Large and Coupled Systems Niko Komin, Raúl Toral, Adrian Murza	106
55.	Statistical Mechanics of Written Texts Elka Korutcheva and K.Koroutchev	107
56.	Un mapeo entre series temporales y redes comlejas: el grafo de visibilidad Lucas Lacasa, Bartolo Luque, Fernando Ballesteros, Jordi Luque y Juan Carlos Nuño	108
57.	Ordenadores termodinámicamente complejos y programación matemática Luis Lafuente y Neil Gershenfeld	109
58.	Dynamics of 3D Thin Films: from hydrophilic to super-hydrophobic substrates R. Ledesma-Aguilar, I. Pagonabarraga, and A. Hernández-Machado	110
59.	Controlling surface coverage in patterned substrates R. Ledesma-Aguilar, A. Hernández-Machado, and I. Pagonabarraga	111
60.	Cooperativity and hydrodynamic interactions in externally driven semiflexible filaments Isaac Llopis, Ignacio Pagonabarraga, Marco Cosentino Lagomarsino, Christopher P. Lowe	112
61.	Phase behavior of a family of continuous two-dimensional <i>n</i> -vector models with $n = 2, 3$, and 4 E. Lomba, N.G. Almarza and C. Martín	113
62.	Tendencia al equilibrio bajo la óptica de una medida estadística de complejidad Xavier Calbet and Ricardo López-Ruiz	114
63.	Physical principles in the structure of prolate viruses Antoni Luque and David Reguera	115
64.	Phase transition in a stochastic prime number generator Bartolo Luque, Lucas Lacasa and Octavio Miramontes	116
65.	Structure and stability of decomposing films of binary mixtures with free evolving surfaces Santiago Madruga and Uwe Thiele	117
66.	Duplication of a self-repressed gene: an evolutive approach to loss of cross-links Paolo Malgaretti Fabrizio Capuani Marco Cosentino-Lagomarsino	118

67.	Estudio por simulación del diagrama de fases del modelo de solapamiento gaussiano R. Marguta, E. Martín del Río y E. de Miguel	119
68.	Diagrama de fases de un cristal líquido esméctico E. Martín del Río y E. de Miguel	120
69.	 Determinación de propiedades derivadas segundas de alcanos de cadena larga mediante Monte Carlo NPT M. M. Piñeiro, G. S. de Ferron, J. M. Míguez, D. Bessières, F. Plantier, J. L. Legido 	e 121
70.	Casimir-like forces: effects of fluctuation confinement in non-equilibrium fluids. Ricard Matas Navarro and Ignacio Pagonabarraga	122
71.	Spectral analysis of Bazarov's piston S. Velasco, B. Jiménez de Cisneros, J.M.M. Roco and J.A. White	123
72.	Coherence resonance of excitable localized structures in nonlinear optical cavities Damià Gomila, Adrian Jacobo, Pere Colet, Manuel A. Matías	124
73.	Movimiento browniano en el seno de un fluido disipativo P. Maynar, M.I. García de Soria, G. Schehr, A. Barrat y E. Trizac	125
74.	Propiedades topológicas de la red de contactos en medios granulares. Roberto Arévalo, Iker Zuriguel, Diego Maza.	126
75.	Phase-Field Study of the Cellular Bifurcation in Directional Solidification Esteban Meca and Mathis Plapp	127
76.	Memory and recall of information in neural networks with dynamic synapses Jorge F. Mejías and Joaquín J. Torres	128
77.	Dewetting of a stratified liquid thin film Samy Merabia and Josep Bonet Avalos	129
78.	Caos espacio-temporal en un experimento convectivo 1D M.A. Miranda, J.Burguete	130
79.	Topology and transport in driven vortex lattices Paolo Moretti and M. Carmen Miguel	131
80.	Mixed dynamics in evolutionary games Angel Sánchez, Luis G. Moyano	132
81.	Hidden Orders and impact in financial markets Esteban Moro, Luis G. Moyano	133
82.	Simulación por dinámica molecular del contacto entre sólidos Javier Munilla, Mario Castro, Alberto Carnicero	134
83.	Acoplamiento del transporte de material y la morfología en superficies sometidas a erosión iónica Javier Muñoz-García, Rodolfo Cuerno y Mario Castro	n 135
84.	Estimación de entropías a partir de conjuntos limitados de datos J. A. Bonachela, H. Hinrichsen, and Miguel A. Muñoz	136
85.	Shortest path finder algorithm based on autowave properties Alberto P. Muñuzuri and Alejandro Vázquez-Otero	137
86.	Diffusion in models of active Brownian particles of relevance in biological self-propelled motion Ernesto M. Nicola and Benjamin Lindner	138
87.	Un modelo de intercara difusa para la formación de patrones en fluidos magnéticos Matteo Nicoli, Rahul Bhysar, Sébastien Nguyen, Hervé Henry y Mathis Plapp	139

88.	Inestabilidades morfológicas y rugosidad cinética en procesos de crecimiento con efectos r locales Matteo Nicoli, Rodolfo Cuerno y Mario Castro	10 140
89.	Fluctuaciones fuera del equilibrio en flujo plano de Couette José María Ortiz de Zárate Leira y Jan V. Sengers	141
90.	Simulaciones Monte Carlo de polímeros vivos con interacciones laterales en 2D Alfonso Páez, Pedro Tarazona, Enrique Velasco	142
91.	Can protein folds be automatically and objectively defined? An analysis based on transitivity Alberto Pascual-García, Enrique García de Bustos, David Abia, Angel Ramírez Ortiz and Ugo Bastolla	143
92.	Estudio Experimental de la Convección Granular J.M. Pastor, A. Garcimartín, D. Maza	144
93.	Vectores de Lyapunov en sistemas con caos espacio-temporal Diego Pazó, Ivan G. Szendro, Miguel A. Rodríguez y Juan M. López	145
94.	Mecanismos de reexcitación en tejido cardiaco Angelina Peñaranda, Inma R. Cantapiedra, Blas Echebarria	146
95.	Aspectos estadísticos de la espectroscopía de disoluciones criogénicas Justo Pérez y Antonio Padilla	147
96.	Influencia de una mezcla inhomogenea en un fluido activo químicamente Vicente Pérez Muñuzuri y Guillermo Fernández García	148
97.	Noise spectra and correlations in semiconductor ring laser in the bidirectional regime Antonio Pérez S., Roberta Zambrini, Alessandro Scirè and Pere Colet	149
98.	Perfect Plasticity and Shear Deformation in a Random Medium Clara B. Picallo, Mikko J. Alava, Stefano Zapperi, Juan M. López	150
99.	Dynamics of a fluid interface in imbibition experiments. Part 2: Global dynamics S. Santucci, R. Planet, K.J. Måløy and J. Ortín	151
100	• Finding optimal wavelet bases of cascade processes Oriol Pont, Antonio Turiel and Conrad Pérez-Vicente	152
101	 Explorando el paisaje de energía mediante redes complejas: Del doble pozo al análisis d espacio conformacional de proteínas. Diego Prada-Gracia, Pablo Echenique, Jesús Gómez-Gardeñes, Fernando Falo. 	el 153
102	Avalanches in fluid imbibition fronts Marc Pradas, and A. Hernández-Machado	154
103	Manu Prakash and Neil Gershenfeld	155
104	. Método para la inversión de redes de contenidos José Javier Ramasco y Muhittin Mungan	156
105	. Efectos del ruido externo en sistemas caóticos extendidos: el caso del modelo Lorenz '96 Jorge A. Revelli, Miguel A. Rodriguez, Horacio S. Wio	157
106	Inhomogeneidad anómala en sistemas con condiciones de contorno periódicas J. A. White, F. L. Román, A. González y S. Velasco	158
107	. Transición de mojado por nemático de un sustrato microestructurado Pedro Patricio, Chi-Tuong Pham y José Manuel Romero Enrique	159

108.	Simulación por dinámica molecular de procesos de micelización en modelos moleculares o 'grano grueso' T. Ruiz–Herrero y E. Velasco	le 160
109.	Liquid water confined in graphene nanochannels at supercritical conditions J. Sala, E. Guàrdia, J. Martí	161
110.	Non-equilibrium phase transition between bulk structures in ballistic-diffusive stochastic models of thin film growth Pedro A. Sánchez, Tomás Sintes, Oreste Piro, Julyan H. E. Cartwright	162
111.	Función de distribución radial en un fluido pozo cuadrado con núcleo penetrable Riccardo Fantoni, Achille Giacometti, Alexandr Malijevský y Andrés Santos	163
112.	Shear effects in the induction of the kinetic phase transformations in depletion driven colloid Juan J. Cerdà, Tomás Sintes, C.M. Sorensen and A.Chakrabarti	s164
113.	Join effects of nutrients and contaminants on the dynamics of a food chain in marine ecosy	S-
	tems Flora S. Bacelar, Sibylle Dueri , Emilio Hernández-García and José-Manuel Zaldívar	165
114.	Efectos inerciales en sistemas brownianos empujados por barreras moviles P. Tarazona and U. Marini Bettolo Marconi	166
115.	Caracterización dinámica de redes modales en láseres de semiconductor Jordi Tiana Alsina, M. Carme Torrent, Jordi Garcia-Ojalvo	167
116.	Diversity-induced resonance in a model for opinion formation Raúl Toral, Claudio J. Tessone	168
117.	Transiciones de fase absorbentes en redes coevolutivas Federico Vazquez, Juan Carlos González-Avella, Víctor M. Eguíluz and Maxi San Miguel	169
118.	Escalado consistente de las fluctuaciones térmicas en DPD/SPH Adolfo Vázquez, Marco Ellero, Pep Español	170
119.	Impureza en un gas granular bajo flujo laminar de Couette no lineal Francisco Vega Reyes, Vicente Garzó y Andrés Santos	171
120.	Potenciales de depleción extremadamente atractivos en mezclas de esferas blandas Y. Martínez–Ratón, G. Cinacchi, E. Velasco, G. Navascués, L. Mederos, A. Tani	172
121.	Potencial de tipo termodinámico alejado del equilibrio para KPZ: procedimiento à la carte Horacio S. Wio	173
IV	Índice de autores	175
\mathbf{V}	Asistentes al congreso	181

Parte I Conferencias invitadas

Combining Neutron Scattering and Molecular Dynamics Simulations to Unravel the Structure and Dynamics of Polymer Systems

<u>A. Arbe</u>^{*} and J. Colmenero Centro de Física de Materiales CSIC-UPV/EHU 20080 San Sebastián

Polymers are rather complex systems displaying different structural and dynamical features depending on the length scale of observation. At large length scales (hundreds of Å) the macromolecular character of the structural units prevails and the processes associated to the chain dynamics (entropy-driven 'Rouse'-like dynamics, reptation, diffusion of the whole macromolecule) play the most relevant role. However, observing the system at length scales of ≈ 10 Å or smaller, chain connectivity is not so important anymore and the characteristics are those universal for glass-forming systems: some short range order in the amorphous material is the main structural feature, while the structural relaxation and other dynamics associated to the glassy state are the dominant processes from a dynamical point of view. In this talk, we will focus on aspects of polymers related to their glass-forming nature, i.e., properties at inter- and intramolecular length scales will be discussed.

The structure and dynamics of glass-forming polymers can be investigated at a molecular level by means of neutron scattering (NS). On fully deuterated samples, coherent scattering is addressed revealing the (static and dynamic) structure factor. Additional structural information can be obtained by considering different levels of deuteration and selecting thereby other partial correlation functions. Moreover, studies on protonated samples allow insight into the atomic self-motions through the incoherent scattering function of the hydrogens. Thus, NS provides a very powerful tool to investigate these materials at microscopic and mesoscopic level. However, NS techniques are limited (e.g., the information is always obtained in the reciprocal space, or it might be extremely difficult –or impossible– to isolate the signal of a given kind of atom) and the results are sometimes difficult to interpret. In this direction, the combination with fully atomistic molecular dynamics (MD) simulations is essential. But a first necessary step is the validation of the MD-simulations by a critical and extensive direct comparison with experimental results. This is the approach we have been following during the last years in our investigations of polymer structure and dynamics. Once we have proven that our MD-simulations provide a good mimic of the real polymer, we take advantage of the simulations and calculate magnitudes that cannot be (or at least easily) accessed by the experiments.

We will consider some examples of this combined approach including dynamic and structural aspects: (i) the origin of the non-Gaussian effects in the α -relaxation¹⁻³; (ii) the role of local processes involved in the β -process of an archetypal polymer, polybutadiene,⁴ and (iii) the short-range order of poly(methyl metacrylate).⁵

- ⁴ J. Colmenero, A. Arbe, F. Alvarez, A. Narros, M. Monkenbusch and D. Richter, Europhys. Lett. **71** 262 (2005)
- ⁵ A.-C. Genix, A. Arbe, F. Alvarez, J. Colmenero, W. Schweika and D. Richter, Macromolecules **39**, 3947 (2006)

^{*} a.arbe@ehu.es

¹ J. Colmenero, F. Alvarez and A. Arbe, Phys. Rev. E **65**, 041804 (2002)

² A. Arbe, J. Colmenero, F. Alvarez, M. Monkenbusch, D. Richter, B. Farago and B. Frick, Phys. Rev. Lett. 89, 245701 (2002).

³ A. Arbe, J. Colmenero, F. Alvarez, M. Monkenbusch, D. Richter, B. Farago and B. Frick, Phys. Rev. E 67, 051802 (2003)

Estudios de procesos de adsorción y difusión molecular en materiales cristalinos utilizando simulación molecular

Sofia Calero^{*}

Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales Universidad Pablo de Olavide Carretera de Utrera km1. 41013 Sevilla

Utilizamos técnicas avanzadas de simulación molecular para estudiar adsorción, difusión y catálisis en materiales porosos cristalinos (zeolitas, aluminosilicatos, aluminofostatos, silicogermanatos, titanatos y MOFs). Para ello hemos recurrido al desarrollo de nuevos métodos de simulación, modelos y campos de fuerza¹⁻⁵. La combinación de estos factores nos ha permitido reproducir de forma precisa los datos experimentales existentes, predecir adsorción y difusión molecular en nuevos sistemas, estudiar sus propiedades catalíticas y en resumen analizar cómo afectan a los fenómenos de adsorción y difusión molecular factores tales como la composición química de estructura, su forma, el tamaño y el tipo de poro y la densidad, distribución y tipo de cationes de intercambio, cuando éstos son necesarios para neutralizar la estructura.

* scaldia@upo.es

- ¹ Calero, S.; Dubbeldam, D.; Krishna, R.; Smit, B.; Vlugt, T. J. H.; Denayer, J. F. M.; Martens, J. A.; Maesen, T. L. M. J. Amer. Chem. Soc. **2004**, 126, 11376.
- ² Dubbeldam, D.; Beerdsen, E; Calero, S.; Smit, B. Proc. Nat. Acad. Sci. U.S. **2005**, 102, 12317.
- ³ Dubbeldam, D.; Calero, S.; Maesen, T. L. M.; Smit, B. Phys. Rev. Lett. **2003**, 90, 245901.
- ⁴ Dubbeldam, D.; Calero, S.; Vlugt, T. J. H.; Krishna, R.; Maesen, T. L. M.; Beerdsen, E; Smit, B. *Phys. Rev. Lett.* **2004**, *93*, 088302.
- ⁵ García-Pérez, E.; Dubbeldam, D.; Liu, B.; Smit, B.; Calero, S. Angew. Chem. Int. Ed. **2007**, 46, 276.



Figura 1.

Fluctuations and large deviations in non-equilibrium systems

Bernard Derrida^{*}

École Normale Supérieure, Paris

The exact solutions of simple models allow one to obtain the large deviation functions of density profiles and of the current through simple systems in contact with two reservoirs at different densities.

These simple models show that non-equilibrium systems have a number of properties which contrast with equilibrium systems: phase transitions in one dimension, non local free energy functional, non-Gaussian density fluctuations. They also allow to test more recent approaches such as the macroscopic fluctuation theory, which can be applied to more general diffusive systems.

* derrida@lps.ens.fr

Excitabilidad en circuitos genéticos: un mecanismo de toma de decisión en células

Gürol M. Süel¹, Rajan P. Kulkarni², Michael B. Elowitz² y Jordi García-Ojalvo^{3*}

¹Green Center for Systems Biology, University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX 75390, EEUU

²Division of Biology and Department of Applied Physics, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91125, EEUU

³Departament de Física i Enginyeria Nuclear, Universitat Politècnica de Catalunya, Colom 11, 08222 Terrassa

El funcionamiento celular se basa en redes moleculares de interacción entre genes y proteínas, la arquitectura de las cuales determina el comportamiento dinámico y nolineal de la célula. Existen ejemplos de circuitos genéticos con comportamientos biestables (como en el caso del metabolismo de la lactosa en la bacteria $E. \ coli^1$) y oscilatorios (por ejemplo el ciclo celular²). Un tercer tipo de comportamiento dinámico muy común en sistemas no lineales, que funciona de forma muy característica en entornos ruidosos, es la *excitabilidad*. En esta charla presentamos evidencia experimental y teórica reciente de un circuito genético excitable en la respuesta al estrés de la bacteria *B. subtilis*.

Cuando una población de células *B. subtilis* se somete a estrés por falta de alimentos, se produce una activación de diversos programas genéticos, que dan lugar a respuestas como la formación de esporas o biocapas, o la aparición de flagelos. Otra de estas respuestas es la diferenciación a un estado celular llamado competente, en el que la bacteria es capaz de asimilar ADN extracelular. Dicho estado ha sido ampliamente estudiado en las últimas décadas, sobretodo porque en él se basa una de las técnicas fundamentales de la ingeniería genética, concretamente la transformación. Ensayos bioquímicos muestran que el estado competente es reversible, de forma que cuando una bacteria se diferencia hacia este estado, puede regresar al estado de crecimiento normal (estado vegetativo) si las condiciones ambientales son las adecuadas. Nosotros hemos estudiado al nivel de células individuales el proceso de toma de decisión que lleva a la bacteria a diferenciarse al estado competente, utilizando una combinación de modelización dinámica y microscopía de fluorescencia temporalizada. Los resultados experimentales muestran que la diferenciación hacia el estado competente es transitoria, de manera que la bacteria vuelve de forma espontánea hacia el estado vegetativo, después de haber pasado un cierto tiempo en el estado competente. Esta dinámica supone una restricción muy importante por lo que respecta a la arquitectura de la red de regulación genética que controla el desarrollo de la competencia. Hemos utilizado dicha restricción dinámica, que es compatible con un comportamiento excitable, para determinar el circuito genético mínimo que subyace a la diferenciación al estado competente³. Para ello hemos llevado a cabo una comparación exhaustiva de las observaciones experimentales con predicciones hechas por un modelo dinámico excitable sencillo.

Los resultados muestran que este circuito genético es sorprendentemente robusto a cambios en el nivel de estrés, y está diseñado de forma que ciertas características importantes desde el punto de vista evolutivo, concretamente la frecuencia de la diferenciación y la duración de la fase competente, se pueden controlar de forma independiente⁴. Hemos desarrollado asimismo un método para variar de forma global la cantidad de ruido bioquímico que está presente en la célula, con el que mostramos que las excursiones hacia la competencia son inducidas por ruido.

- ³ G. M. Süel, J. García-Ojalvo, L. M. Liberman y M. B. Elowitz, Nature **440**, 545 (2006).
- ⁴ G. M. Süel, R. P. Kulkarni, J. Dworkin, J. García-Ojalvo y M. B. Elowitz, Science **315**, 1716 (2007).

^{*} jordi.g.ojalvo@upc.edu

¹ M. Santillan y M. C. Mackey, Biophys. J. 86, 1282 (2004).

² J. R. Pomerening, S. Y. Kim y and J. E. Ferrell, Cell **112**, 565 (2005).

Programming Bits and Atoms

Neil Gershenfeld* The Center for Bits and Atoms; Massachusetts Institute of Technology;USA

* gersh@cba.mit.edu

Multi-blob Representation of Concentrated Polymer Solutions

Jean-Pierre Hansen*

Department of Chemistry, University of Cambridge and Laboratoire des Liquides Ioniques et Interfaces Chargées, Université Pierre et Marie Curie, Paris

A novel coarse-grained multi-blob description of concentrated solutions of interacting polymers is presented, which provides a quantitative realization of the familiar Pincus-de Gennes blob picture. Soft, transferable effective interactions between bonded and non-bonded blobs are determined from first principles, by taking appropriate averages over monomer configurations. The number of blobs is chosen such that the blob density does not exceed their overlap threshold, thus allowing polymer concentrations to be explored deep into the semi-dilute regime. This quantitative multi-blob description is shown to preserve known asymptotic scaling laws of polymer solutions, and provides accurate estimates of amplitudes, while leading to orders of magnitude increase of simulation efficiency and allowing analytic calculations of structural and thermodynamic properties.

The coarse-graining strategy is extended to polymer "brushes" grafted to a planar substrate in order to explore the regime of long polymers and high grafting densities, and to the entropically driven clustering and selfassembly of diblock copolymers into lamellar and micellar phases. It is shown that the multi-scale coarse-graining strategy allows the order-disorder transition of micelles to be observed in Monte Carlo simulations.

* jph32@cam.ac.uk

Procesos de activación térmica en nanoestructuras ferromagnéticas

Luis López Díaz^{1*}, L. Torres¹, Eduardo Martinez² y Óscar Alejos³

¹Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca. 37008 Salamanca.

²Departamento de Ingenieria Electromecanica, Universidad de Burgos. E-09001 Burgos.

³Departamento de Electricidad y Electronica. Universidad de Valladolid. E-47071, Valladolid.

Desde un punto de vista teórico, el estudio de las nanoestructuras ferromagnéticas se aborda mediante un modelo mesoscópico semiclásico, tradicionalmente conocido con el nombre de micromagnetismo, que se sitúa a una escala grande en comparación con la escala atómica pero suficientemente pequeña como para resolver la estructura interna de paredes y vórtices. En la primera parte de la presentación se expondrán brevemente los aspectos fundamentales de este formalismo: hipótesis de partida, términos de energía, ecuaciones básicas, limitaciones, etc. En particular, se hará énfasis en el término de interacción entre una corriente de espín polarizada y los espines de la red atómica (transferencia de par de espín), que está acaparando gran interés en estos últimos años, ya que abre nuevas posibilidades para manipular la respuesta del material con vistas a su utilización en dispositivos tecnológicos tales como memorias magnéticas, osciladores, etc. Por otro lado, también nos detendremos para comentar la inclusión del efecto de la agitación térmica en el modelo mediate el formalismo de la dinámica de Langevin. Es este un punto conflictivo que da lugar a una serie de problemas tanto de índole conceptual como práctico, y que aún no ha sido resuelto de forma satisfactoria. Muy brevemente veremos algunas soluciones parciales que se han propuesto al respecto.

En la segunda parte de charla nos centraremos en un tipo particular de nanoestructuras: paredes cabeza-concabeza (head-to-head) en nanotiras de sección rectangular (ver fig. 1) y se expondrán algunos resultados de nuestro grupo de investigación en este campo. Empezaremos presentando los distintos tipos de paredes que pueden presentarse en esta geometría y sus propiedades dinámicas. A continuación, veremos cómo en el movimiento libre de una pared bajo la aplicación de un campo y una corriente, la inclusión de la agitación térmica nos permite obtener un buen acuerdo cuantitativo con resultados experimentales¹ (ver fig. 2). También se estudiará el proceso de *depinning* de una pared anclada en un estrangulamiento. Se mostrará cómo dicho estrangulamiento ejerce una fuerza atractiva sobre la pared que puede caracterizarse mediante un potencial de tipo elástico, lo cual nos permite utilizar, en paralelo con las simulaciones micromagnéticas, un sencillo modelo de pared rígida unidimensional². Usando ambos modelos obtendremos las curvas límite de *depinning* en función del campo y la corriente aplicados. Veremos el efecto de la agitación térmica en dichas curvas, compararemos con resultados experimentales y veremos cómo a partir de dicha comparación es posible obtener información acerca del grado de adiabaticidad en la interacción de la corriente con la pared, lo cual tiene interés desde el punto de vista teórico, dada la incertidumbre en del mismo³.



Figura 1. Pared *head-to-head* anclada en un estrangulamiento.



Figura 2. Comparación de las simulaciones micromagnéticas y del modelo de pared rígida con resultados experimentales.

* lld@usal.es.

- ¹ E. Martinez, L. Lopez-Diaz, L. Torres, C. Tristan, O. Alejos, Phys. Rev. B 75, 174409 (2007).
- ² E. Martinez, L. Lopez-Diaz, L. Torres, C. Tristan, O. Alejos, Phys. Rev. Lett. 98, 267202 (2007).
- ³ D. Ravelosona et al., Phys. Rev. Lett. 95, 117203 (2005).

Evolutionary games on self-organizing populations

Jorge M. Pacheco*

ATP-Group, Complexo Interdisciplinar da U. Lisboa, Av. Prof. Gama Pinto, 2 1649-003 Lisboa, Portugal

I will discuss the evolutionary dynamics of populations in which individuals engage in games associated with popular social dilemmas. The dynamical structure of their social ties co-evolves with individual strategies, such that individuals differ in the rate at which they seek new interactions. Moreover, once a link between two individuals has formed, the productivity of this link is evaluated. Links can be broken off at different rates. Whenever the active dynamics of links is sufficiently fast, population structure leads to a transformation of the payoff matrix of the original game. We explore the evolutionary dynamics of both one shot and repeated games, deriving analytical conditions for evolutionary stability.

* pacheco@cii.fc.ul.pt

Fenómenos colectivos en dinámica social

Maxi San Miguel^{*}

IFISC (Instituto de Fisica Interdisciplinar y Sistemas Complejos, CSIC-UIB), Campus Universitat Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain

El estudio de los fenómenos colectivos ocupa un lugar central en la Fisica Estadistica. Paralelamente este problema se ha estudiado en el contexto de las ciencias sociales¹. La transferencia de conceptos y métodos entre ambas perspectivas está permitiendo avances tanto en aspectos generales del problema como en aplicaciones específicas. Ilustraré este proceso en los llamados problemas de $consenso^2$ y su dependencia con el tipo de interacción entre elementos y la red de interacciones entre los mismos. Consideraré el modelo del votante como ejemplo paradigmático de modelo reticular de no equilibrio y algunas aportaciones recientes desde este punto de vista en la dinámica de competición de lenguas³ y de globalización cultural⁴. Finalmente plantearé el problema de la dinámica coevolutiva del estado de los elementos y su red de interacciones que da lugar a transiciones de fragmentación⁵.

* maxi@ifisc.uib.es, http://ifisc.uib.es/maxi

- ¹ T. Schelling, Micromotives and Macrobehavior, (Norton, New York, 1978)
- ² M. San Miguel et al, Computing in Science and Engineering, 7, 67-73 (2005)
- ³ X. Castello et al, New Journal of Physics, 8, 308 (2006); Europhysics Letters, 79, 66006 (1-6) (2007)
- ⁴ F. Vazquez et al. Physical Review E, 76, 046120 (1-5) (2007); D. Centola et al. Journal of Conflict Resolution, 51, 905-929 (2007)
- ⁵ M. Zimmermann et al. Physical Review E, 69, 065102 (2004); V. M. Eguiluz et al, American Journal of Sociology, 110, 977-1008 (2005); F. Vazquez et al. arXiv:0710.4910

Gases ultrafríos: de los condensados de Bose-Einstein a sistemas altamente correlacionados

Luis Santos*

Institut fuer Theoretische Physik, Universitaet Hannover, Appelstr. 2 30167 Hannover, GERMANY

En los últimos años la física de los gases ultrafríos ha progresado de manera espectacular, convirtiendose en un campo multidisciplinar que engloba a muy diversas comunidades, como la óptica cuántica, la física de la materia condensada, o la física no lineal. En esta charla me gustaría repasar brevemente algunos conceptos importantes de este campo, así como algunos de nuestros resultados recientes que conciernen a la física no lineal de gases dipolares, la dinámica de gases espinoriales, y la óptica de átomos en campos gauge no abelianos.

* santos@itp.uni-hannover.de

Parte II Contribuciones orales

Estudio de las propiedades de transporte en materiales nanoestructurados mediante simulación por marcha aleatoria

Juan Antonio Anta*; Juan Bisquert; Ivan Mora-Seró; Víctor Morales-Flórez

Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales

Universidad Pablo de Olavide

Carretera de Utrera km1. 41013 Sevilla; Departament de Física, Universitat Jaume I, 12071 Castelló Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Cádiz

En esta presentación mostramos el trabajo realizado en simulación por marcha aleatoria para calcular coeficientes de difusión electrónica y otros parámetros de transporte en materiales nanoestructurados de aplicación a la fabricación de dispositivos optoelectrónicos y células solares de nueva generación. Las simulaciones se realizan en redes tridimensionales de trampas con energías distribuidas conforme a una distribución exponencial o a una función pasa centrada en el nivel de Fermi. Se observa por ejemplo que una vez se alcanza el estado estacionario la ocupación de las trampas sigue una distribución de Fermi-Dirac con un nivel de Fermi bien definido. También se analiza cómo el sistema se acerca al estado estacionario y cómo se pasa de un régimen de transporte anómalo a otro de transporte limitado por efectos de trapping. Los resultados de simulación reproducen predicciones analíticas de los modelos de *multiple trapping* y de *hopping*. También se presentan resultados de simulación que sirven para modelizar experimentos de fotovoltajes transitorios en películas de materiales mesoporosos y nanocristalinos. Finalmente se presentan cálculos ejecutados sobre redes desordenadas de trampas construidas sobre empaquetamientos aleatorios de esferas que reproducen la morfología básica de películas de materiales mesoporosos y nanocristalinos.^{1,2}.

* anta@upo.es

¹ Anta, J. A.; Nelson, J.; Quirke, Ñ.; *Phys. Rev. B* **2002**, 65 125324.

² Anta, J. A.; Mora-Seró, I.; Dittrich, T; Bisquert J..; J. Phys. Chem. C 2007, 111 13997.

The Yang-Yang Anomaly in Fluid Criticality: An Exactly Soluble Model

<u>Claudio A. Cerdeiriña</u>^{*}, Gerassimos Orkoulas[†], and Michael E. Fisher[‡] Institute for Physical Science and Technology, University of Maryland

College Park, Maryland 20742-8510, USA

The traditionally accepted scaling formulation of the thermodynamics of a pure fluid near criticality invokes two 'scaling fields', say \tilde{t} and $\tilde{\mu}$, that are algebraic combinations of the temperature, T, and the chemical potential, μ . But is that adequate? Recent work answers 'No!' Specifically, in response to the original suggestion by Yang and Yang¹ that the chemical potential at vaporliquid coexistence, $\mu_{\sigma}(T)$, might become singular when $t = (T - T_c)/T_c \rightarrow 0^-$ —with $\mu_{\sigma}'' \equiv d^2 \mu_{\sigma}/dT^2$ diverging, in general, like the isochoric specific heat, $C_V \sim |t|^{-\alpha}$ (with, in fact, $\alpha \simeq 0.11$)— an analysis^{2–4} of detailed observations for propane and CO₂ demonstrates the presence of a nonvanishing Yang-Yang ratio, R_{μ} , defined as $R_{\mu} \sim \mu_{\sigma}^{\prime\prime}/C_V \ (T \to T_c)$. This violates the traditional scaling predictions and those of simple lattice gas models; but it was shown^{2,5} in a *complete scaling theory* that the pressure, p, can also mix into \tilde{t} and $\tilde{\mu}$, and thereby generate a nonzero R_{μ} . Furthermore, careful simulations⁶⁻⁸ of both a hard-core square-well fluid and the restricted primitive model electrolyte yield Yang-Yang anomalies, *i.e.*, $R_{\mu} \neq 0$.

It is natural to ask if there are statistical mechanical models that exhibit a Yang-Yang anomaly and pressure mixing. And, if so, what might they teach us? Here we describe a general compressible cell gas (or CCG), a version of the usual lattice gas in which, however, the individual cell volumes are allowed to fluctuate^{2,9}. A flexible class of such models can be solved exactly⁹ via the *decoration transformation*¹⁰ so yielding insight into the microscopic origins of the Yang-Yang and related anomalies: *e.g.*, provided volume fluctuations are coupled to interaction energies, R_{μ} may be positive *or* negative and, likewise, it may vary greatly in magnitude⁹. A particular example^{9,11} turns out to be of previous interest in connection with hydrogen-bonding in water.

[‡] xpectnil@ipst.umd.edu

- * Departamento de Física Aplicada, Universidad de Vigo, Ourense 32004, Spain.
- [†] Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of California, Los Angeles, California 90095, USA.
- ¹ C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. Lett. **13**, 303 (1964).
- ² M. E. Fisher and G. Orkoulas, Phys. Rev. Lett. **85**, 696 (2000).
- ³G. Orkoulas, M. E. Fisher, and C. Üstün, J. Chem. Phys. **113**, 7530, (2000).
- ⁴ A. Kostrowicka Wyczalkowska, M. A. Anisimov, J. V. Sengers, and Y. C. Kim, J. Chem. Phys. **116**, 4202 (2002).
- ⁵ Y. C. Kim, M. E. Fisher, and G. Orkoulas, Phys. Rev. E **67**, 061506 (2003).
- ⁶ Y. C. Kim and M. E. Fisher, J. Phys. Chem. B **108** 6750 (2004).
- ⁷ Y. C. Kim and M. E. Fisher, Comp. Phys. Commun. 169, 295 (2005).
- ⁸ Y. C. Kim, Phys. Rev. E **71**, 051501 (2005).
- ⁹ R. T. Willis and M. E. Fisher, *Poster* presented at the Conference *Thermo 2005*, University of Maryland, College Park (April, 2005).
- ¹⁰ M. E. Fisher, Phys. Rev. **113**, 969 (1959).
- ¹¹ S. Sastry, P. G. Debenedetti, F. Sciortino, and H. E. Stanley, Phys. Rev. E **53**53, 6144 (1996).

Critical wetting out of equilibrium: from high to low system dimensionalities

Francisco de los Santos^{*}, Elvira Romera and Miguel Angel Muñoz

Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia Facultad de Ciencias, Universidad de Granada Campus de Fuentenueva, Severo Ochoa s/n E - 18071 - Granada

Much scientific effort has been devoted to the study of equilibrium wetting since the idea that wetting can be described as a phase transition was introduced by Cahn in the late seventies. Nonequilibrium wetting, however, has only been recently addressed. Here, critical wetting transitions under nonequilibrium conditions are studied by analyzing Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) interfaces in the presence of a binding substrate. In the case of high system dimensionalties, a self-consistent meanfield method is used. For a positive KPZ nonlinearity, a single (Gaussian) regime is found. On the contrary, interfaces corresponding to negative nonlinearities lead to three different regimes of critical behavior for the surface order-parameter: (i) a trivial Gaussian regime, (ii) a weak-fluctuation regime with a trivially located critical point and nontrivial exponents, and (iii) a highly nontrivial strong-fluctuation regime, for which we provide a full solution¹.

Low system dimensionalites are investigated by studying numerically one dimensional systems with a negative KPZ nonlinear coefficient, which are characterized in detail by providing the critical exponents for both the average height and the surface order-parameter. Evidence is shown that the presence of a potential well induces an anomalous scaling of the slopes which is not present in the complete wetting scenario².

^{*} fdlsant@ugr.es

¹ Critical wetting of a class of nonequilibrium interfaces: A mean-field picture, F. de los Santos, E. Romera, O. Al Hammal, and M.A. Muñoz, Phys. Rev. E 75, 031105 (2007).

² Critical wetting of a class of nonequilibrium interfaces: A computer simulation study, E. Romera, F. de los Santos, O. Al Hammal, and M.A. Muñoz. submitted.

Rectificación e inversión de corriente inducidos por inestabilidad en el estado fundamental

L. Dinis¹, E.M. González², J.V. Anguita³, J.M.R. Parrondo¹ y J.L. Vicent²

¹ Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear. Universidad Complutense de Madrid. 28040 Madrid

² Departamento de Física de Materiales. Universidad Complutense de Madrid. 28040 Madrid

³ Instituto de Microelectrónica de Madrid. Consejo Superior de Investigaciones Científicas. 28670 Tres Cantos.

Los dispositivos superconductores están resultando una herramienta adecuada para el estudio de los mecanismos de rectificación en sistemas colectivos, en los que la interacción entre las partículas es importante. Son abundantes los experimentos en los que una película superconductora se estructura utilizando centros de anclaje de forma asimétrica. Debido a la interacción de los vórtices superconductores con los centros asimétricos es posible conseguir la rectificación del movimiento de los vórtices, estimulados mediante una fuerza externa con simetría temporal, constituyendo un ejemplo de lo que se conoce como "rocking ratchet"¹. El interés de los dispositivos "ratchet" de vórtices es doble: pueden manifestar nuevos mecanismos colectivos por los que se produce la rectificación por un lado, y por otro contribuir a desentrañar la física de los vórtices en superconductores.

Las inversiones en la dirección de rectificación en estos dispositivos han sido explicadas mediante modelos unidimensionales o por medio de la coexistencia de vórtices anclados o intersticiales moviéndose en direcciones opuestas¹. También se han estudiado modelos bidimensionales de forma numérica, obteniéndose inversión de corriente solo cuando existen vórtices intersticiales (no anclados) en el estado fundamental $(T = 0)^2$. La inversión se explica mediante mecanismos basados en la interacción local entre vórtices y centros de anclaje.

Sin embargo, la inversión de corriente ocurre en sistemas experimentales en los que los intersticiales no están presentes en el estado fundamental³. Esta inversión de corriente desaparece al incrementar la temperatura o la intensidad del anclaje.

Nuestras simulaciones numéricas indican que la inversión de corriente se debe a un nuevo mecanismo colectivo: una inestabilidad del estado fundamental selectiva respecto del signo de la fuerza externa aplicada³.

La figura 1 muestra el mecanismo para una situación con tres vórtices por centro de anclaje triangular. El panel de la izquierda muestra una configuración inicial con un solo vórtice intersticial y un centro triangular con un vórtice de menos. La dirección natural de rectificación de los vórtices es "hacia arriba" en la figura, esto es, en el sentido indicado por las puntas de los triángulos. Esta rectificación ocurre para fuerzas suficientemente intensas, sin embargo, para fuerzas débiles la rectificación presenta el sentido contrario.

El panel superior derecho corresponde a una foto fija de los vórtices tras haber evolucionado durante un tiempo suficientemente largo bajo la acción de una fuerza constante positiva (en la dirección de las puntas de los triángulos). El panel inferior derecho corresponde a la evolución durante el mismo tiempo bajo la acción de una fuerza de igual módulo pero sentido negativo. Como se aprecia comparando ambos paneles, el número de vórtices intersticiales, libres para moverse, es mucho mayor en el panel inferior. El movimiento en la dirección positiva se produce de forma columnar, limitándose a las columnas en las que existe un defecto, tanto si es un vórtice de más como una ausencia de un vórtice. Cuando los vórtices se mueven siguiendo una fuerza externa negativa, el movimiento acaba propagándose a toda la muestra, dando lugar a la inversión de corriente observada para fuerzas débiles.



 $^{t=0}_{i=\tau}$ Figura 1. Mecanismo de la rectificación negativa. Fotos fijas provenientes de las simulaciones. Condición inicial (izquierda) y configuraciones tras la evolución durante $\tau=6.5\times10^{-9}{\rm s}$ con fuerza positiva (derecha arriba) y negativa (derecha abajo). Las flechas indican las únicas 2 columnas que presentan movimiento para fuerza positiva. Como se puede observar, el número de vórtices intersticiales es mucho mayor cuando la fuerza aplicada es negativa.

^{*} ldinis@fis.ucm.es

¹ J.E. Villegas, S. Savelev, F. Nori, E.M. González, J.V. Anguita, R. Garcia, and J.L. Vicent, Science **302**, 1188 (2003)

 $^{^2}$ C.J. Olson-Reichhardt and C. Reichhardt, Physica C 432, 125 (2005).

³ L. Dinis, E.M. González, J.V. Anguita, J.M.R. Parrondo y J.L. Vicent, Phys. Rev. B 76, 212507 (2007)

Experimento de Faraday en medio activo. Difusión anómala

<u>Guillermo Fernández García</u>^{*}, Vicente Pérez Muñuzuri y V. Pérez-Villar Grupo de Física No Lineal. Facultad de Físicas Univ. de Santiago de Compostela 15782 Santiago de Compostela

Los llamados medios activos exhiben un comportamiento espacio-temporal realmente rico que abarca desde estructuras ordenandas formadas por ondas viajeras hasta caos espacio-temporal. Desde el principio, el estudio de la propagación de ondas en medios activos se ha centrado sobre todo en el campo de la química y la biología, pero recientemente ha surgido con fuerza un nuevo campo de investigación en relación con el estudio de la acción combinada de la reacción, difusión y advección^{1,2}.

Resultan por ello muy interesantes aquellos experimentos en los que la dinámica del medio fluido resulta accesible para el trabajo de laboratorio. Uno de dichos casos es el llamado experimento de Faraday^{3,4} en honor al científico Británico Michael Faraday que primero lo describió, y que consistente en vibrar verticalmente un contenedor con un medio fluido en su interior. Dicho experimento es clásico en hidrodinámica, y en él se forman patrones espaciotemporales en la superficie libre del líquido como consecuencia de la inestabilidad paramétrica del campo gravitatorio en el sistema de referncia del contenedor.



Figura 1. Montaje experimental donde: GF es el generador de funciones, Am es el amplificador, R el reactor, A el acelerómetro, AC el acondicionador de corriente, O el osciloscopio, F filtro óptico, L son las lámparas, CCD la cámara de vídeo, DVD la grabadora de vídeo y finalmente CP el computador personal.

Se describirá el estudio realizado con un experimento

resultado de combinar un medio activo fluido (reacción de Belousov-Zhabotinsky en régimen oscilatorio) y la inestabilidad de Faraday. En la figura 1 se presenta un esquema del montaje experimental. Fruto de esta combinación y tomando como parámetros del experimento la frecuencia y amplitud de vibración del reactor externo se analizan los diferentes regímenes observados en el medio activo.

Uno de dichos regímenes se caracteriza por la inducción de una onda química de advección que surge en el medio con una periodicidad que coincide con el periodo de oscilación del medio no forzado. La observación de esta onda nos ha llevado a abordar el estudio de la difusión neta del sistema, como combinación de la difusión estándar más la acción advectiva del campo de velocidades. Dicho estudio ha revelado una difusión anómala⁵ que se produce en el medio fluido como consecuencia del movimiento vertical del reactor. Dicha difusión anómala ha resultado ser del tipo superdifusivo, que se caracteriza porque el desplazamiento cuadrático medio de las partículas que se mueven bajo su influencia sigue una función potencial del tiempo

$$\left\langle r^2(t) \right\rangle \propto D \cdot t^{\nu}$$
 (1)

de exponente $1 < \nu < 2$, a diferencia de la difusión normal ó gaussiana en la que $\nu = 1$. La superdifusión se produce cuando dichas partículas experimentan grandes desplazamientos conocidos en la bibliografía como *Levy flights*.

El exponente $1<\nu<2$ ha sido estudiado para diferentes valores de los parámetros analizando la evolución de partículas pasivas en el medio fluido así como a través del estudio del propio medio activo.

* guillermo@fmares.usc.es

- ¹ Z. Neufeld, Phys. Rev. Lett. 87, 108301 (2001)
- ² V. Pérez-Villar et al., Phys. Rev. E 74, 046203 (2006).
- ³ M. Faraday, Philos Trans. R. Soc. London 121, 319-340 (1831)
- ⁴ J.W. Miles and D. Henderson, Annu. Rev. Fluid Mech. 22, 143 (1990)
- ⁵ A.J. Majda and P.R. Kramer. Phys. Rep., 314, 237 (1999)
- ⁶ G. Fernández-García, D.I. Roncaglia, V. Pérez-Villar, A.P. Muñuzuri and V. Pérez-Muñuzuri. Chemical wave dynamics in a vertically oscillating fluid layer. Physical Review E (2008).

Segregación en un gas granular denso bajo la acción de la gravedad

<u>Vicente Garzó</u>* Departamento de Física Universidad de Extremadura 06071 Badajoz

La segregación y el mezclado de granos de distinto tamaño y/o masa en mezclas granulares vibradas es uno de los problemas más importantes en medios granulares tanto desde el punto de vista fundamental como práctico. Mientras que en algunos casos es desable y útil separar partículas de distinto tipo, en otros muchos casos puede resultar ser un efecto no deseado y difícil de controlar. Aunque distintos mecanismos han sido propuestos para entender el fenómeno, el problema dista mucho de estar completamente cerrado. Entre los distinos mecanismos físicos involucrados en la segregación, la difusión térmica es el mecanismo más relevante cuando la amplitud de vibración es alta y el medio granular se comporta como un gas granular. En ese régimen, la teoría cinética convenientemente adaptada a sistemas disipativos resulta ser una herramienta útil para poder entender a nivel más fundamental el fenómeno de la segregación.

Nuestro modelo va a ser una mezcla binaria de discos (d=2) o esferas (d=3) duras inelásticas de masas m_i and tamaños σ_i . Sin pérdida de generalidad supondremos que $\sigma_1 > \sigma_2$. Las colisiones entre las distintas parejas son inelásticas y están caracterizadas por 3 coeficientes normales de restitución $\alpha_{ij} \leq 1$. El sistema está en presencia del campo gravitatorio $\mathbf{g} = -g\hat{\mathbf{e}}_z$, donde g es una constante positiva y $\hat{\mathbf{e}}_z$ es el vector unitario en la dirección positiva del eje z. La mezcla está calentada por la acción de una fuerza externa estocástica que imita el papel de un baño térmico. Aunque en los experimentos reales la energía es invectada en el sistema mediante paredes vibrantes, resultados obtenidos recientemente¹en presencia de este termostato estocástico muestran un buen acuerdo con datos de simulación² de mezclas vibradas. El factor de difusión térmico Λ_{12} se define en el estado estacionario en el que los flujos de mas
a \mathbf{j}_i se anulan. En estas condiciones, Λ_{12} viene dado por

$$-\Lambda_{12}\nabla\ln T = \left(\frac{\nabla n_1}{n_1} - \frac{\nabla n_2}{n_2}\right),\tag{1}$$

donde n_i es la densidad numérica de partículas de la especie *i*. Si suponemos que la gravedad y el gradiente térmico son paralelos (de modo que la pared inferior está más caliente que la superior), si $\Lambda_{12} > 0$ las partículas de mayor tamaño se acumularán en la parte superior de la muestra, mientras que si $\Lambda_{12} < 0$, las partículas de mayor tamaño se acumularán en la parte inferior de la muestra. La primera situación se suele referir como el efecto de nueces de Brasil (BNE) mientras que la segunda es el efecto inverso de nueces de Brasil (RBNE). En consequencia la determinación de Λ_{12} nos proporciona un criterio de segregación en el sistema.



Figura 1. Diagrama fases para la transición BNE/RBNE para $\alpha_{ij} \equiv \alpha = 0.8$ en ausencia de campo gravitatorio para tres valores distintos de la fracción sólida de volumen ϕ .

El objetivo de este trabajo es calcular el factor de difusión térmica en el caso límite de difusión de un intruso o impureza $(n_1/n_2 \rightarrow 0)$ en un gas granular denso. El punto de partida será la reciente solución³ encontrada para la ecuación de Enskog, la cual es válida para cualquier grado de disipación y para sistemas moderadamente densos. En particular, a primer orden en los gradientes, el flujo de masa $j_{1,z}$ viene dado por

$$j_{1,z} = -\frac{m_1^2}{\rho} D_{11} \partial_z n_1 - \frac{m_1 m_2}{\rho} D_{12} \partial_z n_2 - \frac{\rho}{T} D_1^T \partial_z T, \quad (2)$$

donde D_{11} , D_{12} , y D_1^T son los coeficientes de transporte relevantes. El conocimento de las expresiones de dichos coeficientes así como de la ecuación de estado nos permite obtener el factor Λ_{12} en términos de los parámetros del sistema. La condición $\Lambda_{12} = 0$ proporciona un criterio para la transición BNE \Leftrightarrow RBNE. A modo ilustrativo, en la Fig. 1 se muestra un diagrama de fases BNE/RBNE característico en ausencia de campo gravitatorio. La región por encima (debajo) de las líneas corresponde a BNE (RBNE). Es claro que en este caso el tamaño de la región RBNE disminuye a medida que aumenta la densidad del gas granular.

^{*} vicenteg@unex.es

¹ V. Garzó, Europhys. Lett. **75**, 521 (2006).

² M. Schröter *et al.*, Phys. Rev. E **74**, 011307 (2006).

³ V. Garzó, J. W. Dufty and C. M. Hrenya, Phys. Rev. E **76**, 031303 (2007); V. Garzó, C. M. Hrenya and J. W. Dufty, Phys. Rev. E **76**, 031304 (2007).

⁴ http://www.unex.es/fisteor/vicente

Vortex Nucleation in Bose-Einstein Condensates due to Effective Magnetic Fields

Douglas R. Murray¹, Stephen M. Barnett¹, Patrik Öhberg², <u>Damià Gomila^{3*}</u>

¹Dept. of Physics, SUPA, University of Strathclyde

Glasgow G4 0NG, UK

²Dept. of Physics, SUPA, Heriot-Watt University

Edinburgh EH14 4AS, UK

³ IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB)

Campus Universitat Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain

A spectacular property of superfluid systems is their ability to support quantized vortices. These can appear as flux lines in superconductors to which a sufficiently strong magnetic field has been applied. Alternatively, in the case of neutral superfluids subject to sufficiently fast external rotation, they exist as lines of vanishing condensate density around which the velocity field flow is quantized. These scenarios are closely linked because the equations describing a rotating superfluid, when studied in the rotating frame, mimic those of a charged superfluid (a superconductor) in a magnetic field, with the Coriolis force playing the role of the Lorentz force.

The dilute gas BEC is an extremely useful tool for probing the underlying physics of superfluid phenomena. In particular, vortex nucleation in condensates rotated by an anisotropic potential or localized stirring have attracted a lot of attention in the last years. Yet, the precise mechanism for the nucleation of vortices in these systems is still an open question.

Rotating a condensate only provides access to a limited class of problems for which the effective magnetic field is spatially homogeneous in the plane perpendicular to the rotation axis. Recent proposals to create effective magnetic fields in a more direct way open the door for more wide-ranging studies into the interaction of degenerate quantum gases with effective magnetic fields. The method considered here exploits the interaction of Λ -type three-level atoms with two laser beams possessing relative orbital angular momentum (OAM) in an electronically induced transparency (EIT) configuration. The corresponding vector potential **A** shows up in the effective equation of motion for the atoms in the following way¹:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + \tilde{V} + g\left|\Psi\right|^2 + \frac{i\hbar}{M}\mathbf{A}\cdot\nabla\right)\Psi,\quad(1)$$

where $\tilde{V}(r) = V + \frac{|A|^2}{2M}$ and $g = 4\pi\hbar^2 a/Ma_z$ is the scaled strength of the two-body collisions between atoms and a_z represents the thickness of the cloud in the z-direction. If one or both beams are Laguerre-Gaussian modes carring OAM, then the induced vector potential acting on the atoms can be approximated by

$$\mathbf{A} = -\frac{\hbar\ell}{\mathbf{R}} \alpha_{\mathbf{0}} \left(\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{R}}\right)^{\nu} \mathbf{e}_{\phi}, \qquad (2)$$

An advantage of this method is that the vector potential, and consequently the effective magnetic field, can be shaped and controlled by appropriate modifications of the phase and intensity of the incident light.

In this work we study the influence of both homogeneous and inhomogeneous effective magnetic fields on the dynamics of a harmonically trapped Bose-Einstein Condensate and observe vortex nucleation for critical parameter values². The exact dynamics are specific to the geometry of the trapping potential and effective magnetic field, but the the existence of unstable modes in the spectrum of elementary excitations as a precursor to vortex nucleation is a universal feature for all cases considered. Recent advances in light beam shaping technology, using for instance spatial light modulators, mean that all the potentials we consider can realistically be created in the laboratory. Fynally we show that the eventual configuration of vortices in the cloud depends on the geometry of the applied field.



Figura 1. Snapshots of the density (top) and phase (bottom) for an inhomogeneous effective magnetic field. Time increases from left to right. The m = 4 octopole surface mode is resonantly excited, and vortex nucleation is enabled by a dynamical instability.

² D.R. Murray, S.M. Barnett, P. Ohberg, and D. Gomila, Physical Review A **76**, 053626 (2007); submitted (2007).

35

^{*} damia@ifisc.uib.es

¹ G. Juzeliunas and P. Öhberg, Phys. Rev. Lett **93**, 033602 (2004); G. Juzeliunas, P. Öhberg, J. Ruseckas, and A. Klein, Phys. Rev. A 71, 053614 (2005).

El anillo de fuerza y su papel en la división celular bacteriana

Ines Hörger, Enrique Velasco, Marisela Vélez y Pedro Tarazona* Departamento de Física Estadística de la Materia Condensada Universidad Autónoma de Madrid

Hasta el día de hoy el mecanismo de la división celular bacteriana no se ha podido describir en términos biofísicos. Las imágenes de microscopía muestran los diferentes estados de la célula a lo largo del proceso de división pero todavía no hay certezas sobre el orígen de la fuerza necesaria para deformar la membrana bacteriana hasta su fisión. Se supone que uno de los actores principales de este proceso es la proteína FtsZ. Esta proteína es la primera que se concentra en el lugar de la división celular formando una estructura llamada anillo de fuerza.

El trabajo que voy a presentar consta de dos partes. En la primera parte proponemos un mecanismo de generación de fuerza por filamentos de FtsZ. Basado en datos experimentales desarrollamos un modelo para describir la forma de los polímeros que encontramos en dos dimensiones y extrapolamos esta descripción a una superficie cilíndrica. La segunda parte trata de describir la deformación de la membrana causada por el anillo de fuerza y de estimar la fuerza necesaria para esta deformación.

La forma de filamentos individuales de FtsZ de imágenes de AFM ha sido modelada considerando los monomeros como bolas en una cadena y unos pocos parámetros para representar sus interacciones efectivas. Filamentos sin contactos laterales tienen una tendencia a curvarse pero mantienen cierta flexibilidad. Para polímeros mas largos la atracción lateral entre filamentos tiene un papel muy importante. Aparecen espirales cuya forma esta determinada por un balance entre las atracciones laterales entre filamentos y la rigidez de la cadena.¹



Figura 1. Filamento de 3000 monómeros de FtsZ sobre una superficie cilíndrica con radio de 470 nm. Las atracciones laterales generan una fuerza radial F_r .

Hemos utilizado los parámetros estimados para modelar el comportamiento de los filamentos en una superficie cilíndrica. Dependiendo de la rigidez y de los ángulos preferentes en las dos direcciones adicionales, FtsZ forma lineas, espirales, hélices o anillos.² En las simulaciones estos anillos generan una fuerza radial para optimizar sus contactos laterales. El mecanismo de generación de fuerza que proponemos es entonces el desarrollo de espirales de FtsZ en el lugar de la división celular.

En la segunda parte estudiamos la deformación de la membrana bacteriana bajo la acción de este anillo de fuerza. Partiendo del modelo de Helfrich minimizamos la energía de la membrana considerando tres efectos en paralelo: la presión osmótica que se resiste a reducir el volumen, la restricción sobre el área y la energía de curvatura. Para hacer predicciones cuantitativas sobre la fuerza necesaria para producir el estrangulamiento de la membrana incluimos información experimental directa sobre monocapas de los lípidos de E.Coli.



Figura 2. Fuerza necesaria para el estrangulamiento de la membrana bacteriana. $\Delta = 1$ corresponde a la división total de la celula.

^{*} pedro.tarazona@uam.es

¹ Hörger, I., Velasco, E., Mingorance, J., Rivas, G., Vélez, M., Tarazona, P. "Langevin Computer Simulations of bacterial protein filaments and the force generating mechanism during cell division", Phys. Rev. E 76 (2007)

² Hörger, I., Velasco, Vélez, M., Tarazona, P. "FtsZ bacterial cytosceleton polymers on curved surfaces: the importance of lateral interactions", Biophysical Journal (enviado)
Máquinas térmicas acopladas y sistemas brownianos

<u>B. Jiménez de Cisneros</u>* y A. Calvo Hernández Departamento de Física Aplicada

Universidad de Salamanca

37008 Salamanca

La Termodinámica Clásica de Equilibrio (TCE) nos dice que cuando un motor funciona intercambiando calor con dos baños térmicos de temperaturas T_1 y T_2 $(T_1 < T_2)$, su eficiencia termodinámica está limitada por la eficiencia de Carnot, $\eta_{\rm C} = 1 - \tau$ ($\tau = T_1/T_2$). Esta cota tiene escasa relevancia práctica ya que se refiere a procesos reversibles en los que la conversión de energía ocurre de forma infinitamente lenta, de manera que las máquinas reales muestran unas eficiencias que suelen ser mucho menores. Las dificultades de la TCE a la hora de estudiar el comportamiento de los convertidores energéticos reales ha estimulado el desarrollo del campo conocido como Termodinámica de Tiempo Finito (TTF), que pretende describir de manera sencilla las principales fuentes de irreversibilidad observadas en dispositivos reales.

Un ejemplo clásico de los métodos de la TTF es el modelo de Curzon-Ahlborn. Consiste en un ciclo de Carnot recorrido en tiempo finito en el que la única fuente de irreversibilidad es debida a los intercambios de calor entre el sistema de trabajo y los baños térmicos (hipótesis endoreversible). Si los intercambios de calor además obedecen una lev de Fourier, se encuentra que la eficiencia del motor en condiciones de máxima potencia es $\eta_{\rm CA} = 1 - \sqrt{\tau}$, conocida como eficiencia de Curzon-Ahlborn. Esta expresión constituye una buena aproximación de la eficiencias observadas en diferentes dispositivos térmicos reales, lo que sugiere que debería ser posible derivarla en un contexto más amplio. En esta línea, Van den Broeck¹ ha propuesto un modelo formado por un conjunto de máquinas térmicas genéricas que operan en el régimen de respuesta lineal caracterizado por ciertos coeficientes de transporte L_{ij} . El acoplamiento en cadena de estas máquinas equivale a un único convertidor energético que funciona entre temperaturas arbitrarias T_1 y T_2 y que puede ser analizado con cierto detalle dentro del esquema de la Termodinámica Irreversible Lineal (TIL). Si las máquinas operan individualmente a máxima potencia y el acoplamiento entre los flujos termodinámicos es perfecto, la eficiencia del dispositivo térmico total coincide con la de Curzon-Ahlborn.

Recientemente se ha extendido esta derivación de la eficiencia de Curzon-Ahlborn al estudio de diferentes dispositivos térmicos² dentro el esquema de la TIL y se ha demostrado que es un caso particular de otra más general³: debido al acoplamiento entre las máquinas, las fuerzas termodinámicas a lo largo de la cadena y los coeficientes de transporte deben satisfacer una ecuación diferencial cuya solución depende de una constante de integración que determina el régimen de funcionamien-

to de toda la cadena. Sorprendentemente, este régimen de funcionamiento "global" no coincide necesariamente con el régimen de funcionamiento de cada máquina. Por ejemplo, cuando la cadena trabaja a máxima potencia las máquinas individuales no operan generalmente en ese mismo régimen. Sin embargo, la eficiencia de Curzon-Ahlborn y otros resultados de la TTF endoreversible pueden ser recuperados sin postular un régimen concreto de operación para todas las máquinas; basta con que los flujos termodinámicos estén perfectamente acoplados. En caso contrario aparecen irreversibilidades adicionales que se pueden formular⁴ mediante un flujo de calor entre los baños externos, reproduciendo así algunas características de los modelos irreversibles de la TTF. Como sistema físico concreto donde se pueden poner a prueba estas ideas se considerará el formado por un conjunto de partículas brownianas que se mueven en un fluido con una distribución de temperatura inhomogénea.



Figura 1. Cadena de máquinas acopladas entre los baños de temperaturas T_1 y T_2 : J(T) es el flujo de calor que atraviesa cada baño y $\Delta \dot{W}$ la potencia extraída de cada máquina.

37

^{*} cisneros@usal.es

 $^{^1}$ C. Van den Broeck, Phys. Rev. Lett. **95** 190602 (2005).

² B. Jiménez de Cisneros, L. A. Arias-Hernández y A. Calvo Hernández, Phys. Rev. E **73** 057103 (2006).

³ B. Jiménez de Cisneros, A. Calvo Hernández, Phys. Rev. Lett. **98** 130602 (2007).

⁴ B. Jiménez de Cisneros, A. Calvo Hernández (enviado a publicar).

Modelización hidrodinámica de partículas autopropulsadas y de rotores. Movimiento de bacterias.

Isaac Llopis*, Ignacio Pagonabarraga

Departament de Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de Barcelona, Barcelona, Spain

Muchas bacterias se desplazan en fluidos autopropulsadas por mecanismos internos. Hay diferentes mecanismos, los más habituales son la oscilación de uno o varios flagelos situados en una región de la membrana (Fig.1), es el caso de la E.coli, por ejemplo. Otro mecanismo es el movimiento cíclico no reversible de cilios situados a lo largo de toda la membrana bacteriana, como en la opalina.

Estos organismos micrométricos se mueven a velocidades tales que el número de Reynolds es tal que el término inercial puede menospreciarse. El acoplamiento hidrodinámico es esencial para la cooperación entre partículas y su agregación en el movimiento colectivo. Hemos elaborado un modelo sencillo de partículas autopropulsadas para estudiar el papel de la hidrodinámica en el movimiento de este tipo de objetos. Para ello se han hecho simulaciones lattice-Boltzmann. A través de este método hemos simulado la dinámica de partículas autopropulsadas que se mueven en un fluido de número de Reynolds bajo. El modelo numérico incluye el acoplamiento hidrodinámico con el solvente en el que se mueven las partículas, de una manera tal que es fácil controlar el papel de la hidrodinámica en tales suspensiones.

Las funciones de distribución de velocidades muestran grandes desviaciones respecto al comportamiento gaussiano en tiempos tales que las partículas aún no han colisionado con las vecinas, lo que llamamos tiempos cortos. Esto es una clara evidencia de que el sistema se encuentra fuera del equilibrio termodinámico. A tiempos largos las partículas colisionan repetidas veces con otras, cambiando considerablemente la configuración respecto a la condición inicial.

El desplazamiento cuadrático medio nos da la información de los diferentes regímenes dinámicos, después de colisionar repetidas veces, el movimiento es difusivo. Sin embargo, a fracciones volúmicas bajas, eventualmente, hay una transición a movimiento balístico debido a la cooperación entre ellas¹ (Fig.2).

En la charla se discutirán las estructuras formadas y como se correlacionan con el comportamiento dinámico.

En la biología también hay varios ejemplos de rotores, como la base de los cilios o la ATP-asa. Presentamos un mecanismo análogo al de propulsión para ellos. En este caso, al tenerlos en suspensión, se desplazarán pero no lo harán por ellos mismos sino por las interacciones con los otros rotores. Caracterizaremos la velocidad colectiva y su implicación a tiempos largos, cuando se difunden en el sistema. Analizaremos las diferencias con la difusión de suspensiones de partículas pasivas y el estado de equilibrio o no equilibrio, junto a la medida de una cierta temperatura efectiva que caracterice el sistema².



Figura 1. La bacteria E. coli usa estructuras largas y delgadas llamados flagelos para propulsarse ella misma (Nicolle Rager Fuller, National Science Foundation).



Figura 2. Desplazamiento cuadrático medio en una suspension de partículas activas en un sistema bidimensional de 400 partículas a Re = 0.25. La linea continua corresponde al movimiento balístico, $\langle \Delta r^2(t) \rangle \sim t^2$, la linea discontinua al difusivo, $\langle \Delta r^2(t) \rangle \sim t$. Los círculos son los datos de fracción volúmica alta (0.282) mientras que los cuadrados y triángulos son a fracción volúmica baja (0.1) para dos condiciones iniciales diferentes. Los tiempos característicos: $\tau_r \sim R^2/\nu \sim 10$, $\tau_m \sim R/u_\infty \sim 100$ y $\tau_D \geq R^2/D \sim 5 \cdot 10^4$.

* isaacll@ffn.ub.es

¹ I. Llopis and I. Pagonabarraga, Europhys. Lett. **75**, 999 (2006).

² I. Llopis and I. Pagonabarraga, *submitted to Eur. Phys. J. E.*

Influencia del comportamiento humano en la transmisión de información: Marketing viral y redes sociales^{*}

José Luis Iribarren^a, Esteban Moro^b

^a IBM Corporation, ibm.com e-Relationship Marketing Europe, 28002 Madrid ^b Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid, 28911 Leganés (Madrid)

La dinámica de transmisión de información en redes sociales es de vital importancia en procesos tales como rumores¹, difusión de innovación², la comunicación "boca-oreja"³ o el marketing viral⁷. Sin embargo, debido a la dificultad de monitorizar a los agentes participantes en dichos procesos, la mayoría de los estudios de difusión de información en redes sociales recurren a modelos teóricos⁴ o medidas indirectas⁵. En esta charla presentaremos los resultados de un experimento en redes sociales diseñado para observar y cuantificar la propagación de información comercial. Utilizando los datos recogidos en campañas de Marketing Viral en las que participaron 31000 personas de 11 países $europeos^6$, hemos visto cómo la información viaja mayoritariamente debido a eventos super-difusivos y a un ritmo inesperadamente lento (logarítmico en tiempo). Esto es debido a la gran variabilidad tanto en la intensidad como en la frecuencia de la respuesta de los participantes a pesar de que participaban en la misma campaña, con la misma información a transmitir v los mismos incentivos. La calidad de los datos permite una modelización matemática de dichas campañas de marketing viral mediante procesos estocásticos de ramificación⁸ que a su vez corroboran el papel preponderante de la heterogeneidad en las redes sociales a la hora de describir la difusión de información y que invalidan los modelos tradicionales basados en promedios sobre la población. El hecho de que los humanos muestren un grado similar de heterogeneidad en otras actividades $^{9-14}$ sugiere que nuestros resultados son aplicables también a otros procesos de transmisión de información y que pueden tener importance en áreas como la gestión de negocios, comunicaciones, marketing o comunidades online 6,15 .

Agradecimientos: J.L. Iribarren agradece el apoyo de IBM Corporation en la recogida de datos anónimos en la propagación de campañas de marketing viral. E. Moro agradece el apoyo parcial del MEC a través de los contratos FIS2004-01001, MOSAICO y de la Comunidad de Madrid a través de los contratos UC3M-FI-05-077 y SIMUMAT-CM * Este trabajo ha sido premiado por IBM con un Shared University Research Award. Más información en http://tinyurl.com/2btdtl

^a iribarren@es.ibm.com

 b esteban.moro@uc3m.es

- ¹ Moreno, Y., Nekovee, M., & Pacheco, A.F., Dynamics of rumor spreading in complex networks, *Phys. Rev. E* **69**, 066103, (2004).
- ² Valente, T.W., Network Models of the Diffusion of Innovations, *Hampton Press*, Cresskill, NJ, (1995).
- ³ Dye, R., The Buzz on Buzz. *Harvard Business Rev.*, vol. 78, No. 6, pp. 139-146 (2000).
- ⁴ Goldenberg, J., Libai, B. & Solomon, S., Marketing Percolation, *Phys A* **284**, (1-4), 335-347, (2000).
- ⁵ Hidalgo, C.A., Castro, A., & Rodriguez-Sickert, C., The effect of social interactions in the primary consumption life cycle of motion pictures, *New J. Phys.* **8** 52 (2006).
- ⁶ Iribarren, J.L., Moro E., Information diffusion epidemics in social networks, arxiv:0706.0641 (2007)
- ⁷ Jurvetson, S. & Draper, R., Viral Marketing. Netscape M-Files, (1997).
- ⁸ Harris, T.E., The Theory of Branching Processes, *Springer-Verlag*, Berlin, (2002).
- ⁹ Barabási, A.-L., The origin of bursts and heavy tails in human dynamics, *Nature* **435**, 207, (2005).
- ¹⁰ Aiello, W., Chung, F. & Lu, L., A random graph model for power law graphs. In *Proc. of the 32nd Annual ACM Symposium of Theory of Computing*, pp. 171-180, ACM, New York, (2000).
- ¹¹ Gruhl, D., Guha, R., Liben-Nowell, D. & Tomkins, A., Information Diffussion Through Blogspace, In *Proc. of the* 13th intl. conf. on WWW, ACM, New York, (2004).
- ¹² Pitkow, J.E., Summary of WWW Characterizations. In Proc. of the 7th WW Web Conference (WWW7), (1997).
- ¹³ Gladwell, M., The Tipping Point, Little, Brown and Company, New York, (2000).
- ¹⁴ Liljeros, F., Edling, C.R., Nunes Amaral, L.A., Stanley, H.E. & Aberg, Y., The web of human sexual contacts, *Nature*, **411**, pp. 907-908 (2001).
- ¹⁵ Iribarren, J.L., Moro E., The network laws of viral marketing, enviado (2007).

The Jarzynski free-energy estimator from the Random Energy Model

Matteo Palassini^{*} and Felix Ritort

Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, Diagonal 647, E-08028 Barcelona, Spain.

Jarzynski's nonequilibrium work theorem¹ is a general result that connects nonequilibrium dynamics to equilibrium thermodynamics. It states that the difference in free energy ΔF between two equilibrium states of a system, kept at inverse temperature $\beta = 1/k_BT$ and at two given values Λ_0 and Λ_1 of an external control parameter Λ , satisfies the relation $e^{-\beta\Delta F} = \langle e^{-\beta W} \rangle$. W is the work performed on the system in a nonequilibrium process in which Λ is varied according to an arbitrary but fixed protocol { $\Lambda(t)$, $0 \leq t \leq \tau$ }, with $\Lambda(0) = \Lambda_0$ and $\Lambda(\tau) = \Lambda_1$, and the average is over all possible trajectories compatible with the protocol. This provides a recipe for estimating free-energy changes in small systems, which has been tested in several experimental and numerical studies³. Given N measurements W_i following the protocol $\Lambda(t)$, the Jarzynski estimator (JE)

$$\Delta F_N \equiv -\frac{1}{\beta} \log \sum_{i=1}^N e^{-\beta \mathcal{W}_i} \tag{1}$$

tends to ΔF with probability one for $N \to \infty$. For finite N, ΔF_N is biased because the exponential average is dominated by rare events with $\mathcal{W} < 0$. Controlling analytically how the bias depends on N and the distribution of \mathcal{W} would be important for practical applications, but is a difficult mathematical problem.

We derive a scaling limit for the JE based on a mapping to Derrida's Random Energy Model² (REM) (Fig. 1) and we obtain analytic estimates of the expected bias $\langle \Delta F_N \rangle - \Delta F$ in three different regimes of the scaling parameter $x = (\log N)/\mu$, where $\mu = \langle W \rangle - \Delta F$ is the mean dissipated work, for a generic work distributions that decays as $p(W) \sim |W|^{-\alpha} \exp -(|W|/\sigma)^{\delta}$ for $W \to -\infty$, where $\alpha > 0$, $\delta > 1$ and and $\sigma > 0$ is the width of the left tail of the distribution. The analytical estimates are based on a vector replica symmetry breaking scheme (VRSB in Fig.2) for x >> 1 on the asymptotic theory of extreme value statistics for x << 1 (EV), and for $x \sim 1$ on a generalization of the method used in Ref. 4 to compute the finite-size corrections of the REM (CD).

The combination of these three analytic approaches agrees well with the expectation value of the bias computed from Monte Carlo generated work values for a wide range of values of μ and N, ranging from N = 1 to large N, and for different work distributions. Fig. 2 shows an example of our results for a Gaussian distribution of the work and two different values of μ .

Based on these results, we discuss improved free-energy estimators and the application to the analysis of experimental data.



Figura 1. Scaling of the expectation value of the bias of the JE v.s. $\log(N)/\mu$, for a Gaussian distribution of the dissipated work and several values of the mean dissipated work μ . The bias and μ are in units of k_BT . The data points are computed by generating work values by Monte Carlo, the continuous lines are a guide to the eye. Our analytical calculation predicts the data must cross at x = 1 and take the value log(2) (horizontal line in the main figure). The dashed line in the inset represents the scaling limit which corresponds to the thermodynamic limit of the Random Energy Model.



Figura 2. Comparison of the analytical estimates of the bias for two values of μ . The data points represents the same Monte Carlo data as in Fig.1. The lines display the analytical estimates in three different regimes of x (see main text).

^{*} palassini@ub.edu

¹ C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).

² B. Derrida, Phys. Rev. Lett. **45**, 79 (1980).

³ See e.g. Liphardt et al., Science **296**, 1832 (2002).

⁴ J. Cook and B. Derrida, J. Stat. Phys. **63** (1991).

Juegos evolutivos y cooperación en poblaciones estructuradas: el papel de la estructura social y la dinámica evolutiva

<u>Carlos P. Roca</u>^{*}, José A. Cuesta, Angel Sánchez Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC)[†] Departamento de Matemáticas Universidad Carlos III de Madrid 28911 Leganés

La cooperación es una fuerza primaria de la evolución, estando presente en todas las escalas de organización, desde los organismos unicelulares hasta las sociedades humanas más complejas¹. Por este motivo, explicar la aparición y estabilización del comportamiento cooperativo se ha convertido en un problema fundamental en biología, economía, sociología y otras ciencias de la conducta. La teoría de juegos evolutivos se ha establecido como una de las aproximaciones más fructíferas a este problema, mediante el estudio de modelos evolutivos basados en dilemas sociales².

Entre los mecanismos propuestos para explicar la emergencia de la cooperación destaca como uno de los más potentes la estructura de la población. Por ella entendemos que los individuos no interactúan todos entre sí, sino que cada uno lo hace con un cierto subconjunto de vecinos, de acuerdo con una red de enlaces que define la estructura social de la población. Esta idea fue introducida por Nowak y May a principios de los noventa³, iniciando una línea de investigación que sigue activa en la actualidad⁴.

Sin embargo, estudios recientes han puesto en tela de juicio la generalidad de esta capacidad de la estructura social para fomentar la cooperación. Hauert y Doebeli⁵, por una parte, y Sysi-Aho, Saramäki *et al*⁶, por otra, han estudiado la influencia de la estructura de la población sobre un dilema social distinto del que emplearon Nowak y May, usando además sendas dinámicas evolutivas diferentes. Ambos estudios muestran una inesperada inhibición de la cooperación. Esta contradicción resulta especialmente llamativa considerando que Nowak y May hicieron uso del Dilema del Prisionero⁷, el juego 2×2 más exigente desde el punto de vista de la cooperación, mientras que los dos estudios más recientes han empleado el Juego de la Ventisca (*Snowdrift*)⁷, en el que la cooperación, en general, es más fácil que perdure.

Posteriormente, Santos, Pacheco *et al*⁸ han estudiado el efecto de una topología de red diferente, scale-free en vez de red regular, encontrando un refuerzo muy alto de la cooperación, especial y precisamente en el Juego de la Ventisca.

Llegados a este punto, no es razonable dudar de que la estructura social tiene una fuerte influencia en la evolución de la cooperación, y que esta influencia es positiva en un importante número de casos. No obstante, el efecto de cada topología de red no se conoce adecuadamente, en el sentido de que no se tiene una imagen global de ese efecto para los distintos tipos de juegos y la influencia en cada caso de la dinámica evolutiva. Tal y como un $review^4$ valora, el énfasis tradicional en el Dilema del Prisionero, junto con el enorme número de parámetros involucrados, han motivado la falta de estudios sistemáticos en este campo.

Nuestra aproximación al problema ha consistido en realizar, en primer lugar, una simulación sistemática y exhaustiva de este tipo de modelos, con objeto de aislar la influencia de cada elemento: juego, red, dinámica evolutiva y régimen de tiempo. Esto nos ha permitido establecer la influencia de cada topología de red en la evolución de la cooperación, en relación con cada dilema social y bajo diferentes dinámicas evolutivas y regímenes de tiempo. Hemos considerado redes regulares, aleatorias, scale-free y small-world⁹, en combinación con las siguientes dinámicas evolutivas: replicador, replicador múltiple, Moran e imitación incondicional², y bajo regímenes de tiempo síncrono y asíncrono. Hemos estudiado el resultado evolutivo de estos modelos sobre el espacio bidimensional de los juegos simétricos 2×2 , concentrándonos en la región clave que incluve los siguientes dilemas sociales: Armonía, Caza del Ciervo (Staq-Hunt), Juego de la Ventisca (Snowdrift) y Dilema del Prisionero⁷.

Además de identificar los patrones de regularidad en el comportamiento asintótico de estos modeles, hemos analizado su dinámica, encontrado que estas regularidades se corresponden con mecanismos básicos en la mesoescala de los grupos de cooperadores, especialmente en lo que concierne a su formación y estabilidad.

- ¹ J. Maynard Smith, E. Szathmáry, *The Major Transitions* in Evolution (Oxford University Press, 1998).
- ² J. Hofbauer, K. Sigmund, *Evolutionary Games and Population Dynamics* (Cambridge University Press, 1998).
- ³ M.A. Nowak, R.M. May, Nature **359**, 826 (1992).
- ⁴ G. Szabó, G. Fáth, Phys. Rep. **446**, 97 (2007).
- ⁵ C. Hauert, M. Doebeli, Nature **428**, 643 (2004).
- ⁶ M. Sysi-Aho, J. Saramäki *et al*, Eur. Phys. J. B **44**, 129 (2005).
- ⁷ H. Gintis, *Game Theory Evolving* (Princeton University Press, 2000).
- ⁸ F.C. Santos, J.M. Pacheco *et al*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **103**, 3490 (2006).
- ⁹ R. Albert, A.-L. Barabási, Rev. Mod. Phys. **74**, 47 (2002).

^{*} cproca@math.uc3m.es

thttp://gisc.uc3m.es/

Dynamics of a fluid interface in imbibition experiments. Part 1: Local waiting time fluctuations along the interface

<u>R. Planet</u>^{*}, S. Santucci, K.J. Måløy and J. Ortín Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria Universitat de Barcelona Martí i Franquès 1, 08028 Barcelona

The dynamics of immiscible fluid-fluid displacements in porous media has been a subject of much interest in last years¹, both from a fundamental point of view, as a dynamical nonequilibrium process, and from a technological point of view. The process is called forced-flow imbibition when an invading fluid that wets preferentially the medium displaces a resident fluid at a constant injection rate.

While the scaling properties of the interfacial morphology in imbibition experiments have been studied extensively (see Alava et al.¹ and references therein), the spatiotemporal dynamics of the process has not received the same attention².

In this work we use a high resolution camera with a high acquisition rate to track the dynamics of the interface in a model porous medium that consists on a Hele-Shaw cell with two different values of gap spacing, randomly distributed in space⁴.

We show that the fluid interface dynamics is governed by local and irregular avalanches with very large size and velocity fluctuations. In order to characterize the scaling features of this local intermittent dynamics -the local pinnings and depinnings of the front- we adopt the analysis procedure recently proposed by Måløy et al.³, and compute the local waiting time fluctuations along the front during its propagation: we measure at each point (x, y)of the recorded region the time spent by the front as it passes through this position. A typical gray-scale image of this so-called waiting time map is shown in Fig.1. The diversity of regions of different gray levels reflects the intermittent character of the local dynamics.



Figura 1. Gray-scale image of the waiting time matrix obtained from 12000 front positions, recorded with a 1280×276 pixels resolution at 100 fps. The darker parts correspond to the longer waiting times.

Avalanches are defined as clusters of velocities v larger than a given threshold v_c . Our results (see Fig.2) show that the avalanche size distribution follows a power law (with an exponential cut-off at large sizes). The analysis allows studying also the anisotropic shape of the avalanches and the statistical distribution of their durations.



Figura 2. Statistical distributions of avalanche sizes for a given set of experimental parameters. The different distributions are obtained by keeping the velocities larger than a given threshold v_c , defined by $v_c = \langle v \rangle + C(\max(v) - \langle v \rangle)$, where C is the clip level.

* rplanet@ecm.ub.es

- ¹ M. Alava, M. Dubé, and M. Rost, Adv. Phys. **53**, 83 (2004).
- ² A. Dougherty and N. Carle, Phys. Rev. E **58**, 2889 (1998).
- ³ K.J. Måløy, S. Santucci, J. Schmittbuhl, and R. Toussaint, Phys. Rev. Lett. **96**, 045501 (2006).
- ⁴ J. Soriano, J. Ortín, and A. Hernández-Machado, Phys. Rev. E **66**, 031603 (2002).

Complex Cooperative Networks through Evolutionary Preferential Attachment

Julia Poncela¹, Jesús Gómez-Gardeñes^{1,2}, Angel Sánchez^{1,3,4}, Luis M. Floría^{1,5}, Yamir Moreno¹

¹ Institute for Biocomputation and Physics of Complex Systems (BIFI), Universidad of Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain

² Scuola Superiore di Catania, Università di Catania, 95123 Catania, Italy

³ Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC), Departamento de Matemáticas,

Universidad Carlos III de Madrid, 28911 Leganés, Spain

⁴ IMDEA Matemáticas, Campus de la Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, 28049 Madrid

⁵ Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain

Recent studies have shown that well-mixed models, lattices and spatial models do not correctly describe the backbone of complex systems. The ubiquity in Nature of the so-called scale-free (SF) networks has led scientists to propose many models aimed at reproducing the SF degree distribution¹. Most of the existing models for network generation are based on growth rules that depend on the instantaneous topological properties of the network and therefore neglect the connection of the structural evolution and the particular function of the system.

On the other hand, a paradigmatic case study of the structure and dynamics of complex systems are social networks. In these systems, it is particularly relevant to understand how cooperative behavior emerges. The emergence of cooperation in the general framework of evolutionary game theory in natural and social systems has been the subject of intense research recently^{2–4}. The results show that if individuals only interact with their neighbors, cooperation dominates over defection in SF networks. But, how cooperative behavior can naturally give rise to SF networks?, and what are the mechanisms that shape the system's structure?

In this work we analyse the growth and formation of complex networks by coupling the network formation rules to the dynamical states of the elements of the system. Specifically, we consider that the nodes of the network are individuals involved in a Prisoner's Dilemma game and

that newcomers are preferentially linked to nodes with high fitness, being the latter proportional to the payoffs obtained in the game. In this way, an element's fitness is not imposed as an external constraint, but rather it is the result of the dynamical evolution of the system. Moreover, we show that the so obtained networks share many features with real-world systems such as the power law dependency of the clustering coefficient with the degree of the nodes, and hence can explain why heterogeneous networks are tailored to sustain cooperation. Finally, the model provides an evolutionary explanation for the origin of the both homogeneous and heterogeneous networks found in natural systems. Only when the selection pressure is weak, homogeneous networks can arise. On the contrary, when the selection pressure is high, scale-free networks are generated.

- ¹ Boccaletti, S., Latora, V., Moreno, Y., Chavez, M. & Hwang, D. U. (2006) *Phys. Rep.* **424**, 175-308.
- ² Santos, F. C. & Pacheco, J. M. (2005) *Phys. Rev. Lett.* **95**, 098104.
- ³ Eguíluz, V.M., Zimmermann, M. G., Cela-Conde, C. J., & San Miguel, M. (2005) Am. J. Soc. **110**, 977-1008.
- ⁴ Gómez-Gardeñes, J., Campillo, M., Floría, L. M. & Moreno, Y. (2007) *Phys. Rev. Lett.* **98**, 108103.

43

Scaling growth and dynamic crossover lengths in viscous fluid fronts

<u>Marc Pradas</u>^{*}, and A. Hernández-Machado Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de Barcelona, Avinguda Diagonal 647, E-08028 Barcelona

Interfacial growth in disordered systems has received a considerable attention during the last years. It has been intensively studied both theoretically and experimentally in many different physical phenomena such as fluid invasion in porous media, slow combustion front, or propagation of fracture crack, among others. In particular, the imbibition process of a viscous liquid invading a porous media has shown that contains a rich variety of behaviors depending on some physical parameters such as the mean velocity of the interface or the strength of the disorder¹⁻³.

In our work, we numerically reproduce the imbibition phenomenon by means of a mesoscopic phase field model. We study the two different situations of imbibition: spontaneous case, where the mean velocity of the interface follows Washburn's law $V \sim t^{-1/2}$, and forced-flow imbibition, where the mean velocity is fixed to constant. In all both cases we observe that the scaling of the interface fluctuations is largely affected by the strongness of the disorder. Indeed, interfaces described by superroughness change to an intrinsic anomalous scaling when the disorder strength is increased. Likewise, in the specific case of having columnar disorder (see Fig. 1), the interfacial growth may pass to be dominated by nonlocal to local interactions. All the numerical results fully agree with experimental work made in a Hele-Shaw cell^{4,5}.

On the other hand, an important feature of the spontaneous imbibition case is the presence of dynamics crossover lengths as a consequence of Washburn's law. As it has been recently shown in a general context of kinetic roughening⁶, the presence of time-dependent crossover lengths in a growth equation can turn into nontrivial scaling properties of the interface fluctuations including anomalous scaling. In this sense, spontaneous imbibition can present a great variety of scaling regimes depending on the interface velocity, as the numerical and experimental results show.



Figura 1. Examples of imbibition fronts in two different disorder configurations: (a) squares disorder, and (b) columnar disorder. Both cases are described in terms of the intrinsic anomalous scaling.

* pradas@ecm.ub.es

- ¹ M. Alava, M. Dubé, and M. Rost, *Imbibition in disordered media*, Adv. Phys. 53, 83 (2004).
- ² R. Planet, M. Pradas, A. Hernández-Machado, and J. Ortín, *Pressure-dependent scaling scenarios in experiments of spontaneous imbibition*, Phys. Rev. E 76, 056312 (2007).
- ³ M. Pradas, and A. Hernández-Machado, *Intrinsic versus superrough anomalous scaling in spontaneous imbibition*, Phys. Rev. E 74, 041608 (2006).
- ⁴ J. Soriano, A. Mercier, R. Planet, A. Hernández-Machado, M. A. Rodríguez, and J. Ortín, Anomalous roughening of viscous fluid fronts in spontaneous imbibition, Phys. Rev. Lett. 95, 104501 (2005)
- ⁵ J. Soriano, J. J. Ramasco, M. A. Rodríguez, A. Hernández-Machado, and J. Ortín, Anomalous roughening of Hele-Shaw flows with quenched disorder, Phys. Rev. Lett. 89, 026102 (2002)
- ⁶ M. Pradas, J. M. López, and A. Hernández-Machado, *Time-dependent couplings and crossover length scales in nonequilibrium surface roughening*, Phys. Rev. E 76, 010102(R) (2007).

Fenómeno de envejecimiento en el estado de enfriamiento homogéneo de un fluido granular de partículas duras

A. Prados, M.I. García de Soria, P. Maynar y J. J. Brey*

Física Teórica, Universidad de Sevilla Apartado de Correos 1065, E-41080 Sevilla, Spain

Se investiga la presencia del fenómeno de envejecimiento en el estado de enfriamiento homogéneo (HCS) de un fluido granular compuesto de esferas duras inelásticas¹. Como consecuencia de la propiedad de escalamiento de la función de distribución de N partículas, se obtiene que el decaimiento de las funciones de correlación temporal se ralentiza al aumentar el tiempo de espera desde el comienzo del proceso. Este resultado se confirma mediante simulaciones de dinámica molecular, para el caso particular de la energía total del sistema. El acuerdo es cuantitativo en el límite de baja densidad, en el que se deduce una expresión analítica explícita para la función de correlación temporal. Además, los resultados obtenidos apoyan la existencia del HCS como una solución de la ecuación de Liouville para el sistema de N partículas .



Figura 1. Función de autocorrelación adimensional de la energía para distintos valores de la densidad (baja) y del coeficiente de restitución, con tiempos de espera t' suficientemente grandes. Se observa como todas las curvas se superponen como función de t/t'.

- * prados@us.es
- ¹ J. J. Brey, A. Prados, M. I. García de Soria and P. Maynar, J. Phys. A: Math. Theor. **40** 14331 (2007).
- ² J.-P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo, J. Kurchan, and M. Mézard, in *Spin Glasses and Random Fields*, edited by A.P. Young (Word Scientific, Singapore, 1997), p. 161.
- ³ J.J. Brey, J.W. Dufty, and A. Santos, J. Stat. Phys. 87, 1051 (1997).
- ⁴ I. Goldhirsch and T.P.C. van Noije, Phys. Rev. E **61**, 3241 (2000).

Dynamical transition in the relaxation of elastic strings at finite temperatures

M.S. de La Lama^{*}, J.J. Ramasco[†], J.M. López, and M.A. Rodríguez Instituto de Física de Cantabria (CSIC-UC) 39005 Santander, Spain

The physics of elastic surfaces in disordered media has received much attention in the last decades. It is well known that at zero temperature the interfaces undergo a pinning-depinning phase transition at a critical value of the external driving force, F_c . But the introduction of thermal fluctuations substancially changes this behaviour. For low driving forces, high temperatures make the system move freely (flow regime). At very low T, on the other hand, there are long periods of inactivity during which the interface is trapped in metastable states, followed by small bursts of activity (creeping). Many different approaches have been taken to characterize this behaviour¹⁻³. Most of them have been focused on the dynamics at very low T and on global properties of the interfaces. Here, instead, we are interested in studying the change that the dynamics suffers when the temperature increases. Our aim is to track the single-site activity and to investigate whether spatio-temporal long-range correlations are actually present or not at a certain temperature.

Description of the model

We employ a discrete model defined on a square lattice where each cell [i, h] $(1 \leq i \leq L)$ is assigned a quenched disorder $\eta_{i,h}$ generated with a normal distribution N(0,1). We define the function V_i for each site (γ elastic constant, F driving force, and ξ_i Gaussian white noise). The interface configuration is updated simultaneously for all i at every time step, and the interface moves, $h_i(t+1) \rightarrow h_i(t) + 1$, only if $V_i(t) > 0$, otherwise it remains pinned at i.

$$V_i(t) = \gamma [h_{i+1} - h_{i-1} - 2h_i)] + F + g \cdot \eta_{i,h_i} + \sqrt{T} \cdot \xi_i$$

General results

We observe that the relaxation dynamics has quite well differenciated behaviour for temperatures over and below an optimal temperature T_{opt} . First we analize the behaviour of the average velocity of the interface, $v(t) = \langle \Delta h / \Delta t \rangle$. For large values of T, the system relaxes exponentially fast towards an steady-state. When the temperature decreases the relaxation time becomes longer and longer. In the range of times studied, the relaxation of the velocity decays with a close to powerlaw functional form for T_{opt} . At even lower $T < T_{opt}$, the relaxation happens in burst of global activity between which the interface is trapped in local minima of the energy landscape, and then the evolution of v shows several plateaus.



Figura 1. Evolution of average velocity for a L=16384 system

We also analize the activity patterns that are obtained for each of these temperature regimes, studying the temporal and spatial correlations. To study the time statistics we analize the first time return $P_f^{\tau}(\tau)$. At hight temperatures the inter-event times showing an exponential decay. At very low T, on the other hand, the interface slowly explores energetically favorable configurations and the longer is the time, the more unfrecuent the big burst become. According to this picture, $P_f^{\tau}(\tau)$ exhibit a bumpy structure with a series of characteristic values of the waiting times. In between these two extreme regimes, an interesting effect is observed. Around the optimal value of temperature T_{opt} , $P_f^{\tau}(\tau)$ decays as a power-law. All this results evidence the presence of a transition in

All this results evidence the presence of a transition in the relaxation dynamics of the string that could be related with the emergence of power-law scaling for several magnitudes.



Figura 2. Activity plots for the three temperature regimes (active sites are drawn in black). *Top:* First time return distributions.

³ J.J. Ramasco *et al.*, Europhys. Lett. **76**, 554 (2006)

^{*} msanchez@ifca.unican.es

 $^{^\}dagger$ ISI Foundation, 10133 Turin, Italy

¹ A.B. Kolton *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**,047002 (2005)

 $^{^2}$ P.Chauve $et~al., Phys. Rev. B. <math display="inline">{\bf 62},\!6241$ (2000)

Exact results in two-dimensional domain growth

Alberto Sicilia and Leticia F. Cugliandolo

Université Pierre et Marie Curie – Paris VI, LPTHE UMR 7589, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

Alan J. Bray and Jeferson J. Arenzon

School of Physics and Astronomy, University of Manchester, Manchester M13 9PL, UK Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, CP 15051, 91501-970 Porto Alegre RS, Brazil

Dynamical systems quenched from a disorder into an ordered phase, may display coarsening phenomena. The simplest example is the Ising ferromagnet. When the system is cooled rapidly through the transition temperature, domains of the two ordered phases form and grow (coarsen) with time.

A common feature of coarsening systems is the dynamical scaling hypothesis: the domain morphology is statistically the same at all times when all lengths are measured in units of a characateristic length scale L(t). Despite the success of the scaling hypothesis in describing experimental and simulation data, its validity has only been proved for very simple models, including the exactly soluble one-dimensional Glauber-Ising model and the nonconserved O(n) model in the limit n >> 1.

In the present work we obtain the exact result for the statistics of the areas enclosed by domain boundaries (hulls) for the coarsening dynamics of a nonconserved scalar field in two dimensions, demostrating explicity, en passant, the validity of the scaling hypothesis for this system.

Using the Allen-Cahn equation and an elegant application of the Gauss-Bonnet theorem, we show 1,2 that the number of hulls per unit area that enclose an area greater than A, in a system evolving at zero temperature from a disordered initial state, has for long time t the form $N_h(A,t) = c/(A+\lambda t)$ where $c = 1/8\pi\sqrt{3}$ is a universal constant introduced by Cardy and Ziff in the context of percolation theory. The same form is obtained for coarsening from a critical initial state, but with c repaced by c/2.

Notice that our solution has the expected scaling form

corresponding to a system with characteristic length scale $L(t) \propto t^{1/2}$, which is the known result if scaling is assumed. Here, however, we do not assume scaling, rather, it emerges from the calculation.

We also prove that the domain area distribution (where domains are the areas of aligned spins), are almost identical to the hull distribution. These results can be generalizated to the coarsening dynamics under the effect of finite temperature³ or the presence of quenched disorder⁴ in the system. The full temperature or disorder dependence enters only through the value of then, characteristic length scale L(t).

Our analytical results have been tested with simulations on the two-dimensional square-lattice Ising model using a Montecarlo algorithm. Numerical data are in excellent agreement with predictions.

An experimental test is also being done. A setup has been developed by professor's Dierking group at Manchester in a liquid crystal system that, under an applied electric field, spontaneously separates into phases with left and right-handed chirality. The experiments are still in course, results will be available in some weeks.

- ¹ J. J. Arenzon, A. J. Bray, L. F. Cugliandolo, A. Sicilia, Phys. Rev. Lett. 98, 145701 (2007).
- ² A. Sicilia, *Physica A* **386**, 674 (2007).
- ³ A. Sicilia, J. J. Arenzon, A. J. Bray, L. F. Cugliandolo, arxiv:0706.4314, accepted for publication in Phys. Rev. E.
- ⁴ A. Sicilia, J. J. Arenzon, A. J. Bray, L. F. Cugliandolo, arXiv:0711.3848, submitted to Eur. Phys. Lett.

^{*} sicilia@lpthe.jussieu.fr

El Formalismo Multifractal Microcanónico: Un nuevo paradigma para el tratamiento de datos en turbulencia

Antonio Turiel[†], Oriol Pont[‡] y Conrad Pérez-Vicente[‡]

†Institut de Ciències del Mar, CSIC ‡Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona

Passeig Marítim de la Barceloneta, 37-49. 08003 Barcelona

Diagonal, 647. 08028 Barcelona

Desde Kolmogorov¹, la turbulencia completamente desarrollada (números de Reynolds Re muy elevados) y sistemas afines (lo cual comprende un amplio rango de sistemas físicos, desde las imágenes del mundo real² a las series econométricas³ pasando por el ritmo cardíaco⁴ o la distribución de fitoplancton en el mar^5) se han caracterizado por medio de variables estadísticas de carácter global. Se procede así ya que cuando $Re \gg 1$, a cualquier escala el número de grados de libertad no resueltos es infinito, así que estudiar una localización concreta pierde sentido físico; por ergodicidad, al desarrollar en escala cualquier posición resultará cualquier configuración del fluido. De este modo, en estas teorías clásicas solamente se tiene en cuenta las distribuciones de magnitudes que describan las propiedades globales del sistema, por tanto, su caracterización es puramente estadística. Dicha caracterización viene dada por las llamadas funciones de estructura, que son los momentos de la distribución de una determinada variable ajustable en escala, ϵ_r . Esta variable puede definirse de diversos modos, según el contexto; puede ser el incremento longitudinal de la velocidad del fluido entre dos puntos separados una distancia r, la proyección en wavelet de escala r de un escalar, la integral sobre una bola de radio r de la disipación puntual de energía, etc. Lo importante es que con la definición escogida la variable ponga de manifiesto la presencia de autosimilitud, esto es:

$$\langle \epsilon_r^p \rangle = \alpha_p r^{\tau_p} + o(r^{\tau_p})$$

Los exponentes τ_p en general presentan escalado anómalo, esto es, no dependen linealmente de p, lo cual es consecuencia de la presencia de una estructura multifractal subyacente⁶, caracterizada por el espectro de singularidades D(h) (o $f(\alpha)$ según la notación de algunos autores). Cada una de las componentes fractales que forman esta estructura multifractal están unívocamente asociadas a un exponente h y tienen dimensión D(h). El espectro de singularidades D(h) se calcula a partir de los exponentes τ_p , es decir, por medio de estadísticos derivados de promedios globales. Por ello, a esta aproximación se le llama Formalismo Multifractal Canónico (FMC), y ha dominado la caracterización de los fluídos turbulentos y los sistemas caóticos durante los últimos sesenta años.

En los últimos años se ha introducido una alternativa de mayor contenido geométrico, el Formalismo Multifractal Microcanónico (FMM)^{7,8}. Según el FMM, tiene sentido preguntarse acerca de los exponentes de singularidad o exponentes de escala de la variable ϵ_r . Así, para cada punto **x** del sistema y bajo las condiciones apropiadas:

$$\epsilon_r(\mathbf{x}) = \alpha(\mathbf{x})r^{h(\mathbf{x})} + o(r^{h(\mathbf{x})})$$

esto es, pasamos de la descripción global del FMC a una descripción local en la que los exponentes de singularidad

h adquieren significado geométrico y son identificables localmente, en todo punto. La distribución de exponentes de singularidad a una escala dada r, denotada por $\rho_r(h)$, no puede tener cualquier forma por compatibilidad con el FMC, y de hecho $\rho_r(h) \sim r^{d-D(h)}$. El uso del FMM permite calcular características globales como D(h) con menos estadística, pero no sólo eso sino que además proporciona el campo $h(\mathbf{x})$ para todos los puntos \mathbf{x} , lo cual nos muestra la geometría del sistema y posibilita un sinfín de aplicaciones. Por ejemplo en oceanografía, se ha comprobado que los exponentes de singularidad extraídos de imágenes de satélite de temperatura superficial del mar trazan las líneas de corriente. Las aplicaciones emergentes del uso del FMM estan lejos de estar agotadas: compresión de imagen, predicción en series temporales, inferencia de datos perdidos, estimación de velocidad en fluídos, filtración de ruido, etc, son varios ejemplos



Figura 1. Exponentes de singularidad $h(\mathbf{x})$ obtenidos de un mapa global de temperatura de superficie del mar. Los exponentes más singulares (más brillantes en la figura) trazan las líneas de corriente principales.

- $^{*}\ turiel@icm.csic.es,opont@ub.edu,conrad@ffn.ub.es$
- ¹ A.Ñ. Kolmogorov, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* **309**, 301 (1941).
- ² A. Turiel et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1098 (1998).
- ³ B. Mandelbrot, A. Fisher, and L. Calvet, Cowles Foundation Discussion Paper No. 1164 (1997).
- ⁴ P. Ivanov et al., *Nature* **399**, 461 (1999).
- ⁵ L. Seuront et al., J. Plank. Res. 21, 877 (1999).
- ⁶ G. Parisi and U. Frisch, in *Turbulence and Predictability in Geophysical Fluid Dynamics. Proc. Intl. School of Physics E. Fermi*, (1985), pp. 84–87.
- ⁷ A. Chhabra et al., *Phys. Rev. A* **40**, 5284 (1989).
- ⁸ A. Turiel, H. Yahia, and C. Pérez-Vicente, accepted in J. Phys. A (2007)

Cadenas de fuerza en pilas granulares

Iker Zuriguel^{*†} y Tom Mullin

Manchester Centre for Nonlinear Dynamics, University of Manchester, Oxford Road, Manchester, M139PL, United Kingdom

Desde que en 1979 Jotaki y Moriyama¹ descubrieron que la presión en la base de una pila de arena presenta un mínimo justo bajo el pico se ha originado un gran debate en la comunidad científica acerca del modo en que las fuerzas se distribuyen en un medio granular. Recientemente, y gracias al uso de nuevas técnicas experimentales como la fotoelasticidad², se ha observado que los esfuerzos en la muestra granular se concentran espontáneamente en las denominadas cadenas de fuerza (figura 1a). El desarrollo de estas cadenas de fuerza y sus principales propiedades parece ser la clave para comprender la mayor parte de las propiedades de los medios granulares densos.

En este trabajo se analiza el efecto de la anisotropía del grano en el perfil de fuerzas bajo una pila granular bidimensional. La comparación de los resultados de pilas de discos con pilas de cilindros elípticos y pilas de cilindros con forma de pera muestra que la anisotropía de los granos realza el mínimo de fuerzas bajo el pico de la pila. Como se muestra en la figura 1c para el caso de pilas construidas con cilindros elípticos, la fuerza bajo el pico es aproximadamente la mitad que en la zona del máximo. Este resultado es válido para distintas alturas como lo muestran los diferentes símbolos utilizados en la figura.

La principal ventaja del uso de material fotoelástico es que las cadenas de fuerza se hacen visibles con lo que se pueden estudiar sus principales propiedades. Se propone la presencia de dos tipos de cadenas de fuerza dependiendo de su orientación: las primarias que están orientadas hacia el exterior de la pila hacia donde distribuyen el peso y las secundarias, perpendiculares a las primarias, estrictamente necesarias para la estabilidad de la pila y que distribuyen el peso hacia el centro³.

Se observa que la relación entre el número de cadenas primarias y secundarias es un parámetro que está correlacionado con el tamaño del mínimo de fuerza⁴. Cuanto mayor es el número de cadenas primarias respecto al de secundarias, mayor es la cantidad de fuerza dirigida hacia el lateral de la pila y consecuentemente mayor el tamaño del mínimo de fuerza en el centro.

Finalmente se especula con el mecanismo por el cual el mínimo de presiones se acentúa para las pilas construidas con granos anisótropos. Se cree que estos granos -que en su gran mayoría están orientados horizontalmente y que no pueden rotar con facilidad- son capaces de formar estructuras estables con menos fuerzas dirigidas al centro de la pila que los discos. De este modo el número de cadenas primarias respecto de las secundarias es más importante en el caso de partículas anisótropas y el mínimo de presiones es realzado.



Figura 1. (a) Detalle de las cadenas de fuerza que se hacen visibles cuando partículas fotoelásticas son observadas a través de dos polarizadores cruzados. (b) Fotografía de la red de fuerzas en una pila granular construida con cilindros elípticos fotoelásticos. (c) Resultados de la fuerza media obtenida en 500 pilas para diferentes alturas en la capa granular $(h = 3.5 \text{ cm} (\Box), h = 7.0 \text{ cm} (\circ), h = 10.5 \text{ cm} (\Delta), \text{ y } h = 14.0 \text{ cm} (\diamond)).$

* iker@fisica.unav.es

- ² D.W. Howell, R.P. Behringer and C.T. Veje, Phys. Rev. Lett. 82, 5241 (1999)
- ³ I. Zuriguel, T. Mullin and J. M. Rotter, Phys. Rev. Lett. **98**, 028001 (2007).
- ⁴ I. Zuriguel and T. Mullin, Proc. Roy. Soc. A **464**, 99 (2008).

[†] Departamento de Física y Matemática Aplicada, Univ. Navarra, C/Irunlarrea s/n 31008 Pamplona

¹ T. Jotaki and R. Moriyama, J. Soc. Powder Technol. Jpn. **60**, 184 (1979).

Parte III Paneles

Transiciones de fase en sistemas de dipolos con desorden espacial

Juan J. Alonso¹ y Julio F. Fernández²

¹Departamento de Física Aplicada 1, Universidad de Málaga, E-29071 Málaga (España) ²ICMA, CSIC y Universidad de Zaragoza, E-50009 Zaragoza (España)

Últimamente ha renacido interés por el comportamiento cooperativo de sistemas de dipolos clásicos. Esto se debe en gran parte a avances recientes en el campo de la nanociencia que han permitido sintetizar particulas magnéticas nanoscópicas.¹ Sistemas de estas partículas muestran un comportamiento magnético muy rico. En ellos la interacción dipolo-dipolo juega un papel esencial, y produce variados ordenamientos anisotrópicos y frustración. Esta frustración hace que haya tipos diferentes de orden magnético dependiendo de la configuracion espacial de las nanopartículas.

En redes cristalinas, la presencia inevitable de anisotropía influye de manera decisiva en el orden de largo alcance observado en estos sistemas. La combinación de esta anisotropía con la interacción dipolar produce la existencia de diagramas de fase muy ricos y complejos.²

Una pregunta interesante es cómo varía el orden magnético al pasar gradualmente de un tipo red cristalina a otra. Otra es cuánto desorden espacial hay que introducir en una red cristalina para que desaparezca el orden magnético asociado a ella. Tampoco se sabe si hay alguna fase de tipo spin glass a bajas temperaturas en configuraciones muy desordenadas espacialmente.

En esta comunicación presentamos resultados numéricos Monte Carlo para sistemas de dipolos en redes cuadradas en los que consideramos una anisotropía cuadrupolar fuerte que haga orientarse a los dipolos en ciertas direcciones preferentes de la red. Estos sistemas tienen transición térmica de paramagneto a antiferromagneto. Encontramos que la singularidad del calor específico va atenuándose al aumentar gradualmente el desorden espacial en dichas redes. Esto es compatible con el criterio de Harris, que es válido para sistemas con interacciones de corto alcance. Dicha singularidad desaparece por encima de cierto valor umbral del desorden. Desorden en la anisotropía produce resultados similares. Finalmente estudiamos si sistemas de dipolos dispuestos en arreglos con desorden fuerte exhiben una transición de fase de equilibrio de paramagneto a spin glass, como sugieren algunos resultados experimentales y numéricos de relajación temporal.³

¹ R. P. Cowburn, Phylos. trans. R. Soc. London, Ser. A **358**, 281 (2000), *ibid.* **361**, 2827 (2003).

³ T. Jonsson, P. Nordbald y P. Svedlindh, Phys. Rev. B 57, 497 (1995); M. Sasaki, P. E. Jonsson, H. Takayama y H. Mamiya, Phys. Rev. B 71, 104405 (2005); S. Russ y A. Bunde, Phys. Rev. B 75, 174445 (2007).

 ² J. J. Alonso y J. F. Fernández, Phys. Rev. B 74, 184416 (2006); J. F. Fernández y J. J. Alonso, Phys. Rev. B 76, 014403 (2007)

Oscillatory regime in excitatory media with global coupling. Application to cardiac dynamics.

E. Alvarez-lacalle,* and B. Echebarria

Departamento de Física Aplicada. Universidad Politécnica de Catalunya. Av Dr Gregorio Marañon, 44, E-08028, Barcelona.

The study of the heart dynamics encompasses a broad range of scientific enquiry. They include from the study of the generation and propagation of the electric signal through the heart to the compression of the whole organ due to this propagation which gives rise to periodic blood pumping¹ and another whole range of different topics which should be understood to fully comprehend the different cardiac problems that might appear such as the control mechanisms that set-up the heart rhythm to the effect of the lack of oxygen in changing heart properties.

Probably one of the best investigated aspects of the heart dynamics is the electrical activity in the heart. The sinoatrial node, which is a collection of cells at the top of the atria, generates electrical impulses with a period mainly regulated by the sympathetic and the parasympathetic nervous system. This initial activity is propagated in the atrium, passes through the atrioventricular node, proceeds through the bundle of hiss to the Purkinje fibers reaching finally the whole ventricle. The dynamics of the currents involved at the level of the cell is well established and its macroscopic propagation can be accounted for obtaining experimentally the electric diffusion tensor at the different points of the heart².

Furthermore, the effects of the electric propagation in the elastic properties of the cell are well known. When the depolarization propagates through the cell one of the main currents entering it consists on calcium ions. Those turn on a set of complex mechanisms inside the cell which unblock the connection between the actin and myosin proteins present in the sarcomere of the cell: the bonding of those proteins generates internal forces which change the viscoelastic properties of the cell in the so-called active state². Unfortunately, this knowledge at the level of the cell is very difficult to complete at the macroscopic level. There are different reasons for this difficulty. First, the passive properties of the heart as a viscoelastic material when no electrical activity is present are not generally known due to the high anisotropy of the tissue and the difficulty in performing experiments to measure tri-axial viscoelastic constants in reliable tissue. Second, it is even more difficult to asses the viscoelastic properties in the active state and relate them with cell properties given the combination of passive elements (collagen proteins, fibroblasts) and active elements (cardiomyocytes) which change in a highly history-dependent way.

To complicate the picture further, recent studies have shown a mechano-electric feedback where the stretching process of the heart affects the propagation of the electric signal due to gates in the cell membrane which are stretch-dependent. This is, the ability of ions to pass through these gates into the cell depends on the level of stretching in the cell membrane. To face this complicated picture, different simplified models have been proposed to analyze what kind of dynamics and new behavior one may expect depending on the viscoelastic properties of the full heart and on the strength of the mechano-electric feedback. One typical example is the Panfilov model³ which includes all the basic parts of the cardiac dynamics (except for the anisotropy) at the most basic level. It includes a two-variable model to explain the electrical propagation with a simple mechano-electric feedback. Another equation relates the voltage with the internal tension generated in the cell and, finally, an isotropic hypoelastic model is given to describe the mechanical properties of the tissue.

The purpose of this work is to show that as long as the stretching remains bounded at roughly 10 % and the boundaries of the system remain fixed, a model adequate to study the main effects of the feedback can be written in terms of an excitatory system with a global coupling. In particular, we will show that the model introduced by Panfilov can be written as:

$$\partial_t u = D\nabla^2 u - Ku(u-1)(u-a) - uz - I_{gc}$$
(1)

$$I_{gc} = G(u-1)(\bar{z}-z)\Theta(\bar{z}-z) \quad \partial_t z = \epsilon(Ku-z) \quad (2)$$

where u is the voltage, z is a slow variable related with the internal tension, and \bar{z} is the instantaneous average value of V in the whole tissue giving rise to the global coupling I_{gc} (with D as the diffusion constant, G the strength of the global feedback and K, ϵ and a fixing the shape of the excitation front). This is basically a F-N model with a global coupling which has been investigated in other fields such as gas discharges or chemical reactions because it can help control the pattern formation process.

Finally we will apply this model to analyze onedimensional cardiac tissue and study the different kind of patterns which have been found in the more complex mechanico-elastic models. We will study the evolution of the nullclines to explain how excitatory parts of the tissue can become oscillatory and when the mechano-electric feedback can generate spontaneous oscillatory regimes in otherwise excitatory media.

^{*} enrical@fa.upc.edu

¹ http://thevirtualheart.org/.

² A. J. Pullan, L. K. Cheng, and M. L. Buist. Mathematically modelling the electrical activity of the heart

World Scientific Publishing; 1 edition (2005). 3 A. V. Panfilov, R. H. Keldermann, and M. P. Nash.

Phys. Rev. Lett. 95, 258104 (2005)

Coupling with delay: collective processes control period and pattern in vertebrate segmentation

Saúl Ares^{*}, Luis G. Morelli, Leah Herrgen, Christian Schröter, Frank Jülicher y Andrew C. Oates Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems Nöthnitzer Str. 38, 01187 Dresden, Germany

We describe the dynamic patterns of gene expression¹ observed in vertebrate segmentation² (see Figure 1) using coupled phase oscillators^{3,4}.



Figura 1. In situ experiments showing expression of the gene DeltaC mRNA in the Zebrafish pre-somitic mesoderm (PSM) of three different embryos, in sequential stages of development from up to down. The evolution of the wave pattern is the footprint of the oscillation in the expression of the gene.

Based on experimental evidence our description (Figure 2) introduces a frequency profile⁵, a moving boundary that describes axis elongation⁶, and coupling between neighboring cells, necessary to counteract the effect of noise and fluctuations⁷. To account for the time it takes for signaling molecules to be produced and exported to the cell membrane we include a time delay in the coupling. We derive analytical expressions for the phase profile, the wavelength of the patterns and the period of oscillations, and use them to determine segmentation parameters from available data. Together with experimental observations, our theory provides means to identify the role of genes involved in the segmentation of vertebrates. Our main finding is that the period of the segmentation clock is set by a collective process, strongly dependent on the characteristics of intercellular communication.



Figura 2. Diagram explaining the system under study. At the arrest front, the boundary condition imposed is the absence of phase diffusion across the boundary. At the posterior, it is the smooth coupling with the cells in the posteriormost shaded region. The signal gradient depicted (possibly related to FGF8 or Wnt gradients) is just a cartoon, the shape of this gradient is unknown.

- * saul@mpipks-dresden.mpg.de
- ¹ I. Palmeirim, D. Henrique, D. Ish-Horowicz, and O. Pourquié, Cell **91**, 639648 (1997).
- ² L. Wolpert *et al.*, *Principles of development*, second edition, (Oxford University Press, 2002).
- ³ Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*, (Springer-Verlag, 1984).
- ⁴ M.K.S. Yeung and S.H. Strogatz, Phys. Rev. Lett. 82, 648-651 (1999).
- ⁵ J. Dubrulle, M.J. McGrew, and O. Pourquié, Cell **106**, 219-232 (2001).
- ⁶ O. Pourquié, Science **301**, 328-330 (2003).
- ⁷ I.H. Riedel-Kruse, C. Müller and A.C. Oates, Science **317**, 1911-1915 (2007).

Un modelo analítico sencillo para las propiedades reológicas de un gas granular en el régimen no estacionario del flujo tangencial uniforme

Antonio Astillero^{*} y Andrés Santos^{†,‡}

Departamento de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones,

Universidad de Extremadura, 06800 Mérida (Badajoz)

Un gas granular nunca se encuentra en equilibrio pues existe una continua disipación de energía debido a la inelasticidad de las colisiones entre las partículas. Como consecuencia, no está clara la posibilidad de aplicar una descripción de tipo hidrodinámico a esta clase de sistemas físicos¹. Tal descripción, de ser posible, no debe limitarse a las ecuaciones de Navier-Stokes, sino que debe abarcar aquellos estados en los que la dependencia espacial y temporal de la función de distribución de velocidades $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ tiene lugar a través de una dependencia funcional respecto a los campos hidrodinámicos $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$ y $T(\mathbf{r},t)$, es decir, $f(\mathbf{r},\mathbf{v},t) = f[\mathbf{v}|n,\mathbf{u},T]$. Desde este punto de vista, dado cualquier estado inicial, la evolución tendría lugar en dos etapas sucesivas. El gas experimentaría en primer lugar una etapa cinética corta (de unas pocas colisiones por partícula) y muy sensible a las condiciones iniciales, seguida de una etapa hidrodinámica más lenta en la que el gas prácticamente ha "olvidado" las condiciones iniciales, alcánzandose por último un estado estacionario de no equilibrio en el caso de que externamente se invecte energía que compense la disipación inelástica debida a las colisiones. El objetivo de este trabajo es analizar el mencionado régimen hidrodinámico desde un punto de vista analítico en el caso del flujo tangencial uniforme ("uniform shear flow", USF).

En el USF la conservación del momento lineal tiene como consecuencia que la tensión tangencial P_{xy} sea uniforme. La ecuación de balance de la energía está dada por

$$\partial_t T(t) = -(2a/3n)P_{xy}(t) - \zeta(t)T(t), \qquad (1)$$

donde *a* es el gradiente de velocidad impuesto y $\zeta(t)$ es la tasa de enfriamiento debida a la inelasticidad. Nuestro modelo reológico consta de dos pasos. En primer lugar, se reemplaza el operador de colisión de la ecuación de Boltzmann por un término de relajación temporal hacia la distribución de equilibrio local más un término de fuerza de fricción que imita los efectos de enfriamiento debidos al carácter inelástico de las colisiones. Aplicado al USF, este modelo cinético cierra la ecuación (1) con las ecuaciones de evolución siguientes:

$$\partial_t P_{xy}(t) = -aP_{yy}(t) - \beta\nu(t)P_{xy}(t) - \zeta(t)P_{xy}(t), \quad (2)$$

$$\partial_t P_{yy}(t) = -\beta \nu(t) \left[P_{yy}(t) - nT(t) \right] - \zeta(t) P_{yy}(t), \quad (3)$$

donde $\nu \propto n T^{1/2}$ es una frecuencia de colisión efectiva escogida de modo que $\zeta^* \equiv \zeta/\nu = \frac{5}{12}(1-\alpha^2)$, siendo α el

coeficiente de restitución, y $\beta = \frac{1}{2}(1 + \alpha)$. En principio, el sistema de ecuaciones acopladas (1)–(3) debe resolverse numéricamente, en cuyo caso la solución incluye tanto el régimen transitorio cinético como la etapa de evolución hidrodinámica, sin una separación totalmente nítida entre ambas etapas. Al objeto de extraer la solución hidrodinámica de un modo analítico, introducimos una aproximación adicional en el segundo paso. El método empleado consiste en generalizar las ecuaciones (1)–(3) al caso $\nu(T) \propto T^q$, llevar a cabo un desarrollo perturbativo lineal alrededor de q = 0, construir un aproximante de Padé y tomar $q = \frac{1}{2}$ al final de los cálculos. Este modelo proporciona los siguientes resultados explícitos para las dos principales magnitudes reológicas:

$$\eta^*(a^*) = \beta^{-1} \left[1 + 2F(a^*) \right]^{-2} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[\zeta^* / \beta - 2F(a^*) \right] \times \left[1 - 6F(a^*) \right] / \left[1 + 6F(a^*) \right]^2 \right\}^{-1},$$
(4)

$$\Psi^{*}(a^{*}) = 2\beta^{-2} \left[1 + 2F(a^{*})\right]^{-3} \left\{1 + \frac{\zeta^{*}/\beta - 2F(a^{*})}{2\left[1 + 6F(a^{*})\right]^{2}}\right\}^{-1} \times \left\{1 + \frac{\zeta^{*}/\beta - 2F(a^{*})}{\left[1 + 6F(a^{*})\right]^{2}}\right\}^{-1},$$
(5)

donde $a^* = a/\nu$ es el gradiente de velocidad reducido, $\eta^* = -(P_{xy}/nT)/a^*$ es la viscosidad tangencial reducida no lineal y $\Psi^* = [(P_{xx} - P_{yy})/nT]/a^{*2}$ es la primera función viscométrica reducida. En las ecuaciones (4) y (5), $F(a^*) \equiv \frac{2}{3} \sinh^2 \left[\frac{1}{6} \cosh^{-1}(1 + 9a^{*2}/\beta^2)\right].$

Hemos comprobado que, para $\alpha \geq 0.5$, las ecuaciones (4) y (5) proporcionan valores prácticamente indistinguibles tanto de los obtenidos mediante una solución numérica de las ecuaciones (1)–(3) como de los obtenidos por medio de la resolución de la ecuación de Boltzmann utilizando el método de simulación directa de Monte Carlo (DSMC)².

* aavivas@unex.es

 ‡ and res@unex.es

¹ L. Kadanoff, Rev. Mod. Phys. **71**, 435 (1999).

http://www.unex.es/fisteor/antonio_astillero/

[†] Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

http://www.unex.es/fisteor/andres/

² A. Astillero and A. Santos, Europhys. Lett. **78**, 24002 (2007).

Denoising de señales mediante modelos probabilísticos

Raúl Benítez Iglesias*

Departament d'Enginyeria de Sistemes, Automàtica i Informàtica Industrial Escola Universitària d'Enginyeria Tècnica Industrial de Barcelona Universitat Politècnica de Catalunya c/ Compte d'Urgell 187

08028 Barcelona

La transformada wavelet discreta representa las señales como una expansión en términos de translaciones y dilaciones de una onda básica de soporte finito¹. Este tipo de representación no solo permite capturar las características espectrales de la señal, sino también eventos puntuales localizados en el tiempo en forma de transitorios o perturbaciones.

Como consecuencia, el análisis wavelet tiene numerosas aplicaciones en compresión de señal y eliminación de ruido (denoising), puesto que permite realizar una estimación de la componente ruidosa de la señal y separarla de la señal sin ruido. Una vez identificados los coeficientes de la expansión que corresponden al ruido, pueden eliminarse de la representación para recuperar la señal limpia de ruido mediante la transformación wavelet inversa (wavelet shrinkage)^{3,4}. Este procedimiento puede aplicarse a datos con ruido gausiano aditivo, y la forma habitual para separar señal de ruido consiste en definir un umbral sobre los coeficientes wavelet a partir de una cierta función de riesgo estadística.

El objetivo de este trabajo es presentar un método robusto y adaptativo que permite estimar la componente ruidosa de la señal mediante la utilización de modelos probabilísticos basados en mezclas gausianas². En caso que la señal solamente contenga ruido, los coeficientes wavelet se distribuirán de forma gausiana. Si por contra, los datos contienen señal y ruido, la distribución de los coeficientes será la mezcla de una gausiana (ruido) y una distribución uniforme (señal). Considerando estos dos modelos, es posible definir el proceso de estimación señal/ruido como un problema de selección de modelos probabilísticos en un contexto de inferencia estadística.

En particular, utilizamos el algoritmo de Expectación-

Maximización para determinar los coeficientes de la mezcla gausiana que maximizan la verosimilitud (likelihood) respecto a los datos, y el índice BIC (Bayes Information Criterion) para seleccionar el modelo que mejor describe los datos. Una vez definido el modelo óptimo, los coeficientes wavelet son clasificados como señal o ruido siguiendo un determinado criterio de decisión basado en las probabilidades de pertenencia a cada uno de los componentes de la mezcla. Diferentes criterios de selección proporcionan estimaciones con diversos grados de sensitividad y especificidad en la eliminación del ruido.

El método ha sido testeado de forma cuantitativa mediante simulaciones Monte-Carlo con un conjunto de señales de prueba que representan una gran variedad de situaciones (transitorios, spikes, alta densidad espectral, etc), presentando un rendimiento superior al de los métodos tradicionales basados en estimación de umbrales (Umbrales universales de Donoho³, Stein's Unbiased Risk Estimate, False Discovery Rate, Minimax, etc).

^{*} raul.benitez@upc.edu

¹ S. Mallat, "A Wavelet Tour of Signal Processing" (2nd Edition), Academic Press, 1999.

² R. Benítez, Z. Nenadic, "Robust Unsupervised Detection of Action Potentials with Probabilistic Models", *IEEE Transactions in Biomedical Engineering* (2007), in press.

³ D.L. Donoho, I.M. Johnstone (1994), "Ideal spatial adaptation by wavelet shrinkage," *Biometrika, vol. 81, pp. 425-*455.

⁴ D.L. Donoho, I.M. Johnstone (1995), "Adapting to unknown smoothness via wavelet shrinkage via wavelet shrinkage,"JASA, vol. 90, 432, pp. 1200-1224.

Realistic model of action potential propagation in rabbit heart: Application to defibrillation studies

Jean Bragard* Departamento de Física y Matemática Aplicada Universidad de Navarra 31080 Pamplona

In this work I have developed a realistic numerical model of the propagation of the action potential through the ventricles of a rabbit heart. The model contains two fields, the external electric potential and the intra-cellular electric potential¹ . Realistic geometry as well as fiber orientation inside the heart are taken into consideration². It is well known that the electric conductivity is one order of magnitude larger in the direction of the fiber with respect to orientation perpendicular to the fibers³. The resulting wave speed of the action potential is substantially affected by the anisotropy of the local conductivity tensor and is a crucial parameter to consider in realistic simulations. In addition to the geometry and the topology of the fibers, the physiology of the cell membrane is also modeled in a realistic manner (different models for the membrane of the myocites have been considered: e.g. Flavio-Fenton model⁴; Luo-Rudy⁵; Ashihara- $Trayanova^6$).

Aiming at determining the influence of a strong applied external electric shock to restore a correct state of the heart, we have used the following proctocol: The model parameters are chosen in order to facilitate a fibrillation state of the heart then through excitation at different choosen points one induces a turbulent electric state (i.e. fibrillation). The next step consists in applying an electric shock to reset the membrane potential.

The parameters of interests in the present study are: strength of the applied electric field; localization of the electric field and finally one also investigate the influence of the temporal dynamics related to the application of the field.



Figura 1. Computational domain.

The final goal of this study is the design of an optimal strategy to follow in defibrillating the heart while avoiding the application of huge electric fields that are responsible for irreversible damages to the heart structure.

- ¹ L. Tung, Ph.D. Thesis MIT, Cambridge, MA, 1978.
- ² F. Vetter & A. McCullogh, Prog. Biophys. Mol Biol., 69, 157, 1998.
- ³ R. Plonsey & R. Barr, *Bioelectricity: A quantitative approach*, Plenum, New York, 1988.
- ⁴ F. Fenton, E. Cherry, A. Karma & W.J. Rappel, *CHAOS*, 15, 013502, 2005.
- ⁵ C. Luo & Y. Rudy, Circ. Res., 68, 1501, 1991.
- ⁶ T. Ashihara & N. Trayanova, *Biophys. J.*, 87, 2271, 2004.

^{*} jbragard@fisica.unav.es

Supervivencia de un blanco rodeado por trampas subdifusivas

Santos Bravo Yuste^{(1)*} y Katja Lindenberg^{(2)†}

⁽¹⁾Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

⁽²⁾ Department of Chemistry and Biochemistry 0340, e Institute for Nonlinear Science, University of California San Diego, 9500 Gilman Drive, La Jolla, CA 92093-0340, USA

Sistemas en los que los procesos difusivos son anómalos aparecen en muy diversos ámbitos de la Ciencia: en Geología, Sociología, Biología, y por supuesto, en Física. Debido a recientes avances tecnológicos, un buen número de experimentos han puesto de relieve la existencia de difusión anómala en medios biológicos, en particular, en el interior de las estructuras celulares, en donde se encuentra que el desplazamiento de ciertas partículas ("caminantes") es subdifusivo, es decir, que su desplazamiento crece de forma sublineal en el tiempo:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim t^{\gamma}, \quad 0 < \gamma < 1.$$
 (1)

Una cuestión natural que surge de inmediato es la siguiente: ¿cómo afecta el carácter anómalo de la difusión de las partículas a la cinética de las reacciones que estas partículas puedan sufrir?. Por ejemplo, recientemente, un buen número de trabajos experimentales y teóricos han comenzado a estudiar el problema de estimar el efecto de la difusión anómala en el acoplo y desacoplo de enzimas en lugares específicos ("blancos") en el ADN.¹

En esta comunicación se estudia el problema de una partícula blanco (el "target") rodeada de un mar de trampas subdifusivas ("target problem") y nos preguntamos por la probabilidad de que, tras un cierto tiempo, el acoplo blanco-trampa no se haya producido. En la jerga habitual, nos preguntamos por la probabilidad de supervivencia Q(t) del blanco (el término supervivencia alude a la suposición tácita de que el blanco desaparece tras acoplarse con la trampa, pero esto no es, por supuesto, obligatorio). En el modelo que consideraremos aquí, el acoplo podría no producirse cuando el blanco y la trampa se encuentran, es decir, hay una cierta probabilidad de que la reacción no se produzca (blanco parcialmente absorbente). Por supuesto, es posible considerar el caso límite en el que la reacción siempre ocurre (probabilidad de reacción uno, blanco completamente absorbente). Este caso especial ha sido estudiado recientemente en la referencia 2. El modo en el que atacamos el problema es a través de una descripción del movimiento subdifusivo en el continuo mediante la ecuación de difusión fraccional. Para hallar Q(r) es necesario conocer previamente la probabilidad $Q_1(r,t)$ de que una única partícula subdifusiva situada inicialmente a una distancia r del blanco no reaccione con éste antes del instante t (una cantidad que interesante en si misma). En el espacio de Laplace se encuentra que

$$u\widetilde{Q}_{1}(r,u) = 1 - \rho^{-\lambda} \frac{K_{\lambda}(\rho z)}{K_{\lambda}(z) + (z/q)K_{\lambda+1}(z)}, \qquad (2)$$

donde u es la variable de Laplace conjugada del tiempo t, ρ es la densidad de trampas, K es la función esférica de Bessel de tercera especie, $\rho = r/R$, $z = \sqrt{R^2 u^{\gamma}/D}$, $\lambda = d/2 - 1$, d es la dimensión del medio, R es el radio del blanco, D la constante de difusión de las partículas subdifusivas, y q es un parámetro que describe la reactividad del blanco (si $q \to \infty$ el blanco es completamente absorbente). Es posible demostrar que la probabilidad de supervivencia en presencia de una única trampa $Q_1(r,t)$ depende de la reactividad del blanco para todas las dimensiones d. Sin embargo, para d = 1 y tiempos grandes encontramos

$$Q_T \sim \exp\left\{-\rho \frac{\sqrt{4\pi D t^{\gamma}}}{\Gamma(1+\gamma/2)}\right\}$$

tanto para blanco completamente absorbente como también para blanco parcialmente absorbente. Para d = 2 y tiempos grandes encontramos

$$Q_T \sim \exp\left\{-\rho \; \frac{4\pi D t^{\gamma}}{\Gamma(1+\gamma) \ln(4D t^{\gamma}/R^2)}\right\}$$

tanto para blanco completamente absorbente como también para blanco parcialmente absorbente. Sin embargo, para d = 3 y tiempos grandes encontramos

$$Q_T \sim \exp\left\{-\rho \frac{4\pi RDt^{\gamma}}{(1+2\lambda/q)\Gamma(1+\gamma)}\right\},$$

de modo que en esta dimensión la probabilidad de supervivencia *sí depende de la reactividad* del blanco.

^{*} santos@unex.es

 $^{^{\}dagger}$ kl@hypatia.ucsd.edu

¹ S. E. Halford and J. F. Marko, Nucleic Acids Res. **32**, 3040 (2004); I. Golding and E. C. Cox, Phys. Rev. Lett. **96**, 098102 (2006).

² S. B. Yuste, K. Lindenberg, Phys. Rev. E 76, 051114 (2007).

Potencial de vaciamiento en sistemas diluidos

Santos Bravo Yuste⁽¹⁾*, Andrés Santos^{(1)†} y Mariano López de Haro^{(2)‡}

⁽¹⁾Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

⁽²⁾ Centro de Investigación en Energía, Univ. Nacional Autónoma de México (U.N.A.M.), Temixco, Morelos 62580, México

Una mezcla de esferas duras constituye un modelo clásico de fluidos. Una propiedad notable de este sistema, en particular cuando el tamaño de sus componentes es muy dispar, es la presencia de fuerzas de vaciamiento ("depletion forces"): cuando la separación entre dos esferas grandes es menor que el diámetro de las esferas pequeñas, estas últimas no pueden interponerse entre aquéllas, de modo que se produce un desequilibrio. una presión local inducida por las esferas pequeñas que tiende a acercar las dos esferas grandes. Este fenómeno ha sido abordado mediante teorías, aproximaciones y técnicas muy diversas. Aquí presentamos resultados obtenidos mediante la "Rational Function Approximation" (RFA). Esta aproximación proporciona expresiones analíticas de la estructura de los líquidos similares a las de la teoría clásica de Percus-Yevick (PY), pero con la ventaja de que generalmente conduce a una mejor descripción de los fluidos de esferas duras $^{1-3}$.



Figura 1. Potencial de vaciamiento entre dos esferas grandes iguales inmersas en un baño de esferas duras pequeñas. La razón de diámetros entre la esferas grandes y pequeñas es 5. El diámetro de la esfera pequeña σ_1 es la unidad de longitud. Se muestran resultados para tres valores distintos de la fracción η del volumen ocupado por las esferas del baño. Los símbolos son resultados de simulación ($\eta = 0.1$, círculos; $\eta = 0.2$, cuadrados; $\eta = 0.3$, triángulos), la línea continua son nuestros resultados (RFA), y la línea quebrada son los de la teoría de Percus-Yevick.

En esta comunicación presentamos resultados (i) del potencial de vaciamiento entre dos esferas grandes que se encuentran rodeadas por un fluido monocomponente de esferas duras pequeñas y, además, (ii) de la fuerza de vaciamiento entre una pared y una esfera grande que está rodeada por un fluido monocomponente de esferas duras pequeñas. Estos resultados se comparan con los predichos por la teoría de PY. En ambos casos, ni la esfera en presencia de la pared ni la pareja de esferas interaccionan con otras moléculas de la misma especie (límite de dilución infinita). Debe notarse que nuestra teoría es válida cuando el fluido solvente esta formado por una mezcla de esferas duras (aunque no disponemos de resultados de simulación para estos casos). En las figuras mostramos algunos resultados representativos. Se observa que la RFA conduce a resultados mejores que los de PY, especialmente cuando las distancias son pequeñas. Finalmente, hay que señalar que para condiciones más extremas (razón muy grande entre los diámetros de las esferas grandes y pequeñas y/o densidades del solvente grandes) tanto la RFA como la de PY conducen a resultados claramente deficientes.



Figura 2. Fuerza de vaciamiento entre una pared y una esfera grande inmersa en un baño de esferas duras pequeñas. La razón de diámetros entre la esfera grande y las esferas pequeñas es 5. El diámetro de la esfera pequeña σ_1 es la unidad de longitud. Los símbolos son resultados de simulación $(\eta = 0.1, \text{ círculos}; \eta = 0.2, \text{ cuadrados})$, la línea continua son nuestros resultados (RFA), y la línea quebrada los de la teoría de Percus-Yevick.

- ‡ malopez@servidor.unam.mx
- ¹ S. B. Yuste, A. Santos, and M. López de Haro, J. Chem. Phys. **108**, 3683 (1998)
- ² M. López de Haro, S. B. Yuste, A. Santos, "Alternative Approaches to the Equilibrium Properties of Hard-Sphere Liquids," en *Playing with Marbles: Theory and Simulation* of Hard-Sphere Fluids and Related Systems, editado por A. Mulero (Springer, Berlin, pendiente de publicación); ar-Xiv:0704.0157 [cond-mat.stat-mech].
- ³ Al. Malijevský, S. B. Yuste, A. Santos, and M. López de Haro, Phys. Rev. E **75**, 061201 (2007).

^{*} santos@unex.es

 $^{^{\}dagger}$ and res@unex.es

<u>O. Canela-Xandri</u>[†], F. Sagués[‡], J. Buceta^{†*}

[†]CeRQT Parc Científic de Barcelona 08028 Barcelona [‡]Departament de Química Física Universitat de Barcelona 08028 Barcelona

Fluctuations in gene expression can produce a loss of precision in reg- ulatory processes. The importance (and consequences) of the effects in- troduced by noise not only depend on the amplitude of the fluctuations. In this regard, a persisting fluctuation can have more serious effects¹. Re- cent single cell experiments pointed out that noise can be decomposed in two types: extrinsic and intrinsic². On the one hand, extrinsic noise pro- duces different effects in the same gene over different cells. On the other hand, intrinsic noise affects differently the expression of two identical genes within the same cell. In this work we have modeled a system where one gene is expressed when the concentration of its repressor decreases by dilution (cell division). Our approach makes use of the chemical master equation formalism. A Kramers-Moyal expansion allows for an effective description in terms of Langevin equations. Our results, in agreement with experiments, show that extrinsic fluctuations are long-correlated (of the order of the cell cycle) whereas intrinsic ones are memory-less.

^{*} jbuceta@pcb.ub.es

¹ Kaern, M, Elston, T. C, Blake, W. J, & Collins, J. J. (2005) Nature Reviews Genetics 6, 451-464

² Elowitz, M. B, Levine, A. J, Siggia, E. D, & Swain, P. S. (2002) Science **297**, 1183-1186.

Dinámica evolutiva de ecosistemas

J. A. Capitán^{*} y J. A. Cuesta[†]

Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC) Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid Avda. de la Universidad, 30. 28911 Leganés Madrid

Desde el punto de vista del modelado de redes ecológicas, los llamados "assembly models" han sido ampliamente utilizados en la literatura para describir la formación de ecosistemas mediante invasiones de nuevas $especies^{1,2}$. Normalmente estos modelos parten de un "pool" de especies posibles, definido a través de ciertas condiciones, a partir del cual se va construyendo el ecosistema mediante invasión de una especie nueva que, a su vez, puede provocar extinciones de algunas especies presentes. Después de la invasión, para determinar el ecosistema final que se alcanza, o bien se hace evolución dinámica de las biomasas, de acuerdo con unas ecuaciones de evolución fijadas previamente, o bien se utilizan criterios de estabilidad que decidan cuál es el estado final tras la invasión². La principal conclusión que se obtiene de estos modelos es que normalmente se alcanza un único ecosistema resistente a cualquier invasión, aunque en algunos casos se obtienen conjuntos más complejos de ecosistemas interconectados a través de invasiones.

Naturalmente, los "estados finales" que se alcanzan mediante este tipo de modelos dependen del conjunto de especies inicial que se defina y de la sucesión de invasiones que se realice. A diferencia de los anteriores trabajos, en esta contribución utilizamos un modelo muy simplificado de ecosistema que nos permitirá estudiar todas las posibles invasiones. Con ello podemos definir una cadena de Markov asignando probabilidades de transición entre ecosistemas, lo que en definitiva nos permitirá determinar el conjunto de ecosistemas al que lleva la iteración de la cadena y, asimismo, la distribución de probabilidad de equilibrio sobre esos ecosistemas.

Para ello, partimos de un modelo sencillo³ de ecosistema definido por L niveles tróficos que albergan s_i especies, $i = 1, \ldots, L$. Las interacciones entre especies están determinadas por la dinámica de Lotka-Volterra (L-V), dejando constantes los parámetros de interacción para tener una descripción de campo medio. Las especies del nivel i depredan del nivel i - 1 y son depredadas por las especies del nivel i+1 y, para reducir el número de posibilidades de invasión, suponemos que cada especie depreda de todas las especies del nivel inferior. Las especies del primer nivel depredan de un "recurso" que evoluciona con una dinámica similar, excepto que en caso de estar asilado crece de forma logística determinada por un valor de saturación R.

La cadena de Markov se define mediante invasiones partiendo del ecosistema vacío, y considerando las invasión posibles en cada uno de los niveles tróficos del ecosistema así como en el nivel inmediatamente superior al último. Se realiza la evolución dinámica integrando numéricamente las ecuaciones L-V, hasta alcanzar un estado estacionario. Al finalizar, chequeamos la viabilidad de todas las especies, es decir, comprobamos si todas quedan por encima de un umbral de extinción N_c . En tal caso, el invasor es admitido y se genera un nuevo ecosistema perteneciente a la cadena de Markov. En caso de que no se cumpla el criterio de viabilidad, se realizan extinciones sucesivas de una especie en los niveles que primero hayan cruzado el umbral de extinción. Lo que observamos es que, o bien el invasor es rechazado y el ecosistema permanece, o bien se producen "avalanchas" de extinciones que reconfiguran el ecosistema a veces de forma drástica.

Una vez definida la matriz de probabilidades de la cadena, se clasifican los ecosistemas en transitorios y recurrentes, siendo estos últimos aquéllos a los que tiende la iteración de la cadena. En función de los valores de R, se puede llegar a un único ecosistema recurrente o a un conjunto ergódico, que puede llegar a tener en torno a 2000 ecosistemas (un ejemplo de conjunto cerrado puede verse en la FIG.1). La cadena alcanza, por tanto, estados finales similares a los que encuentran Morton y Law².



Figura 1. Transiciones en el conjunto final para R = 430. Los nodos son proporcionales a la probabilidad del ecosistema.

- * jcapitan@math.uc3m.es
- [†] cuesta@math.uc3m.es
- ¹ W. M. Post and S. L. Pimm, Math. Biosci. **64**, 169-192 (1983).
- ² R. D. Morton and R. Law, J. Theor. Biol. **187**, 321-331 (1997).
- ³ U. Bastolla, M. Lässig, S. C. Manrubia and A. Valleriani, J. Theor. Biol. **235**, 521-530 (2005).

Funcional de medidas fundamentales para mezclas de cilindros duros paralelos

J. A. Capitán^{*}, Y. Martínez-Ratón[†] y J. A. Cuesta[‡]

Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC) Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid Avda. de la Universidad, 30. 28911 Leganés Madrid

La Teoría de Medidas Fundamentales (FMT) puede considerarse de las más sofisticadas dentro de las aproximaciones en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), que da sus mejores resultados en el estudio de fluidos inhomogéneos en situaciones de alto confinamiento, y por tanto describe correctamente las fases estructuradas. Tarazona y Rosenfeld¹ mostraron que el buen comportamiento del funcional en situaciones de confinamiento (la correcta "reducción dimensional") junto con los funcionales cero-dimensional y uni-dimensional exactos son los ingredientes necesarios para determinar los funcionales de medidas fundamentales (FMF) para los modelos de discos (HD) y esferas duras (HS). No obstante, aunque las fases confinadas son descritas con muy buen grado de aproximación, los funcionales recuperan el resultado de la Teoría de Partícula Escalada (SPT) para la presión de la fase uniforme. Desafortunadamente, tanto las versiones para HD y HS como otras múltiples extensiones de la teoría a partículas anisótropas, son bastante rígidas en el sentido de que cualquier intento por mejorar el resultado para el fluido uniforme hace que se pierdan las propiedades de correcta reducción dimensional del funcional.

Los primeros ejemplos de FMF's para partículas anisótropas fueron el funcional para cubos y paralelepípedos paralelos². En dichos trabajos se probó que el FMF se puede determinar completamente aplicando un operador diferencial sobre el funcional cero-dimensional. También se demostró que si se considera un modelo en dimensión d cuyo FMF es conocido, para obtener el FMF para partículas paralelas en la dirección ortogonal al espacio d-dimensional basta con aplicar dicho opera-dor diferencial al FMF. Siguiendo esa idea, en esta contribución presentamos el funcional para cilindros duros paralelos, en el caso general de una mezcla de diferentes radios R_i y diferentes longitudes L_i .

En primer lugar, hemos extendido el FMF obtenido por Tarazona y Rosenfeld¹ para el sistema unicomponente de discos al caso de la mezcla, usando un método alternativo al formalismo de cavidades. El funcional resultante satisface la reducción dimensional al caso 1D y 0D, por lo que este método de construcción es equivalente al dado por Tarazona y Rosenfeld¹, ya que este último está completamente basado en la reducción dimensional. En un segundo paso, partiendo del FMF para la mezcla de discos y usando el operador diferencial introducido por Cuesta y Martínez-Ratón², se obtiene de forma inmediata el FMF para la mezcla de cilindros paralelos con interacción de cuerpo duro (PHCL), que por construcción garantiza la correcta reducción dimensional de 3D a 2D. Con el fin de comprobar el poder predictivo del FMF, hemos minimizado el funcional para determinar el diagrama de fases del modelo PHCL parametrizando el perfil de densidad mediante simetrías esméctica (Sm), columnar (C) y cristalina (K). Comparamos nuestros resultados con el diagrama de fases obtenido por simulación Monte Carlo³, resultando un acuerdo bastante bueno entre teoría y simulación, sobre todo en las predicciones de las transiciones entre las fases no uniformes (véase la FIG.1). Aunque la descripción de la FMT de la fase uniforme no es buena, los órdenes de las transiciones obtenidos son los mismos que en simulación y, principalmente, el acuerdo entre los datos para las fases no uniformes (sobre todo, la sólida) es destacable.



Figura 1. Ecuación de estado para todas las fases estables: nemática (hasta la bifurcación indicada con el rombo), esméctica (entre el rombo y la transición Sm-K), y la fase cristalina. Los círculos abiertos son los puntos de simulación dados por Veerman y Frenkel³. Las flechas indican las transiciones N-Sm y Sm-K obtenidas mediante simulaciones. En los insets aparece la ecuación de estado para la fase columnar, que resulta ser metaestable.

* jcapitan@math.uc3m.es

- ¹ P. Tarazona and Y. Rosenfeld, Phys. Rev. E. **55**, R4873 (1997).
- ² J. A. Cuesta and Y. Martínez-Ratón, Phys. Rev. Lett **78**, 3681 (1997).
- ³ J. A. C. Veerman and D. Frenkel, Phys. Rev. A. **43**, 4334 (1991).

 $^{^{\}dagger}$ yuri@math.uc3m.es

[‡] cuesta@math.uc3m.es

Transición de la estabilidad de Turing a Hopf mediante la aplicación de un flujo externo en un sistema micelar

Jorge Carballido-Landeira, Pablo Taboada y A. P. Muñuzuri

Departamento de Física de la Materia Condensada, Univ. de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela

La incorporación de un sistema de reacción-difusión tal como la reacción de Belousov Zhabotinsky en un sistema micelar inverso (conocido como sistema BZ-AOT debido al surfactante utilizado). La compartimentalización requerida en estos sistemas tipo célula, ha dado lugar a una mayor riqueza en los patrones espaciotemporales observados, considerándose así uno de los sistemas primordiales en el entendimiento de fenómenos naturales tales como la morfogénesis, la estructuración de las pieles de los animales, etc. La aplicación de un flujo externo bajo de las condiciones de observación de un patrón de Turing, ponen de manifiesto que la estabilidad de nuestro sistema puede ser modificada, cambiando desde un comportamiento estacionario en tiempo (en ausencia de flujo) a una marcada dependencia temporal (en presencia del mismo), pero manteniendo en todo momento la periodicidad espacial característica de los patrones de Turing.

Language competition as an example of the consensus problem

Xavier Castelló, Víctor M. Eguíluz and Maxi San Miguel

IFISC, Institut de Física Interdisciplinària i Sistemes Complexos (CSIC-UIB), Campus Universitat Illes Balears E07122

Palma de Mallorca

We consider an extension of the voter model in which a set of interacting elements (agents) can be in either of two equivalent states (A or B) or in a third additional mixed (AB) state. The model is motivated by studies of language competition dynamics, where the AB state is associated with bilingualism. Language competition belongs to the general class of processes that can be modelled by the interaction of heterogeneous agents as an example of collective phenomena in problems of social consensus¹. We study the ordering process and associated interface and coarsening dynamics, addressing the role of the third AB state and the network of interactions.

Building upon a proposal by Minett and Wang², we study a model (*AB-model*) in which an agent *i* sits in a node within a network of N individuals and has k_i neighbors. It can be in three possible states: *A*, agent choosing option A (using language A); *B*, agent choosing option B (using language B); and *AB*, agent in a state of coexisting options (bilingual agent using both languages, A and B). States A and B are equivalent states.

The state of an agent evolves as follows: starting from a given initial condition, at each iteration we choose one agent *i* at random and we compute the local densities for each of the three communities in the neighborhood of node *i*, σ_i^l (*l*=A, B, AB). The agent changes its state according to the following transition probabilities³:

$$p_{i,A\to AB} = \frac{1}{2}\sigma_i^B, \qquad p_{i,B\to AB} = \frac{1}{2}\sigma_i^A \tag{1}$$

$$p_{i,AB\to B} = \frac{1}{2}(1 - \sigma_i^A), \qquad p_{i,AB\to A} = \frac{1}{2}(1 - \sigma_i^B).$$
 (2)

For the voter model⁴ the transition probabilities are simply given by $p_{i,A\rightarrow B} = \sigma_i^B$, $p_{i,B\rightarrow A} = \sigma_i^A$. The voter model rules are equivalent to the adoption by the agents of the opinion of a randomly chosen neighbor.

In a 2-dimensional regular lattice⁵ we show that the typical size of a domain, $\langle \xi \rangle$, grows as $\langle \xi \rangle \sim t^{0.45}$. This result is compatible with the well known exponent 0.5 associated with domain growth driven by mean curvature and surface tension reduction observed in SFKI models. Agents in the AB state define the interfaces, changing the interfacial noise driven coarsening of the voter model to curvature driven coarsening. Moreover, around 1/3of the realizations get trapped in long-lived metastable states. They correspond to stripe-like configurations for an A or B domain. For the realizations that do not get trapped in long lived metastable states, the characteristic time to reach an absorbing state can be estimated to scale as $\tau \sim N$. The global characteristic time instead, is dominated by the persistence of the dynamical metastable states, so that $\tau \sim N^{\alpha}$, with $\alpha \sim 1.8$.

In small world networks⁵, AB agents restore coarsening, eliminating the metastable states of the voter model. The time to reach the absorbing state scales with system size as $\tau \sim \ln N$ to be compared with the result $\tau \sim N$ for the voter model in a small world network.

When taking into account a model network with community structure⁶, the fraction of runs which have not reach consensus at time t decays exponentially in the voter model. In the AB-model instead, it appears to have power law behaviour $f(t) \sim t^{-\alpha}$, $\alpha \approx 1.3$. Since the exponent $\alpha < 2$, the average decay time for the bilinguals model does not give a characteristic time scale, but metastable states are found at any time scale (see Fig 1).



Figura 1. Snapshots of a single run of the dynamics, with nodes in state A in black, B in grey, and AB in white circled in black. Left: voter model. Right: AB-model (metastable states at t = 430 and t = 1000).

⁶ Castelló et al. 2007 Europhysics Letters **79** (66006)

^{*} xavi@ifisc.uib.es. http://ifisc.uib.es

¹ San Miguel M et al. 2005 Computing in Science and Engineering **7** Issue 6 67

² Wang W. S.-Y. and Minett J. W. 2005 Trends in Ecology and Evolution **20** (263)

 $^{^3}$ The prefactor 1/2 corresponds to equivalent A and B states.

⁴ Holley R. and Liggett T. 1975 Ann. Probab.4 (195)

⁵ Castelló et al. 2006 New Journal of Physics 8 (308–322)

¿Qué desencadena la invasión de tumores cerebrales?

Mario Castro^{1*}, Carmen Molina-París², y Thomas S. Deisboeck³

¹ Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC) and Grupo de Dinámica No Lineal (DNL),

Escuela Técnica Superior de Ingeniería (ICAI), Universidad Pontificia Comillas, E-28015 Madrid, Spain

² Department of Applied Mathematics, University of Leeds, Leeds LS2 9JT, United Kingdom and Departamento de

Matemáticas, Física Aplicada y Físico-química, Facultad de Farmacia, Universidad San Pablo CEU, E-28660 Madrid, Spain ³ Complex Biosystems Modeling Laboratory, Harvard-MIT (HST) Athinoula A. Martinos Center for Biomedical Imaging,

Massachusetts General Hospital, Charlestown, Massachusetts 02129, USA

El crecimiento de agregados celulares, y en particular de tumores, despierta un gran interés, tanto desde el punto de vista teórico (Biofísica) como aplicado (terapia contra el cáncer). Dependiendo del tipo de cáncer, la invasión tumoral emerge de una combinación de un rápido crecimiento volumétrico (debido a alteraciones genéticas de los genes reguladores) y factores amplificadores externos (siendo la quimiotaxis el factor más aceptado como candidato). Estos mecanismos se combinan dando lugar a un escenario de realimentación que produce el crecimiento explosivo del tumor¹. No obstante, este escenario de auto-realimentación e interacción con factores externos es descrito por la comunidad médica de forma cualitativa, y un estudio cuantitativo que lo corrobore está lejos de ser aceptado².

En este trabajo, estamos especialmente interesados en la forma en que adhesión al substrato, quimiotaxis, proliferación, mecanismos reparadores y factores cancerígenos dan lugar a la formación de tumores en forma de estructuras ramificadas. Para ello, se presenta un modelo físico-matemático que incluye estos mecanismos de la manera más general para preservar la universalidad del fenómeno. Asimismo, se compara con experimentos de crecimiento *in-vitro* de tumores cerebrales. Se obtiene un excelente acuerdo, tanto cualitativo como cuantitativo, y se muestra la validez de la imagen comúnmente aceptada por la comunidad médica sobre el papel de la interacción quimiotaxis-proliferación.

El modelo describe la evolución e interacción de magnitudes macroscópicas (densidades) tratando el sistema desde la hipótesis del continuo. Para ello, se definen

- $\bullet~M$ como la concentración de nutrientes
- $\bullet~U$ como la densidad de células cancerosas
- $\bullet~Q$ como la concentración de hetero-quimiotáctico
- C como la concentración de homo-quimiotáctico

que obedecen el siguiente sistema de ecuaciones

$$\partial_t M = \mu_M \nabla^2 M - \lambda_M R_M(M, U), \tag{1}$$

$$\partial_t Q = \nabla(\mu_Q(M)\nabla Q) - a_Q R_Q, \qquad (2)$$

$$\partial_t C = \nabla(\mu_C(M)\nabla C) + \alpha_C R_C^{(p)} - a_C R_C^{(d)}, \qquad (3)$$

$$\partial_t U = \nabla(\mu_U(M, U)\nabla U) + \lambda_U R_M(M, U).$$
(4)

A pesar de la alta dimensionalidad (paramétrica) del sistema se pueden obtener interesantes resultados, tanto analíticos como numéricos³:

- La presencia del tumor en un entorno nutriente es el desencadenante de la proliferación y limita la movilidad de las células cancerígenas en zonas de alta concentración de nutrientes.
- El hetero-quimiotáctico es el causante de una inestabilidad morfológica que inicia el crecimiento ramificado (invasivo) del tumor.
- El homo-quimiotáctico no es capaz en si mismo de iniciar la invasión, aunque una vez iniciada contribuye al crecimiento de las ramas.
- Numéricamente se prueba que las hipótesis y aproximaciones utilizadas son consistentes y que se pueden obtener morfologías semejantes a las experimentales), como se muestra en la Figura 1 (un tumor compacto y homogéneo del que nacen ramas que se dirigen a la fuente hetero-quimiotáctica).



Figura 1. Comparativa entre la morfología experimental y de simulación de las ecuaciones (1)-(4).

Finalmente, se discuten las implicaciones biomédicas y la formulación de un modelo celular equivalente (como en la Ref. 4) a escala celular que permita obtener una mejor caracterización morfológica.

* marioc@upcomillas.es

- ¹ S. Habib, C. Molina-París, y T. S. Deisboeck, Physica A **327**, 501 (2003).
- ² T.S. Deisboeck, M.E. Berens, A.R. Kansal, S. Torquato, A.O. Stemmer-Rachamimov, y E.A. Chiocca, Cell Prolif 34, 115 (2001).
- ³ M. Castro, C. Molina-Parí, y T.S. Deisboeck, Phys. Rev. E **72**, 041907 (2005)-
- ⁴ M. J. Plank y B. D. Sleeman, Bull. Math. Biol. 66, 1785-1819 (2004).

Hamiltonianos efectivos de interfases libres en la teoria del funcional de la densidad

P.Tarazona, <u>R.Checa</u>^{*}, E.Chacón.

Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada. Universidad Autónoma de Madrid Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid, CSIC,

E-28049 Madrid.

En la interfase entre dos fluidos aparecen, ademas de las fluctuaciones de volumen presentes en ambas fases, unas fluctuaciones térmicas superficiales conocidas como ondas capilares que fueron descritas inicialmente por Mandelstam-Smoluchowski y cuyo tratamiento dío lugar a la teoría de ondas capilares (CWT) que incluye los efectos de estas sobre un perfil exento de fluctuaciones superficiales (llamado intrínseco). Su incorporación es mediante un hamiltoniano efectivo de interfase $\mathcal{H}_{\mathcal{I}}$ definido como un funcional de una variable colectiva $\xi(R)$ dada en el plano de la interfase y que representa la separación instantánea de las dos fases en coexistencia. CWT construye $\mathcal{H}_{\mathcal{I}}$ basandose en consideraciones macroscópicas de modo que equivale a γ_{lv} veces la variación de área de la superficie intrínseca respecto de la interfase plana.

Diversas propuestas se han realizado para derivar $\mathcal{H}_{\mathcal{I}}[\xi]$ sobre una base más firme, desde extensiones fenomenológicas basadas en curvaturas de la interfase hasta teorías que parten de las interacciones a nivel molecular. De forma genérica, en el espacio de Fourier y en aproximación gaussiana las diferentes propuestas encajan en una forma:

$$H_{I}[\{\xi_{q}\}] = \frac{A}{2} \sum_{|q|} q^{2} \gamma(q) |\xi_{q}|^{2} + O(|\xi_{q}|^{4})$$
(1)

Lo que permite comparar los diferentes hamiltonianos efectivos mediante una tensión superficial $\gamma(q)$. CWT asume por tanto que $\gamma(q) = \gamma_{lv}$, hecho correcto en el límite $q \sim 0$. La forma de \mathcal{H}_{CWT} implica que las interfases necesitan un tamaño superficial finito (que surge como un q_{min} en la suma anterior) para estar tener una anchura de la interfase bien definida en ausencia de campos externos que limiten las ondas capilares. Este hecho ha provocado que los perfiles de densidad obtenidos de teorías donde el área de la interfase no aparece y poseen una anchura definida en el límite termodinámico sean interpretados como perfiles intrínsecos en lugar de verse como perfiles de equilibrio de una interfase fluido-fluido. El otro límite a la suma, $q_{max} \sim 2\pi/\sigma$, suele entenderse relacionado con el tamaño molecular y aparece externo a CWT. Conviene notar que $\gamma(q)$ creciente en este regimen permite evitar introducirlo *ad hoc* por la propia estructura de $\mathcal{H}_{\mathcal{I}}$ y las simulaciones más elaboradas encuentran de hecho $\gamma(q)$ monotonamente creciente.

En este contexto la teoría del funcional de la densidad (DFT) permite estudiar un fluido inhomogéneo desde un nivel molecular a un nivel macroscópico y la correcta estimación dentro de ella de un hamiltoniano de interfase efectivo es una vía idónea de entender las interfases fluidas y postular tanto $\mathcal{H}_{\mathcal{I}}$ como $\gamma(q)$. Sin embargo hamiltonianos efectivos obtenidos desde DFT inicialmente predecian $\gamma(q)$ decreciente y su mejora² encontraba una $\gamma(q)$ creciente para valores de q próximos al que se consideraba q_{max} en CWT pero arrastrando el problema del decrecimiento en una región amplia del espectro en q de $\mathcal{H}_{\mathcal{I}}$.

En este trabajo 3 se analizan estas propuestas basadas en hamiltonianos efectivos obtenidos dentro de DFT mediante

$$H_{DF}[\xi] \equiv \Omega[\rho_{\xi}(\vec{r})] - \Omega[\rho_{DF}(z)]$$
⁽²⁾

y que interpretan por tanto ρ_{DF} como un perfil intrínseco sin CW. Mostramos que la definición anterior¹ *implica* obtener $\gamma(q)$ decrecientes desde el límite común $\gamma(q \sim 0) = \gamma_{lv}$. Esto provoca replantear la definición dentro de DFT de $\mathcal{H}_{\mathcal{I}}$ y colateralmente recuperar la interpretación de ρ_{DF} como un perfil con presencia parcial de ondas capilares⁴.

^{*} ramiro.checa@uam.es

¹ Complementada con un crossing criterion, $\rho(\vec{R}, \xi(\vec{R})) = \bar{\rho}$, para determinar ξ . Por tanto involucra minimizar un funcional bajo una ligadura dada por la expresión anterior.

 $^{^2}$ K.R. Mecke and S. Dietrich. Phys. Rev. E. ${\bf 59}$ 6766 (1999).

³ P. Tarazona, R. Checa and E. Chacón. Phys. Rev. Lett. **99** 196101 (2007).

⁴ R. Checa, E. Chacón and P. Tarazona. Phys. Rev. E. **70** 061601 (2004), J.V. Sengers and J.M.J. van Leeuwen. Phys. Rev. A. **39** 6346 (1989).

Interaction of oscillating dissipative solitons in nonlinear optical cavities

Adrian Jacobo, Damià Gomila, Manuel A. Matías and Pere ${\rm Colet}^*$

Instituto de Física Intedisciplinar y Sistemas Complejos, $IFISC^{\dagger}$ (CSIC-UIB)

Campus Universitat de les Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca

Dissipative solitons (DS), are spatially localized structures that appear in several nonlinear dissipative media including nonlinear optical cavities where are also known as cavity solitons¹. DS may develop oscillatory instabilities, so that oscillate in time while remaining stationary in space, like the oscillons (oscillating localized structures) found in a vibrated layer of sand². The occurrence of these oscillons in autonomous systems has been reported in optical³ and chemical systems⁴. Here we consider the interaction of two of such oscillating structures.

A prototype model in nonlinear optics displaying DS is the one introduced by Lugiato and Lefever for the slowly varying amplitude of the electrical field $E(\vec{x},t)$ in the transverse plane of an optical cavity filled with a Kerr medium⁵

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -(1+i\theta)E + i\alpha\nabla_{\perp}^2 E + E_0 + i|E|^2 E.$$
(1)

 ∇^2 is the transverse Laplacian, E_0 the homogeneous pump and θ the cavity detuning with respect to E_0 . The homogeneous steady state is given by $E_s(1+i(\theta-I_s)=E_0)$. The intracavity background intensity $I_s=|E_s|^2$ can be taken as a convenient control parameter. The region of existence of DS has been characterized³. Increasing θ or I_s the DS undergoes a supercritical Hopf bifurcation and starts to oscillate autonomously.

When two static DS are placed in the system at arbitrary positions they interact through the tails. Since the tails are oscillatory they move until they lock at specific equilibrium distances. Typically at stable distances the intensity has a minimum in the middle point while it has a maximum for unstable equilibrium distances.

For oscillatory DS the scenario is richer. For typical system parameters ($I_s = 0.9$, $\theta = 1.27$) there are three equilibrium distances. If the initial separation is larger than d = 19.8 the oscillatory DS move until they reach the largest equilibrium distance $d_3 = 23.44$. The intensity has a minimum in the middle point and in fact this is a stable separation. Independently of the initial phase of the oscillatory DS, after a transient the two DS synchronize and oscillate in phase (See Fig.1 top row).

If the initial separation is smaller than 19.8 but larger than 11.63 then the oscillating DS move until their distance is $d_2 = 15.75$. As shown in the second row of Fig.1 at this distance the intensity in the middle point has in fact a maximum, so for static DS this would be an unstable equilibrium distance. For oscillatory DS this distance is stable and in fact it leads to an antiphase behavior.

Finally if the initial separation is smaller than 11.63 the two DS move to the smaller equilibrium distance d = 7.69. At this separation one encounters coexisten-

ce of in-phase (Fig.1 third row) and out-of-phase (Fig.1 bottom row) stable oscillations. The system evolves to one or the other depending on the initial condition. The period of in-phase oscillation (T = 8.59) is similar to that of a structure alone (T = 8.66) while the one of out-of-phase oscillations is significantly larger (T = 10.45).



Figura 1. Left: Transverse profile of two oscillatory DS. Right: temporal evolution of the maximum of the left (solid) and right (dashed) structures.

- * jacobo@ifisc.uib.es
- [†] http://ifisc.uib.es
- ¹ Feature Section on Cavity Solitons, edited by L.A. Lugiato, IEEE J. Quantum Electron. **39**, # 2 (2003).
- ² P. Umbanhowar, F. Melo and H.L. Swinney, Nature **382**, 793 (1996).
- ³ W.J. Firth, A. Lord and A.J. Scroggie, Phys. Scr. **T67**, 12 (1996); W.J. Firth et al., J. Opt. Soc. Am. B **19**, 747 (2002).
- ⁴ V.K. Vanag and I.R. Epstein, Phys. Rev. Lett. **92**, 128301 (2004).
- ⁵ L.A. Lugiato and R. Lefever, Phys. Rev. Lett. **58**, 2209 (1987).

Sincronización de dos láseres de semiconductor sometidos a retroalimentación óptica filtrada y acoplados unidireccionalmente

Miguel Cornelles Soriano^{*}, Pere Colet, Claudio Mirasso

Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, IFISC (CSIC-UIB) Campus Universitat Illes Balears

07122 Palma de Mallorca

La retroalimentación óptica puede causar inestabilidades en la emisión de los láseres de semiconductor. En la mayoría de los casos, dichas inestabilidades aparecen en la forma de oscilaciones caóticas en la potencia óptica emitida. Estas oscilaciones caóticas pueden utilizarse para codificar información y así mejorar la seguridad de la transmisión de datos en sistemas de comunicación ópticos¹.

La portadora caótica que se genera cuando se somete el láser maestro a retroalimentación óptica suele tener un ancho de banda bastante mayor que la señal que se desea transmitir. Esto implica una mayor exigencia en los canales de comunicación que se vayan a emplear. Una manera de optimizar el sistema es añadiendo un filtro óptico en la cavidad externa que genera la retroalimentación². De esta forma, se reduce el ancho de banda de la portadora caótica de forma notable. En este trabajo exploramos la sincronización entre dos sistemas acoplados unidireccionalmente, que es la configuración típica para comunicaciones basadas en caos (Ver Figura 1).



Figura 1. Disposición de emisor y receptor en bucle cerrado.

La dinámica de este sistema viene dada $por^{1,2}$:

$$\begin{split} \dot{E}_m(t) &= \frac{1+i\alpha}{2} \left[G_m - \frac{1}{\tau_p} \right] E_m(t) + \gamma_m F_m(t), \\ \dot{F}_m(t) &= \Lambda_m E_m(t-\tau) e^{-i\Phi_m} + (i\omega_m - \Lambda_m) F_m(t), \\ \dot{E}_s(t) &= \frac{1+i\alpha}{2} \left[G_s - \frac{1}{\tau_p} \right] E_s(t) + \gamma_s F_s(t) + \kappa_r E_m(t), \\ \dot{F}_s(t) &= \Lambda_s E_s(t-\tau) e^{-i\Phi_s} + (i\omega_s - \Lambda_s) F_s(t), \\ \dot{N}_{m,s}(t) &= \frac{I}{e} - \frac{N_{m,s}(t)}{\tau_N} - G_{m,s}(t) P_{m,s}(t), \end{split}$$

donde los subíndices m y s denotan láser maestro y esclavo, respectivamente. E corresponde al campo eléctrico y N a los portadores en la cavidad láser, mientras que F corresponde a la retroalimentación filtrada. La respuesta en transmisión de los filtros se ha modelado como una Lorenciana. El ancho del filtro a la mitad del máximo es 2Λ y la frecuencia central del filtro es ω . Hemos consi-

derado un retraso $\tau = 1$ ns y una intensidad de la retroalimentación de $\gamma_{m,s} = 25$ ns⁻¹. Además, hemos fijado el bombeo a 1.5 veces la corriente umbral. Los valores del resto de los parámetros son idénticos para ambos láseres y se pueden encontrar en Referencia¹.

Nuestros resultados numéricos indican que la sincronización entre el maestro y el esclavo no sólo se mantiene sino que mejora cuando se añade un filtro en la cavidad externa, ver Figura 2. Además, el tiempo de autocorrelación de la portadora caótica generada con la retroalimentación filtrada es similar al de una portadora caótica generada generada con la retroalimentación de espejo plano, inidicando que ambos son de complejidad similar. Dado que el filtro apenas disminuye la complejidad de la portadora, hemos atribuido la mejora en la sincronización a la discriminación de las frecuencias altas, las cuales sincronizan peor.



Figura 2. Correlación cruzada ente el láser maestro y el esclavo en el bucle cerrado en función de la intensidad del acoplamiento, κ_r . Los anchos de los filtros son 8GHz, 16GHz y ∞ (sin filtro). C(0)=1 para una sincronización perfecta.

Hemos comprobado que la sincronización empeora drámaticamente cuando se utilizan filtros con distintos parámetros en el emisor y el receptor. Por ejemplo, C < 0.95 para filtros en el receptor más estrechos que 12GHz o más anchos que 22GHz con un filtro en el emisor de $\Lambda_m/2\pi = 16$ GHz y un acoplamiento de $\kappa_r = 60$ ms⁻¹. Este hecho podría usarse para mejorar aún más la seguridad de sistemas de comunicación caóticos.

^{*} miguel@ifisc.uib.es, http://ifisc.uib.es

¹ C.R. Mirasso, R. Vicente, P. Colet, J. Mulet, T. Pérez, C. R. Phys. **5**, 613 (2004).

² M. Yousefi and D. Lenstra, IEEE J. Quantum Electron. **35**, 970 (1999).

Estudio numérico experimental de la formación de agregados en la deposición de partículas anisótropas.

R.C. Hidalgo^{(1)*}, I. Zuriguel⁽²⁾, D. Maza⁽²⁾ I. Pagonabarraga⁽³⁾

(1)AMADE, Departament de Física, Departament de Enginyeria Mecànica i de la Construcció Industrial

Universitat de Girona Av. Montilivi s/n, 17071-Girona, Spain

(2)Grupo de Medios Granulares[‡]

Departamento de Física y Matemática Aplicada. Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra. 31080 Pamplona

(3) Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, C. Martí i Franqués, 08028 Barcelona

La morfología interna de los materiales granulares juega un importante papel en muchos procesos tecnológicos. Además, las inestabilidades internas resultan ser de gran relevancia en eventos naturales como los deslizamientos de tierra, los movimientos tectónicos o la estabilidad mecánica de los silos.

Bajo la acción de una fuerza externa, como por ejemplo la gravedad, los materiales granulares adquieren estructuras de alta compacidad donde generalmente se minimiza el espacio libre entre granos. Sin embargo, dichas estructuras no necesariamente corresponden a un mínimo de la energía libre del sistema.

Aunque existen evidencias experimentales de que el empaquetamiento máximo depende en gran media de la forma de los granos¹, la importancia que la forma de la partícula tiene en la formación de estructuras macrócopica, dista mucho de ser bien comprendida². En el presente trabajo discutimos resultados experimentales y de simulación numérica, de depósitos de granos anisótropos en un silo bidimensional. La comparación de ambas técnicas muestra un alto grado de acuerdo, poniendo en evidencia la potencia de la aproximación numérica utilizada. Discutimos las distribuciones angulares y espaciales de los agregados que forman las varillas y su sensibilidad a la forma de las mismas. La metodología implementada nos ha permitido estudiar la estructura morfológica de los depósitos de granos en un amplio rango de relaciones de aspecto.

^{*} raul.cruz@udg.edu

¹ Donev A, Cisse I, Sachs D, Variano E, Stillinger FH, Connelly R, Torquato S, Chaikin PM, Science **303**, 990 (2004).

² I. Zuriguel, T. Mullin and J. M. Rotter, Phys. Rev. Lett. **98**, 028001 (2007).

[‡] http://fisica.unav.es/granular/

Emergence of chaos and criticality in a Neural Network with time dependent connections

Sebastiano de Franciscis, J. Marro and Joaquín J. Torres

Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva s/n - 18071, Spain

Many experimental works on brain or neural cell culture have demonstrate the existence of fast time variation in connection strength between neurons, the so called short-term synaptic plasticity (for instance, synaptic depression and facilitation). This has been reported to play an important role in memory storage, retrieving, transmission of information and its processing to perform a particular task. Here we present a model, built on the classic neural network model, that considers the effect of short-term synaptic plasticity in the dynamic of the network. In addition, tuning the fraction of neurons ρ which are updated at each time (which mimics different levels of synchronization in the network or the existence of silent neurons) induces the emergence of different behaviours as the standard recovering of memories, regular oscillations between up and down activity states, or chaotic jumping between memories or between oscillating signals¹. Here, we are interested in the numerical analisis of the chaotic regimes, and we found that a critical state emerges with some statistical observables presenting a typical power law behaviour³. Our starting point is a stochastic Hopfield Neural Network with hebbian learning rule to set the synapses which allows for associative memory . We complemented this model with two new dynamical rules which mimic short-term synaptic plasticity²:

(i) Time dependent connections. Consider a network of N binary neurons with states $\sigma_i \in \{-1,1\}$ (firing or silent), and receiving a synaptic current $h_i = \sum_{j=1}^{N} w_{ij} d_j \sigma_j$. ere, $w_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\nu=1}^{P} \xi_i^{\nu} \xi_j^{\nu}$ are the classical hebbian weights where the system stores P memory patterns $\{\vec{\xi^{\nu}}\}, \nu = 1, \ldots, P$, and d_j is a depressing factor which considers the stochastic fast synaptic fluctuations due to the overall activity in the network. We assume that d_j in the stationary regime follows a bimodal probability distribution $P_j(d_j) = \zeta_j(\vec{\sigma})\delta(d_j - \Phi) + (1 - \zeta_j(\vec{\sigma}))\delta(d_j - 1)$, which implies that as long as a presynaptic neuron is firing the synapse strength becomes weaker. This accounts for synaptic depression, that is, the decreasing of the available neurotransmitters in the synaptic button due to a continuous and fast presynaptic stimulation. We assume a standard mean-field framework so that we have $d_j \approx \langle d_j \rangle_{P_i} = [1 - (1 - \Phi)\zeta(\vec{\sigma})]$.

(ii) Partial updating of neurons. Recent studies on real neural media show that in many cases neural activity does not have a uniform distribution, and so in a certain time only a portion of neurons are active⁴. Here, we consider this effect using an hybrid updating of neurons, that is, each time only a fraction ρ of the neurons, randomly choosed, will be updated. Once we set a level Φ of synaptic depression, tuning ρ from 0 (sequential Glaubler dynamics) to 1 (parallel Little dynamics),

we observe different regimes. For ρ small the system exhibits associative memory and recovers a given pattern. As ρ increases, however, it emerges some chaotic phases, where the activity switchs between the stored patterns or between the pattern and antipattern states, that is $\left\{\vec{\xi^{\alpha}} \leftrightarrow -\vec{\xi^{\alpha}}, \vec{\xi^{\beta}} \leftrightarrow -\vec{\xi^{\beta}}, ..., \vec{\xi^{\gamma}} \leftrightarrow -\vec{\xi^{\gamma}}\right\}$. An analisis of h_i shows that the chaotic regime can be *critical*. Fig. 1(Left) shows the power spectra of h_i in the critical chaotic window $[\rho_{Min}^c, \rho_{Max}^c]$ presenting a power law behaviour, with an exponent depending on ρ . The same behaviour appears in the correlation function $C(\tau) = \langle (h(t+\tau) - h(t))^2 \rangle_t$ (data not shown). We explored the origin of such criticality by defining a time permanence probability function, that measures how long $h_i(t)$ fluctuates in a window Δh , see for instance Fig. 1(Right), until it jumps off. This observable, with a proper choose of the window size, has also a power law behaviour in the chaotic phase. For small window size as well as outside of the window $[\rho_{Min}^c, \rho_{Max}^c]$, it follows an exponential law which suggests a complex interplay between thermal fluctuations, synaptic fluctuations due to the h_i modulation by synaptic depression, and partial neuron updating, to induce the critical state which is caracterized by irregular jumps of the network activity between memories.



Figura 1. (Left) Power spectra of $h_i(t)$. For wave number k < -1 it switchs from constant at $\rho = 0.35$ (in the edge of chaos but still recovering a pattern) to a power law behaviour for $\rho > 0.35$ (chaotic phase). (Right) Jump probability for $h_i(t)$. Note the exponential behaviour (red curve) just below the chaotic region, and the power law behaviour when the system is jumping irregularly between the memory patterns (other curves).

- ¹ J. Marro, J.J. Torres and J. M. Cortes, Neural Networks, 20(2), 230-235 (2007)
- ² J. Marro, J.J. Torres, J.M. Cortes, B. Whemmenhove, Neural Networks, Submitted
- ³ S. de Franciscis, J. Marro and J.J. Torres, to be published (2008)
- ⁴ S. Shoam, D. H. O'Connor, R. Segev, J. Compar. Physiol. A 192, 777 (2006)

Diagrama de fases de un crista líquido en una celda híbrida

D. de las Heras^{1*}, L. Mederos² y E. Velasco^{1,3} ¹ Facultad de Ciencias, C-V, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid ² Instituto de Ciencia de Materiales, C.S.I.C., 28049 Madrid ³ Instituto Nicolás Cabrera, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

Estudiar la interacción entre cristales líquidos y superficies así como los efectos que sobre el diagrama de fases produce el confinamiento tiene gran interés tanto desde un punto de vista fundamental como tecnológico. Se sabe, por ejemplo, que una superficie induce por lo general orden orientacional sobre un LC, un efecto denominado anchoring. Se conoce como anchoring homogéneo cuando las partículas se orientan paralelas al plano de la superficie y anchoring homeotrópico en caso de que las moléculas se dispongan perpendiculares al substrato. Si ahora confinamos nuestro LC entre dos de estas paredes, que seleccionan orientaciones opuestas, hemos creado lo que comúnmente se denomina celda híbrida. Una configuración de este tipo tiene un gran interés práctico, pues podría constituir la base para la fabricación de nuevos tipos de displays ópticos.

El sistema ha sido ampliamente estudiado desde un punto de vista teórico y experimental. El cristal líquido en el interior del poro se puede reorganizar de tres formas en función de la anchura de la celda y el anchoring superficial. Cuando el ancho del poro es grande, la configuración más estable consiste en una variación lineal del director (ver fase L de la figura 1), de modo que se satisfacen las condiciones de contorno y se minimiza la energía elástica. Si ahora disminuimos la anchura del poro hay dos escenarios posibles. Si el anchoring impuesto por uno de los substratos es mucho mayor que el otro puede ser estable una fase con el director uniforme en toda la celda, adoptando el nemático la orientación que impone la superficie dominante. Por contra, si la intensidad del anchoring es similar, puede aparecer un estado llamado biaxial (ver fase B en la figura 1) que consiste en dos capas uniformes de nemático enfrentadas con el director perpendicular entre sí. Dicho estado ha sido predicho usando teoría Landau-de Gennes¹ y mediante simulaciones Monte Carlo². Hasta la fecha no se ha encontrado experimentalmente, si bien parece que existen evidencias³.



Figura 1. Esquema de dos de las posibles configuraciones que puede adoptar un cristal líquido confinado en una celda híbrida.

Nosotros hemos usado una teoría microscópica, basada en una extensión del funcional de la densidad propuesto por Onsager para estudiar esta configuración. Como modelo de cristal líquido se han utilizado esferocilindros duros y las superficies se han modelado vía un potencial externo.

En condiciones de estabilidad de la fase nemática y para anchos de celda reducidos tiene lugar una transición de primer orden entre un estado tipo L y otro de tipo B. Al desarrollar el diagrama de fases completo y estudiar el comportamiento de la fase biaxial (ver diagrama en figura 2), se observa como dicho estado es en realidad el isótropo de volumen. Cuando la anchura de la celda es de unas pocas dimensiones moleculares la región sin orden posicional queda limitada a una pequeña zona en el centro del poro. En estas circustancias una simple inspección visual de los perfiles induce erróneamente a pensar que se trata de una fase nemática nueva.



Figura 2. Diagrama de fases en el plano potencial químico-anchura del poro. El potencial químico está referido al de la coexistencia isótropo-nemático de volumen. I es la fase isótropa y L la nemática con el director rotado de forma lineal.

^{*} daniel.delasheras–arroba–uam.es

¹ Por ejemplo, H.G. Galaboba et al., Liq. Cryst. 23, 803 (1997).

² C. Chiccoli et al., Phys. Rev. E **67**, 50703 (2003).

³ B. Zappone et al., Phys. Rev. E **71**, 41703 (2005).
Histéresis en un flujo turbulento de von Kármán

<u>A. De la Torre</u>^{*}, M. Miranda, J. Burguete Departamento de Física y Matemática Aplicada[†] Universidad de Navarra 31080 Pamplona

Recientes éxitos en el campo de la magnetohidrodinámica¹ hacen retomar el interés en el estudio hidrodinámico de flujos turbulentos. En concreto, el flujo encontrado en el interior de un cilindro cuyas tapas giran en contrarrotación presenta características interesantes no solo por su aplicación en la MHD, sino también como sistema hidrodinámico.

Una de estas características es la biestabilidad encontrada en el régimen turbulento². Esta biestabilidad se hace más notoria cuando las velocidades de las tapas son muy similares. Definiendo $\Delta = (f_1 - f_2)/(f_1 + f_2)$ para caracterizar la asimetría en la rotación, el régimen de biestabilidad se encuentra dentro del rango $|\Delta| < 0.5\%$. Asimismo, se observan cambios aleatorios de estado, con un tiempo de residencia fácilmente caracterizable (fig.1).



Figura 1. Velocidad medida en un punto del volumen, para $Re = 5.2 \cdot 10^5$ y $\Delta = 0$ (en trazo grueso, la velocidad media). El sistema presenta, dentro de la turbulencia, una dinámica muy lenta, cambiando entre estados con un tiempo medio de $T_{res} \sim 1500$ s.

En esta comunicación presentaremos el estudio de la histéresis encontrada al introducir una diferencia entre las velocidades de rotación de los propulsores. Esta histéresis se caracteriza por los tiempos de residencia en cada estado, mostrando una fuerte dependencia con Δ (fig.2).



Figura 2. Tiempos de residencia en cada estado frente
a $\Delta,$ para $Re=3.3\cdot 10^5$

- * admonguio@alumni.unav.es
- † http://fisica.unav.es/mhd
- ¹ R. Monchaux *et al*, Phys. Rev. Lett. 98, 044502, 2007
- 2 A. De la torre, J. Burguete, Phys. Rev. Lett. 99, 054101 , 2007

Dinámica de ondas capilares de tamaño molecular

R. Delgado-Buscalioni¹, E. Chacon and P. Tarazona Departamento de Física Teorica de la Materia Condensada Universidad Autónoma de Madrid E-28049 Madrid

Usando la teoría de hidrodinámica de medios continuos es posible describir la dinámica de ondas capilares con longitudes de onda mucho mayores que la escala molecular. A medida que disminuimos la longitud de onda, la teoría hidrodinámica predice una transición desde un modo propagativo oscilatorio (las ondas capilares que todos conocemos) a un modo sobreamortiguado, no propagativo². Sin embargo, en esta rama sobreamortiguada (de corta longitud de onda) las relaciones hidrodinámicas clásicas no describen correctamente la relación de dispersión que se observan en fluidos simples. Este aparente fallo de la teoría del continuo se suele justificar argumentando la pequeñez de la longitud de onda de transición, que en el caso de fluidos simples resulta ser de unos diez a veinte diámetros moleculares. En este trabajo demostramos que este error de la teoría hidrodinámica es tan solo aparente. Para números de onda por encima de un cierto umbral $q > q_{\sigma}$, el coeficiente de tensión superficial deja de ser constante y comienza a depender de q. La relación $\sigma = \sigma(q)$ fue obtenida para diversos tipos de fluidos simples, usando el método propuesto por Chacón y Tarazona³, basado en ajustar la amplitud de las fluctuaciones de equilibrio del perfil de densidad intrínseco de la interfase líquido-vapor⁴. Introduciendo dicha dependencia $\gamma(q)$ en el formalismo hidrodinámico, este trabajo⁵ demuestra que, sorprendentemente, la predicción del continuo es válida hasta longitudes de ondas muy pequeñas (de hasta unos tres diametros moleculares). "Ondas" con longitudes más pequeñas pertenecen ya al régimen dominado por colisiones moleculares.



Figura 1. Ritmo de decaimiento de ondas capilares sobreamortiguadas frente al número de onda, q. Los datos corresponden a un fluido Lennard-Jones a temperatura $T = 0.68(\epsilon/k_B)$, en coexistencia líquido-vapor. Las líneas muestran la predicción de la hidrodinámica clasica $\gamma(q = 0)q/(2\eta)$, usando el coeficiente de tensión superficial macroscópico (i.e., a q = 0) y el resultado de la corrección del presente trabajo $\gamma(q)/(2\eta)$. Todos los datos en unidades estándares de Lennard-Jones.

- ² J. Jäckle and K. Kawasaki, J. Phys: Condens. Matter, 7, 4351 (1995)
- ³ E. Chacón and P. Tarazona, Phys. Rev. Lett. **91** 166103 (2003).
- ⁴ E. Chacón and P. Tarazona, J. Phys: Condens. Matter, **17**, S3493 (2005)
- ⁵ R. Delgado-Buscalioni, E. Chacón and P. Tarazona, Dynamics of capillary waves at molecular scale, *preprint*.

¹ r.delgado@uam.es

Microestructura de una suspensión magneto-reológica depositada.

P. Domínguez-García^{1*}, J. M. Pastor³, Sonia Melle² y Miguel A. Rubio⁴. Laboratorio de Sistemas Complejos. Dpto Física Fundamental.

Facultad de Ciencias UNED. C/ Senda del Rey, 9. 28040 Madrid.

Los fluidos magnetoreológicos (en adelante, fluidos MR) son suspensiones coloidales estables de partículas superparamágnéticas, de diámetro entre 100 nm y 10 μ m, en agua o en algún disolvente orgánico. Cuando se aplica un campo magnético externo sobre el fluido, se forman cadenas de partículas magnéticas en la dirección del campo aplicado, siempre que la interacción magnética domine sobre la térmica⁵. Los fluidos MR son utilizados en diversos campos: por ejemplo, en dispositivos industriales para automoción o en aplicaciones en microfluídica⁶. Estas suspensiones permiten, además, estudiar modelos de Mecánica Estadística en lo referente a las propiedades de transporte de fluidos complejos y de agregación.



Figura 1. Potencial $\beta U(r)$ para 3 experimentos con $n d^2 = 0.082$, 0.093 y 0.065. Figura interior: valores medios de $\beta U(r)$ frente a r.

En este trabajo exponemos una caracterización de la microestructura de la suspensión depositada sin campo magnético externo aplicado. Mediante el empleo de un sistema de video-microscopía podemos obtener la posición de las partículas cuando no hay campo aplicado con el objetivo de caracterizar el comportamiento electrostático de la suspensión mediante la obtención de la función de correlación de pares, g(r) (empleando la metodología usada por Behrens y Grier⁷). Mediante esta función es posible obtener un potencial efectivo de interacción entre las partículas (Fig. 1), cuyo núcleo repulsivo puede ajustarse a un potencial DLVO que proporciona valores de la longitud de Debye (κ^{-1}) y de la carga efectiva de las partículas (σ_{ef}). De hecho, es posible comparar los valores obtenidos a través de esta metodología con los resultados obtenidos empleando un modelo

sencillo de la doble capa para el sistema (ver Fig. 2). Además, puede apreciarse, en el cuadro interior de la Fig. 1, la presencia de una región de interacción atractiva para distancias del orden de dos veces el diámetro de las partículas. Esta atracción anómala ha sido observada en microesferas con cargas de igual signo en suspensiones en situación de confinamiento, aunque su origen aún no es totalmente conocido⁸. El análisis de estas interacciones electrostáticas podría mejorar la comprensión de los resultados obtenidos en experimentos de agregación de fluidos MR, a baja concentración de partículas, bajo campos magnéticos constantes y uniaxiales.⁹.



Figura 2. Densidad de carga efectiva, σ_{ef} , para $\kappa^{-1} = 0.15$, 0.25 y 0.35 μ m, para una partícula de PS, como para una pared de cuarzo.

- * pdominguez@fisfun.uned.es
- ¹ Dpto. Física de Materiales, UNED
- ² Dpto. Óptica, UCM
- ³ Dpto. Ciencia y Tec. Apl. ITA, ETSI Agrícolas, UPM
- ⁴ Dpto. Física Fundamental, UNED
- ⁵ Furst, E.M. y Gast A. P. *Phys. Rev. E*, 62, 6916 (2000).
- ⁶ A. Egatz-Gómez et al. Appl. Phys. Lett., 89(3), 034106, 2006.
- ⁷ S. H. Behrens y D. G. Grier. *Phys. Rev. E*, 64, 050401, 2001.
- ⁸ Y. Han y D. G. Grier. *Phys. Rev. Lett.*, 91(3), 038302, 2003. D. G. Grier y Y. Han. *J. Phys. Condens. Matter*, 16, 4145-4157, 2004.
- ⁹ P. Domínguez-García, Sonia Melle, J.M. Pastor y M.A. Rubio. *Phys. Rev. E*, 76, 051403 2007.

Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol +agua}: Propiedades termodinámicas

A. Dopazo-Paz*, P. Gómez-Álvarez, L. Romaní y D. González-Salgado

Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias de Ourense

 $Universidad\ de\ Vigo.\ As\ Lagoas\ s/n.\ 32004\ Ourense$

El estudio del comportamiento termodinámico del sistema {metanol + agua} ha atraído un enorme interés debido a su inesperado alto grado de no-idealidad. Bajo condiciones estándar, el proceso de mezcla va acompañado de un descenso en la entropía (entropía molar de panado S_m^E negativa), en la entalpía (entalpía molar de exceso H_m^E negativa), y en el volumen (volumen molar de exceso V_m^E negativo).¹ El comportamiento del volumen molar parcial de exceso de metanol ν_1^E y de la expansividad térmica isobárica de exceso α_P^E frente a la fracción molar de metanol x_1 es especialmente singular; la curva ν_1^E - x_1 muestra un mínimo para bajas x_1 mientras que la curva α_P^E - x_1 tiene forma de W.^{1,2} Por otra parte, la capacidad calorífica molar isobárica de exceso $C_{P,m}^E$ toma valores positivos sobre todo el intervalo de concentración.^{3,4} El origen microcópico de este comportamiento no está todavía claro. Durante muchos años, la teoría propuesta por Frank y Evans⁵ ha sido aceptada, sin embargo, recientes experimentos de dispersión de neutrones⁶⁻⁹ han proporcionado una nueva imagen a escala molecular basada en la microinmisciblidad de ambos componentes, cuya relación con el comportamiento macroscópico no ha sido esclarecida.

La técnica de simulación molecular por el método de Monte Carlo es una herramienta útil para afrontar este tipo de problemas. Para ello es fundamental disponer de un potencial intermolecular que proporcione una descripción adecuada tanto de la termodinámica del sistema como de la estructura (por ejemplo, las funciones de distribución radial). Los potenciales intermoleculares para una mezcla se construyen comúnmente a partir de aquellos que definen las interacciones entre componentes del mismo tipo y de una regla que los acopla para describir las interacciones entre componentes distintos (regla de mezcla). Existen una amplia variedad de potenciales intermoleculares para agua y metanol puros, que describen adecuadamente la termodinámica y la estructura de estas sustancias (por ejemplo, el $TIP4P^{10}$ para agua y el OPLS¹¹ para metanol), sin embargo, se ha avanzado poco en el desarrollo de uno para el sistema {metanol+agua}.

En un trabajo previo,¹² hemos llevado a cabo un análisis de la capacidad de un potencial construido a

partir del TIP4P para agua, el OPLS para metanol, y la regla de Berthelot, para describir la termodinámica de este sistema. Los resultados no fueron completamente satisfactorios; el V_m^E se obtuvo de forma correcta, sin embargo, la forma de las curvas frente a composición para la H_m^E y el ν_1^E no fue la adecuada y sólo el signo fue adecuadamente predicho.

En este trabajo, se ha llevado a cabo un estudio similar al previamente descrito utilizando un potencial intermolecular construido a partir de TIP4P para agua, el OPLS para metanol y la regla de Lorentz-Berthelot. Para ello se han realizado simulaciones de Monte Carlo en el colectivo NPT considerando P = 0.101325 MPa, T = 298.15 K y N = 500 moléculas en una celda cúbica bajo condiciones de frontera periódicas. El número de propiedades estudiadas se ha extendido incluyendo la α_P^E y C_{Pm}^E .

* anadp@uvigo.es

- ¹ F. Franks and D. J. G. Ives, Quat. Rev. Chem. Soc. **20**, 1 (1966).
- ²G. C. Benson and O. Kiyohara, J. Solution Chem. 9, 791 (1980).
- ³G. C. Benson, P. J. D'Arcy, and O. Kiyohara, J. Solution Chem. **9**, 931 (1980).
- ⁴ G. C. Benson and P. J. D'Arcy, J. Chem. Eng. Data 27, 439 (1982).
- ⁵ H. S. Frank and M. W. Evans, J. Chem. Phys. **13**, 507 (1945).
- ⁶ A. K. Soper and J. L. Finney, Phys. Rev. Lett. **71**, 4346 (1993).
- ⁷ S. Dixit, A. K. Soper, J. L. Finney, and J. Crain, J. Europhys. Lett. **59**, 377 (2002).
- ⁸ S. Dixit, J. Crain, W. C. K. Poon, J. L. Finney, and A. K. Soper, Nature **416**, 829 (2002).
- ⁹ A. K. Soper, L. Dougan, J. Crain, and J. L. Finney, J. Phys. Chem. B **110**, 3472 (2006).
- ¹⁰ W. L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J. D. Madura, R. W. Impey, and M. L. Klein, J. Chem. Phys. **79**, 926 (1983).
- ¹¹ W. L. Jorgensen, J. Phys. Chem. **90**, 1276 (1986).
- ¹² D. González-Salgado and I. Nezbeda, Fluid Phase Equilib. 240, 161 (2006).

Difusión en la interfaz líquido-vapor

^a Daniel Duque^{*a}, Pedro Tarazona^a y Enrique Chacón^b ^a Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada Universidad Autónoma de Madrid Francisco Tomás y Valiente 6, 28049 Madrid ^b Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid Consejo Superior de Investigaciones Científicas E-28049 Madrid, Spain.

Hace poco se ha desarrollado el método de *muestreo intrínseco* con el objeto de obtener, a partir de una simulación molecular, la estructura intrínseca de una interfaz¹. Esta estructura se presupone en la teoría clásica de ondas capilares, pero los detalles particulares no importan. Sin embargo, es justamente la estructura intrínseca la que proporciona la más detallada información estructural a nivel microscópico.

Nos hemos propuesto estudiar procesos dinámicos en la superficie líquido-vapor, dado que este método proporciona una definición operacional de las moléculas que están "en" la interfaz en cada momento. Esto hace posible el seguimiento y análisis de la dinámica de las moléculas interfaciales, propocionando, con gran precisión, información dinámica de la interfaz.

En particular, hemos estudiado la autodifisión anisotrópica en la interfaz líquido-vapor del fluido de Lennard-Jones, separando la difusión paralela de la perpendicular. Este último proceso es algo más complicado, ya que la anchura finita de la interfaz invalida el método habitual, consistente en calcular la constante de difusión a partir de la desviación cuadrática media en función del tiempo (relación de Einstein). Nuestro enfoque consiste en modelización del proceso de la deriva, ensanche y decaimiento de un pico mediante una ecuación de Smoluchowski (ver Figura).

También hemos obtenido resultados para otros parámetros espaciales y temporales que caracterizan el proceso de difusión en este sistema; así como información detallada de la permanencia y tiempo de residencia de las moléculas en la interfaz.

Estudiamos lo general de estos resultados variando la temperatura y el tamaño del sistema; en este último caso, consideramos un modelo previo para los metales alcalinos. Un resultado interesante es que la difusión perpendicular no parece depender del tamaño del sistema, lo cual confirma su genuino carácter de propiedad intrínseca interfacial.

Nuestras conclusión principal es que, incluso si pueden calcularse coeficientes de atodifusión, en muchos casos el proceso de renovación de moléculas interfaciales (mediante el cual nuevas moléculas pasan a forman parte de la interfaz y otras la abandonan) puede ser tan importante como el proceso de difusión. Por ejemplo, obtenemos que el tiempo típico que una molécula emplea en recorrer un diámetro molecular es muy similar a su tiempo de residencia en la interfaz. Referimos al *preprint*² y a la página web³, donde se pueden contemplar animaciones de la simulación.



Figura 1. Difusión de un pico inicialmente en $z = -\sigma$. Símbolos: resultados de la simulación, líneas: ajuste a una ecuación de Smoluchowski. Se ve cómo se reproduce su deriva, ensanchamiento y decaimiento (este último, sólo para los tiempos más largos). Intervalos temporales, en unidades reducidas: 0.456 (negro, círculos), 2.280 (rojo, rombos) y 4.104 (verde, triángulos).

^{*} daniel.duque@uam.es

¹ Un punto de partida sería: Enrique Chacón y Pedro Tarazona Characterization of the intrinsic density profiles for liquid surfaces, J. Phys.: Cond. Matter **17** (45) pp. S3493-S3498 (2005)

² Daniel Duque, Pedro Tarazona y Enrique Chacón, *Diffusion at the liquid-vapor interface*. Enviado a J. Chem. Phys. Preprint: http://arxiv.org/abs/0712.1683.

³ http://www.uam.es/daniel.duque

Mechanisms for Initiation of Cardiac Discordant Alternans

Blas Echebarria* Departament de Física Aplicada Universitat Politècnica de Catalunya 08028 Barcelona

Alain Karma Department of Physics and Center for Interdisciplinary Research on Complex Systems, Northeastern University, Boston, MA 02115

Nonlinear waves and patterns are common structures found in multitude of biological systems, ranging from the propagation of electrical impulses along neurons to the geometrical forms present in animal coatings. Very often these waves appear in the form of propagating pulses characteristic of excitable systems. In these, a finite size perturbation can bring the system far from the stable state for a given amount of time, that typically depends on the time elapsed from the previous excitation. A well studied example is cardiac muscle, where a change in transmembrane cellular potential produces a response known as action potential, that propagates along the tissue. Many cardiac malfunctions are associated to problems in propagation, sometimes inducing the formation of rotors (spiral or scroll waves, in two or three dimensions). These structures, typical of excitable systems, are thought to underline many cases of ventricular tachycardia (VT). They also constitute the most commonly accepted building block of ventricular fibrillation (VF), a particularly malign malfunction of the heart, in which synchronous excitation is lost among different parts of the ventricle, impeding contraction, and causing death in a few minutes. The main explanation for the transition from VT to VF is related to instabilities of spirals, either in the core, causing the continuous creation and destruction of rotors, or in the waves emitted by spirals. Thus, a major challenge is to classify and understand the mechanisms that cause, first, the creation of rotors, and second, their subsequent destabilization. To this end, numerical simulations of propagation of the electrical impulse on the heart provide an invaluable tool. In computer models, unlike in real experiments, it is possible to isolate each of the possible mechanisms, and study them separately to assess their influence. Results obtained with this in silico models can be compared with real controlled experiments. The goal is then to construct models that help us to bridge the gap from cellular electrophysiology to propagating properties in tissue, and through whole heart models, to clinical manifestations.

Among the known precursors of life-threatening ventricular arrhythmias and sudden cardiac death are T wave alternans, defined as a periodic beat to beat change in the amplitude or shape of the ECG T wave. Although T wave alternans provide a global measure of the propagation at the whole heart level, they have been related to alternations in the duration of the excited phase (or action potential duration APD) at the single cell level, thereby establishing a causal link between electrical alternans and the initiation of ventricular fibrillation¹. Electrical alternans may appear as concordant (all the tissue presenting the same phase of oscillation) or discordant (with outof-phase regions distributed among tissue)². Spatially discordant alternans can lead to unidirectional block that initiates reentry and ventricular fibrillation. The role played by tissue heterogeneities and heart rate changes in their initiation remains, however, unclear.

We study the mechanisms for initiation of spatially discordant alternans by numerical simulations of an ionic model spatially distributed in a one-dimensional cable and in an anatomical model of the rabbit heart. The effects of CV-restitution, ectopic beats, and the role of spatial gradients of electrical restitution properties are investigated³. In homogeneous tissue, the origin of discordant alternans may be dynamical, through CVrestitution, or due to a localized change in the pacing period. We also find that a sudden change of stimulation rate can initiate discordant alternans in the presence of a spatial gradient of APD-restitution without necessitating CV-restitution. The mechanism of, and the conditions for, initiation are determined based on an iterated map analysis of beat to beat changes of APD. This analysis leads to the definition of a vulnerable window for initiation of discordant alternans. Moreover, the pattern of spatially discordant alternans is found to change slowly over several beats following initiation, as reflected in ECG recordings.

^{*} blas@fa.upc.edu

¹ J. M. Pastore, S. D. Girouard, K. R. Laurita, F. G. Akar and D. S. Rosenbaum, Circulation **99**, 1385 (1999).

 ² B. Echebarria, A. Karma, Physical Review Letters 88, 208101 (2002); Physical Review E 76, 051911 (2007)

³ B. Echebarria, A. Karma, Eur. Phys. J. Special Topics 146, 217 (2007)

Dynamics of Tidal Synchronization and Orbit Circularization of Celestial Bodies

Bruno Escribano^{*}, Jozsef Vanyo, Idan Tuval, Julyan Cartwright, Diego L. González, Oreste Piro and Tamás Tél

Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra, CSIC

Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Campus Fuentenueva s/n, 18002 Granada

What is the dynamical origin of the fact that the Moon presents the same hemisphere facing perpetually towards the Earth? The other large moons of the solar system also have their rotations synchronized with their orbits, and Pluto and Charon are mutually locked in this way. All of these celestial bodies are in 1:1 spin-orbit resonance. The rotation of one planet, Mercury, is also synchronized with its orbit around the Sun, but it performs three rotations every two orbits, and thus, unlike the former instances, is locked in 3:2 resonance¹. Similar synchronization phenomena are thought to occur too in solar systems with so-called 'hot Jupiters' or short-period $planets^2$, and in systems of binary stars³, whose orbits also evolve to become circular. All these instances are clearly a consequence of a spin-orbit interaction brought about by the gravitational torque exerted by the larger primary body on the smaller secondary body elastically deformed by the differential gravity combined with the corresponding tidal friction induced in the secondary. The phenomenon has long been studied^{4,5}, but existing $models^{6-8}$ are designed for quantitative analysis of a specific instance or a particular part of the problem, and are correspondingly complicated; the details obscure the basic mathematical structure of the dynamical system.

Here we take the opposite course: we study the simplest possible system that displays tidal synchronization and orbit circularization with a minimal model that takes into account only the essential ingredients of tidal deformation and dissipation in the secondary body. In our qualitative dynamical-systems approach, without including the full panoply of details, we treat in a selfconsistent way the temporal evolution of the eccentricity and the energy flow from orbital to rotational motion; important ingredients to understand the long-term evolution of the orbit. Despite its simplicity, our model can account for both synchronization into the 1:1 spin-orbit resonance and the circularization of the orbit as the only true asymptotic attractors, together with the existence of relatively long-lived metastable orbits with the secondary in p:q synchronous rotation.



Figura 1. Instantaneous configuration of the system given by the generalized coordinates r, β, l, ϕ . The relative angle $\alpha = \phi - \beta$ is indicated.

We model an extended secondary body of mass m by two point masses of mass m/2 connected with a damped spring. This composite body moves in the gravitational field of a primary of mass $M \gg m$ located at the origin. In this simplest case oscillation and rotation of the secondary are assumed to take place in the plane of the Keplerian orbit. We use polar coordinates r, β for the center of mass of the secondary, with l as the instantaneous length of the spring and ϕ the rotational angle characterizing the orientation of the secondary. Both angles β and ϕ are measured from the x-axis in an inertial reference frame. The spring is characterized by its spring constant D and rest length L_0 . The gravitational interactions of both point masses with the primary are taken into account, but that between the point masses is neglected.



Figura 2. Average angular velocity $\dot{\phi}$ versus time for $\varepsilon_0 = 0.2$, $\gamma = \omega = 10$, $l_0 = 10^{-4}$ shows the crossover from 3:2 to 1:1 resonance. The insets show the metastable 3:2 and asymptotic 1:1 attractors on the Poincaré map $\dot{\phi}, \alpha$ taken at apapsis. Time is measured in units of T. The transition shown occurs after the system has spent a long time in the 3:2 resonance and is very abrupt, lasting about 50 periods.

- ¹ C. D. Murray and S. F. Dermott, *Solar System Dynamics*, Cambridge University Press, (1999).
- ² I. Dobbs-Dixon, D.Ñ. C. Lin and R. A. Mardling, *Astrophys. J.* 610, **464** (2004).
- ³ R. A. Mardling, Astrophys. J. **450**, 732 (1995).
- ⁴ G. J. F. MacDonald, *Rev. Geophys.* **2**, 467 (1964).
- ⁵ P. Goldreich and S. Soter, *Icarus* **5**, 375 (1966).
- ⁶ B. Gladman, D. D. Quinn, P.Ñicholson and R. Rand, *Icarus* **122**, 166 (1996).
- ⁷ A. C. M. Correia and J. Laskar, *Nature* **429**, 848 (2004).
- ⁸ A. Celletti, C. Froeschle and E. Lega, *Planet. Space Sci.* **55**, 889 (2007).

^{*} bruno@lec.csic.es

Dinámica de Escala de las Superficies no Euclídeas

Carlos Escudero* Mathematical Institute University of Oxford 24-29 St. Giles' Oxford OX1 3LB United Kingdom

El crecimiento de superficies es un fenómeno omnipresente en la naturaleza. Podríamos mencionar la propagación de llamas, frentes de humidificación, crecimientos de colonias bacterianas o deposición de películas como ejemplos de sistemas ya investigados en este contexto. Todos estos procesos, aunque aparentemente son muy distintos, han sido estudiados dentro del mismo marco teórico: la dinámica de escala¹. La dinámica de escala caracteriza a las superficies en crecimiento mediante conjuntos de exponentes críticos, que codifican información a cerca de la morfología y la dinámica de la interfaz. Fenómenos diferentes con los mismos exponentes críticos se dice que pertenecen a la misma clase de universalidad. Por tanto, la clasificación en términos de las distintas clases de universalidad nos permite identificar que dinámicas interfaciales tienen los mismos mecanismos físicos, independientemente de su origen concreto. Sin embargo, a pesar de sus numerosos éxitos, existen varias limitaciones en los análisis de escala realizados hasta ahora. Dos ejemplos son las hipótesis habituales sobre la geometría euclídea de la superficie y la invariabilidad de su tamaño en el transcurso del tiempo. Debido a los importantes ejemplos de superficies que violan dichas simetrías, la extensión del análisis de escala a estos casos ha sido considerada como uno de los principales problemas abiertos en este contexto².

El estudio teórico del crecimiento radial fuera del equilibrio aparece ya con los modelos de Eden³; sin embargo, el uso de ecuaciones estocásticas de crecimiento ha sido incorporado sólo más recientemente. El origen es posiblemente el desarrollo de la ecuación de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) en una forma que es invariante a la reparametrización⁴. Tras él, han aparecido trabajos enfocados al estudio de la ecuación KPZ en una geometría radial^{5,6}, y de la ecuación de Mullins-Herring en geometrías radial y esférica^{7,8}. La dinámica de escala de estas superficies posee unas características que la hacen completamente diferente de su recíproco euclídeo. Una de las diferencias más acusadas es la existencia de una dimensión crítica, $d_c = 1$, por encima de la cual todas las interfaces son planas. Por tanto, la rugosidad cinética se ve reducida a un fenómeno intrínsicamente unidimensional, caracterizado por una amplitud marginal de las fluctuaciones. Más aún, aquellos modelos afectados por una propagación sub-balística de las correlaciones, un conjunto que incluye a las ecuaciones estocásticas de crecimiento más comunes, sufren una pérdida de correlación a lo largo de la interfaz, y su dinámica se reduce a la del modelo de deposición aleatoria asintóticamente en el tiempo. Las consecuencias de estos hechos pueden ser dramáticas en determinados casos, y se hace necesario volver a interpretar los resultados experimentales existentes con las nuevas herramientas del análisis de escala no euclídeo.

- ¹ A.-L. Barabási y H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth.* Cambridge University Press, Cambridge (1995).
- ² R. Cuerno y L. Vázquez, en Advances in Condensed Matter and Statistical Physics, E. Korutcheva y R. Cuerno (editores). Nova Science Publishers, New York (2004).
- ³ M. Eden, en *Symposium on Information Theory in Biology*, H. P. Yockey (editor). Pergamon, New York (1958).
- ⁴ A. Maritan, F. Toigo, J. Koplik y J. R. Banavar, Phys. Rev. Lett. **69**, 3193 (1992).
- ⁵ R. Kapral, R. Livi, G.-L. Oppo y A. Politi, Phys. Rev. E 49, 2009 (1994).
- ⁶ M. T. Batchelor, B. I. Henry y S. D. Watts, Physica A 260, 11 (1998).
- ⁷ C. Escudero, Phys. Rev. E **73**, 020902(R) (2006).
- ⁸ C. Escudero, Phys. Rev. E **74**, 021901 (2006).

^{*} escudero@maths.ox.ac.uk

Modelo para el movimiento "hand-over-hand" de motores moleculares.

Javier Munarriz, Juan José Mazo, <u>Fernando Falo</u>*. Departamento de Física de la Materia Condensada Instituto de Biocomputación y Fisica de Sistemas Complejos (BIFI) Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA) Universidad de Zaragoza- CSIC 50009 Zaragoza.

La dinámica de motores moleculares es uno de los campos más importantes y activos, tanto en biofísica como en nanotecnología^{1,2}. En esta contribución nos centramos en el movimiento direccional de motores estructurados sobre un potencial sustrato. El ejemplo canónico de este sistema es la proteína quinesina que consta de dos cabezas que caminan sobre los microtúbulos que constituyen el citoesqueleto de las células eucariotas³.

Basándose en resultados de experimentos sobre moléculas individuales se han propuesto en la literatua dos mecanismos, a escala mesoscópica, para el movimiento unidireccional: movimiento "inchworm" y "hand-overhand"⁴. (ver figura)

En esta contribución presentamos un modelo minimal, mecánico y continuo para simular el mecanismo "handoverhand" de un motor de dos partículas⁵. El modelo se basa en potenciales en dos dimensiones asimétricos ("ratchet") que se apagan y encienden alternativamente para cada partícula ("flashing"). Este mecanismo induce un movimiento de difusión rotacional de cada partícula que cualitativamente reproduce la secuencia de movimiento propuesta experimentalmente. Las simulaciones con parametros realistas para motores biológicos, producen de forma satisfactoria el comportamiento esperado en función de la temperatura y la carga externa aplicada

Asimismo hemos explorado el espacio de parámetros y encontrado diversos regímenes de movimiento que podrían ser de utilidad en motores fabricados a escala nanométrica.



Figura 1. Representación esquemática de los mecanismos de movimiento para el motor quinesina. En el caso "hand-over-hand" cada cabeza se mueve a una distancia $2l_0$, mientras que en mecanismo "inchworm" el periodo del movimiento es l_0 .

- ¹ M. G. L. van den Heuvel and C. Dekker, Science **317**, 333 (2007).
- ² J. Howard, Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton (Sinauer Associates 2001).
- ³ N. J. Carter and R. A. Cross, Nature **435**, 308 (2005).
- ⁴ A. Yildiz, M. Tomishige, R. D. Vale and P. R. Selvin, Science **303**, 676 (2004).
- ⁵ J. Munarriz, J. J. Mazo, F. Falo, Enviado a Physical Review E.

^{*} fff@unizar.es

Control retardado de una flashing ratchet

<u>M. Feito</u>^{*} y F. J. Cao

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040 Madrid, Spain.

Las ratchets o motores brownianos son rectificadores de fluctuaciones térmicas con interés teórico en física estadistica fuera del equilibrio y con potenciales aplicaciones en biología, materia condensada y nanotecnología¹. En particular, las flashing ratchets consiguen un flujo neto de partículas mediante el apagado y encendido de un potencial periódico asimétrico. Se habla de ratchets de ciclo abierto¹ cuando se actúa sobre el potencial independientemente del estado del sistema, como por ejemplo un encendido y apagado periódico. En contraposición, las ratchets retroalimentadas o de ciclo cerrado² usan información de la posición de las partículas para operar sobre el potencial. Estas últimas tienen especial relevancia teórica como rectificadores brownianos capaces de producir altos rendimientos, por lo que pueden ser relevantes como dispositivos nanotecnológicos. Además, las ratchets de ciclo cerrado han sido sugeridas recientemente como mecanismos que explican el comportamiento de ciertos motores moleculares biológicos³.

En sistemas físicos reales hay siempre un retardo temporal entre la medida del estado del sistema y la posterior acción del controlador. En esta presentación discutiremos los efectos de un retardo temporal en el control retroalimentado de una flashing ratchet colectiva⁴ que opera de acuerdo al protocolo de maximización instantánea de la velocidad². Discutiremos también como nuestros resultados apuntan hacia la viabilidad de la implementación experimental (mediante un dispositivo de monitorización de partículas⁵) de una ratchet retroalimentada con un rendimiento igual o mayor que el obtenido para ciclo abierto.

Para ratchets de una y pocas partículas hemos encontrado que el flujo decrece conforme el retardo temporal aumenta hasta alcanzar un valor asintótico no nulo como consecuencia de la decorrelación del estado real del sistema con la información que el controlador usa. Aun así, la ratchet de ciclo cerrado tiene un mayor rendimiento que su homóloga de ciclo abierto siempre que los retardos sean menores que los tiempos característicos de la dinámica del sistema. Véase Fig. 1 (panel superior). Por otra parte, en el caso de muchas partículas hemos encontrado que para retardos suficientemente grandes el rendimiento del sistema es mayor que el de la ratchet instantáneamente retroalimentada. Este resultado sorprendente se explica por la aparición de un nuevo régimen dinámico en el que gracias al retardo se estabilizan soluciones cuasiperiódicas. Además, el sistema puede presentar multiestabilidad, esto es, varias soluciones pueden ser estables para un retardo temporal dado. Véase Fig. 1 (panel inferior). Resultados similares se han encontrado cuando se mide de forma discreta si los intervalos entre medidas son menores que el retardo temporal 6 .

Finalmente, comentaremos cómo la presencia de retardo temporal en el control puede dar lugar a inversiones de corriente cuando la dirección del flujo favorecida por la asimetría del potencial compite con la dirección del flujo favorecida por el propio protocolo retroalimentado⁷. La variación del retardo permite modificar el peso efectivo de estas asimetrías y variar así el sentido del flujo neto.



Figura 1. Panel superior: Flujo v
s retardo temporal para distinto número N de partículas en el régimen de po
cas partículas. Panel inferior: Flujo v
s retardo temporal en el régimen de muchas partículas.

- ² F. J. Cao, L. Dinis, and J. M. R. Parrondo, Phys. Rev. Lett. **93**, 040603 (2004).
- ³ M. Bier, Biosystems 88, 301 (2007).
- ⁴ M. Feito and F. J. Cao, Phys. Rev. E **76**, 061113 (2007).
- ⁵ J. Rousselet, L. Salome, A. Ajdari, and J. Prost, Nature **370**, 446 (1994); C. Marquet, A. Buguin, L. Talini, and P. Silberzan, Phys. Rev. Lett. **88**, 168301 (2002); A. E. Cohen and W. E. Moerner, PNAS **103**, 4362 (2006).
- ⁶ E. M. Craig, B. R. Long, J. M. R. Parrondo, and H. Linke, Europhys. Lett. **81**, 10002 (2008).
- ⁷ M. Feito and F. J. Cao, *Transport reversal in a delayed feedback ratchet*, arXiv:0711.4784 (2007).

^{*} feito@fis.ucm.es

¹ P. Reimann, Phys. Rep. **361**, 57 (2002).

Information and performance in a feedback controlled Brownian ratchet

<u>M. Feito</u>^{*} and F. J. Cao

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040 Madrid, Spain.

Thermal ratchets or Brownian motors can be viewed as controllers that act on stochastic systems with the aim of inducing directed motion through the rectification of fluctuations¹. In most cases, the system to be controlled is modelled as a collection of Brownian particles undergoing Langevin dynamics, and the control action—that is, the rectification mechanism—is implemented by applying random or deterministic time-dependent perturbations to the particles. In this context, one can distinguish two types of ratchets: (i) *open-loop* ratchets, which are ratchets that apply a rectifying potential independently of the state of the system to be controlled¹; (ii) *closedloop* or *feedback* ratchets, whose rectification action on a system has an explicit dependence on the state of the system.²

In this work we establish a quantitative comparison of these two types of ratchets that explicitly focuses on what distinguishes them, namely the use of information. This is done in three steps using a feedback ratchet that performs an instant maximization of the flux² as a case example. First, we show how the information used by the system can be quantified using techniques of information theory³. Then we study how the performance of that ratchet, measured by the magnitudes of the flux of particles⁴ and the maximum power output⁵, varies as a function of the amount of information used in the ratchet effect. Finally, the results are compared with those obtained with the open-loop version of the flashing ratchet, which operates without information.

We get analytical expressions for the flux and the maximum power output in one-particle and few-particle feedback ratchets. In addition, we show that the maximum flux that can be attained by changing from a closed-loop to an open-loop ratchet has an upper bound proportional to the square-root of the information, while the maximum power output has an upper bound proportional to the information.



Figura 1. One-particle flux and upper bound vs information for different heights of the ratchet potential.

* feito@fis.ucm.es

- ² F. J. Cao, L. Dinis and J. M. R. Parrondo, *Feedback control in a collective flashing ratchet*, Phys. Rev. Lett. **93**, 040603 (2004).
- ³ Cover T. M. and Thomas J. A., *Elements of Information Theory* (John Wiley, New York), 1991.
- ⁴ F. J. Cao, M. Feito and H. Touchette, *Information and flux in a feedback controlled Brownian ratchet*, arXiv: cond-mat/0703492.
- ⁵ M. Feito and F. J. Cao, Information and maximum power in a feedback controlled Brownian ratchet, Eur. Phys. J. B 59, 63 (2007).

¹ P. Reimann, Brownian motors: noisy transport far from equilibrium, Phys. Rep. **361**, 57 (2002).

Inter and intracellular interactions for embryonic pattern formation

Pau Formosa Jordan^{*}, Marta Ibañes Miguez Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria Universitat de Barcelona Diagonal 647 08028 Barcelona

Several patterns of differentiated cells in developing embryos result from the direct intercellular interaction between neighbouring cells¹. This intercellular interaction is mediated by two proteins, termed ligand and receptor respectively, which are anchored on the cell membranes. A cell with the ligand protein can interact with a cell harbouring the receptor protein through the binding of these proteins. Once the binding occurs, a signal is transmitted into the cell having the receptor. A paradigmatic example of this kind of intercellular interaction eliciting a pattern of differentiated cells is the lateral inhibition process mediated by Notch signalling pathway, which results in the determination of two distinct cellular fates distributed in a spatially ordered pattern. This process occurs in the developing nervous system of vertebrates and invertebrates, where a cell adopting a particular fate (neural) interacts with their neighbouring cells preventing them from adopting the same cellular fate (these cells become epithelial cells). Herein we extend a theoretical characterization of this $process^2$ to analyse the role of receptor-ligand binding in the same cell (intracellular interactions) and of diffusible ligand. Despite there is experimental evidence on these two other kinds of interactions^{3,4}, their function and interplay with the pattern formation process is unknown.

A simple scenario capturing the essential features for the emergence of a pattern from a lateral inhibition process reduces the overall process to the dynamics of two variables per cell (related to the ligand and the receptor, respectively)². If intracellular interactions are introduced, assuming that they elicit the same signal as intercellular interactions, the dynamics can be described by the following model:

$$\dot{n}_P = f((1-\mu)d_P + \mu d_P) - n_P \dot{d}_P = v\{g(n_P) - d_P\}$$
(1)

where the subindex P means that we are referred to the cell P, n stands for the receptor and d for the ligand activities respectively. \overline{d}_P denotes the mean of the levels of ligand activity in the cells adjacent to cell P. Thus, this term is responsible for the intercellular coupling. fand g are continuous increasing and decreasing Hill functions respectively. μ and $(1 - \mu)$ are the fractions of signal coming from intracellular and intercellular interactions.vis related to the ratio of the lifetimes for the receptor and ligand. If all signalling results from intercellular interactions ($\mu = 0$), a periodic pattern emerges in a wide parameter region involving strong feedback, with two types of cells: cells with high levels of n and low levels of d, and cells with low levels of n and high levels of d^2 . In the presence of intracellular signalling and below a critical value of μ , which can be obtained by means of a linear stability analysis, the same periodic pattern can still emerge (Figure 1). However, our results show that these intracellular interactions reduce the parameter region where the pattern of two distinct cell types arises. If diffusible ligand is taken into account, similar qualitative results are found.



Figura 1. Top: Simulation results. Pattern formation in an hexagonal array of cells. Cells with low (high) levels of n are depicted in black (white). Bottom: numerical results of the fixed points of receptor activity *versus* the μ parameter. When intracellular signalling dominates over intercellular signalling, there is just one branch, so the pattern disappears.

Hence, stronger feedback is required to create a pattern in the presence of either intracellular signaling or diffusible ligand.

* pformosa@ecm.ub.es

- ³ K. Sakamoto, O. Ohara, M. Takagi, S. Takeda and K. Katsube. Dev. Biol. **241**, 313-326 (2002).
- ⁴ K. Mishra-Gorur, M. D. Rand, B. Perez-Villamil and S. Artavanis-Tsakonas. JCB Vol 159,2, 313-324 (2002)

¹Gilbert, S.F., Eighth Edition. Sinauer Associates, Inc., Publishers Sunderland, Massachusetts USA.

² J. R. Collier, N.A.M. Monk, P.K. Maini and J. H. Lewis. J. theor. Biol. 183, 429-446 (1996).

Análisis de modelos ecológicos para la biodiversidad en redes complejas.

Javier Galeano, M. A. Muñoz^{*}, J.M. Pastor, J.M. Iriondo[†]

Departamento de Ciencia y Tecnología Aplicadas a la I.T. Agrícola, Universidad Politécnica de Madrid

El estudio de redes complejas ha atraído un enorme interés en los últimos años, a partir de los trabajos pioneros de Strogatz-Watts¹ y Barabasi-Albert². En este vasto contexto, uno de los aspectos más interesantes en la actualidad es el estudio de cómo la topología de la red subvacente condiciona la fenomenología asociada a procesos dinámicos definidos sobre la misma. En este trabajo presentamos una aplicación de estos conceptos generales a ecología. En particular analizaremos el comportamiento de un modelo básico en ecología, como el así llamado "piedra-papel-tijera", al variar la topología de la red substrato, prestando especial atención a la determinación de las propiedades topológicas esenciales que permitan optimizar la persistencia de un número mayor posible de especies. En particular, estudiaremos como varía el tiempo de extinción de las especies en redes aleatorias, redes sin-escala, y redes modulares, para determinar criterios generales para fomentar la biodiversidad.

En las redes modulares estamos analizando como varía el tiempo de extinción de las especies con el cociente, β , entre la probabilidad de enlaces intracomunidad y extracomunidad. Los resultados preliminares nos indican que obtenemos una función decreciente del tiempo de extinción con el aumento del parámetro β manteniendo el grado de enlace k = 4 (ver figura III). Esto implicaría que el máximo de perdurabilidad de las especies en estas redes modulares se obtendría cuando existe un único enlace entre las comunidades externas. Mientras que el valor asintótico al que decae el tiempo de extinción coincide con los valores obtenidos para una red con el total de nudos random pero sin comunidades.

Una aplicación directa de nuestros resultados se pre-

tende aplicar al estudio de habitats fragmentados, como los que aparecen en diversos sistemas de lagunas estacionales³.



Figura 1. Tiempo de extinción en función del parámetro β . Los resultados de la figura se han realizado para 4 comunidades con un valor de 128 por cada comunidad.

- * Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia, Universidad de Granada.
- [†] Área de Biodiversidad y Conservación. Departamento de Biología y Geología ESCET. Universidad Rey Juan Carlos.
- ¹ D. J. Watts and H. Strogatz (1998), Nature **393**, 440-442.
- ² A.-L. Barabasi and R. Albert (1999), Science **286**, 509-512.
- ³ M. A. Fortuna, C. Gómez-Rodríguez and J. Bascompte (2006), Proc. R. Soc. B **273**, 1429-1434.

Funcionales cinéticos adecuados para la realización de dinámica molecular en sistemas electrónicos

David García Aldea*, José Enrique Alvarellos Bermejo*

Departamento de Física Fundamental, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Apartado 60.141, 28080 Madrid,

Spain.

La realización de dinámica molecular mediante el método de Car-Parrinello¹ en sistemas electrónicos reviste una gran importancia, ya que se podrían calcular un gran número de sistemas de mucho interés. Para que tales cálculos resulten factibles desde el punto de vista del coste computacional es necesario disponer de un método de cálculo de estructura electrónica de bajo coste.

La teoría del funcional de la densidad en su esquema ^orbital-free"es el método de cálculo de estructura electrónica que presenta el más bajo coste computacional, ya que dicho coste escala linealmente con el tamaño del sistema. La aplicación de este esquema requiere la construcción de funcionales cinéticos aproximados, que sean capaces de dar cuenta de la energía cinética de distribuciones de densidad electrónica. Los últimos funcionales formulados²⁻⁴ reproducen límites físicos que son importantes para el cálculo de distintos sistemas reales y poseen novedosas formas matemáticas.

En este trabajo se presentan funcionales cinéticos com-

pletamente no locales que han resultado ser los más exitosos. También se discuten los resultados de aplicarlos a diversos sistemas modelo, lo que da una idea del potencial de estas nuevas herramientas. Finalmente, se relacionan estos funcionales con el concepto termodinámico de temperatura local electrónica⁵, que presenta un renovado interés teórico en el campo de la física estadística.

- ¹ R. Car and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 55, 2471 (1985)
- ² D. García-Aldea and J. E. Alvarellos, J. Chem. Phys. 127, 144109 (2007)
- ³ D. García-Aldea and J. E. Alvarellos, Phys. Rev. A 76, 052504 (2007)
- ⁴ D. García-Aldea and J. E. Alvarellos (submitted to PRA).
- ⁵ S. K. Ghosh, M. Berkowitz and R. G. Parr, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 81, 8028 (1984).

^{*} dgaldea@fisfun.uned.es

^{*} jealvar@fisfun.uned.es

Computer Simulation of Interfacial Tensions

Noé G. Almarza Instituto de Química-Física Rocasolano (CSIC) C/ Serrano 119 28006 Madrid

In this contribution we will analyze the calculation of interfacial tensions using computer simulation methods. We will focus the discussion on the case of interfaces between vapor and liquid phases (at equilibrium) of one component systems. However, most of the ideas and conclusions can be applied to other types of interfaces.

The calculation of the surface tensions of liquid-vapor interfaces can be carried out using different methods.¹ Most of the techniques can be classified in two groups: (a) Simulations of systems with explicit interfaces, and (b) Binder procedures^{2,3}.

Explicit Interfaces: The simulations are carried out (for one component systems) in the canonical ensemble using periodic boundary conditions(PBC). The density is taken as an intermediate value between those of the vapor and liquid phases at equilibrium at the corresponding temperature. The simulation box is chosen to be elongated in one direction, and the interfaces are built (and expected to stay) perpendicular to that direction. The surface tension, γ , is computed as the derivative of the Helmholtz energy function with respect to the surface area at constant volume.

These procedures are quite straightforward, but some care has to be taken to avoid spurious finite-size effects^{4,5}. On the other hand, these methods can not be used to compute interfacial tensions of lattice models.

Binder Procedures: For the liquid-vapor case, the usual approach is to use a grand-canonical-like calculation (with PBC and eventually with elongated boxes) to compute the Helmholtz energy function, A(N|V,T), at given conditions of volume, V, and temperature, T, for different values of the number of particles N. With the results of A(N|V,T) it is possible to determine the conditions of liquid-vapor equilibrium (LVE) (i.e. the values of the chemical potential, μ_e , and pressure p_e of the transition), and then to extract the surface tension by considering that the grand potential, $\Omega_e(N) \equiv A(N) - N\mu_e$, is expected to fulfill, if two phases coexist, $\Omega_e(N) = -p_eV + \gamma \mathcal{A}(N)$, where $\mathcal{A}(N)$ is the interfacial area.

Within this framework the interfacial tension is not computed as a derivative but as a difference between the values of Ω_e at coexistence situations and those of the pure phases. This fact alleviates most of the problems with finite-size behavior that appear in the differential methods. Nevertheless, Binder methods require for most cases non-standard simulation methods^{3,6} to get reliable results for A(N, V, T) in the two-phase region. In fact γ is often computed as a by-product of the finite-size scaling analysis of the LVE close to the critical point.

Finite-size effects: In the poster, we will illustrate the facts commented above showing results from both kinds of techniques applied to the LVE of a Lennard-Jones fluid. Special attention will be paid to the dependence of the results with the different system lengths.

Thermodynamic Integration techniques: Given the non-monotonic dependence of γ with the interfacial area that appears in the explicit interface methods^{4,5} (at least for small systems) we could think on the possibility of using Thermodynamic Integration (TI) procedures to compute γ for liquid-vapor interfaces, with the aim of keeping the relative simplicity of the explicit interface simulation procedures while using a non-differential route to compute γ . TI methods have been proposed to compute the interfacial free energy of systems near a hard wall⁷.

In our case the TI is build up to go from the system divided into two non interacting phases to the system with the two phases connected through the corresponding interface. Some preliminary results using TI on lattice gas models will be shown, and compared with those attained using the Binder method. Finally, possible ways of adapting TI techniques to compute γ for atomistic models will be discussed.

- * noe@iqfr.csic.es; http://www.qft.iqfr.csic.es/
- ¹ For a review see: G. J. Gloor, G. Jackson, F. J. Blas, and E. de Miguel, J. Chem. Phys. **123**, 134703 (2005).
- ² K. Binder, Phys. Rev. A **25**, 1699 (1982).
- ³ J. R. Errington, Phys. Rev. E **67**, 012102 (2003).
- ⁴ P. Orea, J. López-Lemus, and J. Alejandre, J. Chem. Phys. 123, 114702 (2005).
- ⁵ M. González-Melchor, P. Orea, J. López-Lemus, F. Bresme, and J. Alejandre, J. Chem. Phys. **122**, 094503 (2005).
- ⁶ E. Lomba, C. Martín, N. G. Almarza and F. Lado, Phys. Rev. E 71, 046132 (2005).
- ⁷ M. Heni, and H. Löwen, Phys. Rev. E **60**, 7057 (1999).

Descripción hidrodinámica de un sistema disipativo: el modelo PBA

M.I. García de Soria^{*†}, P. Maynar[‡], G. Schehr[‡], A. Barrat[‡] y E. Trizac[†]. Université Paris-Sud, LPTMS, UMR 8626, Orsay Cedex, F-91405, France.

Una gran variedad de fenómenos pueden ser modelados mediante sistemas de partículas reaccionantes, los cuales proporcionan situaciones privilegiadas para desarrollar y comprobar las bases de la mecánica estadística de no equilibrio. Cuando las reacciones son controladas balísticamente, el sistema puede ser modelado como un conjunto de esferas o discos duros tales que, cuando dos partículas se encuentran, se aniquilan con probabilidad po colisionan elásticamente con probabilidad 1-p. Este es el modelo de aniquilación balística probabilística ("probabilistic ballistic annihilation", PBA)¹. En este modelo, tanto la energía cinética como el número de partículas y el momento, son magnitudes no conservadas.

La mayoría del trabajo llevado a cabo hasta ahora se ha centrado en las ecuaciones cinéticas para la función de distribución de un tiempo y la información que se extrae de ella¹⁻⁴. En particular, las ecuaciones hidrodinámicas han sido derivadas usando una generalización de la expansión de Chapman-Enskog⁵, encontrando expresiones explícitas para los coeficientes de transporte.

En este trabajo, hemos estudiado la ecuación de Boltzmann linealizada alrededor del estado de decaimiento homogéneo. Este estado es uno de los más simples que podemos considerar y se caracteriza porque toda la dependencia temporal de la función de distribución viene dada a través de la densidad y la temperatura. A partir de un análisis del espectro del operador de Boltzmann linealizado hemos derivado las ecuaciones hidrodinámicas linealizadas, expresando los coeficientes de transporte en términos de fórmulas de Green-Kubo.

Haciendo uso de las ideas desarrolladas en el contexto de la ecuación de Boltzmann linealizada es posible el estudio de las fluctuaciones y correlaciones en el modelo PBA. En el límite diluido y para el estado de decaimiento homogéneo, hemos formulado una teoría para las fluctuaciones de las magnitudes globales del sistema.

Los resultados de Dinámica Molecular y del método de simulación Directa de Monte Carlo (DSMC) confirman las predicciones de nuestra teoría.

- [†] Université Paris-Sud, LPTMS, UMR 8626, Orsay Cedex, F-91405, France.
- [‡] Laboratoire de Physique Théorique (CNRS UMR 8627), Bâtiment 210, Université Paris-Sud, 91405 Orsay cedex, France.
- ¹ F. Coppex, M. Droz, y E. Trizac, Phys. Rev. E **69**, 011303 (2004).
- ² P. Krapivsky y C. Sire, Phys. Rev. Lett. **86**, 2494 (2001).
- ³ E. Trizac, Phys. Rev. Lett. **88**, 160601 (2002).
- ⁴ J. Piasecki, E. Trizac, y M. Droz, Phys. Rev. E 66, 066111 (2002).
- ⁵ F. Coppex, M. Droz, y E. Trizac, Phys. Rev. E **70**, 061102 (2004).

^{*} gsoria@us.es

Estudio computacional de procesos de separación de gas natural en mofs.

E. García-Pérez,* A. Martín-Calvo y S. Calero Departamento de Física, Química y Sistemas Naturales Universidad Pablo de Olavide Ctra Utrera km1. 41013 Sevilla

Los MOFs, estructuras metalorgánicas, son un material interesante para el estudio de procesos de adsorción debido a que son altamente cristalinos y su tamaño de poro varía en un amplio rango. Actualmente se investiga desde el punto de vista tecnológico y ambiental, tanto química como estructuralmente, ya que se utilizan en procesos de separación, catálisis y almacenamiento de gases. Nuestro trabajo está basado en procesos de adsorción, almacenamiento y por tanto de separación de los componentes mayoritarios del gas natural en dos tipos de MOFs: Cu-BTC e IRMOF-1. Hemos utilizado métodos avanzados de simulación molecular para estudiar dichos procesos. En primer lugar, es necesario diseñar correctamente el material, definiendo cada uno de los tipos de átomos y asignándoles cargas adecuadas, para ello se ha utilizado el programa Gaussian. En un segundo paso, definimos las interacciones moleculares, van der Waals y coulómbicas. Las van der Waals mediante potenciales tipo Lennard-Jones y las coulómbicas usando sumas de Ewald^{1,2}. El tercer paso, será definir buenos parámetros intermoleculares, para ello utilizamos métodos matemáticos de ajuste a isotermas experimentales de adsorción³. Por último, estudiamos la adsorción y difusión molecular en estos materiales. La adsorción usando el colectivo GC^4 y la difusión utilizando dinámica molecular clásica, o cuando esto es imposible, Teoría del Estado de Transición $(TST)^5$.

Para validar los resultados obtenidos hemos comparado nuestros resultados de simulación con medidas experimentales disponibles. Posteriormente hemos estudiado el efecto que ejerce cada estructura (tipo de átomos y tamaño y forma de poros) en la separación de mezclas equimolares y en otras proporciones de $\rm CO_2/\rm CH_4$, $\rm CO_2/N_2, \rm CH_4/\rm C_2\rm H_6/\rm N_2/\rm CO_2/\rm C_3\rm H_8$ y de una mezcla de once componentes con proporciones que cumplen la de una muestra de gas natural.

- ¹ J. Amer. Chem. Soc. **2004**, 126, 11376.
- ² Phys. Rev. Lett. **2004**, *93*, 088302.
- ³ J. Phys. Chem. B **2004**, 108, 12301.
- ⁴ J. Phys. Chem. B **2006**, 110, 3164.
- ⁵ Angew. Chem. Int. Ed. **2003**, 42, 3623.

^{*} egarper@upo.es

Fluctuaciones en el flujo de material granular a través de un orificio

Angel Garcimartín^{*}, R. Harich[†], P. Cixous[†], A. Janda, I. Zuriguel, D. Maza

Grupo de Medios Granulares[‡] Departamento de Física y Matemática Aplicada Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra 31080 Pamplona



Figura 1. Histograma de las fluctuaciones del flujo a la salida de un silo para diferentes tamaños del orificio de salida. Los gráficos están en representados en escala semilogarítmica. En el eje horizontal las unidades son número de granos por segundo. D es el tamaño del orificio de salida, medido en unidades del diámetro del grano. Los ajustes (*líneas continuas*) son parábolas.

El flujo de material granular a través de un orificio presenta la particularidad de que puede atascarse debido a la formación de un arco que tapone la salida. En experimentos anteriores¹ se encontró que por encima de cierto tamaño del orificio, al que se denominó radio crítico R_c , no se producen atascos –incluso si se espera un tiempo muy largo.

Por otro lado, la cantidad de material que se descarga por unidad de tiempo (el flujo) cumple, para agujeros grandes, la relación de Beverloo (que indica que el flujo escala con el tamaño del agujero elevado a la potencia 5/2). Si bien esta ecuación es válida para un orificio de salida de gran tamaño, no se cumple para agujeros pequeños² (esto es, para aberturas del orden o menores que R_c).

Se presenta aquí un resultado adicional relacionado con los anteriores. Se ha medido el flujo resuelto en el tiempo (es decir, se detectan todos y cada uno de los granos que salen del orificio, de modo que se conoce el instante en que atraviesan el orificio de salida). Al describir estadísticamente el comportamiento del flujo, se observa que las fluctuaciones son gaussianas para tamaños del orificio mayores que R_c , pero para tamaños menores que ese valor las fluctuaciones dejan de ser gaussianas debido a la aparición de sucesos extremos (Fig. 1). Estos sucesos extremos consisten en situaciones en las que el flujo se reduce mucho, o incluso cesa temporalmente, durante un breve espacio de tiempo.

- ¹ I. Zuriguel, L. A. Pugnaloni, A. Garcimartín and D. Maza, Phys. Rev. E - RC **68**, 030301 (2003); I. Zuriguel, A. Garcimartín, D. Maza, L. A: Pugnaloni and J. M. Pastor, Phys. Rev. E **71**, 051303 (2005).
- ² C. Mankoc, A. Janda, R. Arévalo, J. M. Pastor, I. Zuriguel, A. Garcimartín and D. Maza, Gran. Matt. 9, 407 (2007).

^{*} angel@fisica.unav.es

[†] Laboratoire de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes, École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles, Paris (France)

[‡] http://fisica.unav.es/granular/

Sobre la relación de Einstein en gases granulares densos forzados

<u>Vicente Garzó</u>* Departamento de Física Universidad de Extremadura 06071 Badajoz

La extensión del teorema de fluctuación-disipación a sistemas fuera de equilibrio es uno de los problemas que mayor estudio está recibiendo en los últimos años. En este contexto, la materia granular constituye un buen ejemplo de un sistema que inherentemente se encuentra fuera de equilibrio. Dichos sistemas están constituídos por granos macroscópicos que colisionan inelásticamente de modo que la energía total del mismo disminuye en el tiempo a menos que el sistema reciba energía externamente. Cuando el enfriamiento colisional se compensa con la inyección de energía externa, el sistema alcanza un estado estacionario de no equilibrio. Dicha situación es en la que estamos interesados en esta comunicación.

El teorema de fuctuación-disipación relaciona la respuesta lineal de un sistema en equilibrio con sus correlaciones. En el lenguaje de frecuencias ω , el teorema establece que la función de respuesta a una fuerza armónica débil y la correspondiente función de autocorrelación del observable conjugado de dicha fuerza tienen exactamente la misma dependencia en la frecuencia y además el cociente de las mismas es igual a la temperatura del sistema. Dado que la dependencia completa de dichas funciones con la frecuencia es dificil de evaluar en general, en muchas ocasiones la correspondiente relación entre la fluctuación y la respuesta se determina en el límite de frecuencia cero ($\omega \rightarrow 0$). En este límite, el cociente entre ambas cantidades se conoce como la relación de Einstein.

Aunque algunos avances sobre la teoría de respuesta lineal han sido llevados a cabo en el contexto de la mecánica estadística de fluidos granulares,¹ en este trabajo adoptaremos el punto de vista de la teoría cinética (hipótesis de caos molecular) de modo que las ecuaciones de Boltzmann y de Enskog (para sistemas de densidad moderada) serán el punto de partida. En este trabajo se estudiará la difusión de impurezas en un gas granular forzado cuando la corriente es generada simultáneamente por un gradiente débil de concentración y por la presencia de un campo externo débil que sólo actúa sobre las impurezas. Bajo estas condiciones, el coeficiente de difusión Dy de mobilidad μ son los coeficientes de transporte relevantes. Además supondremos que el gas es calentado por la acción de fuerzas externas (termostatos) que realizan trabajo sobre el sistema para compensar el enfriamiento colisional. Dos tipos de termostatos serán considerados: (i) una fuerza determinista proporcional a la velocidad de la partícula (termostato gaussiano), y (ii) una fuerza

externa tipo ruido blanco (termostato estocástico). Dado que el sistema está fuera del equilibrio, la relación usual de Einstein no se verifica, es decir,

$$\epsilon = \frac{D}{T\mu} \neq 1$$

donce T es la temperatura del gas. Sin embargo, algunos resultados obtenidos en simulación de gases diluídos² han mostrado la validez de dicha relación cuando la temperatura del gas T es reemplazada por la temperatura de la impureza T_0 , que en general es distinta de T dada la no equipartición de la energía. Resultados previos³ obtenidos a partir de la ecuación de Boltzmann muestran que en el caso del termostato estocástico las desviaciones de ϵ de la unidad son en general inferiores al 1% si T es sustituido por la temperatura efectiva T_0 , lo cual está de acuerdo con los resultados encontrados en la simulación.² Sin embargo, resultados más recientes de simulación en sistemas densos⁴ donde las correlaciones juegan un importante papel han mostrado una mayor desviación de ϵ con respecto a la unidad. Por ello, el objetivo de este trabajo es estudiar la relación generalizada de Einstein en el contexto de la ecuación de Enskog, la cual desprecia las correlaciones entre las velocidades de las partículas antes de colisionar pero tiene en cuenta las correlaciones espaciales debidas a efectos de volumen excluído. Expresiones explícitas de los coeficientes $D \neq \mu$ son obtenidos a partir del método de Chapman-Enskog en la segunda aproximación de Sonine.⁵ A partir de dichos resultados analizaremos la influencia de la densidad sobre la posible violación de la relación (generalizada) de Einstein.

- ⁴ A. Puglisi, A. Baldasarri, and A. Vulpiani, J. Stat. Mech. P08016 (2007).
- ⁵ V. Garzó and J. M. Montanero, Phys. Rev. E **69**, 021301 (2004).
- ⁶ http://www.unex.es/fisteor/vicente

^{*} vicenteg@unex.es

 ¹ J. W. Dufty and V. Garzó, J. Stat. Phys. **105**, 723 (2001);
 J. W. Dufty, J. J. Brey, and J. Lutsko, Phys. Rev. **65**, 051303 (2002);
 J. W. Dufty, A. Baskaran, and J. J. Brey, J. Stat. Mech. L08002 (2007).

² A. Barrat, V. Loreto, and A. Puglisi, Physica A **334**, 513 (2004).

³ V. Garzó, Physica A **343**, 105 (2004).

Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol + agua}: Estructura

A. Dopazo-Paz, <u>P. Gómez-Álvarez</u>*, L. Romaní y D. González-Salgado

Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias de Ourense

 $Universidad\ de\ Vigo.\ As\ Lagoas\ s/n.\ 32004\ Ourense$

Las anomalías detectadas experimentalmente en las propiedades termodinámicas del sistema {metanol+agua} han sido el punto de partida de un gran número de estudios que han buscado esclarecer el origen a escala molecular de este comportamiento.¹ Recientes experimentos de dispersión de neutrones $^{2-5}$ han proporcionado una imagen de la mezcla que discrepa de la aceptada en las últimas décadas, la propuesta por Frank y Evans.⁶ En este nuevo contexto, la distribución molecular muestra una aparente microinmiscibilidad; las moléculas de metanol se agrupan formando clusters en los que los grupos apolares CH_3 aparecen enfrentados mientras que las de agua mantienen el tipo de estructura presente en el líquido puro, de manera que apenas se ve afectada por la presencia de metanol.

La relación de esta nueva visión con el comportamiento termodinámico aún no ha sido establecida. La técnica de simulación molecular por el método de Monte-Carlo es una herramienta adecuada para el análisis de este tipo de problemas. Para ello, es necesario desarrollar un potencial intermolecular que describa correctamente el comportamiento experimental (macroscópico y microscópico) de estos sistemas. En el caso de los líquidos puros, agua y metanol, existen una amplia variedad de potenciales con distinto grado de complejidad que verifican esas premisas, sin embargo, el desarrollo de un potencial intermolecular para el sistema {metanol+agua} no ha sido abordado en detalle.

En este trabajo, se explora la capacidad de un potencial intermolecular para la descripción de la estructura (funciones de distribución radial) del sistema {metanol+agua}. El potencial se ha construido a partir del potencial TIP4P⁷ para las interacciones entre moléculas de agua, el OPLS⁸ para las interacciones entre moléculas de metanol, y la combinación de ambos potenciales y la regla de mezcla de Lorentz-Berthelot para la descripción de las interacciones entre metanol y agua. Se han llevado a cabo simulaciones por el método de Monte Carlo en todo el intervalo de composiciones. El colectivo utilizado ha sido NVT, considerando T = 298.15 K y N = 500 moléculas en una celda cúbica de lado L bajo condiciones de frontera periódicas. Las densidades fueron obtenidas a partir de simulaciones previas⁹ en el colectivo NPT, asumiendo condiciones se han comparado con los obtenidos a partir de los estudios de dispersión de neutrones.^{2–5}

* ga_paula@uvigo.es

- ¹ F. Franks and D. J. G. Ives, Quat. Rev. Chem. Soc. **20**, 1 (1966).
- ² A. K. Soper and J. L. Finney, Phys. Rev. Lett. **71**, 4346 (1993).
- ³ S. Dixit, A. K. Soper, J. L. Finney, and J. Crain, J. Europhys. Lett. **59**, 377 (2002).
- ⁴ S. Dixit, J. Crain, W. C. K. Poon, J. L. Finney, and A. K. Soper, Nature **416**, 829 (2002).
- ⁵ A. K. Soper, L. Dougan, J. Crain, and J. L. Finney, J. Phys. Chem. B **110**, 3472 (2006).
- ⁶ H. S. Frank and M. W. Evans, J. Chem. Phys. **13**, 507 (1945).
- ⁷ W. L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J. D. Madura, R. W. Impey, and M. L. Klein, J. Chem. Phys. **79**, 926 (1983).
- ⁸ W. L. Jorgensen, J. Phys. Chem. **90**, 1276 (1986).
- ⁹ A. Dopazo-Paz, P. Gómez-Álvarez, D. González-Salgado, and L. Romaní, 'Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol + agua}: propiedades termodinámicas', FisEs08.

Evolutionary Preferential Attachent as a mechanism of social network growth.

Julia Poncela, Jesús Gómez Gardeñes^{*}, Y. Moreno, A. Sánchez, and L.M. Floría. Scuola Superiore di Catania, Università di Catania,

Via San Paolo 73, I-95123 Catania, Italy.

In this poster, we will show how evolutionary dynamics can be incorporated to a model of network growth in which individuals attach preferentially to those agents with highest evolutionary payoff. Our results indicate that scale-free networks with high clustering coefficient and degre-degree correlations are obtained using this novel approach and therefore reproducing those structural patterns found in social networks. Besides, the internal organization of cooperation in these growing scale-free networks is seen to be different from that found in the static scale-free graphs.

* gardenes@gmail.com

¹ http://neptuno.unizar.es/jgg/

Dynamical instabilities of dissipative solitons in nonlinear optical cavities with nonlocal metamaterials

Lendert Gelens^{*}, Guy Van der Sande, Jan Danckaert Department of Applied Physics and Photonics Vrije Universiteit Brussel Pleinlaan 2, B-1050 Brussel, Belgium

Damià Gomila^{**}, Manuel A. Matías, Pere Colet IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB) Campus Universitat Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain

In this work we characterize the dynamical instabilities of Localized Structures (LS) exhibited by a recently introduced generalization¹ of Lugiato-Lefever model² including the weakly *nonlocal* response of an intracavity metamaterial:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -(1+i\theta)E + E_{in} + i|E|^2 E + i\nabla_{\perp}^2 E + i\beta\nabla_{\perp}^4 E.$$
(1)

This equation describes the temporal evolution of the slowly varying envelope of the electric field $E(\vec{x},t)$ in a double-layered optical cavity. One layer of the cavity consists of a conventional right-handed material, while the other layer is an optical left-handed metamaterial. The bilaplacian term accounts for a linear weakly nonlocal response of the left-handed metamaterial. Furthermore, it has been shown that in this double-layered cavity β can be drastically altered by changing the relative lengths of both material layers.

We observe a rich scenario (See Fig.1), in which the LS exhibit different types of oscillatory instabilities, and excitability. We shown that the scenario is organized by a pair of Takens-Bogdanov (TB) codimension-2 points. The dynamical regimes arising from the TB₁ are qualitatively the same as observed without intracavity metamaterials³, but now the TB point, located at the conservative limit ($\theta \rightarrow \infty$) in the previous case, is located at finite parameter values as a result of the nonlocality.

The TB₂ leads, however, to completely new dynamical regimes. Particularly interesting is a regime of conditional excitability where the system is simultaneously excitable and bistable. In this regime, perturbations that are not able to cross the excitability threshold lead to normal relaxation to the fundamental state. Perturbations of moderate intensity above the excitability threshold lead to a long excursion in the phase space, while perturbation of higher intensity, above a second threshold, will form a stable high amplitude LS. So the dynamical response to perturbations is more complex than simply sub- and supra-threshold, and for the latter type of perturbations two possible regimes are possible.

Finally we will discuss how this scenario might emerge from the collapse dynamics of solitons in the two dimensional Nonlinear Schrödinger Equation.



Figura 1. Top: Phase diagram of localized structures in a Kerr cavity with metamaterials. LS are stable between the Saddle-Node bifurcation (solid line - SN) and the Hopf bifurcation (dashed line - H), and oscillate between the Hopf bifurcation and the Saddle-Loop (homoclinic) bifurcation (dotted line - SL). Beyond the homoclinic bifurcation, the system exhibits excitability. Below the saddle-node bifurcation, there exist no LS. The saddle-node and Hopf bifurcation lines meet at two codimension-2 Takens-Bogdanov points. Here $\theta = 1.23$.

- ³ D. Gomila, M.A. Matías, and P. Colet, Phys. Rev. Lett. 94, 063905 (2005). D. Gomila, A. Jacobo, M.A. Matías, and P. Colet, Phys. Rev. E 75, 026217 (2007).
- ⁴ http://www.ifisc.uib.es

 $^{^*}$ lendert.gelens@vub.ac.be

^{**} damia@ifisc.uib.es

¹ Gelens *et al.*, Phys. Rev. A **75**, 063812 (2007).

² L.A. Lugiato and R. Lefever, Phys. Rev. Lett. 58, 2209 (1987).

Modelo de Ising en una red co-evolutiva.

González-Avella Juan Carlos, Eguíluz M. Victor y San Miguel Maxi. Instituto de Física Interdsciplinar y Sistemas Complejos (IFISC-CSIC). Universidad de las Islas Baleares. E-07122 Palma de Mallorca.

En los últimos años, el estudio de la topología de conectividad o redes de interacción de entes dinámicos que interactúan entre sí, han capturado la atención de científicos de distintas áreas como, la biología, física, matemáticas, sociología, economía entre otros.¹⁻⁴. Una diversidad de dinámicas en distintos contextos han sido explorados en diferentes redes complejas, resultando en que las propiedades colectivas de estos sistemas dependen fuertemente de las redes de interacción.^{5,6} Recientemente se ha venido desarrollando una importante línea de investigación que se centra en estudiar los procesos dinámicos en redes evolutivas.⁷⁻⁹. En tal sentido, presentamos un modelo de ising, donde la evolución de los estados, está acoplado con la evolución de la red.

El sistema consiste de N nodos o spins s_i , con i =1, 2, ..., N, colocados en una red aleatoria como red inicial y con un número de vecinos k = 4. Cada spin puede tomar dos valores (-1) o (+1). El valor de los spines esta determinado por la interación con sus vecinos y por las fluctuaciones térmicas. La energía del sistema esta dada por: $E = -\sum_{\langle ij \rangle} Js_i s_j$. No se consideran interaccines con campos magnéticos. La dinámica del sistema sigue las siguientes reglas: 1) Se selecciona un spin al azar y se calcula la contribución a la energía de este spin. 2) Se propone el cambio $s_i = -s_i$ y se calcula la nueva contribución de energía. 3) Se calcula la diferencia de energía $\Delta E.$ Si ΔE <= 0 aceptamos el cambio. 4) Si ΔE > 0 con probabilidad $p = exp(-\Delta E\beta)$ se acepta el cambio, de lo contrario del conjunto de vecinos del elemento (i)se selecciona al azar un vecino con spin contrario y se rompe el enlace entre ellos y se selecciona otro elemento del sistema de forma aleatoria creando un nuevo enlace. El cambio en la energía sólo depende del valor del spin y sus vecinos cercanos. La regla (4) permite la posibilidad de que la estructura de la red cambie en el tiempo, dependiendo del estado de los spines. La evolución de la red se puede ver en la figura 1, donde se muestra el estado final del sistema para diferente valores de β , donde $\beta = 1/T$. Los resultados numéricos muestra que hay una transición en la estaructura de la red, desde un grafo totalmente conectado y en donde los estados de los spines cambian constantemente a un estado en que la red se divide en dos grupos de igual tamaño con spines de signos contrarios. En la figura 2, se observa que hay una valor de $\beta = \beta_c$ para el cual ocurre el rompiento de la red y aparece un nucleo altamente conectado y su tamaño es mucho más pequeño que N. En resumen, hemos estudiado el modelo de ising donde se incluye la posisbilidad de que la red evolucione como consecuencia de la dinámica de los spines, y a su vez la dinámica de los spines depende la estrucura de la red, observando que aparece una transición donde la estrucura de la red cambia drásticamente



Figura 1. Estado final de la estructura de la red. Tamaño del sistema N = 400. a) $\beta = 0$, b) $\beta = 0.1$, c) $\beta = 0.25$, d) $\beta = 2$ y e) $\beta = 6$.



Figura 2. Tamaño de la componente más grande $\langle S \rangle$ vs. β , para distintos tamaños de sistema. para N = 400 (círculos), N = 2500 (cuadrados) y N = 4096 (círculos).

- ¹ A. L. Lloyd and R. M. May, *Science*, **292**, 1316-1313 (2001).
- ² R. Pastor-Satorras and A. vespignani, *Phys. Rev. Lett.*. **86**, 3200 (2001)..
- ³ M. Kuperman and G. Abramson, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2909 (2001).
- ⁴ D.H. Zanette, *Phys. Rev. E.* **64**, 050901 (2001).
- ⁵ Eguíluz V. M., Hernández-García E., Piro O. and K. Klemm *Phys. Rev. E.* **68**, 055102 (2003).
- ⁶ Klemm K., Eguíluz V. M., Toral R. and San Miguel M. *Physica A* **327**, 1-5 (2003).
- ⁷ Zimmermann M., Eguíluz V.M. and San Miguel M., *Phys. Rev. E.* **69**, 065102 (2004).
- ⁸ Holme P. and Newman M. E. J., *Phys. Rev. E.* **74**, 056108 (2006).
- ⁹ Vazquez F., González-Avella J. C., Eguíluz, V. M. and San Miguel M. Phys. Rev. E. **76**, 046120 (2007).

Estructura de fluidos confinados en microcanales

A. González^{*}, F.L. Román, J.A. White y S. Velasco Departamento de Física Aplicada Universidad de Salamanca 37008 Salamanca

En este trabajo se analiza la estructura que adopta un fluido de esferas duras cuando es confinado en un canal infinitamente largo de sección cuadrada y de anchura comparable al tamaño de las partículas (v. figura III). Para obtener la estructura del fluido se emplean dos herramientas habituales, simulaciones Montecarlo y teorías de funcionales de la densidad (DFT).



Figura 1. Esquema del problema.

Para densidades del fluido elevadas la probabilidad de encontrar una partícula a lo largo de una arista del ca-

nal es muy alta. Eso hace que en esa región se pueda considerar como casi unidimensional (1D). Por ello, este problema representa un buen test para medir las cualidades de las DFT empleadas en el caso de reducción dimensional (*dimensional crossover*).

En concreto se van a emplear dos DFT: la teoría de medidas fundamental original (OFMT) de Rosenfeld¹ y la más compleja teoría de medidas fundamental de cavidades (CFMT) de Tarazona². En la primera, el exceso de energía libre del fluido de esferas duras se calcula a partir de una serie de promedios escalares y vectoriales de la densidad del fluido $\rho(\mathbf{r})$. Las funciones de peso empleadas en dichos promedios representan la geometría de una esfera, de ahí el nombre con que se conoce a esa teoría. Esta teoría es una de las más precisas, si bien es conocido que presenta problemas en situaciones de reducción dimensional a 0D y 1D.

Por su parte, la CFMT consigue resolver esos problemas al precio de elevar la complejidad del tratamiento al incluir promedios tensoriales.

^{*} ags@usal.es

¹ Y. Rosenfeld, Phys. Rev. Lett. **63**, 980 (1989).

² P. Tarazona, Phys. Rev. Lett. **8**4, 694 (2000), P. Tarazona, Physica A **3**06, 243 (2002).

Scaling properties in protein evolution

E. Alejandro Herrada^a, Claudio J. Tessone^b, Víctor M. Eguíluz^a, Emilio Hernández-García^a

and Carlos M. Duarte^c

^a IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistema Complejos CSIC-Universitat de les Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain ^bETH Zürich, KPL F 31.1, Kreuzplatz 5, CH-8032 Zürich, Switzerland ^cIMEDEA, Instituto Mediterráneo de Estudios Avanzados (CSIC-UIB) C/ Miquel Marqués 21, E-07190 Esporles, Spain

Many biological processes, from cellular metabolism to population dynamics, are characterized by allometric scaling (power-law) relationships between size and rate. During the last years different research groups 1,2 have developed statistical analysis tools, based on allometric scaling concepts, for the study of tree-like networks (for example to characterize how branching properties change with network size), mostly in the context of transportation networks. Among the biological processes naturally described in terms of a tree-like topology, the diversification of proteins leading to protein families, happening during the evolution of organisms, is conveniently represented in terms of phylogenetic trees, representing the evolutionary relationships among the different proteins. Here we introduce allometric scaling approaches for the statistical analysis of protein families phylogenies. Most of our analysis rely on the PANDIT database^{3,4}.

A protein phylogeny is considered as a group of tips and nodes linked by branches. Each node ultimately represents a diversification (mutation) event. For each node i, a subtree S_i is made up of a root at node i and all the descendant nodes below i. That point of view allows us to understand how much the protein (sub)family members diversify from i, through the subtree size A_i , and how is this diversity arranged, through several topological measures characterizing the shape of the subtree S_i . Universal scaling relationships between shape and size of protein phylogenies are revealed and discussed.

- ¹ J. R. Banavar, A. Maritan and A. Rinaldo. Nature **399**, 130 (1999).
- ² D. Garlaschelli, G. Caldarelli and L. Pietronero. Nature **423**, 165 (2003).
- ³ S. Whelan, P. I. W. de Bakker, E. Quevillon, N. Rodriguez and N. Goldman, Nucleic Acids Research **34**, D327 (2006).
- 4 http://www.ebi.ac.uk/goldman-srv/pandit

Regime changes in competing floating-submerged plant ecosystems

F. S.Bacelar[†], J.-M. Zaldívar-Comenges^{*}, S. Dueri^{*}, E. Hernández-Garcia[†]

†IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, Palma de Mallorca, Spain

*European Commission, DG Joint Research Centre, Institute for Environment and Sustainability, Ispra (VA), Italy

Pristine coastal shallow systems are considered as dominated by extensive meadows of seagrass species, which are assumed to take advantage of nutrient supply from sediment. An increasing nutrient input is thought to favour in a first phase phytoplankton and/or epiphytic micro-, macroalgae as well as opportunistic ephemeral macroalgae that coexist with seagrasses. The primary cause of shifts and succession in the macrophyte community are nutrients added to water, mainly nitrogen and phosphorus.

In an attempt to quantify these aspects to and to analyse better the type of regime shift occurring in these ecosystems according with non-linear dynamical systems theory, we have developed a basic model that accounts for the competition between Zostera marina (submerged plants) and Ulva (floating plants) using existing developed and validated models $^{1-4}$. To deal with the ability of seagrass to survive in low nutrient conditions, we have also included the dynamics of inorganic nitrogen (nitrates and ammonium) in the water column as well as in the sediments⁵. As it is, the model does not take into consideration several important aspects that may influence the outcome of the simulations such as organic nutrient dynamics, oxygen which in some cases is the limiting factor, phytoplankton, zooplankton and bacteria dynamics, and the interactions between Ulva rigida and aquaculture activities.

The 0D results shown a general agreement with the experimental results reported in literature concerning thresholds of nutrient concentrations at which a regime shift occurred?. Furthermore, the model is quite sensitive to water temperature increases. Successively, the regime shift model has been coupled with a 3D hydrodynamic (physical) COHERENS model⁶ and a watershed model⁷ for Thau lagoon (France). Scenarios considering an increase of nutrients due to the enlarge population living at the watershed, carried out by Valette et al (2005), have been used for assessing the probability of the occurrence of a regime shift in Thau lagoon III.



Figura 1. Ulva annual mean biomass as a function of nitrate and ammonium inflows $(mmolm^{-3}h^{-1})$.



Figura 2. Zostera annual mean biomass as a function of nitrate and ammonium inflows $(mmolm^{-3}h^{-1})$.

- ¹ Bocci M, Coffaro G. and Bendoricchio G., 1997. Ecol. Model. 102, 67-80
- 2 Coffaro G. and Bocci M., 1997. Ecol. Model. 102, 81-95
- ³ Solidoro, C., Brando, V. E., Dejak, C., Franco, D., Pastres, R., Pecenik, G., 1997a. Ecol. Model. 102, 259-272
- ⁴ Solidoro, C., Pecenik, G., Pastres, R., Franco, D. and Dejak, C., 1997b. Ecol. Model. 94, 191-20.
- ⁵ Chapelle, A., 1995. Science 75: 125 -134
- ⁶ Luyten, P.J., Jones, J.E., Proctor, R., Tabor, A., Tett, P., Wild-Allen, K., 1999. MUMM Report. Management Unit of the Mathematical Models of the North Sea, 911 pp
- ⁷ Martin, J.F., E. Reyes, G.P. Kemp, H. Mashriqui, and J. Day, J.W. 2002. BioScience 52:357-365.

Discusión sobre la Markovianicidad de una descripción de grano grueso de una cadena unidimensional de osciladores no armónicos

C.Hijón, M. Serrano, P. Español* Departamento de Física Fundamental Universidad Nacional de Educación a Distancia 28080 Madrid

Artículos recientes¹-⁴ reflejan una controversia acerca de la validez de la hipótesis Markoviana en la descripción de grano grueso de un sistema atómico unidimensional. En concreto en la Ref.⁴ se considera que la descripción Markoviana de una cadena unidimensional de átomos de Lennard-Jones a temperatura elevada es correcta. Sin embargo, es cierto que en este sistema puede haber efectos no-Markovianos, tal y como sugiere Cubero. Nuestra intención es mostrar que estos efectos no-Markovianos son pequeños.

Dentro del marco de la Teoría de Operadores de Proyección de Mori, la hipótesis Markoviana implica que la evolución temporal de las variables de grano grueso del sistema está descrita por una exponencial, posiblemente compleja. Cuando esto ocurre, se puede demostrar rigurosamente que podemos sustituir las fuerzas proyectadas por las fuerzas "microscópicas" en la formula de Green-Kubo, que nos da la expresión de los coeficientes de transporte. Nótese, por tanto, que la utilidad práctica de la Teoría de Mori, esto es, la posibilidad de calcular coeficientes de transporte a partir de simulaciones de dinámica molecular sólo aparece si la hipótesis Markoviana es válida.

Una vez que se ha determinado la existencia de efectos no-Markovianos en el problema, nos proponemos cuantificar la importancia de los mismos, para lo cual supondremos que nuestro sistema es Markoviano. Hecha esta suposición podemos resolver las ecuaciones de evolución para las variables relevantes, que comparamos con los resultados obtenidos de simulación. La comparación entre los resultados de simulación para las variables macroscópicas con los resultados de la predicción Markoviana, *sin parámetros ajustables*, es satisfactoria.

- ¹ P. Español, Phys. Rev. E 53, 1572 (1996).
- ² D. Cubero and S. Yaliraki, J. Chem. Phys. 122, 034108 (2005).
- ³ D. Cubero and S. Yaliraki, Phys. Rev. E 72, 032101 (2005).
- ⁴ C.Hijón, M. Serrano, P. Español, J. Chem. Phys. 125, 204101 (2006).

^{*} chijon@bec.uned.es

Current Large Deviations in the Kipnis-Marchioro-Presutti Model of Heat Conduction

Pablo I. Hurtado^{*}, Pedro L. Garrido

Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia, and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Universidad de Granada, 18071 Granada, España

We present numerical results for the one dimensional Kipnis-Marchioro-Pressutti (KMP) lattice model for heat conductivity. In particular, we focus on the fluctuating behavior of the heat current and the associated thermal profiles. We compare our results with a recent theoretical approach by Bodineau and Derrida¹ based on an additivity principle for the current in one dimensional diffusive systems. Using a recently introduced algorithm which allow the direct computation of large deviations^{2,3}, we measure the large deviation function of the total heat current in the KMP model. Our results point out that deviations from the Bodineau-Derrida theory show up for large enough current fluctuations, due to the presence

of time-dependent optimal energy profiles, in agreement with recent results $^{4,5}.$

- * phurtado@onsager.ugr.es
- ¹ T. Bodineau, B. Derrida, Phys. Rev. Lett. **92**, 180601 (2004).
- ² C. Giardinà, J. Kurchan, L. Peliti, Phys. Rev. Lett. 96, 120603 (2006).
- ³ V. Lecomte, J. Tailleur, J. Stat. Mech.: Th. & Exp. P03004 (2007).
- ⁴ T. Bodineau, B. Derrida, Phys. Rev. E **72**, 066110 (2005).
- ⁵ L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, Phys. Rev. Lett. **94**, 030601 (2005).

Hysteresis in planar liquid crystal cells illuminated by polarized light

<u>Adrian Jacobo¹</u>, Giampaolo D' Alessandro², Damià Gomila¹ and Pere Colet¹

¹Instituto de Física Intedisciplinar y Sistemas Complejos, IFISC[†] (CSIC-UIB) Campus Universitat de les Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain

²School of Mathematics, University of Southampton.

University Road, Southampton SO17 1BJ, United Kingdom.

Work by F. R. Mahamd Adikan et. Al. at the University of Southampton, demonstrated an electrically tunable first-order Bragg gratings via liquid-crystal index modification¹. With a maximum tunability of 141 GHz at 1562 nm and 114 GHz at 1561.8 nm for transverse magnetic (TM) and transverse electric (TE) polarized input light. Also two distinct threshold behaviors that manifest only during an increase of supply voltage where observed, giving hysteresis in the tuning curve.



Figura 1. Schematic set-up

To clarify the origin of the hysteresis and why the shift on both the TM and TE modes are the same a simpler cell has been considered. This cell is formed by two microscopic slides. The bottom one is covered with ITO. The electrodes are formed by scratching a $50\mu m$ wide channel in the ITO layer. Measurements of cross polarized intensity (input field at 45° to the direction of the applied electric field) show the formation of a line defect that disappears at approx 75V and reappears only when the voltage has been lowered to approximately 25V. This seems to suggest that the hysteresis in the frequency shift is associated to hysteresis in the appearance and disappearance of the line defect. However, it is not immediately obvious why the line defect should show hysteresis.

We integrate a standard Landau- de Gennes model 234

for the tensor order parameter of the liquid crystal:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \xi_0^2 \nabla Q + \vartheta_Q Q - 3\sqrt{6}Q^2 + 2Tr(Q^2)Q + \chi_a \nabla \phi \otimes \nabla \phi$$

Q is constructed from the average molecular orientation unit vector ${\bf n}$ as

$$Q_{ij} = \sqrt{2}S(n_i n_j - \frac{1}{2}\delta_{ij}) \Leftrightarrow Q = S \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$$

where $\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ is the traceless symmetric tensor product of \mathbf{n} with itself and S is a scalar order parameter that indicates the local phase of the liquid crystal; from a physical point of view $0 \leq S \leq 1$, with S = 0 and S = 1 in the fully isotropic or ordered phases respectively. With this notation we have that $S^2 = Tr(Q^2)$

We consider the orientation of the liquid crystal constrained in the (x,y)-plane. Hence we can use a 2 x 2 traceless symmetric tensor to represent the orientation of the liquid crystal. The scalar order parameter S is assumed to be constant and equal to 1, since in the experiment the crystal is in the nematic phase. Finally we assume that the anchoring energy of the crystal to the boundary is infinite. Steady state solutions can be obtained with arbitrary precision using a Newton method and its linear stability can be evaluated. Together with continuation methods this allows to follow these solutions in parameter space, therefore explore the possible instabilities or bifurcations in parameter space and determine the regime of parameters for which hysteresis exists. We also plan to explore the landscape of the liquid crystal energy as a function of the parameters to get a better insight of the origin of the hysteresis.

- [†] http://ifisc.uib.es
- ¹ F. R. Mahamd Adikan et. al. Optics Letters, 32, 1542 (2007)
- ² R. Barberi, et. al. Eur. Phys. J. E 13, 61-71 (2004).
- ³ A. Sonnet, A. Kilian and S. Hess. Phys. Rev. E 52 (1), 718-722 (1995).
- ⁴ H. Coles. Mol. Cryst. Liq. Cryst. Lett. 49, 67 (1978).

^{*} jacobo@ifisc.uib.es

Probabilidad de atasco de un medio granular al pasar a través de un orificio

A. Janda^{*}, I. Zuriguel, C. Mankoc, J.M. Pastor, A. Garcimartín y D. Maza

Grupo de Medios Granulares[‡]

Departamento de Física y Matemática Aplicada Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra 31080 Pamplona

El comportamiento de los medios granulares al pasar por un orificio presenta diferencias cualitativas con el caso de un líquido. Esto se debe a que existe la posibilidad de que se formen arcos que taponen la abertura, produciéndose un atasco. La probabilidad de que el orificio se atasque está relacionada con el tamaño de los granos y del orificio de salida. El parámetro relevante es $D = \frac{D_o}{d_p}$, donde D_o es el diámetro del orificio y d_p el diámetro de los granos.

En este trabajo presentamos un estudio experimental de la probabilidad de atasco en la descarga de un medio granular por gravedad desde un silo. Para ello, se han empleado dos sistemas experimentales: un silo cilíndrico tridimensional y un silo bidimensional. En ambos casos, se han medido los tamaños de avalancha (número de granos que caen entre dos atascos consecutivos) para diferentes valores de D.

En un trabajo previo se mostró que los histogramas de los tamaños de avalancha decaen exponencialmente a partir de su moda^{1,2}. Este comportamiento puede entenderse, asumiendo que las partículas pasan a través del orificio independientemente de sus vecinos con una probabilidad p. A partir de dicho modelo se deduce un expresión que predice la probabilidad de atasco antes de que N granos atraviesen el orificio³.



Figura 1. Probabilidad de atasco en función de D en un silo bidimensional. Los puntos corresponden a los datos experimentales. En línea continua se representan los valores obtenidos con la función deducida del modelo.

- * ajandaga@alumni.unav.es
- [‡] http://fisica.unav.es/granular/
- ¹ I. Zuriguel, L.A. Pugnaloni, A. Garcimartín and D. Maza, *Phys. Rev. E* 68 030301 (2003).
- ² I. Zuriguel, A. Garcimartín, D. Maza, L.A. Pugnaloni and J.M. Pastor, *Phys. Rev. E* **71** 051303 (2005)
- ³ A. Santos, Comunicación privada.

Estadística de atascos temporales en descarga de silos sometidos a vibraciones

C. P. Mankoc, <u>A. Janda</u>^{*}, E. Clément[†], A. Garcimartín y D. Maza

Grupo de Medios Granulares[‡]

Departamento de Física y Matemática Aplicada Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra 31080 Pamplona

La descarga de medios granulares a través de un orificio mediante la acción de la gravedad presenta diferencias cualitativas respecto a otro tipo de sustancias. En ella aparecen fenómenos de formación de atascos, estructuras estables que interrumpen el flujo de las partículas. Un silo sometido a vibraciones externas sufre perturbaciones que hacen que la estabilidad de tales estructuras se vea afectada; aún así se pueden forman atascos temporales que taponen el orificio.

En el presente trabajo se muestran los resultados experimentales obtenidos en dos configuraciones de silos diferentes: un silo de base plana sometido en conjunto a vibraciones y un silo con la base inclinada en el cual se vibra únicamente la base del mismo. Se ha medido la probabilidad de que se forme un atasco temporal de una duración determinada, variando las vibraciones a las que se somete el silo, en función de las dimensiones del orificio de salida. Se ha encontrado que la presencia de vibraciones desatasca la salida del orificio, teniendo como consecuentia que la probabilidad de que el silo se atasque permanentemente se reduce al incrementar la intensidad de las vibraciones a las que se somete el silo.

La distribución de probabilidades sigue una ley de potencias con dos comportamientos característicos. Dicha distribución tiene caracteristicas similares para ambos experimentos, como puede observarse en las figuras 1, obtenida con el silo de base plana, y 2, obtenida con el silo de base inclinada, para los valores de apertura del orificio e intensidades de vibración que se muestran.



Figura 1. Densidad de probabilidad de atascos temporales de duracion tjam en un silo de base plana con un diametro adimensional del orificio de 2,58 y una aceleración efectiva $\Gamma = 0,226$



Figura 2. Densidad de probabilidad de atascos temporales de duracion tjam en un silo de base plana con un diametro adimensional del orificio de 2,61 y aceleraciones efectivas $\Gamma = 0, 06, \Gamma = 0, 08 \text{ y} \Gamma = 0, 11$

^{*} ajandaga@alumni.unav.es

[†] PMMH, ESPCI, Paris, France

[‡] http://fisica.unav.es/granular/

Constructive Chaos in Excitable Networks with Tuneable Topologies

Samuel Johnson^{*}, Joaquín Marro, and Joaquín J. Torres Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional Universidad de Granada, 18071 Granada.

We study an excitable network with tuneable powerlaw wiring connectivity in which the connection weights vary rapidly with the system activity in a way that mimics resistance, fatigue or synaptic depression. The resulting dynamics has attractors, corresponding to patterns of activity, which are destabilised by the rapid fluctuations, and three main phases emerge: a "ferromagnetic" or memory phase, a phase of chaotic hopping among the patterns, and a phase of periodic pattern-antipattern switching¹. In a mean-field approach for a single pattern, the dynamics of the network is well approximated by a two-dimensional discrete map. In the case of a random scale-free graph, the exponent of the power-law degree distribution can be used as a control parameter. Analysis of the map then reveals that there is an optimal exponent, around 2, which minimises the amount of excitation (e.g., fatigue) needed to destabilise the memory patterns.



Figura 1. γ dependence for bifurcation diagrams for two different values of depression, $\Phi = 0.99$ and $\Phi = 0.2$, and $\langle k \rangle = 20$, N = 1600, T = 1/800. Very slight depression ($\Phi \leq 1$) is enough to destabilise the patterns around $\gamma \simeq 2$, whereas a stronger depression ($\Phi \rightarrow 0$) is required to take the chaotic region to topologies with steeper distributions – i.e. with a higher power-law exponent.

Our study shows that certain topologies are most convenient for storage and retrieval of memories, whereas others allow for a better performance in tasks requiring unstable behaviour, such as pattern recognition and class identification and categorisation. We go on to suggest a mechanism by which a network could switch from stable to unstable behaviour by means of only a slight rewiring. Our Monte Carlo simulations agree both qualitatively and quantitatively with the mean-field results.

Though possibly a general feature of excitable media with fatigue, we believe these results to be particularly relevant for neural networks, since recent evidence suggests the existence of chaotic brain activity² and the emergence of a scale-free functional topology – with an exponent close to 2 – during cognitive processes³.



Figura 2. Value of the depression factor Φ at which the behaviour of *m* becomes chaotic, Φ_{chaos} , for depression probabilities q = 1, 1/2 and 1/4, as obtained from the map (lines) compared to MC simulations for one pattern (squares) and two (circles). Bars represent standard deviation. (Data correspond to averages over 10 network realisations, with $\langle k \rangle = 20, N = 1600$, and T = 1/800.)

^{*} samuel@onsager.ugr.es

¹ Marro, J., Torres, J.J., and Cortés, J.M. [2007] "Networks with heterogeneously weighted connections and partial synchronization of nodes", *Comp. Phys. Comm.* **177** 180–183.

² Korn, H. and Faure, P. [2003] "Is there chaos in the brain? ii. experimental evidence and related models", C. R. Biol. **326** 787–840.

³ Eguíluz, V.M., Chialvo, D.R., Cecchi, G.A., Baliki, M., and Apkarian, A.V. [2005] "Scale-free brain functional networks", *Phys. Rev. Lett.* **95**.

Estado de Fourier de un gas granular diluido

<u>Nagi Khalil</u> * y J. Javier Brey[†]

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear Universidad de Sevilla 41080 Sevilla

Un gas granular diluido sometido a una diferencia de temperaturas alcanza, en ciertas circunstancias, un estado estacionario caracterizado por que el gradiente de temperaturas es estrictamente lineal, no existiendo campo de velocidades. Además, el flujo de calor es proporcional al gradiente de temperaturas (sin efectos viscoelásticos). La función de distribución solución de la ecuación de Boltzmann que describe dicho estado obedece una ley de escala. Utilizando dicha propiedad, se ha resuelto la ecuación de Boltzmann en la primera aproximación de Sonine. La solución se ha comparado con la que se obtiene mediante el desarrollo de Chapman-Enskog en el orden de Navier-Stokes. También se presentan comparaciones con resultados de simulación mediante dinámica molecular.

[†] brey@us.es

^{*} nagi@us.es

Diversity in Large and Coupled Systems

Niko Komin^{*}, Raúl Toral, Adrian Murza Edificio Mateu Orfila, Campus UIB Ctra. Valldemossa km. 7,5 07122 Palma de Mallorca

This work is dedicated to systems of coupled subsystems. It focuses on situations where the subsystems are not completely identical but have diversity in one of their parameters. An order "parameter expansion developed" in¹²³⁴ is followed and applied to a set of systems such as coupled active rotators, neurons forming circadian clocks⁵ or cells in the intestinal wall transporting chemicals. This approach reduces N coupled systems of d dimensions (Nd equations) to $\frac{(d+1)^2+3d-1}{2}$ equations, d of them accounting for the dynamics of the mean values. This high reduction of dimension leads to few equations, which might be very nonlinear, but due to their number they are still easily integrated (numerically).

For the investigated systems we will compare the results of the approximation with the simulation of the full system and theoretical results and determine the merits and the limits of the simplification. As an example, figure (1) shows the Kuramoto order parameter for coupled active rotators. Coincidence is good for small diversity values, for larger diversity only the overall behaviour is conserved.

Another goal is to find similiar approximations which might explain the system with big paramter deviations not only qualitatively but as well quantitatively, such that the moment of desynchronization can be determined equally well as the point where synchronization starts.



Figura 1. 1000 active rotators (Kuramoto) compared with "order paramter expansion". Shown is the Kuramoto order parameter ρ over the frequencies' deviation σ from the mean value $\langle \omega \rangle$.

- 1 S. D. Monte, F. D'Ovidio, Europhys. Lett. ${\bf 50},\,21$ (2002).
- ² S. D. Monte, F. D'Ovidio, E. Mosekilde, Phys. Rev. Lett. 90, 054102 (2003).
- ³ S. D. Monte, F. D'Ovidio, H. Chaté, E. Mosekilde, Phys. Rev. Lett. **92**, 254101 (2003)
- ⁴ S. D. Monte, F. D'Ovidio, H. Chaté, E. Mosekilde, Physica D **205**, 25 (2005)
- ⁵ D. Gonze, S. Bernard, C. Waltermann, A. Kramer, H. Herzel, Biophys. J. **89**, 120-129, (2005)

^{*} niko@ifisc.uib.es

Statistical Mechanics of Written Texts

Elka Korutcheva and K.Koroutchev Departamento de Física Fundamental Universidad Nacional de Educación a Distancia 28080 Madrid and Escuela Politécnica Superior, Universidad Autónoma de Madrid, Canto Blanco,

28049 Madrid

The model we investigate consists of a text T and a vocabulary V, written in one and the same language. The vocabulary is formed using all the words of some huge collection of texts, written in that language.

We consider the vocabulary with length L_v as a solid state basement, composed by "molecules", which are actually the parts of the text (the words of the language). The text itself, which has a length L_t is considered as a liquid solution of "molecules", derived in the same manner as the vocabulary. The text and the vocabulary "react" and there exists some energy gain when the reaction takes place, so some "molecules" are settled down on the solid base. The "molecules" (words) of the text w are matched with the "molecules" of the vocabulary and the corresponding number of occurrences of these "molecules" are $n_t(w)$ for the text and $n_v(w)$ for the vocabulary.

We have checked the hypothesis for the gamma distribution of the probability P(m) of the state with mdeposited molecules (words) on a set of about 19000 English texts given by the Gutenberg collection and have found an excellent agreement with the experimental data. This distribution we regard as a potential energy of the word w in the language. A typical energy curve is given in Fig.1. The linear member accounts for the excess of words of a given type in the text, while the logarithmic one corresponds to the entropic part of the energy¹.

By finding the corresponding partition function for a given word w,

$$Z(w,\beta) = \sum_{m=1}^{N_t} \exp(-\beta E_{tot}(m, N_t)), \qquad (1)$$

where

$$E_{tot}(m, N_t) = -\frac{1}{\beta} \log \binom{N_t}{m} + N_v b \left[1 - \frac{m}{N_v} + \log \left(\frac{m}{N_v} \right) \right]$$
(2)

is the total energy corresponding to a given word w, we are able to find all the thermodynamic parameters that describe the system. We have shown that the specific heat C_V has different behavior for different kind of words.



Figura 1. Potential energy of a word according to the number of words.

We have applied the above method to different corpora of texts and we have found one and the same universal behavior, which does not depend on the particular text. Our numerical results show that the "specific heat" effectively separates the closed class words from the specific terms and the common words used in the text.

¹ Y. Peng, and M. Goldberger, Chaos, **17** (2007) v015115.

Un mapeo entre series temporales y redes comlejas: el grafo de visibilidad

Lucas Lacasa^{*}, Bartolo Luque, Fernando Ballesteros, Jordi Luque y Juan Carlos Nuño

Departamento de Matemática Aplicada

ETSI Aeronáuticos, Universidad Politécnica de Madrid

En esta contribución presentamos una nueva herramienta de análisis de series temporales. Se trata de una familia de algoritmos que convierten de forma unívoca una serie temporal en un grafo o red. Por construcción, la red extraída por estos métodos hereda o captura propiedades estructurales de la serie de partida. Así, por ejemplo, si la serie temporal es periódica, el grafo asociado es regular; si la serie es aleatoria, la red asociada presenta una distribución de conectividades exponencial; o si la serie es fractal, la red correspondiente es libre de escala. Medidas sobre del grafo asociado, como la distribución de conectividades, la distancia media entre nodos y su scaling con el número de nodos/datos, el clustering, las correlaciones de grado-grado o el espectro de su matriz de adyaciencia, algunas desarrolladas recientemente en la teoría de redes complejas, permiten caracterizar de forma no trivial la serie temporal. Pretendemos implementar estos métodos como una nueva herramienta de análisis series temporales y aplicarlos a la mayor variedad de ejemplos artificiales y naturales posibles. Pensamos que su eficiencia computacional puede ser superior en ciertos casos a otros métodos clásicos, y que existen diversas aplicaciones del algoritmo entre los que se encuentran: (i) una nueva herramienta para la estimación de exponentes de Hurst en series fractales y (ii) un localizador espacial de bifurcaciones inversas en sistemas dinámicos caóticos.

Figura 1. Ejemplo del algoritmo de visibilidad, por el cual una serie se transforma en un grafo. Cada dato de la serie se asocia con un nodo, y dos nodos se conectan mediante un link si en la serie, esos datos se pueden 'ver', es decir si existe una linea recta que los una tal que esa recta no corte a ningun dato intermedio.



Figura 2. Dos series temporales fractales (movimiento browniano (arriba), y serie de Conway (abajo), y asociado a su respectivo grafo de visibilidad, distribuciones de conectividad (libres de escala en ambos casos) y camino medio de la red (el movimiento browniano evidencia effecto Small-World mientras que la serie de Conway tiene un grafo fractal).

^{*} lucas@dmae.upm.es

¹ L Lacasa, B Luque, F Ballesteros, J Luque & JC Nuño, in revision.
Ordenadores termodinámicamente complejos y programación matemática

Luis Lafuente^{*} y Neil Gershenfeld The Center for Bits and Atoms Massachusetts Institute of Technology 20 Ames Street, Cambridge 02139 MA, USA

El uso de componentes cada vez más pequeños en sistemas de computación cada vez más grandes alcanzará un límite en el que el número de grados de libertad que contienen información sea comparable con el de los grados de libertad físicos del sistema. En este límite, si queremos crear este tipo de sistemas, debemos conseguir construir una estructura coherente que unifique los conceptos de la Informática con los de la Física.

Para alcanzar este objetivo será necesario revisar hipótesis históricas sobre la naturaleza del microcódigo (introduciendo grados de libertad físicos en la representación de un programa), de los lenguajes de alto nivel (poniendo en correspondencia objetivos globales con dinámicas locales), y de los sistemas operativos (codificando la construcción de un programa).

Un ordenador concebido de tal modo escalaría con la física subyacente porque es en ella sobre la que está construido. En el último límite, proporcionaría arquitecturas de computación continuas.

Este trabajo se centra específicamente en la parte relacionada con el lenguaje de alto nivel y el problema de la compilación en este tipo de arquitecturas.

Supongamos que hemos resuelto el problema del microcódigo. Aunque no sepamos exactamente cuál es la solución, de manera general podemos pensar que consiste en un microcódigo celular,¹ donde cada "célula" puede contener un bit de estado que representa el resultado de una operación lógica entre los estados de las células vecinas (red Booleana). Bajo esta hipotésis, todo programa vendría definido, en este microcódigo celular, por una serie de reglas locales y una configuración inicial. En la figura III podemos ver la implementación en un microcódigo de este tipo de un algoritmo "bubble sort".²

Para resolver el problema de compilar un programa en una arquitectura de esa naturaleza, debemos ser capaces de traducir descripciones globales del problema en dinámicas locales equivalentes. La Física está llena de estas equivalencias: el principio de Fermat del camino óptico mínimo y las leyes de Snell, el principio de mínima acción y la mecánica de Newton, el teorema H de Boltzmann y la teoría cinética de los gases, las integrales de camino de Feynmann y la ecuación de Schrödinger, etc. Basados en estas equivalencias, nuestra propuesta consiste en obtener las reglas locales que representan el programa a nivel del microcódigo como soluciones distribuidas de un problema de optimización global con ligaduras.

Por tanto, la programación matemática (en el sentido de la teoría de optimización) constituiría nuestro lenguaje de programación de alto nivel. El proceso de compilación consistiría en usar las técnicas de descomposición de un problema de optimización con ligaduras³ para resolver el programa matemático.⁴ Dicho proceso consistiría en tres pasos: (1) formulación del problema de optimización, (2) preprocesado de la formulación para asegurar que la estructura de la arquitectura está implícita en el programa matemático, y (3) aplicación de la teoría de descoposición para obtener las dinámicas locales.

Como primer paso para desarrollar la teoría de compilación necesaria, hemos estudiado el problema de ordenar una lista de números dados. El objetivo es formularlo como un problema de optimización apropiado y a partir de ahí obtener unas reglas locales como, por ejemplo, las que se ilustran en la figura III.



Figura 1. Ejemplo de un "bubble sort" implementado en microcódigo celular.

* luis.lafuente@cba.mit.edu

- ¹ Estos modelos están siendo analizados por D. Dalrymple en su tesis de máster en el M.I.T.
- ² D. E. Knuth (1998). The Art of Computer Programming: Volume 3. Reading, MA: Addison-Wesley.
- ³ D.P. Bertsekas (1999). Nonlinear Programming. Belmont, MA: Athena Scientific.
- ⁴ La teoría de descomposición ya se ha aplicado con éxito para describir de manera unificada y coherente las distintas capas de transporte en las arquitecturas de redes.[M. Chiang, S. H. Low, A. R Calderbank y J. C. Doyle (2007). Proc. IEEE **95** (1), 255-312.]

Dynamics of 3D Thin Films: from hydrophilic to super-hydrophobic substrates

R. Ledesma-Aguilar*, I. Pagonabarraga, and A. Hernández-Machado

Departament de Estructura i Constituents de la Matèria

Universitat de Barcelona, Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona

Contact line dynamics are essential to many interesting dynamic wetting problems^{1,2}, that range from the surprising climbing of partially wetting drops in inclined vibrating substrates³ to linear or spin coating of surfaces^{4,5}, mono-disperse drop formation⁶ and in-drop mixing in micro-channels^{7,8}. An exciting and relatively unexplored field is that of fluid flow in super-hydrophobic substrates, where the equilibrium contact angle exceeds 120°.

Here we study the motion of three-dimensional thin films spreading in dry inclined substrates under the action of gravity. Using lattice-Boltzmann simulations, we study the stability of the free surface in different substrates, depending on their wettability. Wetting properties in our simulations are introduced via a surface free energy, which allows us to consider substrates that range from hydrophilic to super-hydrophobic. We find that the stability of the free surface is strongly affected by the substrate wettability. * rodrigo@ecm.ub.es

- ¹ P.-G. de Gennes, F. Brochard-Wyart, and D. Quéré, *Capillarity and Wetting Phenomena: Drops, Bubbles, Pearls and Waves*, Springer-Verlag, 2003
- ² P. de Gennes, Wetting: statics and dynamics, Rev. Mod. Phys. 57, 827 (1985).
- ³ P. Brunet, J. Eggers, and R.D. Deegan, Vibration induced climbing drops, Phys. Rev. Lett. **99**, 144501 (2007).
- ⁴ F. Melo, J.F. Joanny, and S. Fauve, Fingering instability of spinning drops, Phys. Rev. Lett. **63**, 1958 (1989).
- ⁵ J.R. de Bruyn, Growth of fingers at a driven three-phase contact line, Phys. Rev. A **46**, R4500 (1992).
- ⁶ O. Kuksenok, D. Jasnow, J. Yeomans, and C. Balazs, Periodic droplet formation in chemically patterned microchannels, Phys. Rev. Lett. **91**, 108303 (2003).
- ⁷ H. Song, J. Tice, and F. Ismagilov, A microfluidic system for controlling reaction networks in time, Angew. Chem. Int. Ed. **42**, 767 (2003).
- ⁸ K. Hosokawa, T. Fujii, and I. Endo, Handling of picoliter liquid samples in a poly(dimethylsiloxilane)-based microfluidic device, Anal. Chem. **71**, 4781 (1999).

Controlling surface coverage in patterned substrates

R. Ledesma-Aguilar*, A. Hernández-Machado, and I. Pagonabarraga Departament de Estructura i Constituents de la Matèria Universitat de Barcelona, Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona

We study the dynamics of fluid thin films that spread in chemically patterned substrates under the action of gravity. It is well known that for homogeneous substrates, the front is unstable for sufficiently large driving velocities^{1,2}. For hydrophobic substrates, the instability leads to the growth of fingers and consequently to poor surface coverage. This contrasts with the case of hydrophilic substrates, in which the instability leads to the growth of protrusions that saturate to a given length, a situation that does not generate dry regions. Heterogeneos surface wettability then appears as a potential way of controlling the instability and ultimately surface coverage.

By means of a 3D lattice-Boltzmann algorithm, we study the flow of thin films in cases in which substrate heterogeneity is highly asymmetrical, meaning that some portions of the substrate are hydrophilic (with a vanishing equilibrium contact angle) while some others are super-hydrophobic (where the equilibrium contact angle is beyond 120°).

We find that a rich phenomenology for the motion of the contact line arises for different wetting patterns. For situations in which the size of the hydrophobic domain allows for the destabilization of the contact line, we find that the patterned substrate can effectively suppress the instability.



Figura 1. Contact line evolution for a thin film spreading in a hydrophobic substrate with hydrophilic patches. Interface calculated from lattice-Boltzmann simulation.

- ¹ F. Melo, J.F. Joanny, and S. Fauve, Fingering instability of spinning drops, Phys. Rev. Lett. **63**, 1958 (1989).
- ² J.R. de Bruyn, Growth of fingers at a driven three-phase contact line, Phys. Rev. A 46, R4500 (1992).

^{*} rodrigo@ecm.ub.es

Cooperativity and hydrodynamic interactions in externally driven semiflexible filaments

Isaac Llopis*, Ignacio Pagonabarraga

Departament de Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de Barcelona, Barcelona, Spain.

Marco Cosentino Lagomarsino

Gruppo Teorico, Università degli Studi di Milano, Milano, Italy.

Christopher P. Lowe

Van't Hoff Institute for Molecular Science, University of Amsterdam, Amsterdam, The Netherlands.

We describe a simple simulation method that describes the hydrodynamics of semiflexible filaments immersed in a low Reynolds number fluid and analyze how multiple body cooperativity emerges due to the presence of hydrodynamic interactions (HI). We study the sedimentation of ensembles of filaments under an external force and also consider the propulsion of filaments subject to simple periodic driving. In both cases the dynamics shows qualitative differences due to the presence of HI¹.

- 1. For sedimentation, the effects of the HI include cooperative velocity and instabilities that can be understood from the interplay of deformations due to flexibility and hydrodynamic forces. We concentrate in the case of a pair of inextensible semiflexible filaments under a uniform constant force at low Reynolds numbers. We have analyzed the different regimes and the morphology of such polymers in simple geometries², which allow us to highlight the peculiarities of the interplay between elastic and hydrodynamic stresses. Cooperative and symmetry breaking effects associated to the geometry of the fibers gives rise to characteristic motion which give them distinct properties from rigid and elastic filaments.
- 2. We examine the problem of cooperativity induced by HI in the swimming of multiple flagellated ob-

jects, such as sperm cells. We concentrate on the two case studies of model semi-flexible inextensible filaments driven by an external oscillatory force and by an internal, force and torque-free mechanism, what we call swimmers. The velocity gain for swimming cooperatively depends both on the geometry and on the driving; as a result, a variety of situations are possible, and only in some of them swimming together becomes advantageous. Moreover, there is positive and negative cooperation depending on distance, frequency of drive, and flexibility. We find that in all geometries and drives, the hydrodynamics determine a directional instability such that filaments that profit from swimming together are driven apart from each other. Biologically, this implies that flagella need to synchronize in order to profit from swimming together³.

- ² I.Llopis, I.Pagonabarraga, M. Cosentino Lagomarsino and C.P. Lowe, Phys. Rev. E 76, 061901 (2007).
- ³ I.Llopis, I.Pagonabarraga, M. Cosentino Lagomarsino and C.P. Lowe, *in* preparation.
- * isaacll@ffn.ub.es

¹ I. Llopis, I. Pagonabarraga and M. Cosentino Lagomarsino, submitted to Comp. Phys. Comm.

Phase behavior of a family of continuous two-dimensional *n*-vector models with n = 2, 3, and 4

E. Lomba^{*}, N.G. Almarza and C. Martín *IQFR-CSIC*, *Calle Serrano 119*, *E-28006 Madrid*

The presence of an unusual order disorder transition in the two dimensional XY model has been known since the pioneering works of Berezinskii¹ and Kosterlitz and Thouless². More generally, it has been found that similar transitions appear in lattice models of particular relevance in field theory and elementary-particle physics, such as the bidimensional RP^{n-1} (real projective space in *n*-dimensions).

In this work we investigate the phase behavior of a family of continuous bidimensional *n*-vector models (with n = 2, 3, and 4) using Monte Carlo simulation, in which the explicit interaction is given by a hard sphere potential of diameter σ with embedded *n*-dimensional spins, i.e.

$$u(r_{ij},\omega_i,\omega_j) = u_{HS}(r_{ij}) + u_{ang}(r_{ij},\omega_i,\omega_j), \qquad (1)$$

where $u_{HS}(r)$ is a hard sphere interaction, and the angular interaction is described by

$$u_{ang}(r,\omega_i,\omega_j) = -Ku_0(r)\frac{1}{n-1}[(\hat{s}_i \cdot \hat{s}_j)^2 n - 1] \quad (2)$$

with $\hat{s}_i = (s_{i_1}, s_{i_2}, \ldots, s_{i_n})$ being a *n*-dimensional unit vector describing the orientation of the spin in particle *i*. In Eq. (2) the spin coupling is defined by

$$u_0(r) = \frac{e^{-\kappa(r-\sigma)}}{r/\sigma} - \frac{e^{-\kappa(R-\sigma)}}{R/\sigma}, \text{ for } \sigma < r < R, \qquad (3)$$

$$= 0, \text{ for } r > R.$$
(4)

Here we have used both cluster algorithms in the line of Swendsen and Wang method³ with the aim of studying the orrder-disorder transition. First order phase changes (vapour-liquid equilibrium) has been studied using an algoritm based on Wang-Landau's method⁴. In all cases we detect the presence of a defect mediated orderdisorder transition of the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless type with critical temperatures that decrease with the spin dimensionality. Coupled with the order-disorder transition a gas-liquid equilibrium is found at low temperatures. Here one observes that the stability region of the liquid phase shrinks with the growing spin dimensionality, in parallel with a decrease in magnitude of the angular averaged spin-spin interaction.



Figura 1. Simulation results for the phase diagram of the planar RP^{n-1} spin fluid for n = 2, 3, and 4. Symbols joined with dotted lines correspond to the states at which the BKT transition takes place and the line separates orientationally disordered states (lower densities) from states with quasi-long range order (higher density, quasi nematic states).

- ¹ V. Berezinskii, Sov. Phys.-JETP, **32**, 493 (1971)
- ² J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys., 5, L124 (1972).
- ³ R. H. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. 58, 86 (1987).
- ⁴ F.Wang and D. P.Landau, Phys. Rev. Lett., **86**, 2050 (2001)

^{*} E.Lomba@iqfr.csic.es

Tendencia al equilibrio bajo la óptica de una medida estadística de complejidad

Xavier Calbet[‡] and <u>Ricardo López-Ruiz</u>^{†*} [‡]Instituto de Astrofísica de Canarias & BIFI Vía Láctea, s/n 38200 La Laguna, Tenerife [†]DIIS & BIFI, Facultad de Ciencias Universidad de Zaragoza 50009 Zaragoza

Diferentes sistemas estadísticos fuera del equilibrio se dejan relajar hacia su estado asintótico estable. En concreto, gases de partículas que termalizan hacia el equilibrio vía choques elásticos entre ellas.

Desde la óptica de una medida estadística¹ de complejidad se analiza cómo se realiza esta transición. A la vista de los resultados, términos como camino de máxima complejidad² y transición al equilibrio por doble gaussiana³ se introducen en la nomenclatura ya existente.

Como ejemplo, véase en la figura adjunta cómo luce esa transición en el espacio de distribuciones de energías de la colectividad en función del tiempo. Las dos rectas que aparecen en el plot semilogarítmico evidencian la presencia de las dos gaussianas en el decaimiento hacia el equilibrio.

- ¹ R. Lopez-Ruiz, H. Mancini, and X. Calbet, Phys. Lett. A **209**, 321 (1995).
- ² X. Calbet and R. Lopez-Ruiz, Phys. Rev. E **63**, 066116 (2001).
- ³ X. Calbet and R. Lopez-Ruiz, Physica A **382**, 523 (2007).



Figura 1. Relajación al equilibrio vía doble gaussiana.

 $^{^{*}}$ rilopez@unizar.es, xcalbet@googlemail.com

Physical principles in the structure of prolate viruses

Antoni Luque^{*} and David Reguera Departament de Física Fonamental Universitat de Barcelona C/ Martí i Franqués, 1, 08028 Barcelona

Viruses are non-living particles which in their simplest form are constituted by an infective genetic material (DNA/RNA) and its protective protein shell (or *capsid*), which is built in a self-assembly process from several copies of the same protein. Viruses can infect a wide variety of organisms -from bacteria to mammals- causing many diseases, which have a huge medical and economical impact. In addition, due to their well-defined size (in the nanometer range), highly symmetrical structure and their ability to self-assemble spontaneously, the interest in viruses has spread also in nanoscience, where several technological and biomedical applications are envisioned.

From the first structural determination of a viral capsid by X-ray analysis back in 1935 to the present days, many different and beautifully symmetrical viral structures have been elucidated, but the physical principles governing their architectures have not yet been fully revealed. About half of the viral species posses a roughly spherical capsid with icosahedral symmetry, characterized by a triangulation number T. However, many other viruses, including various bacteriophages and several plant viruses adopt a *bacilliform* or prolate shape, whose precise geometry is not so well understood. In particular, their non-isometric shape and the lack of well-justified theoretical models constitute handicaps for the current experimental techniques used in the structural characterization of these viruses.

Previously, we have presented a model that successfully explained the origin of icosahedral symmetry for spherical viruses¹. Here, we extend this model to describe the physical principles underlying the structure of spherocylindrical -or prolate- viruses. The model captures the basic ingredients of the capsomer-capsomer interaction, namely a short-range repulsion to prevent overlapping, and a long-range attraction that drives the self-assembly, and is able to reproduce the equilibrium structures observed both in real prolate viruses as well as in some $in\ vitro$ experiments. T-number icosahedral caps with hexagonally-ordered cylindrical bodies are shown to be local free energy minima (see figure), thus justifying their occurrence as optimal virus structures. Moreover, we find a set of "magic numbers-selection rules- for the number of capsomers that can be present in the cylindrical body, that confirms the geometrical classification put forward

by $Moody^2$. Finally, we also find other non-icosahedral capped structures that can compete energetically with the T-number capped ones and that resemble the aberrant structures observed in some viruses reconstituted *in vitro*.



Figura 1. 3D reconstruction of a $\phi 29$ virus obtained by cryo-EM³. It is a prolate virus with a cylindrical Q = 5body closed by two *spherical* caps having T = 3 icosahedral symmetry, according to Moody's classification². On the right there is the side view of the structure corresponding to the free energy minima obtained in our model for N = 42capsomers, which has the same T=3, Q=5 symmetry as the experimental result.

The understanding of the physical principles governing the architecture of these prolate viral capsids might open up new routes to prevent the correct replication of a virus and might pave the way towards the control and tunability of their structure, required for their use in nanotechnological applications.

¹ R. Zandi, D. Reguera, R. F. Bruinsma, W. M. Gelbart, J. Rudnick, *Origin of icosahedral symmetry in viruses*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **101**: 15556 (2004).

^{*} luque@ffn.ub.es

² M. F. Moody, Geometry of phage head construction, J. Mol. Biol. 293: 401 (1999).

³ Y. Tao, N.H. Olson, W. Xu, D.L. Anderson, M.G. Rossmann, T.S. Baker, Assembly of a tailed bacterial virus and its genome release studied in three dimensions., Cell 95: 431 (1998).

Phase transition in a stochastic prime number generator

Bartolo Luque^{*}, Lucas Lacasa and Octavio Miramontes Departamento de Matemática Aplicada ETSI Aeronúticos, Universidad Politécnica de Madrid

Prime numbers are mostly found using the classical sieve of Eratosthenes and its recent improvements . Additionally, several methods able to generate probable primes have been put forward . In this contribution we study an algorithm somewhat different from those mentioned above, based on an artificial chemistry model that generates primes by means of a stochastic integer decomposition.

Suppose a pool of positive integers $\{2, 3, ..., M\}$, from which N numbers are randomly extracted. Notice that the number 1 is ignored and that repetitions are allowed. Given two integers a and b (taken from the set of N numbers), the reaction rules of the algorithm are:

- Rule 1: If a = b then no reaction takes place, and the numbers are not modified.
- Rule 2: If the numbers are different, say a > b, a reaction will take place only if b is a divisor of a, i.e. if there exists an integer c = a/b. Then a is eliminated from the set and substituted by c.
- Rule 3: On the other hand, if a is not divisible by b, then no reaction takes place.

The stochastic algorithm goes as follows: after choosing N numbers from the pool $\{2, 3, ..., M\}$ two numbers $a, b \in N$ are picked at random; then the reaction rules are applied to them. We consider N repetitions of this process as one time step in order to have a parallel updating. Notice that the positive reactions tend to decompose numbers, thereby this process when iterated may generate primes. We say that the system has reached the steady state when no more reactions are achieved, either because every number has become a prime or because rule 2 cannot be satisfied anymore: the algorithm then stops.

We will firstly present the phase transition that the system seems to exhibit, between a regime with low prime density and a regime where every number ends as a prime. In a second part we will try to interpret this phase transition in terms of a dynamical process embedded in a directed catalytic network, introducing subsequently a proper order parameter. Some analytical arguments in terms of an annealed approximation will then be outlined in a third part. Finally, some links with computational complexity theory will be addressed.

^{*} bartolo@dmae.upm.es

¹ Phase transition in a stochastic prime number generator, B. Luque, L.Lacasa and O. Miramontes *Physical Review E* **76**, 010103 (R) (2007)

² Phase transition and computational complexity in a stochastic prime number generator, L.Lacasa, B. Luque and O. Miramontes - Submitted to *New Journal of Physics*

Structure and stability of decomposing films of binary mixtures with free evolving surfaces

Santiago Madruga^{1,2} and Uwe Thiele³

 ¹ ETSI Aeronáuticos, Universidad Politécnica de Madrid Plaza Cardenal Cisneros 3, 28040 Madrid
 ² Max Planck Institut für Physik komplexer Systeme Nöthnitzer Str. 38, 01187 Dresden, Germany
 ³ School of Mathematics, Loughborough University, Loughborough, Leicestershire, LE11 3TU, UK

Thin polymer films are often used in advanced technological applications either as homogeneous coatings or as structured functional layers. Their stability and potential use is mostly determined by the wettability properties of the substrate and is well understood for single component liquids. However, in many relevant applications the film consists of a binary mixture such as a polymer blend. For such systems the dynamics of the decomposition within the film and of the dewetting of the film itself may couple. This allows for new pathways of structuring like decomposition induced dewetting¹.

We propose a model for films of binary mixtures with free surfaces that allow to study the coupling between profile evolution and decomposition. The model is based on model-H² describing the coupled transport of concentration (convective Cahn-Hilliard equation) and momentum (Navier-Stokes-Korteweg equations) fields supplemented by boundary conditions at the substrate and the free surface.

After determining homogeneous and vertically stratified base states we analyse their lateral stability and show that depending on the energetical bias at the surface and the mean concentration the convective transport (i) promotes the instability and (ii) induces surface deflections for the stratified base states³. In addition, we derive the longwave limit of our generalized model-H and show the structuring of droplets of binary mixtures on solid substrates.

We acknowledge support by the EU under grant MRTN-CT-2004-005728.

^{*} smadruga@gmail.com

¹ R. Yerushalmi-Rozen, T. Kerle, and J. Klein. *Science*. **285**, 1254–1256 (1999).

² D.M. Anderson, G.B. McFadden, and A.A. Wheeler. Ann. Rev. Fluid Mech. **30**, 139-165 (1998).

³ U. Thiele, S. Madruga, and L. Frastia. *Phys.of Fluids*. In press. http://arxiv.org/abs/0707.3374

Duplication of a self-repressed gene: an evolutive approach to loss of cross-links

Paolo Malgaretti^{*†} Fabrizio Capuani[‡] Marco Cosentino-Lagomarsino[†]

Dipartimento di Fisica

Universitá degli studi di Milano

20133 Milano

Study of genetic network is a field of current research interest owing to its importance in understanding the phenomenon of cell regulation. In this contest we focus on Escherichia Coli. Escherichia Coli has been studied experimentally fairly well and a lot of data pertaining to the information of its genetic network is available. Recent studies have shown interesting aspects of this network. The 76% of the genes of E. Coli transcriptional regulation network are self-repressed genes¹, and the 70%of the self-repressed genes are obtained by $duplication^2$. Moreover M.Cosentino-Lagomarsino et al.³ have shown that E.Coli transcriptional regulation network is essentially feedforward with no cross-links between duplicated self-repressed genes. This aspect is peculiar since we expect to find cross-links between duplicated self-repressed genes (see figure).

The aim of this work is study the loss of cross-links in a network composed of duplicated self-repressed genes. In particular we want to investigate if networks with no cross-links have some particular functionality for which they are positively selected by evolution.

The link between networks and functionality is the temporal behavior of the concentration of the proteins involved in the networks⁴. We model networks as a well stirred reactor with high copy number for each kind of reactant. In this way we can model networks by a set of ordinary differential equations whose variables are the concentrations of the reactants. The evolutionary pressure is modeled by a cost function⁵ (CF). The CF is defined like: $\int_0^T (A(t) - F(t))^2 dt$ where A(t) and F(t) are, respectively, the concentration of protein A and the value of the superimposed functionality at the time t.

We have used two different methods. In the first method we calculate the CF's landscape. Minima of the CF are the networks, composed by duplicated self-repressed genes, that are best suited to perform the superimposed functionality. In the second method we have realized, tested and used an evolutionary algorithm based on P.Francois and V.Hakim⁵ to explore the space of net-

works.

Both methods find the same minima in all the CFs that we have used. Depending on the CF we find that the networks that are best suited to perform the superimposed functionality are the networks without cross-links. In one particular case in which the CF present a continuous variety of minima the methods give different information. While landscape give only information about the variety, simulation with the evolutive algorithm give information about the probability to reach each minimum.



Figura 1. Left figure: self-repressed gene network. Right figure: duplicated self-repressed gene network.

* paolo.malgaretti@unimi.it

- [†] Universitá degli studi di Milano
- [‡] IFOM, Firc Institute of Molecular Oncology, Milano
- ¹ D. Tieffry, A.M. Huerta, E. Perez-Rueda and J. Collado-Vides (1998) BioEssays 20 433-440
- ² S.A. Teichmann and M.M. Babu, Gene regulatory network groth by duplication, Nat. Gen. (2004) 36 492-496
- ³ M. Cosentino Lagomarsino, P. Iona, B. Bassetti and H. Isambert, Hierarchy and feedback in the evolution of E.coli transcriptional network, PNAS (2007) 104, 5516,5520
- ⁴ J.J.Tyson, K. C. Chen and B. Novak, Sniffers, buzzers, toggles and blinkers: dynamics of regulatory and signaling patways network in the cell, Current Opinion in Cell Biol. (2003), 15 221-223
- ⁵ P.Francois and V.Hakim, Design of genetic networks with specified functions by evolution in silico, PNAS (2004)101, 580,585

Estudio por simulación del diagrama de fases del modelo de solapamiento gaussiano

R. Marguta^{1*}, E. Martín del Río² y E. de Miguel¹

(1) Dto. de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva, 21071 Huelva
(2) Dto. de Ingeniería Eléctrica y Térmica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Huelva, 21819 Huelva

El modelo de solapamiento gaussiano repulsivo $(\text{HGO})^{1,2}$ constituye una base adecuada para el estudio de cristales líquidos nemáticos. Aunque se han estudiado detalladamente las fases isótropa (I) y nemática (N) de dicho modelo, poco se sabe de las fases sólidas. En este trabajo completamos el diagrama de fases del modelo HGO incluyendo las fases sólidas además de las fases fluidas.

Este análisis implica la utilización de diversas técnicas de simulación para el cálculo de energías libres: integración termodinámica [utilizando como estados de referencia el gas ideal (fases fluidas) o el cristal de Einstein (fases cristalinas)], integración paramétrica e integración Gibbs-Duhem. Solo se consideran moleculas prolatas. Para valores pequeños de la elongación molecular, κ , se tiene la secuencia isótropo-plástico-cristal cuando se comprime el sistema. A medida que aumenta κ desaparece la fase plástica (P) y finalmente aparece la fase nemática entre el fluido isótropo y el cristal (Cr). Los dos puntos triples presentes en el diagrama de fases $(I - P - Cr \in I - N - Cr)$ son determinados con exactitud.

^{*} ramona.georgeta@uhu.es

¹ E.de Miguel y E. Martín del Río, J. Chem. Phys., **115**, 9072 (2001)

² E.de Miguel y E. Martín del Río, J. Chem. Phys., **118**, 1852 (2003)

Diagrama de fases de un cristal líquido esméctico

<u>E. Martín del Río¹</u> y E. de Miguel²

(1) Dto. de Ingeniería Eléctrica y Térmica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Huelva, 21819 Huelva
 (2) Dto. de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva, 21071 Huelva

Presentamos un estudio del diagrama de fases de un modelo de cristal líquido basado en una teoría del funcional de la densidad. Las interacciones moleculares consiten en una contribución repulsiva anisótropa (descrita por el modelo de solapamiento gaussiano) y un término atractivo isótropo (modelo de pozo cuadrado). Este modelo ha sido estudiado previamente para el caso de moléculas paralelas^{1,2}.

En el funcional de la energía libre la contribución repulsiva se tiene en cuenta usando una descripción no local mientras que la interacción atractiva se incorpora usando una aproximación de campo medio.

Para ciertos valores de los paraámetros moleculares

el modelo exhibe fases isótropa, nemática y esméctica. La estabilización de la fase esméctica se debe a la interacción atractiva ya que el modelo puramente repulsivo no presenta fase esméctica. Analizamos el papel de los parámetros del potencial en el diagrama de fases y en la aparición de una fase nemática reentrante.

* elvira@uhu.es

- ¹ E. Martín del Río y E. de Miguel, Phy. Rev. E, **72**, 051707 (2005)
- ² E. de Miguel y E. Martín del Río, Phys. Rev. Lett., **95**, 217802 (2005)

Determinación de propiedades derivadas segundas de alcanos de cadena larga mediante Monte Carlo NPT

M. M. Piñeiro,*, G. S. de Ferron[†], J. M. Míguez, D. Bessières[†], F. Plantier[†], J. L. Legido

Departamento de Física Aplicada

Universidade de Vigo

36310 Vigo

En un trabajo reciente, Lagache et al¹ demostraron la idoneidad de la combinación de la simulación molecular (Monte Carlo en el conjunto NPT) con la teoría estadística de fluctuaciones para calcular las propiedades derivadas segundas de la energía de Gibbs para moléculas lineales (cadenas). Este método demostró ser eficaz en al cálculo del coeficiente de expansión térmica, compresibilidad isoterma, capacidad calorífica residual isóbara e isócora, velocidad del sonido y coeficiente de Joule Thompson. En el trabajo original se aplicó la técnica a alcanos de cadena corta, y se extendió luego a una mezcla compleja simulando un condensado de gas natural. (Lagache et al.²). En este trabajo se ha aplicado la misma metodología para calcular el conjunto de propiedades citadas para alcanos lineales de cadena larga, del decano al eicosano. Los alcanos fueron modelizados usando el potencial de átomos unidos propuesto por Martin y Siepmann³, conocido como modelo TraPPE. Los resultados permiten hacer un análisis del efecto de la longitud de la cadena en la estimación de estas propiedades derivadas.

Agradecimientos: Los autores agradecen al CESGA (Santiago de Compostela, España), por permitir el uso de sus servidores de cálculo.

[†] Laboratoire des Fluides Complexes, Groupe Haute Pression, Université de Pau et des Pays de l'Adour, B.P. 1155, 64013 Pau Cedex, France

- ² Lagache M. H., Ungerer, P.; Boutin A., Fluid Phase Equilibria, 220 (2): 211-23 2004.
- ³ Martin, M. G.; Siepmann, J. I., J. Phys. Chem. B, 102, 2569-77, 1998.

^{*} mmpineiro@uvigo.es

¹ Lagache, M.; Ungerer, P.; Boutin, A.; Fuchs, A. H., Phys. Chem. Chem. Phys. 3 4333-49 2001.

Casimir-like forces: effects of fluctuation confinement in non-equilibrium fluids.

<u>Ricard Matas Navarro</u>^{*} and Ignacio Pagonabarraga Departament de Física Fonamental Universitat de Barcelona 08028 Barcelona

Long-ranged spatial correlations are the only ingredient needed to generate Casimir-like forces between two large objects immersed in a fluid. Casimir forces have been studied since 1948, when Casimir predicted the existence of an attractive force between two metal plates in vacuum, and are present in all systems with longranged fluctuations, like in critical fluids or superconducting films. More recently, the same mechanism has been proposed for different non-equilibrium systems, such as granular fluids¹, which reach a homogeneous stationary state characterized by long-ranged correlations².

We present a numerical study using dissipative particle dynamics, a mesoscopic simulation method with molecular dynamics structure useful to reproduce the hydrodynamic behaviour of a fluid. The long-ranged correlations appear in our simulations as a consequence of breaking the detailed balance condition in a DPD-ideal gas, a very useful model in which all the other nature effects in granular systems, like depletion forces, are avoided, permitting us to focus on the correlation effects on the effective force between large immersed objects.

We estimate the fluctuation-induced forces between two plates and analyse its nature and the effects of confinement on the different thermodynamic properties, not only for long separations but also for short ones. This simple one-dimensional experiment allows a detailed analysis, paving the way for the following two disks configuration (two-dimensional case).

^{*} ricardmn@ffn.ub.es

¹ C. Cattuto, R. Brito, U.M.B. Marconi, F. Nori and R. Soto, Phys. Rev. Lett. **96**, 178001 (2006).

² T.P.C. van Noije, M.H. Ernst, E. Trizac, I. Pagonabarraga, Phys. Rev E **59**, 4326 (1999).

Spectral analysis of Bazarov's piston

S. Velasco, B. Jiménez de Cisneros, <u>J.M.M. Roco</u>^{*} and J.A. White

Departamento de Física Aplicada

Universidad de Salamanca

37008 Salamanca

We consider a hard-disk gas contained in an adiabatically isolated cylinder with a movable, frictionless, adiabatic piston under constant external pressure. The power spectrum of the position of a piston at equilibrium is investigated. The analysis is made by means of molecular dynamics simulations and hydrodynamics. For different piston masses we obtain results for the main times scales involved in the problem: the piston frequency and its damping constant.

The model (see Fig. 1) consists of a simplified version of the *adiabatic* piston. It presents the advantage that it has a well-defined thermodynamic solution.¹ On the other hand, this model does not present the time evolution from mechanical equilibrium to full thermodynamic equilibrium characteristic of the *adiabatic* piston.²



Figura 1. Bazarov's piston.

From a theoretical viewpoint, an analysis of the system near equilibrium is performed by assuming that the fluid displacement is approximately described by $\xi(x,t) \approx \sin(kx)f(t)$ where k is an effective wavelength of the system. An equation for the wavelength is derived in terms of the mass of the piston M and hydrodynamic parameters. Comparison with simulation shows that this equation is very accurate in predicting the piston frequency. Finally, an equation of motion for the piston is obtained in terms of an effective mass that is itself a function of the wavelength k.

Previous work² showed that the power spectral density $S(\omega)$ of the position of the *adiabatic* piston at equilibrium presents a three peak structure with a thermal mode associated to the *slow* motion of the piston from mechanical equilibrium to full thermodynamic equilibrium and a sound mode related to the damped oscillating beha-

vior of the piston. A similar behavior is found for the sound mode in Bazarov's piston but the thermal mode characteristic of the *adiabatic* piston is absent in Bazarov's piston. This behavior is shown in Fig. 2 where we note that one must keep the same ratio between piston mass and the mass of the particles in both systems and this implies half piston mass in Bazarov's model compared to the *adiabatic* piston. Finally we would like to note that a second harmonic arises in the spectrum as a consequence of the asymmetry of the effective potential in Bazarov's model.



Figura 2. Power spectral density of the position of the piston at equilibrium. Bazarov's piston with M = 50 vs the *adiabatic* piston with M = 100.

We are grateful for financial support from the Ministerio de Educación y Ciencia of Spain under grants FIS2005-05081/FEDER and FIS2006-03764/FEDER.

* roco@usal.es

¹ Application of thermodynamic extremum principles, C. Fernández-Pineda and S. Velasco, Am. J. Phys. **69**, 1160 (2001).

² The 'adiabatic' piston at equilibrium: Spectral analysis and time-correlation function, J.A. White, F.L. Román, A. González, and S. Velasco, Europhys. Lett. **59**, 479 (2002).

Coherence resonance of excitable localized structures in nonlinear optical cavities

Damià Gomila, Adrian Jacobo, Pere Colet, Manuel A. Matías*

IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB)

Campus Universitat Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain

Dissipative solitons (DS), are spatially localized structures that appear in several nonlinear dissipative media, including nonlinear optical cavities where are also known as cavity solitons¹. In recent work², it was shown that DS appearing in nonlinear Kerr cavities exhibit a excitability regime. This excitability is an intrinsic dynamical property of the system, as excitability appears in an extended system that is not locally excitable. In other words, excitability is an emergent feature that appears due to spatial coupling.

The excitable nature of the DS exhibited by this type of systems makes them natural candidates to exhibit coherence resonance³, that is the resonant behavior exhibited by excitable systems in the presence of noise. This effect is present in a more clear cut way in Class II excitable systems, characterized by a frequency response curve with a narrow band of frequencies, and that is the case studied in Ref.³. In Ref.⁴ it has been shown that one can also find coherence resonance (or stochastic resonance without external periodic force, as is called in these references) in Class I excitable systems, characterized instead by an unbounded distribution of response times (i.e., a frequency response curve that starts from zero). In particular, the excitability of the DS reported in this work is Class I.



Figura 1. Noise-to-signal ratio ${\cal R}$ as function of noise intensity

Coherence resonance behavior is quantitatively measured through Pikovsky's³ noise-to-signal ratio, defined as the normalized fluctuations of pulse durations, $R_p = \sqrt{Var(t_p)}/\langle t_p \rangle$, that can be shown to exhibit a relative minimum as a function of the noise intensity (cf. Fig. 1. In our case, external noise is applied on top of a localized Gaussian pump, as defined in Ref.⁵, for parameters in the excitable region close to the SNIC (Saddle Node on the Invariant Circle) bifurcation. The effect of noise for three intensities of noise, respectively before the resonant value, close to it, and larger than the resonant value, are shown in Fig. 2.



Figura 2. Dynamics of DS for three different noise intensities, where a more regular distribution of pulses can be observed for an intermediate value of the noise intensity.

- * Manuel.Matias@ifisc.uib.es
- [†] http://ifisc.uib.es
- ¹ Feature Section on Cavity Solitons, edited by L.A. Lugiato, IEEE J. Quantum Electron. **39**, # 2 (2003).
- ² D. Gomila, M.A. Matías, and P. Colet, Phys. Rev. Lett. 94, 063905 (2005); D. Gomila, A. Jacobo, M.A. Matías, and P. Colet, Phys. Rev. E 75, 026217 (2007).
- ³ A. Pikovsky and J. Kurths, **78**, 775 (1997).
- ⁴ G. Hu, T. Ditzinger, C.Z. Ning, and H. Haken, Phys. Rev. Lett. **71**, 807 (1993); T. Ditzinger, C.Z. Ning, and G. Hu, Phys. Rev. E **50**, 3508 (1994).
- ⁵ A. Jacobo, D. Gomila, M.A. Matías, and P. Colet, (to be published).

Movimiento browniano en el seno de un fluido disipativo

P. Maynar^{*,1}, M.I. García de Soria, G. Schehr, A. Barrat y E. Trizac

Laboratoire de Physique Théorique (CNRS UMR 8627), Bâtiment 210, Université Paris-Sud, 91405 Orsay cedex, France.

Hemos estudiado el problema de la difusión de una partícula esférica de masa M en el seno de un fluido compuesto por partículas que se aniquilan. Las partículas del baño son esferas duras de masa m que al encontrarse se aniquilan con probabilidad p o colisionan elásticamente con probabilidad 1-p. Consideraremos que el baño se encuentra en el denominado "estado de decaimiento uniforme". Este estado está caracterizado por ser homogéneo y porque toda la dependencia temporal de la función de distribución viene dada a través de la densidad y la temperatura.

A partir de una ecuación de Boltzmann-Lorentz para

la partícula browniana se ha derivado una ecuación de Fokker-Planck mediante un desarrollo en potencias del cociente de masas m/M. Su análisis en el régimen de tiempos largos y gradientes pequeños nos permite evaluar el coeficiente de difusión. Las predicciones teóricas han sido comparadas con simulaciones de Dinámica Molecular y de Simulación Directa de Monte Carlo (DSMC) encontrándose un acuerdo excelente.

^{*} maynar@us.es

¹ Área de F'isica Teórica, Universidad de Sevilla

Propiedades topológicas de la red de contactos en medios granulares.

Roberto Arévalo, Iker Zuriguel, Diego Maza.

Grupo de Medios Granulares[‡] Departamento de Física y Matemática Aplicada Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra 31080 Pamplona

Los medios granulares están siendo ampliamente estudiados por la comunidad de físicos debido a que exhiben características distintivas e inusuales¹. Estos materiales se componen de partículas macroscópicas que interactúan mediante fuerzas de contacto disipativas. Un modelo apropiado para el estudio de los medios granulares consiste en considerar cada grano como una esfera dura ignorando la fragmentación e incluyendo el efecto de la deformación en el término disipativo. Como apuntan en Anikeenko *et al.*², la aplicabilidad de este modelo al estudio de líquidos, gases y coloides implica una importancia primordial de las propiedades geométricas de los empaquetamientos de esferas duras a la hora de analizar las propiedades físicas de estos materiales.

En el presente trabajo³ proponemos un estudio estructural de los empaquetamientos granulares utilizando las herramientas desarrolladas en el campo de las redes complejas. Definiremos un grafo donde los nodos serán aquellos granos en contacto con algún otro y las fuerzas entre ellos determinarán la existencia de un eje o arista. Una vez definida la red analizamos propiedades como la conectividad, la dimensión fractal o la distancia topológica.

El sistema que analizamos es un empaquetamiento bidimensional de discos obtenido mediante simulaciones de dinámica molecular de partículas blandas. Las simulaciones comienzan con un gas de discos a muy baja densidad que es comprimido mediante cuatro paredes móviles. Este protocolo nos permite estudiar la evolución de la red de contactos y, en particular, comprobar qué cambios cualitativos en sus propiedades se producen cuando el sistema se atasca. En este sentido prestaremos especial atención a la aprarición de triángulos, tres aristas formando un circuito cerrado, en la red de contactos. La importancia estructural de los triángulos radica en que son las estructuras rígidas más simples.

Las propiedades estructurales se enlazan con la física del sistema mediante la definición del parámetro $f/\langle F \rangle$, dónde $f/\langle F \rangle$ es la fuerza presente en un contacto. El significado de este parmétro consiste en que eliminaremos las fuerzas con un valor inferior a $f/\langle F \rangle$; así, $f/\langle F \rangle = 0$ es toda la red de contactos, mientras que $f/\langle F \rangle = 1.5$ es la red de fuerzas obtenida al eliminar las que son inferores a una 1.5 veces la media. De este modo podemos definir un contínuo de redes y las propiedades topológicas son funciones de $f/\langle F \rangle$. Veremos que la presencia de triángulos puede explicar el comportamiento de algunas de estas funciones.

[‡] http://fisica.unav.es/granular/

¹ J. Duran, *Sands, powders and grains*, Springer-Verlag, New York, 1999.

² A. V. Anikeenko and N. N. Medvedev, Phys. Rev. Lett. 98, 235504 (1997).

³ R. Arévalo, I. Zuriguel, and D. Maza, arXiv:0709.2680[conmat]

Phase-Field Study of the Cellular Bifurcation in Directional Solidification

<u>Esteban Meca</u>^{$*^{\dagger}$} and Mathis Plapp^{\dagger}

Departament de Física Aplicada Universitat Politècnica de Catalunya, Av. Doctor Marañón, 44-50

08028 Barcelona

The cellular structures that arise during the directional solidification of alloys above a critical growth velocity have been extensively studied since their first description by Rutter and Chalmers¹. The basic physical mechanisms that lead to their formation are well understood, and there exist numerous theoretical and numerical models that are able to predict some features of cellular growth. However, many questions remain open, both concerning the properties of individual cells, such as their precise shape and tip radius, and concerning phenomena that result from the interaction between numerous cells, such as the selection of a characteristic spacing, the structure and dynamics of the cellular array, and the morphological transitions and instabilities.

The phase-field method has emerged in recent years as a new and powerful tool to investigate such questions². It avoids the numerical difficulties linked to the tracking of a sharp solidification front by introducing a phase field, which takes constant values in the bulk phases and varies smoothly through diffuse interfaces of a typical width W. The complete dynamics of the solidification front can be easily simulated in three dimensions on the scale of a few cells. However, a direct quantitative comparison with experiments is generally difficult. The reason is that for typical parameters of slow directional solidification, the size of the cells is of the order of 100 μ m, whereas the solidliquid interfaces have a typical thickness of the order of 1 nm. Because it is unfeasible to resolve numerically both of these scales at the same time, even with the help of modern multiscale algorithms, the interface width W of the phase-field model has to be chosen orders of magnitude larger than the thickness of the physical solid-liquid interfaces. This generally makes the results of simulations depend on the interface thickness. However, for a few special cases, such as the symmetric and the one-sided model of solidification, improved phase-field models have been developed that eliminate all undesired effects that

scale linearly with W, which has opened the way to quantitative phase-field modeling of microstructure formation in pure substances and dilute binary alloys³.

Here, we present the results of phase-field simulations in both two and three dimensions which are used to investigate the microstructures that form closely above the threshold of the Mullin-Sekerka instability in the directional solidification of dilute binary alloys. It is found that in this regime of shallow cells the simulation results strongly depend on the thickness of the diffuse interfaces even for model parameters that yield quantitative results for deep cells. For the material parameters of a dilute Sn-Bi alloy, the bifurcation is found to be supercritical, whereas weakly nonlinear amplitude expansions⁴ predict a subcritical bifurcation. Furthermore, an oscillatory instability of the cell grooves is found, which leads to the pinch-off of liquid inclusions even for relatively shallow cells. Finally, in three dimensions, three different morphologies are found, in agreement with experiments and previous numerical studies: regular hexagons, elongated cells ('stripes'), and inverted hexagons ('node' or 'pox' structure, a hexagonal array of local depressions of the solidification front). Nodes and stripes are stable steadystate solutions only very close to the bifurcation⁵.

- [†] Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, CNRS/École Polytechnique, 91128 Palaiseau, France
- ¹ J.W. Rutter and B. Chalmers, *Can. J. Phys.* **31** 15-39 (1953)
- ² W.J. Boettinger et al. Annu. Rev. Mater. Res. **32** 163-194 (2002)
- ³ B. Echebarria et al. *Phys. Rev. E* **70** 061604 (2004)
- ⁴ D.J. Wollkind and L.A. Segel, *Phil. Trans. R. Soc. London* 268 351-380 (1970)
- ⁵ E. Meca and M. Plapp, *Met. Mat. Trans.* **38A** 1409-1416 (2007)

^{*} esteban@fa.upc.edu

Memory and recall of information in neural networks with dynamic synapses

Jorge F. Mejías^{*} and Joaquín J. Torres

Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia Avda. Fuente Nueva s/n, Universidad de Granada 18071 Granada

In classical neural network models, information is assumed to travel through links between neurons, or synapses. The complex configuration of these links allows the system to exhibit a rich phenomenology. For example, the system can retrieve P previously stored patterns of neural activity, mimicking the associative memory processes which occur in several brain areas, as the hippocampus¹. The activity patterns are stored in the network via a learning rule, which modifies the strengh of the synapses in a proper way. This modification is slow compared with the dynamics for generation of electrical signals or action potentials (APs) in the individual neurons, thus synapses are considered to have "static" values in these models. However, in the last years much attention has been paid to fast synaptic dynamics and its role in the processing and coding of information in the $\mathrm{brain}^{3,5,6}.$ In particular, synapses often present fast activity-dependent dynamics, as for example short-term depression (STD) and short-term facilitation (STF), which notably modifies the behaviour of the system when compared with the case of static synapses. While STD implies a temporal reduction of the synaptic strengh for high frequency signals (in order to save synaptic resources needed for information transmission), STF has the opposite effect, since it reflects the increase of calcium ions which occurs after an presynaptic AP, and these ions favours future transmissions. Therefore, the interplay between these two effects may have nontrivial consequences in the system behaviour. Indeed, the inclusion of activity-dependent synapses, or *dynamic synapses*, is responsible of the appearance of switching between activity patterns in neural networks², the gain control of signals with different frequencies³, and improvements on the detection of input correlated APs⁴.

In this work, we study the influence of the competition of STD and STF in the capacity of the network to store and retrieve information. We consider a network of N fully connected binary neurons which follow a probabilistic dynamics $\operatorname{Prob}[s_i(t+1) = +1] = \frac{1}{2}(1 + \tanh[2\beta(h_i(t) - \theta_i)])$ where s_i represents the state of the neuron i, β takes into account the termal noise in the network, h_i is the local field or the total synaptic current to the neuron i, and θ_i is the neuron firing threshold. To include the dynamic synapses, we consider the following phenomenological model⁵:

$$x_i(t+1) = x_i(t) + \frac{1 - x_i(t)}{\tau_{rec}} - u_i(t)x_i(t)s_i(t) \quad (1)$$

$$u_i(t+1) = u_i(t) + \frac{U_{SE} - u_i(t)}{\tau_{fac}} + U_{SE}(1 - u_i(t))s_i(t) \quad (2)$$

where x_i is the synaptic resources molar fraction in the presynaptic neuron i, u_i is related to calcium concentration near the synapse, U_{SE} is the minimal release probability of synaptic resources after an AP, and τ_{rec} , τ_{fac} represent time constant for STD and STF processes, respectively. Then, the synaptic current is given by $h_i = \sum_j \omega_{ij} x_j \frac{u_j}{U_{SE}} s_j$, where ω_{ij} represents the static synaptic weights.



Figura 1. Storage capacity of a neural network with dynamic synapses with STD and STF mechanisms. STD decreases the storage capacity with τ_{rec} whereas STF can enhance it for intermediate values of U_{SE} . The figure also shows how an standard mean-field theory (lines) agrees qualitatively with simulations (data points).

Figure 1 shows the effect of include STD and STF in the storage capacity of the network. This is measured by the maximun number of patterns (relative to the network size, i.e., $\alpha_c = P/N$) which is able to memorize and retrieve eficiently. Our study reflects that STD makes α_c to decrease for large τ_{rec} , while STF allows to restore this number to eventually its maximum value ($\alpha \simeq 0.138$) for relatively small U_{SE} . This results would lead us to think in the positive role of synaptic facilitation in optimal and fast memory retrieval whereas synaptic depression could be more oriented to other tasks concerning, for instance, the dynamical processing of data.

- 2 J. J. Torres et al., Neural Comp. 19 (10) 2739-2755 (2007).
- ³ L. F. Abbott et al., *Science* 275 (5297) 220-224 (1997).
- ⁴ J. F. Mejias and J. J. Torres, J. Comp. Neurosci., in press, (2007).
- ⁵ M. V. Tsodyks, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* 94 719-723 (1997).
- ⁶ N. Matsumoto et al., *Neurocomputing* 65-66 571-577 (2005).

^{*} jmejias@onsager.ugr.es

¹ J. J. Hopfield, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* 79 2554-2558 (1982).

Dewetting of a stratified liquid thin film

Samy Merabia^{*} and Josep Bonet Avalos^{*}

Departament d'Enginyeria Quimica, Escola Tecnica Superior d'Enginyeria Quimica (ETSEQ) Universidad Rovira i Virgili, Avinguda dels paísos catalans 26, 43007 Tarragona Spain

Dewetting is the process under which a liquid thin film withdraws a solid substrate leaving dry patches. For simple liquids, the situation is now well characterised experimentally and understood theoretically¹. Binary fluids on the other hand can reveal novel scenarios yet partially understood². Apart from the fundamental aspect, dewetting of binary fluids is also relevant for industrial applications such as coating or lithography where the films used consist of more than one component.

In this presentation, we study the dewetting of a liquid bilayer on a solid substrate, using numerical simulations. To this end, we extend a coarse-grained simulation method (dissipative particle dynamics DPD) to deal with interfaces³. We analyze the influence of the viscosity contrast between the two components of the film on the dewetting kinetics and the film morphology. We find that the dewetting velocity significantly depends on the location of the more viscous component with respect to the solid substrate. The asymmetry in the deweting behaviour is interpreted by analyzing the velocity field as well as the viscous dissipation patterns within the film, which display a rather different structure with respect to that of a monocomponent liquid. We propose a theoretical explanation of the observed behavior⁴.



Figura 1. Velocity field within the dewetting film obtained from simulations. Left: single fluid; Middle and right: binary stratified fluids with a viscosity contrast between the two components. Middle: the more viscous component is below. Right: the more viscous fluid is on top. The symbols indicate the positions of the liquid/vapor and liquid/liquid interfaces.

- ² R. Yerushalmi-Rozen, T. Kerle and J. Klein, *Science* **285** (5431) 1254 (1999)
- 3 S. Merabia and I. Pagonabarraga, Eur. Phys. J. E., ${\bf 20}$ (2) 209 (2006)
- 4 S. Merabia and J. Bonet Avalos, preprint

^{*} smerabia@gmail.com

^{*} josep.bonet@urv.cat

¹ P.G. De Gennes, F. Brochard and D. Quéré, *Capillary and wetting phenomena: drops, bubbles, pearls, waves*, (Springer, New York 2003)

Caos espacio-temporal en un experimento convectivo 1D

M.A. Miranda^{*}, J.Burguete[†] Departamento de Física y Matemática Aplicada Universidad de Navarra E-31080 Pamplona

En el estudio de la dinámica no lineal de sistemas disipativos fuera del equilibrio termodinámico, entender la transición al caos espacio-temporal en los sistemas extensos es un tema de gran interés. En el proceso de transición al estado desordenado pueden aparecer desdoblamientos de frecuencia: experimentalmente encontramos evidencias de transición por biperiodicidad en sistemas de flujo confinado como en el experimento de Taylor-Dean³ y en el de electroconvección en cristales líquidos². Teóricamente en sistemas unidimensionales encontramos antecedentes en Hohenberg y Shraiman¹ para sistemas unidimensionales.

En este trabajo estudiamos experimentalmente una cascada de bifurcaciones en un sistema termoconvectivo 1D hacia un estado donde se ha producido un desdoblamiento en frecuencias y números de onda. El experimento consiste en un canal de base rectangular (470 mm x 60 mm) que contiene un fluido (Pr = 75) abierto a la atmósfera y sometido a un calentamiento T_c en su base inferior situado en el centro y a lo largo de una línea en la dirección x. Los parámetros de control son el espesor de la capa de fluido d y la diferencia de temperaturas vertical ΔT_v . A cada estado asintótico del sistema ($d, \Delta T_v$) le corresponde un diagrama espacio-temporal característico S(x,t) a partir del cual obtenemos las amplitudes \mathcal{A}_j , los números de onda k_j y las frecuencias ω_j de cada modo fundamental de Fourier M (k_j, ω_j) .

Este sistema manifiesta una gran diversidad de patrones en el espacio de las fases⁴. Para pequeños espesores (d = 3 mm) el estado inicial es celular estacionario (ST) con número de onda $\lambda_s \approx 2d$. Cuando $\Delta T_v \uparrow$, el sistema experimenta una bifurcación secundaria, a ΔT_{vc1} , hacia un estado mixto constituido por dominios localizados a modo de islas en régimen oscilatorio (ALT), éstos coexisten con el patron de base ST (Fig.2(a)). Estos dominios localizados desestabilizan localmente el estado ST y tienen fronteras fluctuantes para un amplio rango de ΔT_v que acaban por colapsar. A medida que aumentamos ΔT_v las fronteras fluctuantes se saturan con la consiguiente formación de uno o dos dominios de gran coherencia espacio-temporal. A partir de un nuevo valor crítico del parámetro de control ΔT_{vc2} se produce una nueva bifurcación secundaria por desdoblamiento espacio-temporal de los modos contrapropagativos $M_{1,2v\pm}$. Este patrón por su particular geometría en zig-zag se designa por ZZ (Fig.1). La demodulación compleja de los modos desdoblados evidencia la existencia del fenómeno de batidos así como la naturaleza supercrítica de esta bifurcación (Fig.2(b)).



Figura 1. Diagrama espacio-temporal S(x,t) en el régimen ZZ.



Figura 2. (a) Régimen mixto ST/ALT donde el estado de base ST ha sido filtrado; (b) Régimen ZZ obtenido por demodulación compleja.

* montse@fisica.unav.es

- ¹ P. C. Hohenberg, B. I. Shraiman *Physica D* **37** (1989) 109.
- ² L. Pastur, M. Henriot, R. Ribotta *Phys. Rev. Lett.* 86 (2001) 228.
- ³ P. Bot and O. Cadot and I. Mutabazi *Phys. Rev. E*, **58** (1998) 3089.
- ⁴ M.A. Miranda, J. Burguete to be submitted to *Eur. Phys. J. B* (2008), J. Burguete and D. Maza and H.L. Mancini *Physica D* **174** (2003) 56.

 $^{^\}dagger$ javier@fisica.unav.es

Topology and transport in driven vortex lattices

Paolo Moretti^{*} and M. Carmen Miguel Departament de Física Fonamental Universitat de Barcelona 08028 Barcelona

The dynamics of disordered vortex arrays in type II superconductors is one of the most active fields of investigation in condensed matter physics at present. Recent advances in superconducting technologies constantly require a deeper understaning of the underlying physical mechanisms. At the same time, vortex assemblies have always been regarded as paradigmatic disordered systems, a sort of ideal playground for the most refined theories of driven random media, that appeared equally well accessible on experimental grounds.

Recently, the attention of the scientific community has turned to the topology of vortex arrays¹ and the role of topological defects, such as dislocations, in the emergence of disordered phases and critical current anomalies. Constant improvements in computational performance, together with constant advances in experimental techniques, have somehow broadened the well known phase space, introducing novel metastable states (vortex polycrystals, hexatic phases etc.) which are expected to shed some light on the sometimes counterintuitive electrodynamic behaviour of type II superconductors.

It is well known that magnetic fields penetrate samples of type II superconductors in the form of quantised flux lines, referred to as vortices, which whould arrange themselves into ordered quasi two-dimensional lattices and move under the action of Lortentz-like forces induced by external currents. Disorder and thermal fluctuations tend to break long range order giving rise to disordered phases. The loss of topological order is the main responsible for abrupt variations in the critical current of the driven vortex array.

We propose a numerical study of the interplay of topology and current transport in type II superconductors by tuning certain relevant parameters of these systems, namely the magnetic field, the density of defects and, most importantly, the typical disorder strength, or pinning force. We find that in the case of weak pinning interactions, the dynamics of dislocation assemblies is the relevant mechanisms that accounts for the collective motion of the vortex array. Dislocations rearrange into grain boundaries, accounting for the emergence of polycrystalline order.

A previous analytical study predictied that a crossover between the regimes of individual and collective pinning of grain boundaries should be detected by looking at the critical current as the defect density was increased². Now we find our numerical results in excellent agreement with that model (Figure 1). Simulated critical currents follow the predictions based on grain boundary pinning and collective dislocation dynamics proves essential to explain the electrodynamic behaviour of the superconductor.

In the case of stronger pinning forces, instead, the vortex assembly loses topological order and falls into a completely disordered phase. The consequent increase in the number of degrees of freedom results in a huge increase of the critical current. Depinning is now strongly heterogeneous, accompanied by a sharply discontinous transition and jerky individual vortex dynamics.



Figura 1. Critical current density J_c as a function of the number of defects. In the case of low defects concentrations, J_c matches the behaviour predicted for individual grain boundary pinning (solid line), while for dense defect configurations grain boundary pinning becomes a collective process, as required by theory (dashed line). Currents are measured in units of Gb^2c/Φ_0 , where G is the shear modulus of the vortex lattice, b the lattice spacing, c the speed of light and Φ_0 the magnetic flux quantum.

¹ P. Moretti, M.-C. Miguel, M. Zaiser, and S. Zapperi, Phys. Rev. Lett. **92**, 257004 (2004)

* paolo.moretti@ub.edu

² P. Moretti, M.-C. Miguel, and S. Zapperi, Phys. Rev. B **72**, 014505 (2005)

Mixed dynamics in evolutionary games

Angel Sánchez, Luis G. Moyano^{*}

Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid, 28911 Madrid

In the repeated Prisoner's Dilemma (PD) game, agents play with each other and update their strategies in every generation according to some microscopic dynamical rule¹. In this work, we explore mixed PD systems composed of two types of agents, each kind with a certain update rule. We investigate two possibilities: in the first case, update rules remain fixed for the entire evolution of the system. In the second case, agents update both strategy and update rule in every generation. Our results show that, for an important range of the parameters of the game, the final state of the system is much different than the one obtained with the usual setup of a single, fixed, dynamical rule or with two fixed rules. Our model implements representative dynamical rules and shows that, certain type of rules may become extinct while others prevail. We describe the new and rich variety of final outcomes that arise from mixed dynamics configuration.

^{*} lmoyano@math.uc3m.es

 $^{^1}$ R. Axelrod (1984), "The evolution of cooperation", New York, Basic Books

Hidden Orders and impact in financial markets

Esteban Moro, Luis G. Moyano*

Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid, 28911 Madrid

Financial markets provide a detailed record of human decision making under risk and uncertainty in a complex environment over long spans of time. It is of major interest to design models whose components are empirically grounded and also able to make accurate quantitative predictions of the phenomena of interest.

In this lines, we concentrate in the statistical identification of trading and scheduling strategies of the different participants of a real stock market. Specifically, we implement a statistical segmentation algorithm on trading time series during a four-year record of the Spanish stock exchange. We are able to extract and distinguish "hidden orders^or packets which are executed by using several independent trades, design in this way so as to minimise market impact. Furthermore, we characterise these statistical properties and analyse their most salient features. Finally, we study how the total impact builds in time and how this "hidden-order" impact compare with instantaneous price formation models¹.

* lmoyano@math.uc3m.es

¹ Kissell, R., and M. Glantz (2003), "Optimal Trading Strategies," AMACOM, Inc.

Simulación por dinámica molecular del contacto entre sólidos

Javier Munilla, Mario Castro^{*}, Alberto Carnicero

Grupo de Dinámica No Lineal, Escuela Técnica Superior de Ingeniería (ICAI) Universidad Pontificia Comillas de Madrid

28015 Madrid

El problema del contacto entre sólidos se remonta a los prmeros experimentos de Leonardo da Vinci. La deformación plástica o elástica de dos sólidos en contacto, el problema de la fricción o el desgaste son algunos de los problemas relacionados con el contato que tienen importantes aplicaciones tanto en Física como en Ingeniería^{1,2}. No obstante, en muchos casos, el conocimiento detallado de los mecanismos microscópicos no es bien conocido por lo que se utilizan algunas aproximaciones semiempíricas (como los coeficientes estático y dinámico del rozamiento o los llamados "mapas de desgaste"³).

Tradicionalmente se ha utilizado la hipótesis del continuo para describir este tipo de fenómenos. Esta descripción ha resultado especialmente exitosa en el caso del contacto elástico. Por debajo del límite de plasticidad es posible demostrar, por ejemplo, que la longitud de penetración, δ , de dos sólidos en contacto sometidos a una fuerza compresiva, F, obedece una ley de potencias (conocida como la Ley de Hertz, línea discontinua en la figura 1) de la forma: $\delta \sim F^{2/3}$.



Figura 1. Comparativa entre la ley de Hertz (línea discontinua roja) mediante simulación por dinámica molecular (puntos negros).

Por el contrario, no existe por el momento una teoría similar para el caso del desgaste por fricción¹.

En este trabajo se presenta un estudio mediante dinámica molecular del contacto entre dos sólidos. La dinámica molecular permite simular de manera realista el contacto a escala microscópica y analizar el papel de la temperatura y la fuerza externa en la formación de defectos, la deformación plástica y, en última instancia, el desgaste por fricción.

Los principales resultados del estudio son⁴:

• Para sistemas de pocos átomos (correspondiente a *asperidades* nanométricas se viola la ley de Hertz (figura 1). Para ello se simula el contacto de dos cilindros y se determina la longitud de penetración. Dado el carácter microscópico del sistema, las fluctuaciones son importantes y la longitud de penetración sólo tiene sentido estadísticamente (ver figura 2)



Figura 2. Evolución temporal de la longitud de penetración en función de la carga.

- En la región de contacto se produce una elevación muy significativa de la temperatura. Si el sistema está en contancto con una fuente de disipación de calor, el efecto del calentamiento sólo tiene lugar en las proximidades del contacto.
- En el caso del deslizamiento, este calentamiento da lugar a la fusión local de los sólidos y es el desencadenante de la formación de defectos (vacantes o dislocaciones) que originan el proceso de fractura y posterior desprendimiento de material. Esta fusión local en la región de contacto puede ser responsable de la violación de ley de Hertz (por tratarse de un límite plástico).

^{*} marioc@upcomillas.es

¹ K. L. Johnson, Contact Mechanics (CUP, 1987).

² B. N. J. Persson, *Sliding Friction: Physical Principles and Applications* (Springer, 2000).

³ E. Rabinowicz, E., *Friction and Wear of Materials* (Wiley-Interscience, 1995).

⁴ J. Munilla, A. Carnicero, y M. Castro, *en preparación* (2007).

Acoplamiento del transporte de material y la morfología en superficies sometidas a erosión iónica

Javier Muñoz-García^{*}, Rodolfo Cuerno[†] y Mario Castro[‡]

* Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC) y School of Mathematical Sciences, University College of Dublin, Belfield, Dublin 4, Irlanda

[†]Departamento de Matemáticas y GISC, Universidad Carlos III de Madrid, Avda. de la Universidad 30, 28911 Leganés [‡]GISC y Grupo de Dinámica No Lineal (DNL), Escuela Téc. Sup. de Ingeniería (ICAI), Universidad Pontificia Comillas, 28015 Madrid

El interés en la irradiación iónica y en su capacidad para modelar a escala nanométrica regiones extensas (del orden del varios centímetros) se ha visto incrementado en los últimos años debido a la gran variedad de potenciales aplicaciones que presenta, que van desde la fabricación de dispositivos semiconductores u ópticos hasta diversas aplicaciones biotecnológicas.¹ Dicha técnica consiste en eliminar material de la superficie mediante el bombardeo con iones de energías cinéticas del orden del kiloelectronvoltio, de forma que pueden aparecer patrones ordenados en gran variedad de materiales. Además de su interés tecnológico, los mecanismos básicos que provocan la evolución de estas morfologías han sido objeto de numerosos estudios teóricos durante las últimas décadas.

A pesar de que ciertas características experimentales han sido descritas correctamente por estas teorías, otras han requerido la inclusión de nuevos mecanismos físicos y la extensión de los modelos anteriores para ser correctamente explicadas.^{2,3} Así, a diferencia de las teorías morfológicas previas en las que el único campo físico considerado era la altura del sustrato bombardeado, h, en este trabajo acoplaremos la dinámica de h con el grosor de material móvil en la superficie, R. El sistema de ecuaciones resultante incorpora determinados mecanismos como el redepósito de material o la dependencia de la velocidad de erosión con la geometría local, la energía, flujo y ángulo de incidencia de los iones, temperatura, etc. Se mostrará que esta descripción, además de extender las teorías anteriores, permite predecir algunas características novedosas como el ensanchamiento y saturación del tamaño lateral del patrón o el desplazamiento no uniforme de las estrías, observadas en los experimentos. Además del análisis numérico de este sistema, se mostrará un análisis multiescala que nos permitirá eliminar adiabáticamente el campo R y obtener una ecuación de evolución temporal, cerrada para el perfil de alturas, cerca del correspondiente umbral de inestabilidad.De esta forma, en el caso particular de incidencia normal, dicha ecuación se reduce a una generalización de la conocida ecuación de Kuramoto-Sivashinsky de la forma

$$\partial_t h = -\nu \nabla^2 h - \mathcal{K} \nabla^4 h + \lambda^{(1)} (\nabla h)^2 + \lambda^{(2)} \nabla^2 (\nabla h)^2, \quad (1)$$

donde los diversos coeficientes dependen de los parámetros fenomenológicos. Esta ecuación permite predecir determinados comportamientos experimentales⁴ como el desorden en alturas a distancias intermediad estudiado en [5] para su versión 1-D.



Figura 1. (a), (b) Imágenes obtenidas mediante AFM de la superficie de sílice $(1 \times 1 \ \mu m^2)$ tras ser irradiadia oblicuamente durante 10 y 60 minutos respectivamente.⁶ (c), (d) Evolución de la morfología obtenidas mediante integración numérica de la ecuación efectiva para la altura en un instante t y 6t respectivamente.

- ² M. Castro, R. Cuerno, L. Vázquez y R. Gago, Phys. Rev. Lett. **94**, 016102 (2005).
- ³ J. Muñoz-García, M. Castro y R. Cuerno, Phys. Rev. Lett. 96, 086101 (2006).
- ⁴ R. Gago, L. Vázquez, O. Platevin, T.H. Metzger, J. Muñoz-García, R. Cuerno y M. Castro, Applied Physics Letters 89, 233101 (2006).
- ⁵ J. Muñoz-García, M. Castro y R. Cuerno, Phys. Rev. E **74**, R050103 (2006).
- ⁶ D. Flamm, F. Frost y D. Hirsch, Appl. Surf. Sci. **179**, 95 (2001).

^{*} javiermunozgarcia@gmail.com
http://gisc.uc3m.es/~javier

¹ J. Muñoz-García, L. Vázquez, R. Cuerno, J.A. Sánchez-García, M. Castro y R. Gago, *Self-organized surface nanopatterning by ion beam sputtering*, en *Lecture Notes on Nanoscale Science and Technology*. Editado por Zhiming M. Wang. Springer, Heidenberg (2007) (En prensa). También disponible en arXiv:0706.2625.

Estimación de entropías a partir de conjuntos limitados de datos

J. A. Bonachela, H. Hinrichsen, and Miguel A. Muñoz

Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia and Instituto de Física Teórica y Computacional Carlos I, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada, Spain Fakultät für Physik und Astronomie, Universität Würzbur

La estimación de entropías en series limitadas (finitas) de datos no es en absoluto trivial. Estimaciones naive, basadas en reemplazar probabilidades por frecuencias de aparición lleva a errores no sólo de naturaleza estadística si no también sistemáticos (sesgo). De hecho, dicho sesgo obscurece los resultados para cualquier serie finita y obstaculiza el posible uso de funcionales de entropía (sean de Shannon, Rényi, Tsallis, etx). Distintos "estimadores" han sido propuestos en la literatura para evitar este problema y conseguir estimaciones significativas para conjuntos finitos de datos¹⁻⁵. En particular el método mejorado de Grassberger produce resultados muy satisfactorios cuando el número de estados posibles es grande y el tamaño de la muestra también. Sin embargo, en muchos problemas en biología, bioinformática, análisis de sistemas digitales, etc, el número de estados posibles es pequeño (2 en series binarias, 4 en series de nucleótidos de ADN, etc.).

En esta charla presentaré un nuevo método que mi-

nimiza simultáneamente los errores sistemáticos y estadísticos para sistemas con pocos estados y series de datos limitadas. El estimador puede ser adaptado para cualquier tipo de entroía. Complementa, por lo tanto, a los mejores estimadores disponibles hasta la fecha⁶.

- ¹ P. Grassberger, Phys. Letters A **128**, 369 (1988).
- ² M. S. Roulston, *Physica D* **125**, 285 (1999),
- ³ G. Miller, Information Theory in Psicology II-B, ed. H. Quastler, Glencoe, Illinois; Free Press, 95 (1955). See also, G. P. Basharin, Theory Prob. App. 4, 333 (1959).
- ⁴ B. Harris Topics on information Theory, 323, ed. I. Csiszar, Amsterdam, North Holland (1975).
- ⁵ P. Grassberger, condmat, 0307138 (2003).
- T. Schürmann, J. Phys. A **27**, L295 (2004).
- T. Schürmann and P. Grassberger, Chaos 6, 414 (1996).
- ⁶ J. A. Bonachela, H. Hinrichsen, and M. A. Muñoz, J. Phys. A. preprint 2008.

Alberto P. Munũzuri and Alejadro Vázquez-Otero

Group of Nonlinear Physics. Fac. de Física. Campus Sur. Universidad de Santiago de Compostela. 15782 Santiago de

Compostela

The classical problem of labyrinths is analyzed under non common properties of autowaves perspective. In fact, all previous attempts to study this problem always required additional memory or artifacts that had to be included ad hoc in the system. The new method here proposed is based on some mixed state that combines autowaves properties with Turing instability. This is a very robust, easy-to-implement method that does not require any adds-on. Many possible applications can be envisioned.

Diffusion in models of active Brownian particles of relevance in biological self-propelled motion

Ernesto M. Nicola^{*} and Benjamin Lindner Department Biological Physics, Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Noethnitzer Str. 38, D-01187 Dresden, Germany

Self-propelled motion is one of the most fascinating aspects of biological systems. This motion can appear in many different biological contexts either inside cells¹ (*e.g.* molecular motor proteins²) or on the multi-cellular level¹. Simple phenomenological models can help to understand the dynamics of self-propelled entities and their statistics (including their transport properties).

One class of models successfully studied during the last 15 years are active Brownian particles³ (ABP). Here we study, both theoretically and numerically, the effective diffusion coefficient of one-dimensional ABP models. We show that, depending on the choice of the friction function, the diffusion coefficient does or does not attain a minimum as a function of noise intensity. We furthermore discuss the case of an additional bias breaking the left-right symmetry of the system. We show that this bias induces a drift and that it generally reduces the diffusion coefficient. For a finite range of values of the bias, the models can exhibit a maximum in the diffusion coefficient vs. noise intensity⁴.

Finally, we establish a connection between our results for simple one-dimensional ABP models with detailed models of molecular motors². This link allows us to make experimentally testable predictions about transport properties of molecular motors.

- ¹ D. Bray. Cell Movements, Garland, New York, NY, 2001.
- ² J. Howard. Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton, Sinauer Associates, Sunderland, Mass., 2001.

^{*} nicola@pks.mpg.de

³ W. Ebeling, Nonlinear Browinan motion, Condensed Matter Physics, 7:539, 2004.

⁴ B. Lindner and E.M. Nicola, *Diffusion in models of biased active Brownian motion*, Eur. Phys. J. (in print, 2008).

Un modelo de intercara difusa para la formación de patrones en fluidos magnéticos

<u>Matteo Nicoli</u>^{*}, Rahul Bhysar¹, Sébastien Nguyen², Hervé Henry² y Mathis Plapp²

* Departamento de Matemáticas y Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC)

Universidad Carlos III de Madrid, Avenida de la Universidad 30, 28911 Leganés

¹ Indian Institute of Technology Guwahati, Guwahati 781039 Assam, India

² Laboratoire de Physique de la Matiére Condensée (PMC),

Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau Paris, France

Un ferrofluido está compuesto típicamente de partículas ferromagnéticas nanométricas que se encuentran en suspención en un solvente orgánico o en agua. La característica fundamental de estos líquidos es que se polarizan fuertemente en presencia de un campo magnético. Los ferrofluidos exhiben paramagnetismo; de hecho, debido a su gran susceptibilidad, se dice que son superparamagnéticos. Cuando se aplica un campo magnético vertical homogéneo a un contenedor lleno de ferrofluido, se observa la creación de un patrón formado por picos si la intensidad del campo supera un valor umbral. Este fenómeno se debe a la inestabilidad de campo normal o de Rosensweig.¹ Normalmente, la inestabillidad genera una matriz regular de hexágonos, pero aumentando la intensidad del campo magnético se puede observar una transición a un patrón formado por cuadrados.



La generación del patrón estacionario se debe a un balance entre la minimización de la energía magnetica, la fuerza de gravedad y la tensión superficial: el ferrofluido crea los picos para disminuir su energía magnética, mientras que las otras dos fuerzas intentan aplanar su superficie. En 1967, Cowley y Rosensweig estudiaron la estabilidad lineal de una capa infinita de ferrofluido no viscoso en el vacío,² y evidenciaron que en presencia de un campo magnético vertical, una perturbación en su superficie concentra el flujo magnético de modo que la fuerza magnética resultante amplifica ulteriormente la perturbación, mientras que la gravedad y la tensión superficial tienen un efecto estabilizador. Cuando la fuerza magnética supera las fuerzas estabilizadoras, se desarrolla la inestabilidad formada por el patrón de picos.

El estudio analítico de estos sistemas es muy arduo más allá del regimen lineal, de forma que normalmente se utilizan modelos numéricos para simular su comportamiento.³ En esta comunicación presentamos un modelo de intercara difusa (*phase-field*) para estudiar la inestabilidad de Rosensweig en un sistema formado por un ferrofluido y aire. El modelo puede reproducir la forma y la altura de los picos (*soliton-like*), el fenomeno de histéresis asociado a la amplitud del patrón que se encuentra en los experimentos,⁴ así como la transición hexágonos-cuadrados.

¹ R.E. Rosensweig, *Ferrohydrodynamics* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1985)

- ³ C. Gollowitzer, G. Matthies, R. Richter, I. Rehberg y L. Tobiska, J. Fluid Mech. **571**, 455 (2007).
- ⁴ R. Richter y I.V. Barashenkov, Phys. Rev. Lett, **94**, 184503 (2005).

^{*} nmatteo@math.uc3m.es

² M.D. Cowley y R.E. Rosensweig, J. Fluid Mech. **30**, 671 (1967).

Inestabilidades morfológicas y rugosidad cinética en procesos de crecimiento con efectos no locales

<u>Matteo Nicoli</u>^{*}, Rodolfo Cuerno^{*} y Mario Castro[†]

*Departamento de Matemáticas y Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC)

Universidad Carlos III de Madrid, Avenida de la Universidad 30, 28911 Leganés

[†]GISC y Grupo de Dinámica No Lineal (DNL), Escuela Técnica Superior de Ingeniería (ICAI)

Universidad Pontificia Comillas de Madrid, 28015 Madrid

En multitud de procesos de crecimiento se dan cita dos fenómenos opuestos, tales como la existencia de inestabilidades morfológicas que dan lugar a escalas características y orden espacial, y las fluctuaciones (ruido) que tienden a desordenar el sistema y suelen asociarse a comportamientos con invariancia de escala. Es importante comprender la interrelación entre ambos tipos de efectos, tanto desde un punto de vista básico como teniendo en cuenta las aplicaciones.¹

Por otro lado, en una gran clase de procesos de crecimiento la velocidad local de (por ejemplo) agregación de unidades depende del estado global del sistema. Tal es el caso de los sistemas controlados por difusión, en los que son bien conocidos los efectos no locales de "sombreado" o "competición", que dan lugar a inestabilidades morfológicas clásicas como la de Mullins-Sekerka (MS), observadas en flujos en medios porosos, solidificación o crecimiento de superficies sólidas partir de un vapor.^{2,3} En este último contexto, podemos estudiar la interacción entre las inestabilidades morfológicas y las fluctuaciones en una ecuación interfacial como

$$\partial_t h(\mathbf{k}, t) = (\mu |k| + \nu k^2 - \gamma |k|^3 - Kk^4) h(\mathbf{k}, t) + \lambda T.F. [(\nabla h)^2] + \eta, \qquad (1)$$

donde $h(\mathbf{k}, \mathbf{t})$ es la transformada de Fourier espacial (T.F.) de la altura $h(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ de la superficie, η es un término de ruido y μ , ν , γ , K y λ son parámetros. La ecuación (1) interpola entre la relación de dispersión de MS (para $\nu = K = 0$) y la propia de la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky (KS) (para $\mu = \gamma = 0$), genérica para sistemas inestables en los que los efectos de relajación sean puramente locales. La no-linealidad presente en (1) es la de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ), que es la asintóticamente

relevante cuando la superficie del agregado no está sujeta a leyes de conservación. De hecho, la ecuación (1) tiene una gran generalidad y se ha deducido (en varios de sus límites) a partir de las relaciones constitutivas propias a contextos muy diversos.^{3,4}

En esta comunicación presentamos un estudio analítico (mediante grupo de renormalización dinámico, GRD) y numérico de la ecuación (1). Si bien, como es conocido, en el caso de efectos locales (KS) la no linealidad es capaz de estabilizar el sistema y determinar el comportamiento asintótico, éste no es el caso cuando la inestabilidad lineal es de tipo MS (no local). En este caso de nuevo la no linealidad estabiliza el sistema, pero no controla su comportamiento de escala en el estado estacionario. Este resultado contradice la relevancia de la no linealidad de KPZ para cualquier proceso no conservado de crecimiento interfacial y, aunque queda más allá de nuestro tratamiento por GRD, es compatible con nuestras simulaciones numéricas, así como con resultados experimentales. En ausencia de inestabilidades morfológicas, el flujo de GRD permite entender no sólo la estructura de puntos fijos y los valores de los exponentes críticos (como ocurre en el caso inestable) sino también los detalles del flujo hacia los puntos fijos estables.⁴

¹ R. Cuerno, M. Castro, J. Muñoz-García, R. Gago y L. Vázquez, Eur. Phys. J. Special Topics **146**, 427 (2007).

- ³ R. Cuerno y M. Castro, Phys. Rev. Lett. 87, 236103 (2001).
- ⁴ M. Nicoli, R. Cuerno y M. Castro, preprint (2007).

^{*} nmatteo@math.uc3m.es

² P. Pelcé y A. Libchaber eds., *Dynamics of Curved Fronts* (Academic Press, Nueva York, 1988).

Fluctuaciones fuera del equilibrio en flujo plano de Couette

José María <u>Ortiz de Zárate</u> Leira^{*} y Jan V. Sengers Departamento de Física Aplicada I, Universidad Complutense 28040 Madrid

Hemos evaluado las fluctuaciones fuera del equilibrio en la velocidad de un fluido moviéndose bajo una cizalla constante y uniforme. En particular, se ha estudiado un flujo en la dirección del eje x, con la vorticidad en la dirección del eje y, y el gradiente de velocidades en la dirección del eje z: $\mathbf{v}_0 = \{\dot{\gamma}_0 z, 0, 0\}$, configuración que ordinariamente se llama flujo plano de Couette. En este caso, se puede demostrar que las fluctuaciones en la componente vertical de la velocidad $\delta v_z(\mathbf{r}, t)$ se pueden obtener (en aproximación lineal) de resolver una única ecuación, denominada ecuación estocástica de Orr-Sommerfeld:

$$\partial_t (\nabla^2 \delta v_z) + z \; \partial_x (\nabla^2 \delta v_z) - \frac{1}{Re} \nabla^4 (\delta v_z) = - \{ \nabla \times \nabla \times [\nabla (\delta \Pi)] \}_z \,.$$

donde Re es el número de Reynolds y $\delta \Pi(\mathbf{r}, t)$ es el tensor estocástico de presiones. En este caso, al despreciar el calentamiento viscoso, el ruido térmico proviene sólo de fluctuaciones en dicho tensor (único flujo disipativo del problema). Todas las cantidades que aparecen en la ecuación de Orr-Sommerfeld han sido convenientemente adimensionalizadas.

Las funciones de correlación entre las distintas componentes del tensor estocástico de presiones vienen dadas por el teorema de fluctuación-disipación. En este caso particular se escribe:

$$\begin{aligned} \langle \delta \Pi_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \cdot \delta \Pi_{kl}(\mathbf{r}', \mathbf{t}') \rangle \\ &= 2k_{\rm B}T\eta \left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ \delta(\mathbf{t} - \mathbf{t}'), \end{aligned}$$

donde η es la viscosidad de cizalla, T la temperatura y $k_{\rm B}$ la constante de Boltzmann. En la formulación del teorema hemos utilizado la simplificación de fluido incompresible¹.

Hemos resuelto la ecuación estocástica de Orr-Sommerfeld y, usando el teorema de fluctuacióndisipación, hemos calculado la correspondiente función de autocorrelación entre las fluctuaciones de la componente vertical de la velocidad. Si hacemos el cálculo sin tener en cuenta condiciones de contorno, reproducimos resultados anteriores de Dufty y Lutsko², luego confirmados por Wada y Sasa³ (ver figura).

La novedad del presente trabajo es que hemos realizado el mismo cálculo, pero incorporando condiciones de contorno para la velocidad:

$$\delta v_z = \partial_z \delta v_z = 0,$$
 at $z = \pm 1,$

y usando una aproximación Galerkin de segundo orden. La inclusión de dichas condiciones de contorno modifica el comportamiento de las fluctuaciones, en particular para números de onda pequeños (ver figura). Confirmamos para el flujo plano de Couette comportamientos similares que han sido discutidos con detalle previamente en el problema de Rayleigh-Bénard⁴.

100 1010 10 10 10 10° 10 10^{-1} 10 10 $\sim^{(\mathrm{NE})}(q_\parallel)$ 10 10 10 10 10 0.1 1000 10 100 q_{\parallel}

Figura 1. Intensidad de las fluctuaciones fuera del equilibrio en la componente vertical de la velocidad, en función de la magnitud del número de onda (para **q** en la dirección del flujo). El panel superior es para Re = 20 y el inferior para Re = 300. Las líneas de trazos representan los resultados sin considerar condiciones de contorno³, mientras que las líneas continuas representan los efectos del confinamiento.

Por otro lado, hemos estudiado la intensidad de las fluctuaciones de no equilibrio en función del número de Reynolds, comprobando que permanece finita para cualquier valor de Re. Este resultado confirma que el flujo plano de Couette es linearmente estable independientemente de Re. Por consiguiente, la explicación de la transición hacia la turbulencia requiere modelos más complejos, probablemente no-lineales.

* jmortizz@fis.ucm.es

¹ J.M. Ortiz de Zárate y J. V. Sengers, *Hydrodynamic fluctuations in fluids and fluid mixtures*, Elsevier, Amsterdam, 2006.

² J. Lutsko y J.W. Dufty, Phys. Rev. A **32**, 3040 (1985).

³ H. Wada and S. I. Sasa, Phys. Rev. E **67**, 065302(R) (2003).

⁴ J.M. Ortiz de Zárate y J.V. Sengers, Phys. Rev. E 66, 036305 (2002).

Simulaciones Monte Carlo de polímeros vivos con interacciones laterales en 2D

<u>Alfonso Páez</u>^{*}, Pedro Tarazona, Enrique Velasco Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada Universidad Autónoma de Madrid E-28049 Madrid

Los polímeros desempeñan un papel muy importante en muchos procesos biológicos, como por ejemplo la división celular. El anillo septal es una organela compuesta por multitud de polímeros que se forma durante el proceso de división celular en bacterias. Este anillo se forma en la cara interna de la membrana en el centro de la bacteria y es capaz de constreñirla para separarla en dos células independientes.

Hemos realizado simulaciones Monte Carlo de gran numero de partículas con un grado de libertad orientacional y volumen excluido sobre una red triangular bidimensional. Estas partículas son capaces de formar dos enlaces fuertes en lados opuestos de la molécula (cabeza y cola) con otras partículas que estén suficientemente cerca y con orientación similar (enlaces de polimerización de energía U_{pol}) y cuya energía se ve corregida por la curvatura del filamento en ese punto (U_{tor}) . Además, en nuestro modelo cada partícula puede formar un máximo de cuatro enlaces débiles (enlaces laterales de energía U_{lat}) con otras partículas cercanas sin que sea necesaria la correlación de orientaciones.

Las características del modelo propuesto le permiten formar polímeros al sobrepasar un valor de la densidad de moléculas (densidad crítica de polimerización) y que estos formen agregados por encima un valor superior de densidad (densidad crítica de agregación). Hemos estudiado las características de estos polímeros y agregados para distintos valores de los parámetros energéticos del modelo observando tres tipos de agregados diferentes:



Figura 1. Fase I: Varios filamentos antiparalelos que cancelan la curvatura global del agregado.



Figura 2. La fase C se forma por agregación de filamentos paralelos que mantienen la curvatura preferente de los polímeros individuales y fase O está compuesta por filamentos concéntricos, ciclados o en espiral.

Hemos estudiado además la estabilidad de las distintas fases para distintos valores de los parámetros energéticos comprobando que la fase ciclada (Fase O) es fuertemente metaestable.



Figura 3. Fracción de partículas en las distintas fases condensadas para $U_{pol}=9.0; U_{lat}=0.85; U_{tor+}=9.0; [k_BT]$

 * alfonso.paez@uam.es

- ² Sayar, M., Stupp, S.(2005). Physical review E. Assembly of one-dimensional supramolecular objects: From monomers to networks. DOI:10.1103/PhysRevE.72.011803.
- ³ Mingorance, J., Tadros, M., Vicente, M., González, J.M., Rivas, G. and Vélez, M., (2005). Journal of Biological Chemistry. Visualization of Single Escherichia Coli FtsZ Filament Dynamics with Atomic Force Microscopy. 280: 20909-20914.

¹ Hörger, I., Velasco, E., Mingorance, J., Rivas, G., Vélez, M., Tarazona, P. "Langevin Computer Simulations of bacterial protein filaments and the and the force generating mechanism during the cell division", Phys.Rev E 76 (2007)

Can protein folds be automatically and objectively defined? An analysis based on transitivity

Alberto Pascual-García, Enrique García de Bustos, David Abia, Angel Ramírez Ortiz and Ugo Bastolla^{*} Centro de Biología Molecular 'Severo Ochoa', (CSIC-UAM), Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain

Equivalence relationship; Transitivity

In mathematical terms, a protein fold is an equivalence class of protein structures. The question that we investigate here is to which extent the fold can be defined only based on a quantitative measure of structural similarity and a threshold. Mathematically, an equivalence relationship based on a similarity measure is automatically endowed with the reflexive property (any object ais similar to itself) and with the symmetric property (if a is similar to b, then b is similar to a). The transitive property is more problematic. For transitivity to hold, if a is similar to b and b is similar to c, then a must also be similar to c. This property is essential for a similarity measure to give rise to an objective equivalence relationship.

Uniparental evolution satisfies transitivity

There is a simple reason why one should expect that protein structural similarity fulfils the transitive property. Most genes coding for related proteins are related through gene duplication¹, and they can be represented as the leaves of a phylogenetic tree. The distance across such a tree, i.e. the time spent since the divergence of two lineages, is ultrametric², and therefore it is naturally endowed with the transitive property. In fact, if the lineages leading to a and b and those leading to b and cboth splitted less than t million years ago, the same is true also for the lineages leading to a and c, for whatever value of the dissimilarity threshold t. Therefore, a phylogenetic tree naturally implies a hierarchical classification for every similarity threshold. If we can find a structural dissimilarity measure between pairs of proteins linearly correlated with their time of divergence, as it happens for suitable sequence distances, the transitivity property will approximately hold for such a distance.

Fragment assembly violates transitivity;

Nevertheless, single gene duplication is not the only possible mechanism for the evolution of protein domains. It is well known that complex proteins are formed from a combination of individual domains with independent evolutionary history. For this reason, the domain and not the complete protein is the basic unit for protein classification. However, there is increasing evidence that protein domains are not always fundamental units, but they may be formed by smaller fragments below the domain level^{4,5}, and it has been observed that many structurally unrelated proteins share common substructures^{6,7,5}.

If two domains a and b are similar because of a partial substructure A, while b and c are similar because of a different partial substructure C, then a and c are not similar and transitivity is violated. Several authors refer to this kind of situation stating that protein space is continuous, since one can connect two different structures a and c

through two small steps passing through b. In this case, there is no classification simulataneously compatible with all the pairwise similarity relationships. Borrowing a term from statistical physics, we can say that the classification problem is $frustrated^3$ if transitivity is violated. We can expect that, if this situation is common for many triplets, there is an exponentially large number of substantially different classifications that are almost optimal, in the sense that they violate a small and similar number of pairwise relationships, whereas, if the transitive property approximately holds, a well-defined unique globally optimal classification given by the ultrametric tree exists, and all sub-optimal classifications are very similar to the optimal one. We expect that the transitive property depends on the threshold used for defining structural similarity: When this threshold is very large, only domains that share most of their structure are regarded as similar, and we expect that transitivity approximately holds, and the structure space is made of discrete clusters. In contrast, for less stringent thresholds, two domains may be regarded as similar due to partial substructures. We propose here a measure for assessing violations of the transitive property as a hiererchical clustering algorithm joins proteins into clusters. In this way, we aim at detecting a cross-over point beyond which the hierarchical clustering is not justified anymore. We propose to identify the clusters defined up to this point as intrinsic equivalence classes of protein domains. At smaller structural similarity, the protein structure space should be rather regarded as continuous, and the similarity relationships between clusters should be represented as a network rather than as a tree.

- ² R. Rammal, G. Toulouse and M.A. Virasoro Ultrametricity for physicists Rev. Mod. Phys. 58, 765 - 788 (1986).
- ³ G. Toulouse, Theory of the frustration effect in spin glasses: I Comm. Phys. **2**, 115-119 (1977).
- ⁴ Tsai, Maizel and Nussinov, Anatomy of protein structures: Visualizing how a one-dimensional protein chain folds into a three dimensional shape, PNAS 97: 12038-12043 (2000).
- ⁵ JD Szustakowski, S Kasif, Z Weng (2005) Less is more: towards an optimal universal description of protein folds. *Bioinformatics* S2: ii66-ii71.
- ⁶ Efimov AV. Structural trees for protein superfamilies. PROTEINS: Structure, Function and Genetics. 1997;28:241-60.
- ⁷ A. Harrison, F. Pearl, R. Mott, J. Thornton, C. Orengo,Quantifying the similarity within fold space, J. Mol. Biol. 323:909-26 (2002).

^{*}ubastolla@cbm.uam.es

 $^{^1}$ S. Ohno, Evolution by gene duplication (Springer, 1970).

Estudio Experimental de la Convección Granular

J.M. Pastor^{*}, A. Garcimartín, D. Maza

Grupo de Medios Granulares[†] Departamento de Física y Matemática Aplicada Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra 31080 Pamplona

El fenómeno objeto del presente estudio es la llamada convección granular. Cuando un medio granular es agitado puede presentar un movimiento colectivo y ordenado de las partículas que lo constituyen. El ejemplo clásico corresponde a una geometría cilíndrica del recipiente en el que reposa el medio granular y una vibración sinusoidal en la dirección de la gravedad. En este caso el movimiento que presentan los granos es similar al movimiento convectivo que presenta un fluido calentado desde abajo en un recipiente de similares características.

Por una parte, se ha estudiado el movimiento del centro de masas de la capa granular a partir de medidas del tiempo de vuelo para distintas amplitudes de excitación utilizando como parámetro de control la aceleración adimensional, $\Gamma = \frac{A\omega^2}{g}$. Se ha comprobado la aparición de una bifurcación en el tiempo de vuelo por encima de un valor critico del parámetro, Γ_c . Como el medio se puede considerar perfectamente inelástico, se puede comparar los resultados obtenidos con los predichos por el modelo de una bola perfectamente inelástica. Si bien ambos resultados coinciden cualitativamente, difieren cuantitativamente en el valor del parámetro crítico donde aparece de la bifurcación. Se ha modificado el modelo de la bola inelástica de manera satisfactoria logrando reproducir las medidas obtenidas en el laboratorio, ver figura 1.



Figura 1. Tiempo de vuelo en función de la aceleración adimensional.

Por otra parte, se ha obtenido el movimiento resuelto en el tiempo de los granos tanto en la superficie de la capa como en la proximidad de la pared del contenedor. El movimiento durante una oscilación esta compuesto por saltos verticales, y un arrastre global ordenado que representa el movimiento convectivo. Cuando los granos están "volando" se ha observado que su dinámica no corresponde a un vuelo libre y la fricción juega un papel fundamental tanto en el comportamiento a tiempos cortos (saltos) como a tiempos largos (arrastre), ver figura 2.



Figura 2. Posiciónón lateral relativa a la pared del contenedor para distintas alturas respecto del fondo en función del tiempo.

Como complemento a la presente investigación se llevarán a cabo nuevos experimentos en microgravedad en los cuales se estudiará la existencia de algún movimiento colectivo del sistema cuando no existen condiciones que rompan la simetría. Estos experimentos se realizarán dentro de las campañas de vuelos parabólicos de la Agencia Espacial Europea. Además estos nuevos experimentos inspiraran proyectos de investigación en un satélite tipo "Cubesat"[‡].

- [†] http://fisica.unav.es/granular/
- [‡] http://www.tecnun.es/tecnunsat/

^{*} jpgutierrez@alumni.unav.es

¹ J.M. Pastor, D. Maza, I. Zuriguel, A. Garcimartín, J.-F. Boudet, *Time resolved particle dynamics in granular convection* (Physica D 232, 128 - 135. 2007).

² A. Garcimartín, J.M Pastor, R. Arevalo & D. Maza, Convection in a Vibrated Granular Layer (Journal Special Topics 146, 331-340, 2007).
Vectores de Lyapunov en sistemas con caos espacio-temporal

Diego Pazó, Ivan G. Szendro, Miguel A. Rodríguez y Juan M. López

Instituto de Física de Cantabria (IFCA)

 $CSIC\mathchar`-Universidad\ de\ Cantabria$

39005 Santander

El caos es usualmente cuantificado por medio de los exponetes de Lyapunov (ELs) que miden separación exponencial de trayectorias cercanas¹. En los sistemas extendidos en el espacio es habitual observar caos espaciotemporal (CET) que se distingue por una aleatoriedad aparente en el tiempo y en el espacio. Es interesante observar que los sistemas con CET son extensivos en el sentido de que los espectros de Lyapunov convergen a una densidad cuando el tamaño del sistema aumenta.

No existe una definición única de vector de Lyapunov (VL), es habitual referirse con ese nombre a los vectores que aparecen al calcular los ELs por medio del algoritmo de Bennetin et al. que usa sucesivas ortonormalizaciones de Gram-Schmidt. Estos VLs son conocidos como vectores backward pues sólo se comportan "bien" (es decir creciendo/menguando con la tasa exponencial de su EL asociado) en el límite $t \to -\infty$. Otro tipo de VL es el llamado característico (o covariante), que aun siendo más difícil de hallar, se comporta "bien" en los dos límites temporales, pasado y futuro. Como hemos demostrado recientemente², los VLs característicos tienen un significado físico mucho más claro que los VLs backward. Los primeros tienen una dinámica mapeable a una superficie rugosa por medio de la transformación de Hopf-Cole, que consiste en tomar el logaritmo del valor absoluto del VL. Los resultados aquí descritos se refieren a los VLs una vez realizada la transformación de Hopf-Cole que los transforma en una "superficie" asociada.

En esta contribución demostramos que los VLs característicos presentan una universalidad cuantitativa y cualitativa [dentro de la familia de sistemas³ con caos espacio-temporal cuyo primer vector de Lyapunov (bajo la transformación de Hopf-Cole) pertenece a la clase de universalidad de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ)].

Mostramos aquí los resultados⁴ para tres sistemas:

1. Un retículo de mapas caóticos acoplados:

$$u_{i}(t+1) = \epsilon f(u_{i+1}(t)) + \epsilon f(u_{i-1}(t)) + (1-2\epsilon) f(u_{i}(t)),$$
(1)

donde $\epsilon = 0.2$ y la función f es el mapa de la tienda asimétrico $f(x \le 1/a) = a x$; $f(x > 1/a) = a (x - 1)/(1 - a) \operatorname{con} a = 2.3$.

2. El modelo Lorenz'96 (un modelo de juguete para estudios del clima):

$$\dot{x}_i = -x_i - x_{i-1}(x_{i-2} - x_{i+1}) + F \tag{2}$$

 $\operatorname{con} F = 8.$

3. Una ecuación estocástica multiplicativa (propuesta³ anteriormente como modelo para la dinámica del primer vector de Lyapunov):

$$\partial_t w = \zeta w + \partial_{xx} w \tag{3}$$

donde $\zeta(x, t)$ is un término fluctuante que imita una señal caótica y que asumimos toma la forma de ruido blanco: $\langle \zeta(x,t) \zeta(x',t') \rangle = 2 \,\delta(x-x') \,\delta(t-t').$

En todos los casos, para los ELs más grandes, el factor de estructura $S_n(k)$ del VL correspondiente al *n*-ésimo EL escala como ~ k^{-2} sólo hasta una cierta escala (de hecho es KPZ "a trozos"). A partir de ahí se tiene $S_n(k) \sim k^{-\gamma}$ con un γ diferente según se consideren VLs backward o característicos.



Figura 1. Factores de estructura de los VLs para los tres modelos considerados: (a,b) retículo de mapas acoplados (1) con tamaño L = 1024, de arriba abajo los VLs con n = 1, 4, 8, 16, 32, 64, 128; (c,d) modelo Lorenz'96 (2) con L = 256, n = 1, 4, 8, 12; y (e,f) ecuación estocástica (3) con L = 1024, n = 1, 4, 8, 16, 32, 64.

- ¹ J.-P. Eckmann and D. Ruelle, Rev. Mod. Phys. **57**, 617 (1985).
- ² I. G. Szendro, D. Pazó, M. A. Rodríguez, and J. M. López, Phys. Rev. E **76**, 025202 (2007).
- ³ A. Pikovsky and A. Politi, Nonlinearity **11**, 1049 (1998).
- 4 D. Pazó $et\ al.$ (en preparación).

145

Mecanismos de reexcitación en tejido cardiaco

Angelina Peñaranda^{*}, Inma R. Cantapiedra, Blas Echebarria Departament de Física Aplicada Universitat Politècnica de Catalunya 08028 Barcelona

La muerte cardíaca súbita (también conocida como infarto súbito) es el fallecimiento a consecuencia de la pérdida abrupta de la función cardíaca. En los países occidentales es una de las primeras causas de mortalidad. La causa más común de muerte cardiaca súbita es un desorden del ritmo cardiaco (arritmia) llamado fibrilación ventricular (FV). La fibrilación ventricular está asociada a una disfunción en la propagación de las ondas eléctricas en el corazón, en el que súbitamente las señales eléctricas que regulan el bombeo de los ventrículos, se vuelven rápidas y caóticas. Las contracciones rítmicas paran, y el corazón no puede bombear sangre al resto del cuerpo.

En muchos casos, el origen de la fibrilación ventricular se ha relacionado con una mayor inhomogeneidad y una creciente dispersión en la repolarización del tejido ventricular. El miocardio ventricular normal presenta gradientes en sus propiedades eléctricas, tanto entre el apex y la base, como entre el endocardio y epicardio. Además, pueden existir inhomogeneidades a pequeña escala, cuando una pequeña porción de tejido presenta propiedades electrofisiológicas diferentes a las de sus vecinos. Estas inhomgeneidades producen diferencias locales en el estado refractario, de forma que una región de tejido se vuelve excitable antes que el resto, y es susceptible a ser reexcitada. La propagación de esta reexcitación puede originar ondas reentrantes, creando espirales con un periodo más rápido que el ritmo normal, produciendo taquicardia que puede desencadenar en fibrilación si estas

ondas reentrantes se desestabilizan.

Partiendo de un modelo electrofisiológico para el potencial de membrana¹, hemos estudiado diversos mecanismos capaces de producir reexcitación en el epicardio. Así, se han analizado el efecto, tanto de la variación en la dinámica de inactivación de la corriente de sodio, como de un aumento de la conductividad de la corriente de potasio. Por otra parte. también se ha estudiado el efecto de un aumento de la concentración de calcio extracelular con respecto a sus valores normales.

Nuestros resultados confirman resultados experimentales en los que se ponía de manifiesto la influencia proarrítmica de un incremento en la concentración de calcio extracelular. Además, encontramos que una disminución en el tiempo de inactivación de las puertas de sodio (τ_h) aumenta la probablidad de reexcitación, como posiblemente sucede en pacientes que presentan síndrome de Brugada². Sin embargo, encontramos que este aumento no es monotónico, sino que existen "ventanas de vulnerabilidad" en las que la probabilidad de excitación es máxima, separadas por regiones "seguras" incluso para valores bajos de τ_h .

^{*} angelina@fa.upc.edu

¹ C.Luo, Y Rudy. Circ. Res **74**, 1071 (1994).

² P. Brugada, J. Brugada, J. Am. Coll. Cardiol. 20, 1391 (1992)

Justo Pérez y Antonio Padilla

Departamento de Física Fundamental y Experimental Electrónica y Sistemas Univ. La Laguna

38205 La Laguna

La espectroscopía de disoluciones criogénicas es una herramienta ampliamente utilizada en el estudio de los mecanimos de relajación en fase condensada. En particular, los espectros en el infrarrojo próximo y lejano de moléculas diatómicas polares en gases nobles licuados ofrecen una valiosa información acerca de los mecanismos de reorientación de las moléculas en disolución. En los últimos años se ha desarrollado un amplio programa de colaboración entre las Universidades de San Petersburgo, Braunschweig, Amberes, Salamanca y La Laguna, para el estudio, experimental y teórico, de los espectros de HF, HCl,HBr, HI en Ar,Kr,Xe y SF6 licuados en un amplio rango de condiciones termodinámicas. Uno de los resultados de este programa ha sido la interpretación de la aparición de la rama Q, una resonancia central del espectro de vibración rotación, en principio prohibida por las reglas de selección cuánticas de la molécula aislada, y que se ha mostrado consecuencia de la persistencia de correlaciones orientacionales de larga duración entre la molécula disuelta y las de disolvente, un problema que permanecía abierto por más de cuatro décadas. Otros efectos descubiertos a lo largo de este programa como por ejemplo la disminución de las poblaciones de los niveles de menor energía rotacional, y la definición de las escalas de tiempo de la correlación orientacional continúan siendo objeto de investigación

Influencia de una mezcla inhomogenea en un fluido activo químicamente

<u>Vicente Pérez Muñuzuri</u>^{*} y Guillermo Fernández García Grupo de Física No Lineal. Facultad de Físicas Universidad de Santiago de Compostela 15782 Santiago de Compostela

El mezclado no homogéneo es típico de la mayoría de los sistemas naturales. Los fluidos no-newtonianos son un ejemplo de este comportamiento donde los parámetros reológicos juegan un papel importante en la calidad de la mezcla¹. Por otra parte, en los fluidos newtonianos la existencia de reacciones químicas en el fluido pueden modificar las propiedades de la mezcla. Existen ejemplos como la contaminación atmosférica transportada por el viento², o las poblaciones de plankton oceánico³, entre otros, donde la presencia de reacciones químicas y sus efectos en la mezcla no pueden ignorarse. A mayores, la presencia de inhomogeneidades de origen estructural (condiciones de contorno) o no uniformidades en ciertos parámetros externos (densidad, temperatura, etc) también modifican las características de la mezcla.

Para estudiar estos efectos se ha simulado un fluido inhomogéneo activo químicamente mediante un flujo de cizalla modulado por un ruido Gaussiano correlacionado espacio-temporalmente⁴. Los parámetros principales del modelo son la frecuencia de mezclado del flujo de cizalla ν_f , y la intensidad del ruido σ .

La Figura muestra el resultado principal de estas simulaciones. El periodo medio entre dos ondas consecutivas tiene un máximo para un valor intermedio de la intensidad de ruido. El valor máximo decrece al aumentar la frecuencia de mezclado. Este máximo coincide un patrón espacio-temporal intermedio entre una estructura donde los frentes están bien definidos (ver fila inferior en la Figura) y una estructura donde sólo permanecen puntos excitados con una frecuencia de excitación alta.

La existencia de este valor máximo puede considerarse relacionada con una transición inducida por ruido de acuerdo con el modelo de bandas,

$$\dot{\omega} = -\bar{\lambda} \left[1 + \eta(t) \right] \omega + \mu \tag{1}$$

donde ω es el tamaño de los filamentos, y $\eta(t)$ es un ruido Gaussiano blanco con correlación $\langle \eta(t)\eta(t')\rangle = 2\sigma^2\delta(t-t')$. La intensidad de ruido en la transición viene dada por, $\sigma_c \propto \bar{\lambda}^{-3/2}$ con $\bar{\lambda}$ el exponente de Lyapunov

medio.



Figura 1. (Fila superior) Comportamiento del periodo medio como función de la intensidad de ruido para tres frecuencias de mezclado. De izquierda a derecha, $\log_{10} \nu_f = -2.0$, $\log_{10} \nu_f = -0.5$ and $\log_{10} \nu_f = 0$, respectivamente. (Fila inferior) Estructuras espacio-temporales obtenidas para diferentes valores de la intensidad de ruido $(\log_{10} \nu_f = 0)$.

Finalmente se presentarán resultados en función de los exponentes de Lyapunov (FSLE) de tamaño finito que complementan los resultados anteriores.

* vicente.perez@cesga.es

- ¹ P.D. Anderson, O.S. Galaktionov, G.W.M. Peters, F.N. van de Vosse, and H.E.H. Meijer, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **93**, 265 (2000).
- ² A. Wonhas and J.C. Vassiliscos, Phys. Rev. E 65, 051111 (2002); D. Poppe and H. Lustfeld, J. Geophys. Res. 101, 14373 (1996).
- ³ E.R. Abraham, Nature **391**, 577 (1998); E.R. Abraham *et al.*, Nature **407**, 727 (2000).
- ⁴ V. Pérez-Muñuzuri and G. Fernández-García, Phys. Rev. E 75, 046209 (2007); V. Pérez-Muñuzuri and G. Fernández-García, Submitted Phys. Rev. E (2007).

Noise spectra and correlations in semiconductor ring laser in the bidirectional regime

Antonio Pérez S.*, Roberta Zambrini, Alessandro Scirè and Pere Colet

Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, IFISC[†], CSIC-UIB, Campus UIB, E-07071 Palma de Mallorca,

Spain.

We consider the effects of the spontaneous emission noise in the Langevin formulation for a two mode rate equations model for a SRL operating in the bidirectional regime. The model is a two-mode Maxwell-Bloch rate equation model¹. The analysis has been carried out by linearizing the model close to a stable stationary solution, and considering effect of noise as stochastic perturbations expressed by Langevin forces. We analytically investigate the influence of complex backscattering coefficients when the two modes are reinterpreted in terms of mode-intensity sum and difference. As a result we have calculated two noise spectra versus ω , the dimensionless frequency rescaled to photon lifetime: the Total Intensity Noise spectrum (I-Spectrum, $< |I(\omega)|^2 >$, behaving similarly to the standard RIN for single-mode semiconductor lasers, see fig. 1) and Intensity Difference Noise spectrum (D-spectrum, $\langle |D(\omega)|^2 \rangle$), see fig. 2, which unveiled new features.



Figura 1. Total Intensity Noise spectrum. The black line is the analytical result and the grey is the numerical simulation.

Indeed, the I-spectrum is shaped by total field carrier inversion energy exchange processes (relaxation oscillations) whereas the D-spectrum is shaped by the intermodal energy redistribution processes which are strongly influenced by backscattering and induce alternate oscillations. The effect of the noise as a generic perturbation emphasize the system resonances associated to the physical processes of field/medium energy exchange and the energy exchange between modes. Moreover we analize the cross and auto correlations which are related to the spectra by Wiener-Khinchin theorem, like D autocorrelation C_{DD} , see fig. 3. Our analytic results are in excellent agreement with numerical simulations.



Figura 2. Intensity Difference Noise Spectrum. The black line is the analytical result and the grey is the numerical simulation.



Figura 3. Intensity Difference numerical auto-correlation .

* antonio@ifisc.uib.es

¹ M. Sorel, G. Giuliani, A. Scirè, R. Miglieria, S. Donati and P.J.R. Laybourn, IEEE J.Q.E., **39**, **10**, 1187 (2003).
[†] http://ifisc.uib.es

Perfect Plasticity and Shear Deformation in a Random Medium

Clara B. Picallo^{*,†}, Mikko J. Alava⁺, Stefano Zapperi^{†,‡}, Juan M. López Instituto de Física de Cantabria (CSIC-UC), 39005 Santander, Spain

Many materials in nature exhibit elasto-plastic behavior. Under small load, they show an elastic regime in which the strain is proportional to the applied stress and deformations are reversible. Beyond the yield point, they display plastic behavior and deformations are irreversible. Perfect plasticity is characterized by the fact that the strain can increase indefinitely without further increase of the stress. Most commonly, what is observed is "hardening", i.e., the stress required to deform the material increases with the strain. For crystalline materials, plasticity can be explained by the motion and interactions among dislocations of crystalline planes but for amorphous media the origin of plastic behavior is still unclear.

Here we study the behavior of a random medium subject to an increasing external stress within the framework of the random fuse model (RFM), electrical analog of the elasticity problem. One can define a plastic version of the RFM¹ letting the fuses behave linearly with a conductivity q until the current (stress) reaches a threshold value i_{th} and then keeping it constant even though the voltage (strain) continues to increase. We perform numerical simulations to study the macroscopic mechanical response of the model and the scaling with system size as we approach the plastic steady state. We average the results over a large number of realizations and find that the yield stress distribution obeys Gaussian statistics. We will also address here the common belief that this problem belongs to the random bond Ising model universality class since the yield current of the system is given by the sum of the individual currents along the minimum current interface. In this model there is no local rearrangement of stress

each time a bond plastifies, hence the strain avalanches, commonly observed in experiments are not reproduced.

We thus consider a more realistic model, following the spirit of models developed for tectonic plates² where a local slip event occurs when a bond reaches its threshold. Then, an irreversible strain is imposed on the bond, leading to a decrease in its elastic stress. In the RFM, this process can be simulated by adding a voltage source $V_s = \beta i_{th}/g$ to the element in a way to generate an opposite current in the bond. After that, the bond is healed and becomes elastic again. The consequent redistribution of stress throughout the system can cause more slip events, leading to avalanche dynamics. We observe a temporal and spatial localization of the plastic events into several directed paths coincident with minimal energy paths of the system. In the limit of infinitesimal β , this model is equivalent to the perfectly-plastic one but its versatility allows us to study also the effect of hardening and the influence of strain accumulation on the final fracture of the material.

 * picallo@ifca.unican.es

² P. A. Cowie, C. Vanneste, and D. Sornette, J. Geophys. Res. **98**, 21809 (1993).

[†] Institute for Scientific Interchange Foundation, 10133 Torino, Italy

⁺ Laboratory of Physics, Helsinki University of Technology, FIN-02015 HUT

[‡] CNR-INFM, S3, Dipartimento di Fisica, Università di Modena e Reggio Emilia, 41100 Modena, Italy

¹S. Roux, and A. Hansen, J. Phys. II (France) **2**, 1007 (1992).

Dynamics of a fluid interface in imbibition experiments. Part 2: Global dynamics

S. Santucci, <u>R. Planet</u>^{*}, K.J. Måløy and J. Ortín Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria Universitat de Barcelona Martí i Franquès 1, 08028 Barcelona

In many different correlated systems global quantities have been found to display non-Gaussian fluctuations around their mean value¹. The probability density function of the fluctuations seems to have an universal character².

Forced-flow imbibition is a particular case of two-phase fluid transport in porous media, in which an invading fluid that wets preferentially the medium displaces a resident fluid at constant injection rate. In this system the average velocity of the interface behaves as a global quantity. Recently, Rost et al.³ have performed phasefield simulations of imbibition flows, and have shown indeed that the fluctuations of this average velocity follow a PDF that resembles the universal distribution mentioned above.

In this work we present an experimental study of the average velocity fluctuations in imbibition. The experiments are carried out in a model porous medium that consists on a Hele-Shaw cell with a two-valued gap spacing randomly distributed in space⁴. We use a high resolution camera with a high acquisition rate to track effectively the dynamics of the interface. The large spatial and temporal resolution of our measurements allows to carry out the analysis procedure recently proposed by Måløy et al.⁵, and compute the local waiting time fluctuations along the front during its propagation: we measure at each point (x, y) of the recorded region the time spent by the front as it passes through this position. The inverse of the local waiting time gives a measure of the local velocity. The global fluid interface dynamics is then obtained by computing the average velocity $V(t) = \langle v(x,t) \rangle_x$, where $\langle \cdots \rangle_x$ is the spatial average along the front direction x.

Our results show that V(t) is a jerky signal, characterized by sudden bursts, signature of an intermittent dynamics. We analyze the scaling features of this signal along the lines of Rost et al.³: the average velocity fluctuations follow the universal BHP distribution studied by Bramwell et al.^{1,2}, and the rms fluctuations of the average velocity are linearly related to its time average, in very good agreement with the theoretical predictions.



Figura 1. Probability density function of the average velocity fluctuations for forced-flow imbibition experiments at four different flow rates. The data collapse in a single curve, consistent with a BHP distribution.

- ¹ S. T. Bramwell, P. C.W. Holdsworth, and J.-F. Pinton, Nature (London) 396, 552 (1998).
- ² S. T. Bramwell, K. Christensen, J.-Y. Fortin, P. C.W. Holdsworth, H. J. Jensen, S. Lise, J. M. López, M. Nicodemi, J.-F. Pinton, and M. Sellitto, Phys. Rev. Lett. 84, 3744 (2000).
- ³ M. Rost, L. Laurson, M. Dubé, and M. Alava, Phys. Rev. Lett. 98, 054502 (2007).
- ⁴ J. Soriano, J. Ortín, and A. Hernández-Machado, Phys. Rev. E 66, 031603 (2002).
- ⁵ K.J. Måløy, S. Santucci, J. Schmittbuhl, and R. Toussaint, Phys. Rev. Lett. **96**, 045501 (2006).

^{*} rplanet@ecm.ub.es

Finding optimal wavelet bases of cascade processes

<u>Oriol Pont[‡]</u>, Antonio Turiel[†] and Conrad Pérez-Vicente^{‡*}

†Institut de Ciències del Mar CSIC, Passeig Marítim de la Barceloneta 37-49 08003 Barcelona

‡Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, Diagonal 647 08028 Barcelona

Multiplicative cascade processes^{1,2} are found in a wide range of different physical systems. In these systems, the energy or an analogous quantity is transferred from large to small scales through an independent scale-invariant factor, thus conferring a statistically self-similar behaviour to this quantity. Such a behaviour is usually referred to as *multifractality*, because it is related to the presence of a multifractal structure (a hierarchical combination of fractal sets), which is a very general case of self-similarity.³ This way, the presence of multifractality allows to recognize the cascade process, either as a real mechanism or an effective one.⁴

An example of multiplicative cascade process is the case of Fully Developed Turbulence (FDT),⁵ where the cascade transfers the energy from large to small scales (where it is finally dissipated) giving rise to its multifractal structure, but such a behaviour is quite ubiquitous in nature and in fact has been observed in systems as diverse as stock market series,³ natural images,⁶ the heliospheric magnetic field, human gait, heartbeat dynamics,⁷ network traffic, fractures, fire plumes, as well as many other complex systems.

While studying the cascade process is known to be a good strategy to obtain the global descriptors of a system (such as its multifractal characterization⁴), it is possible to also achieve a local dynamical description, thanks to the *optimal wavelet* of the system. The cascade process with the optimal wavelet describes a local effective dynamics that can be used in reconstruction of gaps or lost information, data compression and time-series forecast.

Wavelet transforms are integral transforms that allow to separate the details of a signal that are relevant at different scale levels. In other words, this means that wavelet transforms are precisely tuned to an adjustable scale and, for this reason, they are a powerful strategy to represent cascade processes. In addition, wavelets are Hilbert bases, i.e., the wavelet transform is invertible, so that the signal can be completely represented from the cascade process.⁸ Given a signal s(t), the wavelet transform at scale r is defined as $\alpha_r(t) = s \otimes \Psi_r$, where $\Psi_r(t) = \Psi(\frac{t}{r})$ and Ψ is a certain function called *wavelet*. In a cascade process, the wavelet transform follows a multiplicative relation, i.e., two different scales r, L with r < L are related through a multiplicative variable:

$$\alpha_r \doteq \eta_{r/L} \alpha_L \tag{1}$$

where $\eta_{r/L}$ and α_L are mutually independent. Here, the symbol ' \doteq ' means that both sides equal in distribution, but not explicitly for each point t. The distribution of $\eta_{r/L}$ is usually used as a global descriptor of the system, as it determines the cascade process. In practical cases, the cascade relation works with almost any wavelet Ψ . We propose the existence of an *optimal* wavelet for which the cascade relation is geometrically (and not only statistically) verified, meaning that the equality (1) holds at each point t of the signal.¹⁰ This allows to retrieve the wavelet transform values at the smaller-scales from the one at the largest (whole-domain wide) scale, and through the $\eta_{r/L}$ distribution. Then, inverting the wavelet transform we can reconstruct the signal and infer missing points or even future ones. Existence of such a wavelet is not guaranteed, so its optimality must be checked a *posteriori*.

We will introduce a parameter to quantify the degree of optimality of a certain wavelet when faced a given dataset: $Q = \langle \frac{\alpha_r(t)}{\alpha_L(t)} \rangle$. We will prove that $Q = \sqrt[4]{r/L}$ only with the optimal wavelet (biunivocally), while nonoptimal wavelets always lead to higher values of Q, the farther from optimal the higher the value of Q. This parameter is rather simple and it is proven to be very robust and little data-demanding, while giving the same ranking in suboptimal wavelets as the mutual information $I\left(\frac{\alpha_r(t)}{\alpha_L(t)}, \alpha_L(t)\right)$ (which proves optimality if zero, but is little precise when faced to short datasets). Therefore, Qcan be used as a cost function whose minimization leads to the optimal wavelet. Even further, as illustration of a promising application, we will find the optimal wavelet of a dataset formed by Spanish IBEX-35 time series and discuss how this wavelet can improve predictions based on the multifractal cascade.

- * opont@ub.edu, turiel@icm.csic.es, conrad@ffn.ub.es
- ¹ R. Benzi, G. Paladin, G. Parisi, A. Vulpiani, J. Phys. A **17**, 3521 (1984).
- ² R. Benzi, L. Biferale, A. Crisanti, G. Paladin, M. Vergassola, A. Vulpiani, Physica D 65, 352–358 (1993).
- ³ B. Mandelbrot, A. Fisher, and L. Calvet, Cowles Foundation Discussion Paper No. 1164 (1997).
- ⁴ G. Parisi, U. Frisch, in *Proc. Intl. School of Physics E. Fermi*, (M. Ghil, R. Benzi and G. Parisi Eds., Amsterdam, 1985), pp 84–87
- ⁵ U. Frisch., *Turbulence*. Cambridge Univ. Press, Cambridge MA, 1995.
- ⁶ A. Turiel et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1098 (1998).
- ⁷ P. Ivanov et al., *Nature* **399**, 461 (1999).
- ⁸ I. Daubechies. *Ten lectures on wavelets*. CBMS-NSF Series in App. Math. Capital City Press, Montpelier, Vermont, 1992.
- ⁹ A. Chhabra et al., *Phys. Rev. A* **40**, 5284 (1989).
- ¹⁰ A. Turiel, N. Parga, Phys. Rev. Lett. **85**, 3325 (2000)

Explorando el paisaje de energía mediante redes complejas: Del doble pozo al análisis del espacio conformacional de proteínas.

Diego Prada-Gracia, Pablo Echenique, Jesús Gómez-Gardeñes, Fernando Falo*. Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI). Universidad de Zaragoza.

Proponemos un método de análisis del paisaje de energía¹ mediante el estudio de las propiedades de la red compleja construida a partir de la simulación de la dinámica estocástica del sistema.

Esta red, que denominaremos "red de Markov", se construye discretizando el espacio de coordenadas y representando cada celda de este espacio con un nodo en la red. Así la trayectoria pasa a ser a una secuencia de saltos entre nodos. Asignamos un peso a cada nodo de la red que depende del número relativo de veces que ha sido visitado. E Incluímos también las probabilidades de salto entre los nodos mediante el peso de sus links direccionales.

Con los pesos debidamente normalizados, esta red cumple propiedades como la del balance detallado u otras relaciones propias de una cadena de Markov². Disponemos tras esta transformación de una matriz estocástica.

Con estas herramientas y con las herramientas propias de la teoría de redes complejas somo capaces de:

- Localizar mínimos, que llamaremos globales o locales, del sistema.
- Definir estados conformacionales del sistema.
- Calcular las constantes de equilibrio entre estos estados.
- Definir tiempos de decorrelación estructural.
- Relacionar temperaturas de transición termodinámicas con cambios en la topología de la red.

- Predecir el comportamiento del sistema en un rango de temperaturas próximo a la temperatura simulada.
- Analizar y extraer información de trayectorias de sistemas con un alto número de grados de libertad mediante la red generada por el subespacio de coordenadas que llamamos "de reacción".
- ...

Este método de análisis y las herramientas que lo complementan han sido aplicados para su desarrollo a sistemas tan elementales como el oscilador armonico unidimensional, doble pozo, doble pozo modulado por una función seno... y a sistemas más complejos como el modelo de polímero HP (20 monómeros) en dos dimensiones "off-lattice"³. En este último caso aplicamos el método propuesto para advertir diferencias entre el paisaje de una secuencia buena plegadora y el paisaje de una secuencia mala o no plegadora.

[•] Calcular magnitudes termodinámicas como la diferencia de energía libre entre conformaciones, entropía, diferencias de energía interna...

^{*} fff@unizar.es

¹ D. J. Wales, *Energy Landscapes* (Cambridge University Press, Cambridge, 2003).

² N.G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland Personal Library, 1997).

³ Bongini L., Livi R., Politi A. and Torcini A. Physical Review E, vol.68, 061111, 2003.

Avalanches in fluid imbibition fronts

<u>Marc Pradas</u>^{*}, and A. Hernández-Machado Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de Barcelona, Avinguda Diagonal 647, E-08028 Barcelona

Avalanche phenomenon is observed in many different physical situations and it exhibits scale–invariant statistics^{1,2}. One example is fluid imbibition which occurs when a viscous fluid gets into a porous media displacing the in-present air. The two phases, liquid/air, are separated by a rough interface whose fluctuations have generally scaling properties. Imbibition processes can be classified in different types depending on the mean velocity of the interface[?]. Then we have driven imbibition when we impose a constant mean velocity V, and spontaneous imbibition when it follows Washburn's law $V \sim t^{-1/2}$. In addition, one can impose an external pinning force like gravity, obtaining an interface that gets pinned at a given time.

In this work⁴, we focus on the avalanche behavior of the interface when advances through a porous medium. We consider all the different imbibition cases. By using a mesoscopic phase field model, we can reproduce the imbibition phenomenon and analyze the statistical properties of the interface fluctuations by means of a scaling treatment. We observe that the typical quantities describing avalanches, such as size distribution, follow clear power-laws with well defined exponents (see Fig. 1). A comparison to experimental work is also given.



Figura 1. Avalanche size distribution of the interface in the case of imbibition with gravity. The distribution is well described by a power-law $P(A) \simeq A^{-\tau}$ with $\tau \simeq 1.16$.

 4 M. Pradas, and A. Hernández-Machado (preprint, 2008).

^{*} pradas@ecm.ub.es

¹ M. Rost, L. Laurson, M. Dubé, and M. Alava, *Fluctuations in fluid invasion into disordered media*, Phys. Rev. Lett. 98, 054502 (2007).

² K. J. Måløy, S. Santucci, J. Schmittbuhl, and R. Toussaint, Local waiting time fluctuations along a randomly pinned crack front, Phys. Rev. Lett. 96, 045501 (2006).

³ M. Alava, M. Dubé, and M. Rost, *Imbibition in disordered media*, Adv. Phys. 53, 83 (2004).

Microfluidic Bubble Logic

Manu Prakash^{*} and Neil Gershenfeld The Center for Bits and Atoms Massachusetts Institute of Technology Cambridge, MA 02139 USA

We present an all-fluidic universal logic family¹ operating at low Reynolds number in a two-phase flow in micro-channel geometries. A bubble traveling in a channel represent a bit, providing us with the capability to simultaneously transport materials and perform logic operations. Nonlinearities are introduced in the system by hydrodynamic bubble-to-bubble interactions. We demonstrate nonlinearity, bistability, cascadability, feedback and signal encoding, all the necessary attributes for a scalable microfluidic computer.

Due to lack of droplet-level control mechanisms, segmented-flow micro-reactors heavily depend on external control. Bubble logic provides an internal flowcontrol mechanism utilizing physical fluid dynamics providing a route to large scale droplet processors.

Previous attempts at all-fluidic computation used inertial effects² (high Reynolds number) or polymer blends³ (non-Newtonian fluids). Bubble Logic operates at both low Reynolds number and in Newtonian fluids, allowing us to operate at small length scales using common fluids. Nonlinearity in laminar, reversible stokes flow in Bubble Logic is introduced via bubble-to-bubble hydrodynamic interactions.



Figura 1. Universal logic and memory. Top row depicts a universal logic gate (AND and NOT) with a plot depicting gain. Bottom row depicts one bit bistable memory, implemented as a toggle flip-flop with a plot of bistability (in surface energy) as a bubble traverses the microfluidic geometry. Scale bar $\sim 100~\mu m.$



Figura 2. Microfluidic ring oscillator depicting cascading and feedback. Top inset depicts the schematic with three microfluidic AND gates connected in a ring configuration. Righ column depicts a time series of steady state operation of the oscilator at ~ 10 Hz. Scale bar $\sim 200 \ \mu m$.

The devices consists of 2D planar microchannel geometries fabricated using soft-lithography in PDMS bonded to glass. The data presented here is with Nitrogen as a gaseous phase and water (with 2% Tween20 as a surfactant) as the liquid phase. Figure III depicts device geometries for universal AND-NOT logic gate and a toggle flip-flop. Propagation time for the logic gates and flip-flop is ~ 10ms. Figure III depicts a ring oscillator consisting of three AND gates and a delay line, demonstrating cascading via a feedback circuit.

Bubble Logic provides an all-fluidic means of manipulating both materials and information, merging chemistry and computation.

- ² A Guide to Fluidics, *Macdonald*, London, 1972.
- ³ Microfluidic Memory and Control Devices, A. Groisman, M. Enzelberger and S. R. Quake, *Science*, 300, 2003

^{*} manup@mit.edu

¹ Microfluidic Bubble Logic, M Prakash and N Gershenfeld, *Science*, 315, 2007.

Método para la inversión de redes de contenidos

José Javier Ramasco* Complex Networks Lagrange Laboratory, ISI Foundation, 10133 Turin, Italy.

Muhittin Mungan

Department of Physics, Faculty of Arts and Sciences, Boğaziçi University, 34342 Bebek, Istanbul, Turkey, and and The Feza Gürsey Institute, Çengelköy, 34680 Istanbul, Turkey.

Las redes complejas han probado ser una herramienta útil para estudiar un gran número de sistemas reales desde Internet hasta las sociedades humanas o las reacciones metabólicas dentro de las células¹⁻³. Los nodos de las redes representan los elementos del sistema y las conexiones las relaciones entre ellos. En este contexto es importante caracterizar los grupos de nodos que presenten una fuerte interconexión. Dichos grupos han sido llamados comunidades en la literatura⁴ y se espera que jueguen un papel importante en la evolución del sistema en su conjunto. Se han propuesto una gran número de métodos para detectar comunidades en redes complejas, algunos basados en la evolución de "random walks" en la red, la optimización de medidas globables como la "modularidad", la sincronización de osciladores situados en los nodos, etc. Reciententemente, Newman y Leicht han introducido un nuevo método que no asume nada a priori sobre la red, se basa en la maximización de la probabilidad de encontrar una red como la dada desde la partición que se busca. La mejor partición será por tanto aquella que tenga una mayor probabilidad de producir una red como la que se observa⁵.

En este trabajo⁶, mostramos que en realidad este meétodo no sólo detecta comunidades sino que está especialmente adaptado para la busqueda de lo que en la literatura de algoritmos se ha conocido como equivalencia estructural entre nodos⁷. Esta equivalencia implica una similitud entre la vecindad de los nodos, en redes reales se espera que dichos nodos desarrollen funciones similares. También generalizamos el método para redes dirigidas y probamos númerica y analíticamente que es capaz de invertir en la práctica redes de contenidos incluso en la presencia de desorden en la estructura de interconexión. Las redes de contenidos se han usado en el pasado reciente para caraterizar con éxito relaciones entre proteinas en el interior de las celulas. En su forma ideal se generan asignando a los nodos una propiedad intrínseca que mediante una función de conexión es responsable por su conectividad. El desorden se introduce dando una cierta probabilidad a los nodos de conectarse sin seguir la directiva de la función de conexión. Las redes de contenido incluyen la forma clásica de las comunidades como un caso particular.

* jramasco@isi.it

- ¹ R. Pastor-Satorras and A. Vespignani, *Evolution and structure of the Internet: A statistical physics approach*, Cambridge University Press, Cambridge (2004).
- ² L.C. Freeman, *The development of social network analysis*, Empirical Press, Vancouver, (2004).
- ³ E. Ravasz *et al.*, Science **297**, 1551 (2002).
- ⁴ M. Grivan, and M.E.J. Newman, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **99**, 7821 (2002).
- ⁵ M.E.J. Newman, and E.A. Leicht, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **104**, 9564 (2007).
- ⁶ J.J. Ramasco and M. Mungan, arXiv:0711.1128.
- ⁷ P. Doreian, V. Batagelj, and A. Ferligoj, *Generalized Block-modeling*, Cambridge University Press, Cambridge, (2005).

Efectos del ruido externo en sistemas caóticos extendidos: el caso del modelo Lorenz`96

Jorge A. Revelli^{*}, Miguel A. Rodriguez, Horacio S. Wio Instituto de Física de Cantabria (IFCA) Avda. de los Castros s/n, Universidad de Cantabria 39005 Santander

Se investigaron los efectos producidos por un ruido externo sobre el comportamiento dinámico de un sistema caótico extendido. El modelo elegido es el Lorenz '96 que, si bien es un *modelo de juguete*, se utiliza en estudios sobre fenómenos climáticos al haber sido heurísticamente formulado como la forma mas sencilla de incluir los ingredientes esenciales de modelos atmosféricos globales.

A través del análisis de la evolución temporal del sistema y de sus correlaciones temporales y espaciales, se ha obtenido evidencia numérica de dos comportamientos de tipo *resonancia estocástica*. Dichos comportamientos se observan al graficar tanto la relación señal ruido usual, como una forma generalizada de ésta, ya sea en función de la intensidad de ruido externo o del tamaño del sistema. Los resultados indican que el mecanismo de estos fenómenos estaría asociado a una reducción del *ruido determinista* (caos) inducida por el *ruido -aleatorioexterno*.

A fin de aproximarnos a problemas relacionados con predicción climática, el estudio se extendió a las correspondencias y complementariedades existentes entre los diagramas TALAGRAND y MVL (Mean Variance of Logarithms) via la comparación de las características de la evolución de ambos diagramas.

Finalmente se discute la posible relevancia de estos estudios en el establecimiento de criterios para una óptima predicción meteorológica.

* revelli@ifca.unican.es

Inhomogeneidad anómala en sistemas con condiciones de contorno periódicas

J. A. White, <u>F. L. Román</u>^{*}, A. González y S. Velasco

Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca

La colectividad de la Mecánica Estadística correspondiente a las simulaciones mediante dinámica molecular de sistemas en equilibrio es diferente de la microcanónica ó EVN, donde $E, V \neq N$ son, respectivamente, la energía, el volumen y el número de partículas del sistema. Históricamente las simulaciones de dinámica molecular han sido asociadas a la colectividad $EVN\mathbf{M}$, donde \mathbf{M} es el momento lineal total del sistema que permanece constante. Recientemente, 1,2 se ha puesto de manifiesto la existencia de otra magnitud física conservada G, relacionada con el centro de masa del sistema. En particular, la consideración de condiciones de contorno periódicas en las simulaciones de dinámica molecular inducen la localización del centro de masas del sistema en una red discreta. El paso de dicha red está relacionado con la razón entre las masas de las partículas que componen el sistema. Esta localización del centro de masa introduce una correlación entre las posiciones de las partículas y modifica la densidad del sistema de manera que deja de ser uniforme. De esta manera un sistema que a priori podría ser considerado como homogéneo presenta, sorprendentemente, una inhomogeneidad provocada por las condiciones de contorno periódicas.

En este trabajo estudiaremos los perfiles de densidad de sistemas de discos duros conteniendo pocas partículas en la colectividad de dinámica molecular EVNMG. En la figura 1 se presentan los perfiles de densidad de un sistema de discos duros de la misma masa conteniendo 2 (a), 3 (b) y 4 (c) discos. En todos los casos la energía del sistema fue E = 1, su momento lineal total $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ y el tamaño del sistema fue $L^2 = 3 \times 3\sigma^2$ donde σ es el diámetro de los discos. Los perfiles de densidad muestran que, en efecto, dichos sistemas presentan una gran inhomogeneidad que se atenúa a medida que crece el número de partículas³.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Educación y Ciencia de España a través de los proyectos FIS2005-05081 FEDER y FIS2006-03764 FEDER.



Figura 1. Densidad de un sistema de discos duros con condiciones de contorno periódicas. El número de partículas del sistema fue a) N = 2, b) N = 3 y c) N = 4.

² W. W. Wood, J. J. Erpenbeck, G. A. Barker Jr. y J. D. Johnson, Phys. Rev. E **63**, 011106 (2000).

^{*} romanh@usal.es

¹ J. R. Ray y H. Zang, Phys. Rev. E **59**, 4781 (1999).

³ J. A. White, F. L. Román, A. González y S. Velasco, *enviado*

Transición de mojado por nemático de un sustrato microestructurado

Pedro Patricio¹, Chi-Tuong Pham¹ y José Manuel Romero Enrique²

¹ Centro de Física Teórica e Computacional, Universidade de Lisboa, Avenida Professor Gama Pinto 2, P-1649-003 Lisboa

(Portugal)

² Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Área de Física Teórica, Apartado de Correos 1065, 41080 Sevilla

Los fenómenos de mojado son un área de intensa investigación tanto a un nivel fundamental como por sus múltiples aplicaciones prácticas. En los últimos años el efecto de la rugosidad del sustrato en los fenómenos de mojado ha renovado su interés en la comunidad científica. Ello se debe a los avances tecnológicos que han permitido la fabricación controlada y el diseño de superficies sólidas estructuradas en la escala del nanómetro y micrómetro², que son cruciales en el desarrollo de dispositivos microfluídicos³. Desde un punto de vista, las leyes fenomenologógicas de Wenzel⁴ y Cassie⁵ permiten obtener el ángulo de contacto efectivo del líquido sobre el sustrato, anulándose éste en la transición de mojado. Sin embargo, bajo ciertas condiciones la situación es más compleja y el mojado completo de la superficie puede obtenerse como una secuencia de transiciones $(rellenado \ y \ despegado)^6$. Sin embargo, en la mayoría de los casos se han considerado fluidos simples, y hay relativamente poca información sobre el efecto que el orden orientacional puede tener sobre esta transición⁷.



Figura 1. Geometría del problema.

En este trabajo estudiamos la transición de mojado por fase nemática del sustrato microestructurado mostrado en la figura 1, cuando en volumen el fluido está en la fase líquida isótropa. Hemos considerado dentro de la aproximación de campo medio el modelo de Landau-de Gennes en presencia de este sustrato, donde la interacción cristal líquido-fluido está controlada por un parámetro w. La minimización del funcional se ha realizado mediante el método de los elementos finitos combinado con un mallado adaptativo⁸. Nuestros resultados muestran que para longitudes de onda moderadas del sustrato periódico $(L \lesssim 50\xi$, donde ξ es la longitud de correlación de la fase

nemática), hay una desviación apreciable respecto a la ley de Wenzel, que se recobra para $L \to \infty$. Asimismo, existen dos tipos de configuraciones del campo director en la capa nemática diferentes para $\alpha < 45^{\circ}$ y $\alpha > 45^{\circ}$, análogas a las configuraciones HAN y P observadas en la literatura para sustratos sinusoidales⁹. Estos resultados se interpretan con una modificación de la ley de Wenzel que introduce el efecto de las distorsiones elásticas del campo nemático¹⁰.



Figura 2. Diagrama de fases de mojado.

1

- ² S. Herminghaus *et al*, Adv. Mater. **11**, 1393 (1999); F. R. Service, Science **282**, 399 (1998).
- ³ A. Terry *et al*, Science **296**, 1841 (2002); G. M. Whitesides y A. D. Strock, Physics Today **54**, 42 (2001).
- ⁴ R. N. Wenzel, J. Phys. Colloid Chem. **53**, 1466 (1949); Ind. Eng. Chem. **28**, 988 (1936).
- ⁵ A. B. D. Cassie, Discuss. Faraday Soc. **3**, 11 (1948).
- ⁶ C. Rascón, A. O. Parry y A. Sartori, Phys. Rev. E **59**, 5697 (1999); K. Rejmer y M. Napiorkowski, Phys. Rev. E **62**, 588 (2000).
- ⁷ L. Harnau, F. Penna y S. Dietrich, Phys. Rev. E **74**, 021505 (2004); J. Fukuda, H. Stark y H. Yokoyama, Phys. Rev. E **69**, 021714 (2004).
- ⁸ P. Patricio, M. Tasinkevych y M. M. Telo da Gama, Eur. Phys. J. E 7, 117 (2002).
- ⁹ L. Harnau y S. Dietrich, Europhys. Lett. **73**, 28 (2006).
- ¹⁰ P. Patricio, C.-T. Pham y J. M. Romero-Enrique, aceptado para su publicación en Eur. Phys. J. E (2008).

Simulación por dinámica molecular de procesos de micelización en modelos moleculares de 'grano grueso'

<u>T. Ruiz–Herrero</u> * y E. Velasco

Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

En los últimos años ha comenzado a ser posible abordar el estudio de soluciones de moléculas anfifilicas en agua mediante técnicas de simulaciones por ordenador. A pesar de ello, los modelos atomísticos de interacción se encuentran aún lejos de poder predecir los comportamientos termodinámicos y estructurales de sistemas realistas, y los modelos de 'grano grueso', que atienden a las propiedades básicas de las moléculas, y no a sus detalles químicos, están jugando un papel muy importante.

En esta contribución analizamos un modelo sencillo, propuesto anteriormente y estudiado mediante técnicas del funcional de la densidad¹, utilizando simulación por ordenador con el método de dinámica molecular. El modelo de interacción no tiene en cuenta explícitamente el solvente (agua), salvo a través de términos en la interacción entre dos moléculas anfifílicas que simulan la interacción hidrofóbica; de esta manera es posible estudiar fenómenos de agregación utilizando sistemas con un número de moléculas relativamente grande. La forma molecular de las partículas se supone esférica, si bien hemos considerado asimismo formas moleculares alargadas con asimetría 'cabeza–cola', en la línea de los modelos propuestos por Cleaver y colaboradores².

Nuestros resultados preliminares (Fig. 1) se centran en el proceso de formación de micelas (micelización), es decir, de agregados esféricos en promedio en los que la interacción hidrofóbica se optimiza a base de maximizar el contacto entre 'colas' en regiones separadas del 'agua' (vacío en el modelo) a través de una corona esférica de 'cabezas'. Hemos estudiado la dependencia de la concentración micelar crítica (a la que aparece de manera espontánea un gran número de micelas) con la intensidad de la interacción hidrofóbica. Asimismo, hemos analizado la distribución de micelas en cuanto a sus tamaños y formas, y estudiado la cinética de agregación. Por último, hemos explorado el régimen de alta concentración, en el cual la interacción entre micelas es importante, y aventuramos un escenario con respecto a la estabilidad de las posibles estructuras en este régimen.



Figura 1. (a) Subregión de la celda de simulación donde se pueden observar varias micelas en equilibrio con moléculas anfifilicas aisladas. (b) Histograma que muestra el número de clusters n_s en función del tamaño del cluster s para concentración de moléculas anfifilicas por encima de la concentración crítica. Se observa una distribución bimodal con un máximo secundario alrededor de s = 7, que sería el tamaño medio de una micela.

^{*} teresa.ruiz@uam.es

¹ A. M. Somoza, E. Chacón, L. Mederos y P. Tarazona, A model for membranes, vesicles and micelles in amphiphilic systems, J. Phys. Condens. Matter 7, 5753 (1995).

² F. Barmes, M. Ricci, C. Zannoni y D. J. Cleaver, *Computer simulations of hard pear-shaped particles*, Phys. Rev. E 68, 021708 (2003).

Liquid water confined in graphene nanochannels at supercritical conditions

J. Sala^{*}, E. Guàrdia, J. Martí Departament de Física i Enginyeria Nuclear Universitat Politècnica de Catalunya Campus Nord UPC, 08034 Barcelona

The microscopic behavior of liquid water near surfaces has been a topic of great interest for the last decades,¹ basically because of the enormous influence of the surface on the properties of the water molecules close to it.

In this communication we report the results of a series of molecular dynamics simulations of water inside a narrow graphite channel at supercritical conditions. We considered N water molecules embedded into two parallel graphite plates with no defects to model two sheets of highly oriented pyrolytic graphite (HOPG). We set up a simulation box in the x, y, and z directions of 34.4, 34.1 and 31 Å, respectively. These values correspond to the geometry of HOPG in the real system. We assumed the z coordinate to be perpendicular to the graphite layers, and the usual periodic boundary conditions were considered only in the x and y directions. The temperature of the system was kept at T=673K. Different number of molecules were assumed ranging from N=100 to N=800 to cover a range of densities from $\rho = 0.08$ to $\rho = 0.66$ $g cm^{-3}$).

Water-water inter- and intramolecular interactions were modeled with a flexible simple-point-charge (SPC) potential which was specifically reparametrized to reproduce the main trends of the infrared spectrum of water at ambient conditions². This flexible SPC potential has a critical point ($T_c = 643$ K, $\rho_c = 0.32$ gcm⁻³) which is very close to the experimental one ($T_c = 647$ K, $\rho_c = 0.322$ gcm⁻³).³. Water-carbon forces were assumed to be of the Lennard-Jones type with the same parametrization employed in previous studies of water near graphite (see for instance Ref. 4.)

During the simulations, we separately analyzed the properties of two different groups of water molecules directly related by their locations with respect to the graphite walls: *adsorbed* for water in the closest layer and *bulk* for water far from the graphite. The exact definition of these regions in each case comes from the corresponding oxygen density profiles (see FIG. 1). The residence times of water molecules in both the adsorbed and bulk regions were determined. A thorough analysis of the structure, hydrogen bonding, dielectric and dynamic properties of the systems was performed. Finally, our present results were compared with previous studies of liquid water confined in graphene nanochannels at $ambient^{5,6}$ and high temperature⁷ conditions.



Figura 1. Oxygen density profiles of water molecules.

- * jonas.sala@upc.edu
- ¹ P. A. Thiel and T. E. Madey, Surf. Sci. Rep. 7, 211 (1987).
- ² J. Martí, J. A. Padró, and E. Guàrdia, J. Mol. Liq. **62**, 17 (1994).
- ³ C. C. Liew, H. Inomata and K. Arai, Fluid Phase Equilib. **144** 287 (1998).
- ⁴ M. C. Gordillo and J. Martí, Chem. Phys. Lett. **329**, 341 (2000).
- ⁵ J. Martí, G. Nagy, M. C. Gordillo and E. Guàrdia, J. Chem. Phys. **124**, 09473 (2006).
- ⁶ J. Martí, G. Nagy, E. Guàrdia and M. C. Gordillo, J. Phys. Chem. B **110**, 23987 (2006).
- ⁷ G. Nagy, M. C. Gordillo, E. Guàrdia and J. Martí, J. Phys. Chem. B **111**, 12524 (2007).
- ⁸ http://www-fen.upc.es/cscm

Non-equilibrium phase transition between bulk structures in ballistic-diffusive stochastic models of thin film growth

<u>Pedro A. Sánchez[†]</u>, Tomás Sintes[‡], Oreste Piro[§], Julyan H. E. Cartwright[¶]∥

Dept de Física e Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos IFISC (CSIC-UIB),

Universitat de les Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain

The modelling of thin solid films growth by different deposition techniques has been a very active research field in the last decades driven by the variety and increasing relevance of its technological applications to fields such as microelectronics, optics, chemistry or biology¹². From a theoretical perspective, thin film growth dynamics exhibits very interesting and challenging behaviors which are related to key topics on nonlinear and statistical physics, like critical phenomena and universality. Not surprisingly, the development of film growth modelling has run linked to the advances on the study of far-from-equilibrium growth processes, fractal growth and interface physics³⁴.

The simplest atomistic stochastic models for thin film formation adopt drastic approximations to the deposition and growth processes in order to achieve computational efficiency. These approximations include the deposition of the species on the substrate via ballistic trajectories and adatom interactions limited to first nearest neighbors. Despite — or arguably owing to — these approximations, simple atomistic models have proved a suitable tool for studying different aspects of thin solid films growth regimes and morphologies and the growth parameters that determine them. In particular, special attention has been paid to the possible universality of the kinetic roughening of the growing film surfaces and the existence of non-equilibrium phase transitions between different surface growth regimes⁵. Instead much less attention has been paid to the behavior of film bulk properties and its interplay with surface evolution⁶, probably by assuming that bulk properties highly depend on the system characteristics and require details which simple atomistic models do not include. However, one of the more universal behaviors of film growth shown theoretically and experimentally is the existence of diverse characteristic mesoscopic morphologies, with different surface and bulk properties, as a consequence of the competition between the spatially disordered deposition of particles on the growing film surface and the ordering effect of activated particle mobility processes. These characteristic morphologies have been summarized on successive qualitative empirical models known as Structure Zone Models (SZM). The first structure zone model, introduced by Movchan and Demchishin for physical vapor deposition under simple experimental conditions⁷, included three characteristic morphology zones obtained by varying the main deposition parameters: the deposition rate and the substrate temperature. Progressively, new structure zones have been incorporated into the original model as different experimental parameters have been introduced. Statistics of the microstructural arrangements of particles are used to characterize the film morphologies and their correspondence with experimental structure zones, treating the dependence of the diverse film morphologies with deposition parameters as a physical or structural transition⁸⁹¹⁰.

In this context, we have developed an atomistic stochastic model with ballistic deposition and thermally activated surface diffusion for study the transition between the growth regimes corresponding to the zones I and II of the simplest SZM for thin films growth from physical vapor deposition. The model incorporates a novel approach to the microstructure representation which can reproduce the simple lattice microstructures used frequently among the literature, either in (1+1) and (2+1) dimensions, as well as more complex microstructures which can develop lattice frustration and texture competition effects. The results obtained with our model provide the first evidence that the transition between the structure zones I and II can be considered as a true non-equilibrium phase transition between a porous, low density bulk morphology with self-affine surface and a compact, high density bulk morphology with a columnar shape surface.

Iaboratorio de Estudios Cristalográficos, LEC (CSIC), E-18100 Armilla, Granada, Spain

- ¹ M. Ohring, *The materials science of thin films* (Academic Press, 2001), 2nd Ed.
- ² A. Lakhtakia and R. F. Messier, *Sculptured thin films: na*noengineered morphology and optics (SPIE Press, 2005).
- ³ A.-L. Barabási and H. E. Stanley, *Fractal concepts in surface growth* (Cambridge University Press, 1995).
- ⁴ P. Meakin, *Fractals, scaling and growth far from equilibrium* (Cambridge University Press, 1997).
- ⁵ G. Ódor, Rev Mod Phys **76**, 663 (2004).
- ⁶ E. Katzav, S. F. Edwards, and M. Schwartz, Europhys Lett 75, 29 (2006).
- ⁷ B. A. Movchan and A. V. Demchishin, Phys Met Metallogr **28**, 83 (1969).
- ⁸ K.-H. Müller, J Appl Phys **58**, 2573 (1985).
- 9 M. J. Brett, J Mater Sci
 $\mathbf{24},\,623$ (1989).
- ¹⁰ H. Savaloni and M. G. Shahraki, Nanotechnology **15**, 311 (2004).

[†] pedro@ifisc.uib.es

[‡] tomas@ifisc.uib.es

[§] piro@ifisc.uib.es

[∥] julyan@lec.csic.es

Función de distribución radial en un fluido pozo cuadrado con núcleo penetrable

Riccardo Fantoni^{*}, Achille Giacometti^{*}, Alexandr Malijevský[†] y Andrés Santos[‡]

Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

Los fluidos complejos de materia "blanda" constituyen un tema interdisciplinar de interés en física, química y ciencia de materiales. A pesar de algunos rasgos distintivos y específicos, esos sistemas pueden describirse mediante modelos simples en los que las partículas interaccionan a través de un potencial de pares que combina una fuerte y abrupta repulsión a distancias cortas con una atracción débil a distancias mayores. Algunos ejemplos incluyen las interacciones entre partículas coloidales con una capa polimérica, efectos de solvatamiento y enlace hidrófobo en micelas inversas en microemulsiones de agua en aceite o efectos de penetrabilidad y solapamiento en cadenas poliméricas en buenos solventes.

En este trabajo nos hemos centrado en fluidos cuyas partículas interaccionan mediante un potencial que posee (i) una barrera repulsiva de altura ϵ_r hasta distancias inferiores a un cierto valor σ y (ii) un pozo atractivo de profundidad ϵ_a y de anchura Δ . Nos referiremos a este modelo como el de "pozo cuadrado penetrable" ("pene-trable square-well", PSW). Es un modelo muy flexible, ya que incluye como casos especiales el potencial de esfera dura ($\epsilon_r \to \infty$ y $\epsilon_a \to 0$), el SW convencional ($\epsilon_r \to \infty$), el de esferas duras adhesivas ($\epsilon_r \to \infty, \epsilon_a \to \infty \text{ y } \Delta \to 0$) y el de esferas penetrables $(\epsilon_a \to 0 \text{ ó } \Delta \to 0)$.

Al objeto de obtener información útil sobre las peculiaridades intrínsecas de este modelo de interacción, hemos considerado en este trabajo la versión unidimensional del modelo PSW, quedando la versión tridimensional para un futuro estudio. Hay que hacer notar que el carácter acotado del potencial hace que el caso unidimensional no sea en absoluto trivial y que su solución exacta no sea conocida. Como paso previo hemos analizado las condiciones que han de verificarse para garantizar la existencia de una descripción termodinámica estable¹, resultando que $\epsilon_r>2\epsilon_a$ es una condición suficiente. A continuación hemos obtenido de modo exacto las propiedades estructurales hasta segundo orden en la densidad y las propiedades termodinámicas hasta el nivel del cuarto coeficiente del virial. Para ello hemos explotado el hecho de que los diagramas del modelo PSW son exactamente los mismos que los del modelo SW, excepto que cada uno tiene un peso igual a una cierta potencia del parámetro de penetrabilidad $x \equiv 1 - e^{-\epsilon_r/k_B T}$.

Posteriormente, además de obtener numéricamente las soluciones de las ecuaciones integrales clásicas de líquidos (PY y HNC), hemos desarrollado dos aproximaciones analíticas semejantes a las propuestas recientemente para el caso de esferas penetrable² y hemos comparado los resultados teóricos con nuestras propias simulaciones de Monte Carlo. Para las aproximaciones analíticas hemos considerado dos enfoques complementarios: una aproximación de alta penetrabilidad (HPA) y otra de baja penetrabilidad (LPA). La primera consiste en extrapolar a

valores finitos (pero pequeños) de x el resultado que se obtiene de modo exacto en el límite $x \to 0$, en cuyo caso es posible resumar la serie resultante de retener, a cada orden en densidad, el diagrama dominante. Por otro lado, la LPA se basa en una extensión a ϵ_r finito (pero grande) de la solución exacta del modelo SW ($\epsilon_r \to \infty$).



Figura 1. Función de ditribución radial para $\epsilon_r/\epsilon_a = 5$, $\Delta/\sigma = 0.5, k_B T/\epsilon_r = 0.2 \text{ y} \eta = 0.8.$

Los resultados muestran que la LPA describe de modo muy preciso el comportamiento del sistema para valores suficientemente pequeños de $k_B T/\epsilon_r$, incluso a densidades elevadas. Al aumentar la temperatura las predicciones de la LPA se tornan menos fiables, pero es entonces cuando la HPA presenta un buen acuerdo. Respecto a las soluciones numéricas de las teorías PY y HNC, la primera es en general bastante deficiente, mientras que la segunda proporciona excelentes resultados, excepto para valores pequeños de $k_B T/\epsilon_r$.

* Dipartimento di Chimica Fisica, Università di Venezia, Venezia, Italia

- http://www.unex.es/fisteor/andres/
- ¹ M. E. Fisher and D. Ruelle, J. Math. Phys. 7, 260 (1966). ² Al. Malijevský and A. Santos, J. Chem. Phys. **124**, 074508 (2006); Al. Malijevský, S. B. Yuste, and A. Santos, Phys. Rev. E 76, 021504 (2007)

[†] Department of Chemical Engineering and Chemical Technology, Imperial College, London, United Kingdom ‡ and res@unex.es

Shear effects in the induction of the kinetic phase transformations in depletion driven colloids

Juan J. Cerdà², <u>Tomás Sintes¹</u>^{*}, C.M. Sorensen³ and A.Chakrabarti³

¹ Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, IFISC (CSIC-UIB)

Universitat de les Illes Balears. 07122 Palma de Mallorca, Spain.

² FIAS. Johann Wolfgang Goethe Universität. 60438 Frankfurt am Main. Germany.

³ Dept of Physics, Cardwell Hall, Kansas State University. Manhattan, KS 66506-2601. USA

The general problem of how a dispersed phase, such as colloids in solution, come together when destabilized to form a condensed phase, like gels or crystalline solids, is of fundamental importance to control the assembly of the dispersed phase into a useful material. Colloidal solutions can display a rich series of phase transitions that are controlled by the interacting potential between the dispersed components and the kinetics of the phase transformation. Recent Brownian dynamics simulations¹ of a 2D model of polymer depletion-driven colloids have shown a transition from a dispersed colloidal phase to a coexistence of dispersed-phase and solid-phase for increasing depth of the depletion potential well. Near the transition point the formation of clusters with a round shape is observed. As the well depth is increased further, elongated clusters first, and then fractal aggregates are obtained. The effect of shear in crystal nucleation has been considered quite recently, however, while some authors predict a shear-induced ordering of the liquid which enhances the nucleation rate $^{2-4}$, others predict that shear induces the suppression of crystallization $^{5-7}$, even at very low shear rates.

In this study, we shall present extensive 2D Brownian Dynamics computer simulations to characterize the effect of shear on the nucleation and crystal growth in two different kinds of colloidal systems: a repulsive-stabilized dense suspension modeled by a Yukawa repulsive pair potential, and a polymer depletion-driven system modeled by an attractive Asakura-Oosawa potential. In both systems, it has been found that small and moderate shear rates do not affect crystall growth (the transition takes place at the same critical value of the potential depth), however, for shallow quenches in the two phase region, low shear rates are observed to speed up the process of nucleation, whereas large shear rates produce the opposite effect. In the limit of very large shear rates the system virtually reverts into a single phase. We provide a pausible explanation for the dual nature of shear during the aggregation process: the weakening of the effective interaction among particles due to the shear compete with the induction of an extra flux of matter that increases the frequency of collisions that contributes to speed up the aggregation process.



Figura 1. Nucleation proceeds from round shaped clusters (a) to fractal structures (b) for increasing potential depth. Hexagonals crystalline ordering is found at small scales

- ¹ Juan J. Cerda, T. Sintes, C. M. Sorensen, A. Chakrabarti, Phys. Rev. E, **70**, 011405, (2004).
- ² B. J. Ackerson, and P. N. Pusey, Phys. Rev. Lett. **61**,33, (1988).
- ³ M.D. Haw, W. C. K. Poon, and P. N. Pusey, Phys. Rev. E **57**, 6859, (1998).
- ⁴ R. M. Amos et al., Phys. Rev. E, **61**, 2929 (2000).
- ⁵ R. Blaak, S. Auer, D. Frenkel, and H. Löwen Phys. Rev. Lett., **93**, 068303, (2004).
- ⁶ T. Palberg, W. Mönch, J. Schwarz, and P. Leiderer J.Chem. Phys. **102**, 5082, (1995).
- ⁷ T. Okubo, and H. Ishiki, J. Colloid Interface Sci., **211**, 151, (1999).

^{*} tomas@ifisc.uib.es

Join effects of nutrients and contaminants on the dynamics of a food chain in marine ecosystems

Flora S. Bacelar*, Sibylle Dueri†, Emilio Hernández-García* and José-Manuel Zaldívar†

*IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, Palma de Mallorca, Spain

†European Commission, DG Joint Research Centre, Institute for Environment and Sustainability, Ispra (VA), Italy

During the last decades coastal waters have been exposed to growing anthropogenic pressures represented not only by the increase on the input of nutrients and contaminants, but also by the exploitation of coastal areas for aquaculture, fishing and tourism. Release of pollutants derived from urban, agricultural and/or industrial effluents and domestic sewage may reach the coastal waters from watersheds, but also atmospheric transport (dry and wet deposition and air-water exchange) can be a major contributor.

The interactions between nutrient enrichment and the cycling of contaminants at ecosystem level may be important for assessing the fate of contaminant in the aquatic environment, their bioavailability, and their effects on the impacted ecosystem¹. Impacts of contaminants in the aquatic ecosystem are both direct and indirect² from acute and/or chronic toxicity on sensitive species to disruption in the food web structure, with long-term effects as bioaccumulation and biomagnification. Furthermore, they can have instantaneous effects as massive killings after an accidental contaminant release.

We consider the Canale's chemostat model (CC) which is an extension of the tri-trophic food-chain Rosenzweig-MacArtur model (RMA), which has been extensively studied in theoretical ecology^{3,4}.we analyze the joint effect of the presence of contaminants and of nutrient loading on population dynamics of marine food chains by means of bifurcation analysis⁵. Contaminant toxicity is assumed to alter mortality of some species with a sigmoidal dose-response function. Counterintuitive effects arising from indirect effects are described.



Figura 1. Sigmoidal response of mortality to the concentration of the toxic contaminant.



Figura 2. Some of the bifurcations occurring as a function nutrient input I and contaminant C_1 affecting phytoplankton, where TB is the notation to transcritical bifurcatons, HB is the Hopf bifurcations. The variables N, P, Z, F represent the nitrogen concentration in the different compartments of the system (nutrient, phytoplankton, zooplankton and fish) expressed in units of mg N/l. NPZF is the region where there is the coexistence among all species.

- ¹ Gunnarsson, J. S., Broman, D., Jonsson, P., Olsson, M. and Rosenberg, R. (1995) Interactions between eutrophication and contaminants: towards a new research concept for the European aquatic environment. Ambio 24: 383-385
- ² Fleeger, J.W., Carman, K.R. and Nisbet, R.M. (2003). Indirect effects of contaminants in aquatic ecosystems. The Science of the Total Environment 317: 207-233
- ³ Scheffer M. and Carpenter S.R. (2003). Catastrophic regime shifts in ecosystems: linking theory to observation. Trends in Ecology and Evolution. 18 (12) 648-656.
- ⁴ Gragnani, A., De Feo, O., Rinaldi, S. (1998). Food chains in the chemostat: Relationships between mean yield and complex dynamics. Bulletin of Mathematical Biology 60:703-719.
- ⁵ Gugenheimer an Holmes (1983). Nonlinear oscillations, dynamical systems and bifurcations of vector fields. Applied mathematical sciences, (Springer-Verlag New York inc)v.42

Efectos inerciales en sistemas brownianos empujados por barreras moviles

<u>P. Tarazona</u>^{*} and U. Marini Bettolo Marconi

Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada Universidad Autónoma de Madrid E-28049 Madrid

La extension del formalismo del funcional de la densidad dinamico $(DDF)^1$ a particulas brownianas parcialmente amortiguadas, que conserven parte de su dinamica inercial, ha sido objeto de nuestro trabajo en los ultimos años^{2,3}. Presentamos aqui el estudio de las corrientes estacionarias y las distribuciones de densidad producidas por barreras de potencial que se desplazan a velocidad constante sobre un sistema de particulas brownianas. El caso de amortiguamiento completo, cuando la velocidad de las particulas esta completamente termalizada, habia sido estudiado⁴ dentro del formalismo DDF. Analizamos ahora los efectos de una dinamica parcialmente inercial,

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -m\gamma\frac{dx}{dt} + f_{ext}(x - Vt) + \xi(t), \qquad (1)$$

con un baño que proporciona a la vez una friccion con constante friction γ y un ruido termalizante con

$$\langle \xi(t)\xi(s)\rangle = 2\gamma m k_B T \delta(t-s) , \qquad (2)$$

en terminos de la temperatura T y la fuerza $f_{ext}(x,t) = -\frac{d}{dx}V_{ext}(x-Vt)$ ejercida por la barrera de potencial que se desplaza a velocidad V. Las propiedades se analizan a traves de la funcion de distribucion de posicion y velocidad de una particula, p(x, v, t), obteniendo las distribuciones de densidad,

$$\rho(x - Ct) = \int dv \ p(x, v, t), \tag{3}$$

de corriente

$$j(x - Vt) = \int dv \ v \ p(x, v, t), \tag{4}$$

de temperatura local

$$k_B \tilde{T}(x - Vt) = \int dv \ \frac{v^2}{m} \ p(x, v, t), \tag{5}$$

etc. La figura muestra un ejemplo de la estructura de densidad obtenida, con un frente de particulas arrastrado por delante de la barrera y una estela inercial, que desaparece en el limite no inercial DDF.



Figura 1. Estructura de la densidad en el frente y en la estela de una barreraparabolica, de altura $5k_BT$, desplazandose a una velocidad V = 0.2 y varias valores del amortiguamiento Γ , en las unidades naturales del problema.

* pedro.tarazona@uam.es

- ¹ U. Marini Bettolo Marconi and P. Tarazona, J. Chem. Phys. **110**, 8032 (1999)
- ² U. Marini Bettolo Marconi and P. Tarazona, J. Chem. Phys. **124**, 164901 (2006)
- ³ U. Marini Bettolo Marconi, P. Tarazona and F. Cecconi, J. Chem. Phys. **126**, 164904 (2007)
- ⁴ F. Penna and P. Tarazona, J. Chem. Phys. **119**, 1766 (2003).

Caracterización dinámica de redes modales en láseres de semiconductor

Jordi Tiana Alsina*, M. Carme Torrent, Jordi Garcia-Ojalvo

Departamento de Física e Ingenieria Nuclear, Universidad Politécnica de Catalunya, Colom 11, 08222 Terrassa

Los láseres de semiconductor presentan una gran variedad de comportamientos dinámicos, incluyendo fluctuaciones de baja frecuencia, colapso de coherencia, caos, etc¹. La mayoría de estudios teóricos sobre estos fenómenos dinámicos se han llevado a cabo en modelos monomodo, aún cuando la mayoría de láseres de semiconductor comerciales operan en varios modos longitudinales. En esta comunicación presentamos un estudio experimental de la dinámica multimodo de láseres de semiconductor, interpretando los diferentes modos como un conjunto de osciladores acoplados, con un patrón de acoplamiento complejo.

El espectro óptico de un láser de semiconductor multimodo presenta una dinámica de *mode hopping*, i.e, un encendido y apagado de los modos del láser en función del tiempo. En la Fig. 1 presentamos la dinámica del espectro de un láser de semiconductor multimodo solitario (Mitsubishi ML976H6F) en función del tiempo.



Figura 1. Evolución temporal experimental de los modos de un láser de semiconductor solitario.

Queremos ver si existe una causalidad entre la dinámica de un modo respecto de los otros, tanto en el caso de un láser solitario como en presencia de realimentación óptica. Para ello utilizamos el método de la *coherencia dirigida parcial (partial directed coherence*, PDC)². Este método permite describir las relaciones que existen entre series temporales multivariadas, basándose en la descomposición de coherencias parciales obtenidas a partir de modelos multivariados autorregresivos (MVAR)³ del tipo

$$\mathbf{x}(k) = \sum_{j=1}^{p} \mathbf{a}_j \mathbf{x}(k-j) + \varepsilon(k)$$
(1)

donde $\mathbf{x}(k)$ es un vector de dimensión n que representa el estado de los n modos del láser en un instante de tiempo k, p es el orden del modelo autorregresivo, \mathbf{a}_i son la matrices de coeficientes del modelo, y $\varepsilon(k)$ es un ruido multivariado Gaussiano blanco. Estos parámetros se pueden estimar mediante un algoritmo de mínimos cuadrados lineal a trozos⁴.

Para hacer el estudio del acoplamiento entre modos asimilaremos nuestro láser a una red compleja de osciladores acoplados. El método de las PDCs nos permite conocer la intensidad del acoplamiento entre modos, en términos de la función de correlacion cruzada entre los mismos,

$$\pi_{j \to i}(\omega) = \frac{\left|A_{ij}(\omega)\right|}{\sqrt{\sum_{k} \left|A_{kj}(\omega)\right|^{2}}},\tag{2}$$

donde $A(\omega) = I - a(\omega)$ es la matriz de coeficientes del modelo autorregresivo multivariado definido arriba, en el espacio de frecuencias. El área total de esta función nos indica la intensidad del acoplamiento entre el modo j y el i. La aplicación de este cuantificador a la situación de la Fig. 1 nos conduce a una red con la topología mostrada en la Fig. 2. En esta comunicación se presentarán también resultados similares para un láser con realimentación óptica.



Figura 2. Diagrama de la red de modos del láser solitario.

Estos resultados muestran que los láseres de semiconductor multimodo podrían ser usados como modelos experimentales bien controlados para el estudio de la dinámica, interacción y sincronización de redes complejas.

* jordi.tiana.alsina@gmail.com

- ¹ J. Ohtsubo, Prog. Optics **44**, 1 (2002).
- ² B. Schelter *et al*, Journal of Neuroscience Methods **152**, 210 (2005).
- ³ L.A. Baccala y K. Sameshima, Biol. Cybern. **84**, 463 (2001).
- ⁴ A. Neumeier y T. Schneider, ACM Trans. Math. Software 27, 27 (2001).

Diversity-induced resonance in a model for opinion formation

Raúl Toral*, Claudio J. Tessone

IFISC (Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos) CSIC-Universitat de les Illes Balears Ed. Mateu Orfila, Campus UIB, 07122-Palma de Mallorca

Resonance in forced dynamical systems is a topic of widespread interest with many applications. A resonance usually appears as the effect of a matching between some parameters of the internal dynamics and the external forcing. It was shown in the early 80's that in a non-linear system a resonance can also appear as a function of the intensity of the fluctuations, of either internal or external origin. The basic mechanism leading to this *stochastic resonance* is rather generic and requires only a bistable system, a sub-threshold periodic forcing and a fluctuating term in the dynamics. The surprising result that fluctuations can enhance the response of a dynamical system to external forcing has become a new accepted paradigm and there have been many extensions and applications^{1,2}.

While most of the work in this field has focused on low-dimensional systems, more recent work analyses the role of fluctuations in the response of an extended system. A usual modelling is that of many identical units placed on the sites of a lattice, such that their response to the forcing is modified by the interactions amongst the units. A typical assumption in this case is that all the units are identical in the sense that they all possess the same values for some constituent parameters. For most applications, mostly in the biological or social sciences, the assumption of identical units is not a reasonable one since some sort of diversity or variability will always be present. We have shown in a recent work a new type of resonance with the external forcing as a function of the degree of diversity of the system^{3,4}. This has been proven in bistable and excitable systems in which the diversity is modeled by *quenched noise*, i.e. by a parameter that adopts a different value for each of the units.

Although surprising at first, the fact that the right amount of diversity can enhance the response to an external forcing is not against our intuition. Think, for example, of a society which is very homogeneous in that all the members of the population work on a particular economical field. If the economy tilts and that particular field becomes of less importance, it will have a big negative impact in the overall wealth of the population since they will not be able to follow the change. However, if there is some degree of heterogeneity and fractions of the populations work on different fields, there will be always a section that can adapt easily to the changing economy. The final ingredient that allows the whole society to follow the change is some degree of interaction by which the benefited agents can pull the others.

In this communication, we present a rather different example of diversity-induced resonance in a simple opinion formation model. The model incorporates two basic ingredients for the evolution of the opinion held by an individual: social pressure and the effect of advertising. The heterogeneity in the model appears in that every individual has an intrinsic preference for a particular option. We also consider that the network of interactions has a non-uniform distribution of links. In both cases, as shown in the figure, there is a resonance effect (optimal synchronisation of the average opinion with respect to the external signal) as a function of parameters measuring the diversity in the distribution of the preferred opinions or the rewiring probability of links.

By giving an example which is very far away from the typical dynamical system applications, we want to emphasize the generality of the mechanism leading to the diversity-induced resonance. Furthermore, we believe that the example has interest on its own in the field of social sciences, since it shows that an external forcing (imitating the effect of advertising) has a larger impact on a hetereogenous society than on a completely homogenous one. This effect might be relevant when explaining the changes in opinion (e.g. in poll's results) motivated by an apparently small change in the external environment.



Figura 1. Measure of the collective opinion synchronization with the external signal as a function of the diversity σ in the preferences or the rewiring probability p_{sw} of the network.

* raul@ifisc.uib.es

¹ Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop: Stochastic Resonance in Physics, Biology. F. Moss, A. Bulsara, M.F. Shlesinger, eds. J. Stat. Phys. **70** (1993).

² L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, F. Marchesoni, Rev. Mod. Phys. **70** (1998) 223.

³ C. Tessone, C. Mirasso, R. Toral, J.D. Gunton Physical Review Letters 97, 194101 (2006).

⁴ R. Toral, C. J. Tessone, J. Viana Lopes European Physical Journal-Special Topics 143, 59 (2007).

Transiciones de fase absorbentes en redes coevolutivas

<u>Federico Vazquez</u>*, Juan Carlos González-Avella, Víctor M. Eguíluz and Maxi San Miguel <u>IFISC, Instituto de Física Interdisicplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB)</u>

E-07122 Palma de Mallorca

En esta charla, voy a hablarles sobre una clase de transición de fase absorbente que ha sido observada recientemente en modelos de redes adaptativas. En estos modelos, los nodos de la red cambian su estado al interactuar con sus vecinos, y al mismo tiempo, los enlaces pueden ser redirigidos de acuerdo al estado de los nodos en sus extremos. De esta forma, la dinamica de los nodos y la topologia de la red no son independientes sino que, por el contrario, *coevolucionan*. Se encuentra que si la topologia cambia a una velocidad suficientemente alta respecto de la velocidad a la que los nodos actualizan sus estados, la red se quiebra en un conjunto de componentes desconentadas.

Para ilustrar esta fenómeno de fragmentación, en la primera parte de la charla, voy a mostrar los resultados del modelo de Axelrod coevolutivo¹. La transicion de fragmentación aparece entre dos fases congeladas, una en la que el tamaño de la componente mas grande es del orden del tamaño del sistema, y la otra, compuesta por muchas componentes mucho mas pequeñas que el sistema. En el punto de transición, el tiempo que caracteriza la formación de la estructura coincide con el tiempo que tardan los nodos en converger a sus estados finales. Este modelo tambien presenta una transición de recombinación, entre una fase congelada y un fase activa en la que un numero constante de nodos es permanentemente reenlazado.

Con el objeto de desarrollar un entendimiento analítico de la transición de fragmentación, en la segunda parte de la charla, voy a presentar el modelo mas simple de coevolución², que posee todas las caracteristicas de modelos coevolutivos relacionados, y tiene la ventaja de poder ser resuelto en forma analítica. Los nodos pueden tener uno de dos estados posibles (+ o -), e interaccionan unicamente con sus primeros vecinos. En un evento, un nodo y un vecino son elegidos al azar. Si los dos tienen el mismo estado, nada ocurre. Pero si tienen estados opuestos, luego con probabilidad p el nodo elegido decide cortar el enlace con su vecino, y se enlaza con otro nodo elgido al azar que posee sus mismo estado, o con probabilidad 1-p, el nodo copia el estado de su vecino. Este modelo puede ser pensado como la version adaptativa del modelo del votante, donde ahora los nodos pueden seleccionar sus vecinos de acuerdo a sus estados. Una aproximación de campo medio predice, en el límite de una red infinita, una transición a un valor crítico p_c entre una fase activa con links reenlazandose constantemente, y una fase

congelada compuesta por dos componentes desconectadas de estado opuesto y de aproximadamente la mitad del tamano del sistema. Mostramos que en redes finitas, el sistema se congela en una sola componente conectada para valores de p menores a p_c , o en dos componentes desconectadas para valores de p mayores a p_c . En la fugura 1, mostramos como los diferentes parametros del sistema cambian en el punto de transición. Esta transición puede entenderse como el cambio abrupto en la trayectoria de un caminante aleatorio en el espacio de las coordenadas.

Termino hablando de los ingredientes mínimos, segun nuestro análisis, que un modelo de coevolución debe tener para experimentar una transición de fase absorbente en su estructura.



Figura 1. (a) Average relative size of the largest network component S and (b) absolute value of the link magnetization m vs p in the final frozen state. (c) average convergence time τ per system size N vs p. Inset: scaling of τ for $pp_c \simeq 0.38$, indicating that $\tau \sim \frac{N}{z} \ln(z)$ with $z = \mu(p - p_c)N$. The solid line has slope -1. (d) Stationary density of active links in surviving runs ρ^{surv} . Inset: average time evolution of ρ . The averages are over 10⁴ realizations of networks with $\mu = 4$ and sizes N = 250 (circles), 1000 squares and 4000 (diamonds).

* ifisc.uib.es

¹ F. Vazquez, J. C. Gonzalez-Avella, V. M. Eguiluz and M. San Miguel, Phys. Rev. E 76, 046120 (2007).

² F. Vazquez, V. M. Eguiluz and M. San Miguel, ar-Xiv:0710.4150.

Escalado consistente de las fluctuaciones térmicas en DPD/SPH

Adolfo Vázquez¹, Marco Ellero¹², Pep Español^{1*}

¹ Departamento de Física Fundamental, UNED, Apartado 60141, 28080 Madrid, Spain

² Lehrstuhl für Aerodynamik, Technische Universität München, 85747 Garching, Germany

La DPD (Dissipative Particle Dynamics) es un modelo estocástico de partículas fluidas para la simulación de fluidos newtonianos a escalas mesoscópicas. En la DPD, un fluido newtoniano se representa mediante una colección de puntos que sufren interacciones estocásticas que conservan el momento, y que producen un comportamiento hidrodinámico en cierto nivel de coarse graining. La DPD también incluye fluctuaciones térmicas de una manera termodinámicamente consistente.

A pesar de su éxito, la DPD sufre de algunos problemas conceptuales que pueden limitar su uso y aplicabilidad:

- 1. No permite una elección arbitraria de la ecuación de estado.
- 2. No hay una conexión directa entre los parámetros del modelo y los coeficientes de transporte del fluido simulado.
- 3. El tamaño de la partícula fluida no está definido.

En una elaboración posterior, el modelo de la DPD ha sido puesto en relación con la técnica lagrangiana sin red de resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes denominada Smoothed Particle Hydrodynamics o SPH. Este nuevo modelo, denominado SDPD (Smoothed Dissipative Particle Dynamics) es capaz de resolver los problemas mencionados:

1. Permite introducir una ecuación de estado arbitraria, por lo que podremos utilizar, por ejemplo, una ecuación de estado de Van der Waals, o expresiones más generales.

- 2. En el modelo SDPD, por ser una discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes, no se requiere un cálculo previo de los coeficientes de transporte del fluido simulado, pues son un input del modelo.
- 3. La definición del volumen de la partícula fluida nos permite saber cuál es su tamaño. Además, los resultados de las simulaciones no dependen de dicho tamaño: el modelo no depende de la escala que estemos simulando.

El nuevo modelo, por lo tanto, muestra la relación entre el DPD y el SPH, obteniendo lo mejor de ambos métodos (fluctuaciones del DPD y conexión con las ecuaciones de Navier-Stokes del SPH) y clarificando la relación entre el concepto de partícula fluida en la DPD y en la SPH.

En el presente trabajo, mostramos cómo las fluctuaciones térmicas escalan apropiadamente con el tamaño de las partículas fluidas. Así, cuanto menor son estas partículas y, por tanto, mejor resolvemos el fluido, mayores son las fluctuaciones térmicas, con una amplitud que escala con la inversa de la raiz cuadrada del volumen de las partículas. A pesar de esto, la amplitud de las fluctuaciones de velocidad de una partícula coloidal no se ve afectada por el grado de resolución del fluido a su alrededor.

* avazquez@bec.uned.es marco.ellero@aer.mw.tum.de pep@fisfun.uned.es

Impureza en un gas granular bajo flujo laminar de Couette no lineal

Francisco Vega Reyes, Vicente Garzó y Andrés Santos Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

El estudio de los procesos de transporte de medios granulares tiene un obvio interés científico, motivado en gran parte por las innumerables aplicaciones practicas que su control tiene. El límite de gas granular (baja densidad, flujos rápidos) es una de las situaciones más estudiadas tanto a nivel experimental como teórico. El modelo colisional más usado es el de esfera dura, en el que la inelasticidad de las colisiones viene caracterizada por el coeficiente de restitución normal α . Extendiendo los resultados de la teoría de Chapman-Enskog a gases granulares, es posible calcular los coeficientes de transporte de Navier-Stokes, tanto para el gas monocomponente como para mezclas binarias y polidispersas. Esto permitiría en principio describir fenómenos de transporte en diversos sistemas granulares. Sin embargo, el hecho de que, en situaciones de flujo estacionario, el mínimo del número de Knudsen asociado crezca muy rápidamente con la inelasticidad hace que estos coeficientes no sean en general de gran utilidad práctica. Para empezar, no son adecuados para el análogo en medios granulares de muchos problemas clásicos de mecánica de fluidos. Un ejemplo básico son los flujos laminares unidireccionales a presión constante (el flujo de Couette).



Figura 1. Perfiles de presión (a) y velocidad de flujo (b) para una simulación de Monte Carlo con $\alpha = 0.9$, y masa y radio relativos $m_1/m_2 = 2.0$ y $\sigma_1/\sigma_2 = 1$, respectivamente. Los cuadrados y los triángulos corresponden a los resultados para el baño y para la impureza, respectivamente.

En el presente estudio mostramos que, en geometría plana, el flujo de Couette admite una descripción hidrodinámica no lineal para una mezcla granular binaria en

el límite de muy baja fracción molar de una de las componentes (impureza). Demostramos además que en este sistema siempre se tiende a la solución especial $\mathbf{u_1} = \mathbf{u_2}$ (la velocidad de flujo para la impureza y el baño son iguales). Para ello, usamos un modelo cinético del tipo BGK, recientemente extendido a mezclas de gases granulares¹ v resolvemos teóricamente los perfiles v los flujos hidrodinámicos para la impureza. Esta solución teórica se obtiene haciendo uso, para el gas en exceso, de la solución del flujo de Couette no lineal para un gas granular monocomponente, encontrada en un trabajo previo². Posteriormente, comprobamos que la solución teórica hallada coincide con los resultados obtenidos de la simulación Monte Carlo del modelo cinético utilizado y que, en efecto, las simulaciones remiten siempre a soluciones del tipo $p_1 = \text{cte}, p_2 = \text{cte}, \mathbf{u_1} = \mathbf{u_2}$ (figura 1). Por último, calculamos los coeficientes de transporte asociados al tensor de tensiones y al flujo de calor de la impureza y comprobamos que para todos ellos el acuerdo entre la solución teórica y la simulación es excelente. A modo de ejemplo, mostramos en la figura 2 los resultados para la viscosidad.



Figura 2. Viscosidad de la impureza, para valores de masa relativa $m_1/m_2 = 2$ (líneas discontinuas y círculos), $m_1/m_2 = 1$ (líneas continuas y triángulos) y $m_1/m_2 = 0.5$ (líneas de puntos y cuadrados). Las líneas se refieren a los resultados teóricos y las series de símbolos a los de simulación. En todos los casos, $\sigma_1/\sigma_2 = 1$.

² M. Tij *et al.*, J. Stat. Phys. **103**, 1035 (2001).

¹ F. Vega Reyes, V. Garzó, and A. Santos, Phys. Rev. E **75**, 061306 (2007).

Potenciales de depleción extremadamente atractivos en mezclas de esferas blandas

Y. Martínez–Ratón^{1*}, G. Cinacchi², E. Velasco³, G. Navascués³, L. Mederos⁴, A. Tani²

¹GISC, Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III, 28911 Leganés (Madrid)

²Dipartimento di Chimica, Università di Pisa, I–56126 Pisa, Italia

³Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

 4 Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, E-28049 Madrid

En esta contribución consideramos mezclas de partículas coloidales esféricas en un solvente de esferas más pequeñas, y calculamos la interacción de depleción entre dos esferas coloidales mediada por el fluido de esferas pequeñas. Se han utilizado simulaciones por ordenador de dinámica molecular y diferentes teorías, cuya validez se ha contrastado con las simulaciones¹.

El modelo de interacción considerado es un potencial tipo WCA repulsivo, cuyos parámetros variamos a voluntad con objeto de controlar el grado de *dureza* de las interacciones. Hemos utilizado teorías basadas en desarrollos del virial, a segundo y tercer orden en la densidad de las esferas pequeñas, prestando especial atención al límite en el que la interacción es de tipo esfera dura, y a las consecuencias de tener interacciones cada vez más blandas. Asimismo, hemos estudiado el efecto de la densidad del solvente y de la temperatura.

En las simulaciones las esferas coloidales se fijan a una cierta distancia r (como si tuviesen masa infinita); éstas actúan sobre las esferas pequeñas a través de un potencial externo. La fuerza de depleción se calcula a partir del momento transferido a las esferas coloidales vía un potencial de fuerza media. Integrando esta fuerza se obtiene directamente el potencial de depleción. Otras técnicas de calcular esta fuerza indirecta conducen a los mismos resultados. Los sistemas estudiados contienen ~ 4000 esferas pequeñas a altas densidades (densidades de líquido), lo que permite estudiar el comportamiento oscilatorio del potencial de depleción a distancias largas.

Nuestros resultados indican que, sorprendentemente, a medida que la interacciones *directas* entre las partículas se hacen más blandas, las interacciones de depleción (*indirectas*) entre las partículas coloidales se vuelven significativamente más atractivas que en el caso de esferas duras (Fig. 1). Este efecto podría dar lugar a comportamientos de fase, en el fluido coloidal denso, muy diferentes de los usuales, así como a propiedades dinámicas singulares. Como complemento a estos resultados, hemos utilizado un esquema perturbativo con objeto de predecir el diagrama de fases que se sigue de estas interacciones, utilizando relaciones de tamaño entre las partículas coloidales y las partículas de solvente de 5:1. El diagrama incluye la transición fluido-sólido usual pero, en el caso de esferas blandas, la transición fluido-fluido, que no existe en mezclas de esferas duras, es metaestable, aunque se encuentra muy próxima a ser estable con respecto a la coexistencia directa fluido-sólido. Estos resultados pueden implicar que, para partículas coloidales suficientemente blandas, la transición fluido-fluido pueda llegar a ser estable.

Actualmente los estudios se centran en considerar potenciales más blandos, relaciones de tamaño entre las esferas más extremas, y en el análisis de formas geométricas anisótropas para las partículas coloidales. Se mostrarán algunos resultados preliminares de estos estudios.



Figura 1. Líneas discontinuas: potenciales de depleción obtenidos en las simulaciones para potenciales WCA con potencias inversas 12 – 6 (indicada con un 6) y 24 – 12 (indicada con un 12). Líneas punteadas: potenciales directos para los anteriores potenciales. Líneas continuas: potenciales efectivos totales para los casos anteriores y para esferas duras, con líneas en gris de distinta densidad (claro, medio y oscuro para 12 – 6, 24 – 12 y esfera dura, respectivamente). (a) es para densidad (en unidades del σ del WCA) de $\rho^* = 0.680$; (b) es para $\rho^* = 0.750$.

^{*} yuri@math.uc3m.es

¹ G. Cinacchi, Yuri Martínez-Ratón, Luis Mederos, Guillermo Navascués, Alessandro Tani y Enrique Velasco, J. Chem. Phys. **127**, 214501 (2007).

Potencial de tipo termodinámico alejado del equilibrio para KPZ: procedimiento à la carte

Horacio S. Wio*

Instituto de Física de Cantabria (IFCA) Avda. de los Castros s/n, Universidad de Cantabria 39005 Santander

En oposición a la creencia común en contra de la existencia de un potencial tipo termodinámico para la ecuación de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) o de otras ecuaciones cinéticas relacionadas, aqui se muestra un procedimiento para obtener tal tipo de funcionales. Para el caso de KPZ, y con el conocimiento de tal potencial, se muestra la validez de propiedades de invariancia de traslación global ya conjeturadas por investigadores, como así mismo otras propiedades relacionadas. El procedimiento utilizado para KPZ se ha extendido a fin de derivar formas mas generales de tal funcional que dan lugar a otras ecuaciones cinéticas no lineales ya conocidas, incluyendo casos con contribuciones de tipo convectivo, o con difusión dependiente de la densidad. Se muestra en general la posibilidad de hallar tales funcionales para ecuaciones del tipo KPZ à la carte. Finalmente se discute la forma de la función de distribución de probabilidad, y la posibilidad de explotarla para la determinación de valores medios del campo.

* wio@ifca.unican.es

Parte IV Índice de autores

Abia, D., 143 Alava, M. J., 150 Alejandro Herrada, E., 97 Alejos, O., 23 Alessandro, G. D., 101 Almarza, N. G., 87, 113 Alonso, J. J., 53 Alvarellos Bermejo, J. E., 86 Alvarez-lacalle, E., 54 Anguita, J. V., 32 Anta, J. A., 29 Arévalo, R., 126 Arbe, A., 17 Arenzon, J. J., 47 Ares, S., 55 Astillero, A., 56 Bacelar, F. S., 98, 165 Ballesteros, F., 108 Barnett, S. M., 35 Barrat, A., 88, 125 Bastolla, U., 143 Benítez Iglesias, R., 57 Bessières, D., 121 Bhysar, R., 139 Bisquert, J., 29 Bonachela, J. A., 136 Bonet Avalos, J., 129 Bragard, J., 58 Bravo Yuste, S., 59, 60 Bray, A. J., 47 Brey, J. J., 45, 105 Buceta, J., 61 Burguete, J., 73, 130 Calbet, X., 114 Calero, S., 18, 89 Calvo Hernández, A., 37 Canela-Xandri, O., 61 Cantapiedra, I. R., 146 Cao, F. J., 82, 83 Capitán, J. A., 62, 63 Capuani, F., 118 Carballido-Landeira, J., 64 Carnicero, A., 134 Cartwright, J., 79, 162 Castelló X., 65 Castro, M., 66, 134, 135, 140 Cerdà, J. J., 164 Cerdeiriña, C. A., 30 Chacón, E., 67, 74, 77 Chakrabarti, A., 164 Checa, R., 67 Chi-Tuong Pham, 159 Cinacchi, G., 172 Cixous, P., 90 Clément, E., 103

Colet, P., 68, 69, 94, 101, 124, 149 Colmenero, J., 17 Cornelles Soriano, M., 69 Cosentino-Lagomarsino, M., 112, 118 Cuerno, R., 135, 140 Cuesta, J. A., 41, 62, 63 Cugliandolo, L. F., 47 Danckaert, J., 94 de Ferron, G. S., 121 de Franciscis, S., 71 de La Lama, M. S., 46 De la Torre, A., 73 de las Heras, D., 72 de los Santos, F., 31 de Miguel, E., 119, 120 Deisboeck, T. S., 66 Delgado-Buscalioni, R., 74 Derrida, B., 19 Dinis, L., 32 Domínguez-García, P., 75 Dopazo-Paz, A., 76, 92 Duarte, C. M., 97 Dueri, S., 98, 165 Duque, D., 77 Echebarria, B., 54, 78, 146 Echenique, P., 153 Eguíluz, V. M., 65, 95, 97, 169 Ellero, M., 170 Elowitz, M. B., 20 Escribano, B., 79 Escudero, C., 80 Español, P., 99, 170 Falo, F., 81, 153 Fantoni, R., 163 Feito, M., 82, 83 Fernández García, G., 33, 148 Fernández, J. F., 53 Fisher, M. E., 30 Floría, L. M., 43, 93 Formosa Jordan, P., 84 Gómez-Álvarez, P., 76, 92 Gómez-Gardeñes, J., 43, 93, 153 Galeano, J., 85 García Aldea, D., 86 García de Bustos, E., 143 García de Soria, M. I., 45, 88, 125 García-Ojalvo, J., 20, 167 García-Pérez, E., 89 Garcimartín, A., 90, 102, 103, 144 Garrido, P. L., 100 Garzó, V., 34, 91, 171 Gelens, L., 94 Gershenfeld, N., 21, 109, 155 Giacometti, A., 163

Gomila, D., 35, 68, 94, 101, 124 González, A., 96, 158 González, D. L., 79 González, E. M., 32 González-Avella, J. C., 95, 169 González-Salgado, D., 76, 92 Guàrdia, E., 161 Hörger, I., 36 Hansen, J.-P., 22 Harich, R., 90 Henry, H., 139 Hernández-García, E., 97, 98, 165 Hernández-Machado, A., 44, 110, 111, 154 Herrgen, L., 55 Hidalgo, R.C., 70 Hijón, C., 99 Hinrichsen, H., 136 Hurtado, P. I., 100 Ibañes Miguez, M., 84 Iribarren, J. L., 39 Iriondo, J.M., 85 Jülicher, F., 55 Jacobo, A., 68, 101, 124 Janda, A., 90, 102, 103 Jiménez de Cisneros, B., 37, 123 Johnson, S., 104 Karma, A., 78 Khalil, N., 105 Komin, N., 106 Koroutchev, K., 107 Korutcheva, E., 107 Kulkarni, R. P., 20 López Díaz, L., 23 López de Haro, M., 60 López, J. M., 46, 145, 150 López-Ruiz, R., 114 Lacasa, L., 108, 116 Lafuente, L., 109 Ledesma-Aguilar, R., 110, 111 Legido, J. L., 121 Lindenberg, K., 59 Lindner, B., 138 Llopis, I., 38, 112 Lomba, E., 113 Lowe, C. P., 112 Luque, A., 115 Luque, B., 108, 116 Luque, J., 108 Míguez, J. M., 121 Målø, K. J., 42, 151 Madruga, S., 117 Malgaretti, P., 118 Malijevský, A., 163 Mankoc, C., 102, 103 Marguta, R., 119

Marini Bettolo Marconi, U., 166 Marro, J., 71, 104 Martí, J., 161 Martín del Río, E., 119, 120 Martín, C., 113 Martín-Calvo, A., 89 Martínez, E., 23 Martínez-Ratón, Y., 63, 172 Matías, M. A., 68, 94, 124 Matas Navarro, R., 122 Maynar, P., 45, 88, 125 Maza, D., 70, 90, 102, 103, 126, 144 Mazo, J. J., 81 Meca, E., 127 Mederos, L., 72, 172 Mejías, J. F., 128 Melle, S., 75 Merabia, S., 129 Miguel, M. C., 131 Miramontes, O., 116 Miranda, M., 73, 130 Mirasso, C., 69 Molina-París, C., 66 Mora-Seró, I., 29 Morales-Flórez, V., 29 Morelli, L. G., 55 Moreno, Y., 43, 93 Moretti, P., 131 Moro, E., 39, 133 Moyano, L. G., 132, 133 Muñoz, M. A., 31, 85, 136 Muñoz-García, J., 135 Muñuzuri, A. P., 64, 137 Mullin, T., 49 Munarriz, J, 81 Mungan, M., 156 Munilla, J., 134 Murray, D. R., 35 Murza, A., 106 Navascués, G., 172 Nguyen, S., 139 Nicola, E. M., 138 Nicoli, M., 139, 140 Nuño, J. C., 108 Oates, A. C., 55 Öhberg, P., 35 Orkoulas, G., 30 Ortín, J., 42, 151 Ortiz de Zárate, J. M., 141 Páez, A., 142 Pérez Muñuzuri, V., 33, 148 Pérez S., A., 149 Pérez, J., 147 Pérez-Vicente, C., 48, 152 Pérez-Villar, V., 33 Pacheco, J. M., 24 Padilla, A., 147 Pagonabarraga, I., 38, 70, 110–112, 122

Palassini, M., 40 Parrondo, J. M. R., 32 Pascual-García, A., 143 Pastor, J. M., 75, 85, 102, 144 Patricio, P., 159 Pazó, D., 145 Peñaranda, A., 146 Piñeiro, M. M., 121 Picallo, C. B., 150 Piro, O., 79, 162 Planet, R., 42, 151 Plantier, F., 121 Plapp, M., 127, 139 Poncela, J., 43, 93 Pont, O., 48, 152 Prada-Gracia, D., 153 Pradas, M., 44, 154 Prados, A., 45 Prakash, M., 155 Ramírez Ortiz, A., 143 Ramasco, J. J., 46, 156 Reguera, D., 115 Revelli, J. A., 157 Ritort, F., 40 Roca, C. P., 41 Roco, J. M. M., 123 Rodríguez, M. A., 46, 145, 157 Román, F. L., 96, 158 Romaní, L., 76, 92 Romera, E., 31 Romero Enrique, J. M., 159 Rubio, M. A., 75 Ruiz-Herrero, T., 160 Süel, G. M., 20 Sánchez, A., 41, 43, 93, 132 Sánchez, P. A., 162 Sagués, F., 61 Sala, J., 161 San Miguel, M., 25, 65, 95, 169 Santos, A., 56, 60, 163, 171 Santos, L., 26 Santucci, S., 42, 151 Schehr, G., 88, 125 Schröter, C., 55 Scirè, A., 149 Sengers, J. V., 141 Serrano, M., 99 Sicilia, A., 47 Sintes, T., 162, 164 Sorensen, C. M., 164 Szendro, I. G., 145 Tél, T., 79 Taboada, P., 64 Tani, A., 172 Tarazona, P., 36, 67, 74, 77, 142, 166 Tessone, C. J., 97, 168 Thiele, U., 117 Tiana Alsina, J., 167

Toral, R., 106, 168 Torrent, M. C., 167 Torres, J. J., 71, 104, 128 Torres, L., 23 Trizac, E., 88, 125 Turiel, A., 48, 152 Tuval, I., 79 Vázquez, A., 170 Vázquez, F., 169 Vázquez-Otero, A., 137 Vélez, M, 36 Van der Sande, G., 94 Vanyo, J., 79 Vega Reyes, F., 171 Velasco, E., 36, 72, 142, 160, 172 Velasco, S., 96, 123, 158 Vicent, J. L., 32 White, J.A., 96, 123, 158 Wio, H. S., 157, 173 Zaldívar-Comenges, J.-M., 98, 165 Zambrini, R., 149 Zapperi, S., 150 Zuriguel, I., 49, 70, 90, 102, 126
Parte V Asistentes al congreso

- 1. Alonso Pereda, Juan José
 - Tel.: 952132039
 - E-mail: jjalonso@uma.es
- 2. Alvarellos Bermejo, José Enrique
 - Tel.: 913987120
 - E-mail: jealvar@fisfun.uned.es
- 3. Alvarez-Lacalle, Enrique
 - Tel.: 93 401 10 92
 - E-mail: enrical@fa.upc.edu
- 4. Anta Montalvo, Juan Antonio
 - Tel.: 954 34 93 14
 - E-mail: anta@upo.es
- 5. Aparicio Reinoso, José María
 - Tel.: 913987143
 - E-mail: jmaparicio@bec.uned.es
- 6. Arbe, Arantxa
 - Tel.: + 34 943 015369
 - E-mail: a.arbe@ehu.es
- 7. Ares García, Saúl
 - Tel.: +49 351 871 1407
 - E-mail: saul@mpipks-dresden.mpg.de
- 8. Astillero Vivas, Antonio
 - Tel.: 924387068
 - E-mail: aavivas@unex.es
- 9. Benítez Iglesias, Raúl
 - Tel.: 93 401 18 35
 - E-mail: raul.benitez@upc.edu
- 10. Bragard, Jean
 - Tel.: 948-425600 (ext:6422)
 - E-mail: jbragard@fisica.unav.es
- 11. Bravo Yuste, Santos
 - Tel.: 924 289529
 - \bullet E-mail: santos@unex.es
- 12. Brey Abalo, José Javier
 - Tel.: 954550936
 - E-mail: brey@us.es
- 13. Brito López, Ricardo
 - Tel.: 91 394 49 52
 - E-mail: brito@fis.ucm.es

- 14. Burguete Mas, Javier
 - Tel.: 948 42 56 00 x 6275
 - E-mail: javier@fisica.unav.es
- 15. Cabrillo García, Carlos
 - Tel.: 915616800 xtn. 1136
 - E-mail: ccabrilo@foton0.iem.csic.es
- 16. Calero Díaz, Sofía
 - Tel.: 954 97 75 94
 - E-mail: scalero@upo.es
- 17. Calvo Hernández, Antonio
 - \bullet Tel.:
 - \bullet E-mail: anca@usal.es
- 18. Canela Xandri, Oriol
 - Tel.: 934034527
 - E-mail: ocanela@pcb.ub.es
- 19. Capitán Gómez, José Ángel
 - Tel.: 916249977
 - E-mail: jcapitan@math.uc3m.es
- 20. Carballido Landeira, Jorge
 - Tel.: (+34) 981 563100 x 13958
 - E-mail: jorge@fmares.usc.es
- 21. Cartwright, Julyan
 - Tel.: 609 355224
 - E-mail: julyan@lec.csic.es
- 22. Castelló Llobet, Xavier
 - Tel.: 971 259518
 - E-mail: xavi@ifisc.uib.es
- 23. Castro Ponce, Mario
 - Tel.: 91 542 28 00
 - E-mail: marioc@upcomillas.es
- 24. Cerdeiriña Álvarez, Claudio
 - Tel.: 988-387217
 - E-mail: calvarez@uvigo.es
- 25. Chacón Fuertes, Enrique
 - Tel.: 913349021
 - E-mail: echacon@icmm.csic.es
- 26. Checa Garcia, Ramiro
 - Tel.: 914978629
 - E-mail: ramiro.checa@uam.es

- 27. Colet Rafecas, Pere
 - Tel.: 971 173382
 - E-mail: pere@ifisc.uib.es
- 28. Colmenero de León, Juan
 - Tel.: +34 943 015962
 - E-mail: juan.colmenero@ehu.es
- 29. Cornelles Soriano, Miguel
 - Tel.: 971173369
 - E-mail: miguel@ifisc.uib.es
- 30. Cruz Hidalgo, Raúl
 - Tel.: 0034 972419754
 - E-mail: raul.cruz@udg.edu
- 31. Cuerno Rejado, Rodolfo
 - Tel.: 91 624 59 44
 - E-mail: cuerno@math.uc3m.es
- 32. Cuesta Ruiz, José A.
 - Tel.: 91 624 8751
 - E-mail: cuesta@math.uc3m.es
- 33. de Franciscis, Sebastiano
 - Tel.: (+34) 958 244014
 - E-mail: sebast@onsager.ugr.es
- 34. de la Rubia Sanchez, Javier
 - Tel.: 913987128
 - E-mail: jrubia@fisfun.uned.es
- 35. de las Heras Díaz-Plaza, Daniel
 - Tel.: +34 914978629
 - E-mail: daniel.delasheras@uam.es
- 36. De la torre Monguió, Alberto
 - Tel.: 948425600
 - E-mail: admonguio@alumni.unav.es
- 37. Delgado Buscalioni, Rafael
 - Tel.: 914973667
 - E-mail: rafael.delgado@uam.es
- 38. de los Santos Fernández, Francisco
 - Tel.: 958 244 014
 - E-mail: fdlsant@ugr.es
- 39. de Miguel Agustino, Enrique
 - Tel.: 959219797
 - E-mail: demiguel@uhu.es

- 40. Derrida, Bernard
 - Tel.:
 - E-mail: derrida@lps.ens.fr
- 41. Díaz Guilera, Albert
 - Tel.: 934021167
 - E-mail: albert.diaz@ub.edu
- 42. Dinis Vizcaino, Luis
 - Tel.: 913944741
 - E-mail: ldinis@fis.ucm.es
- 43. Domíguez García, Pablo
 - Tel.: +34913989345
 - E-mail: pdominguez@fisfun.uned.es
- 44. Dopazo Paz, Ana María
 - Tel.: 988-387272
 - E-mail: anadp@uvigo.es
- 45. Duque Campayo, Daniel
 - Tel.: 91 497 3002
 - E-mail: daniel.duque@uam.es
- 46. Echebarria Domínguez, Blas
 - Tel.: 934016263
 - E-mail: blas@fa.upc.edu
- 47. Escribano Salazar, Bruno
 - Tel.: 958 243158
 - E-mail: bruno@lec.csic.es
- 48. Escudero Liébana, Carlos
 - Tel.: +44 (0) 1865 283891
 - \bullet E-mail: escudero@maths.ox.ac.uk
- 49. Español Garrigós, Pep
 - Tel.: 91 398 7133
 - E-mail: pep@fisfun.uned.es
- 50. Falo Forniés, Fernando
 - Tel.: 976762455
 - E-mail: fff@unizar.es
- 51. Feito Guzmán, Manuel
 - Tel.: 913944742
 - E-mail: feito@fis.ucm.es
- 52. Fernández García, Guillermo
 - Tel.: (+34) 981 563100 x 13958
 - E-mail: guillermo@fmares.usc.es

- 53. Fernández Nóvoa, Julio Fernando
 - Tel.: 976 76 2458
 - E-mail: julioF@unizar.es
- 54. Floría Peralta, Luis Mario
 - Tel.: 976761221
 - E-mail: floria@unizar.es
- 55. Formosa Jordan, Pau
 - Tel.: 93 4021191
 - E-mail: pformosa@ecm.ub.es
- 56. Galeano Prieto, Javier
 - Tel.: +34913365445
 - E-mail: javier.galeano@upm.es
- 57. García Aldea, David
 - Tel.: 913987636
 - \bullet E-mail: dgaldea@fisfun.uned.es
- 58. García Almarza, Noé
 - Tel.: +34-91 561 94 00 EXT 1302
 - \bullet E-mail: noe@iqfr.csic.es
- 59. García de Soria Lucena, María Isabel
 - Tel.: +33 1 69 15 31 86
 - E-mail: gsoria@us.es
- 60. García Ojalvo, Jordi
 - Tel.: +34 93 739 8645
 - E-mail: jordi.g.ojalvo@upc.edu
- 61. García Pérez, Elena
 - Tel.: 954358921
 - E-mail: egarper@upo.es
- 62. Garcimartín Montero, Angel
 - Tel.: 948 425600 Ext. 6385
 - E-mail: angel@fisica.unav.es
- 63. Garzó Puertos, Vicente
 - Tel.: 924289527
 - E-mail: vicenteg@unex.es
- 64. Gershenfeld, Neil
 - \bullet Tel.:
 - E-mail: gersh@cba.mit.edu
- 65. Gómez Álvarez, Paula
 - Tel.: 988-387294
 - E-mail: ga_paula@uvigo.es

- 66. Gómez Gardeñes, Jesús
 - \bullet Tel.:
 - E-mail: gardenes@gmail.com
- 67. Gómez-Sicilia, Angel
 - Tel.: 934039194
 - E-mail: sicilia@ecm.ub.es
- 68. Gomila Villalonga, Damia
 - Tel.: 971172668
 - E-mail: damia@ifisc.uib.es
- 69. González Avella, Juan Carlos
 - Tel.: 971 25 95 20.
 - E-mail: juancarlos@ifisc.uib.es
- 70. González Salgado, Diego
 - Tel.: 988-387239
 - E-mail: dgs@uvigo.es
- 71. González Sánchez, Antonio
 - Tel.: 923 294 436
 - E-mail: ags@usal.es
- 72. Graell Solé, Josep
 - Tel.: 934039194
 - E-mail: pgraell@gmail.com
- 73. Guàrdia, Elvira
 - Tel.: 934017288
 - E-mail: elvira.guardia@upc.edu
- 74. Hansen, Jean-Pierre
 - Tel.: 00 44 1223 336 376
 - E-mail: jph32@cam.ac.uk
- 75. Hernández García, Emilio
 - Tel.: 971171307
 - E-mail: emilio@ifisc.uib.es
- 76. Hernandez-Machado, Aurora
 - Tel.: 93.402.15.92
 - E-mail: aurora@ecm.ub.es
- 77. Hijon de Miguel, Carmen
 - Tel.: 913987136
 - E-mail: chijon@bec.uned.es
- 78. Hörger, Ines
 - Tel.: 914978629
 - E-mail: ines_hoerger@web.de

- 79. Hurtado Fernández, Pablo Ignacio
 - Tel.: 958 244014
 - E-mail: phurtado@onsager.ugr.es
- 80. Jacobo, Adrian
 - Tel.: 971 259520
 - E-mail: adrian@ifisc.uib.es
- 81. Janda Galán, Alvaro
 - Tel.: 948 425 600 Ext.6562
 - E-mail: ajandaga@alumni.unav.es
- 82. Jiménez de Cisneros, Borja
 - Tel.: 923 294 436 Ext. 1311
 - E-mail: cisneros@usal.es
- 83. Johnson, Samuel
 - Tel.: (+34) 958 244 014
 - E-mail: samuel@onsager.ugr.es
- 84. Khalil Rodríguez, Nagi
 - Tel.: 954556418
 - E-mail: nagi@us.es
- 85. Komin, Niko
 - Tel.: +34 971 25 95 20
 - E-mail: niko@ifisc.uib.es
- 86. Korutcheva, Elka
 - Tel.: : 91-398-7143
 - E-mail: elka@fisfun.uned.es
- 87. Lacasa Saiz de Arce, Lucas
 - Tel.: 913366326
 - E-mail: lucas@dmae.upm.es
- 88. Lafuente Molinero, Luis
 - Tel.: +1 617 253 0620
 - \bullet E-mail: luis.lafuente@cba.mit.edu
- 89. Ledesma Aguilar, Rodrigo
 - Tel.: 934039194
 - E-mail: rodrigo@ecm.ub.es
- 90. Llopis Fusté, Isaac
 - Tel.: 934039213
 - E-mail: isaacll@ffn.ub.es
- 91. Lomba García, Enrique
 - Tel.: 915619400
 - E-mail: E.Lomba@iqfr.csic.es

- 92. López Díaz, Luis
 - Tel.: 923294400
 - \bullet E-mail: lld@usal.es
- 93. López Martín, Juan Manuel
 - Tel.: 942 202 085
 - E-mail: lopez@ifca.unican.es
- 94. López Ruiz, Ricardo
 - Tel.: 976761134
 - E-mail: rilopez@unizar.es
- 95. Luque Santolaria, Antoni
 - Tel.: 93 402 11 55
 - E-mail: luque@ffn.ub.es
- 96. Luque Serrrano, Bartolo
 - Tel.: 913366326
 - E-mail: bartolo@dmae.upm.es
- 97. Madruga Sánchez, Santiago
 - Tel.: +49 351871 1413
 - E-mail: smadruga@gmail.com
- 98. Malgaretti, Paolo
 - Tel.: 651066854
 - \bullet E-mail: paolo.malgaretti@unimi.it
- 99. Marguta, Ramona
 - Tel.: 959219795
 - E-mail: ramona.georgeta@uhu.es
- 100. Martín del Río, Elvira
 - Tel.: 959217578
 - E-mail: elvira@uhu.es
- 101. Martínez Piñeiro, Manuel
 - Tel.: 647343191
 - E-mail: mmpineiro@uvigo.es
- 102. Martínez Ratón, Yuri
 - Tel.: 916248890
 - E-mail: yuri@math.uc3m.es
- 103. Matas Navarro, Ricard
 - Tel.: +34 93 4021155
 - E-mail: ricardmn@ffn.ub.es
- 104. Mateos Roco, José Miguel
 - Tel.: 923 294436 Ext.: 1311
 - E-mail: roco@usal.es

- 105. Matías, Manuel
 - Tel.: 971173383
 - E-mail: Manuel.Matias@ifisc.uib.es
- 106. Maynar Blanco, Pablo
 - Tel.: 954550944
 - E-mail: maynar@us.es
- 107. Maza Ozcoidi, Diego Martín
 - Tel.: 948425600
 - E-mail: dmaza@unav.es
- 108. Mazo Torres, Juan José
 - Tel.: 976762454
 - E-mail: juanjo@unizar.es
- 109. Meca Álvarez, Esteban
 - Tel.: 934016263
 - \bullet E-mail: esteban@fa.upc.edu
- 110. Mederos Martín, Luis
 - Tel.: 913349022
 - \bullet E-mail: lmederos@icmm.csic.es.es
- 111. Medina Domínguez, Alejandro
 - Tel.: 923-294500, ext. 1311
 - E-mail: amd385@usal.es
- 112. Mejías Palomino, Jorge F.
 - Tel.: (+34) 958 244 014
 - E-mail: jmejias@onsager.ugr.es
- 113. Merabia, Samy
 - Tel.: 93 403 9210
 - E-mail: smerabia@gmail.com
- 114. Míguez Díaz, José Manuel
 - Tel.: 637124494
 - E-mail: miguezjm@uvigo.es
- 115. Miranda Galcerán, Montserrat Ana
 - Tel.: 948 425 600 (ext. 6562)
 - E-mail: montse@fisica.unav.es
- 116. Moreno Franco, Francisco
 - Tel.: 954550944
 - \bullet E-mail: fmoreno@us.es
- 117. Moreno Vega, Yamir
 - Tel.: 976562212, ext 223
 - E-mail: yamir@unizar.es

- 118. Moretti, Paolo
 - Tel.: 934039253
 - E-mail: paolo.moretti@ub.edu
- 119. Moro Egido, Esteban
 - Tel.: 916248727
 - E-mail: emoro@math.uc3m.es
- 120. Moyano, Luis Gregorio
 - Tel.: +34 91 624 5960
 - E-mail: lmoyano@math.uc3m.es
- 121. Munilla López, Javier
 - Tel.: 686244680
 - E-mail: jmunilla@gmail.com
- 122. Muñoz García, Javier
 - Tel.: +34 686450306
 - E-mail: javiermunozgarcia@gmail.com
- 123. Muñoz Martínez, Miguel Angel
 - Tel.: 958-244014
 - E-mail: mamunoz@onsager.ugr.es
- 124. Naranjo Mayorga, Fernando
 - Tel.: 976763432
 - E-mail: fnmtunja@unizar.es
- 125. Nicola, Ernesto M.
 - Tel.: 0049/(0)351/871-2122
 - E-mail: nicola@pks.mpg.de
- 126. Nicoli, Matteo
 - Tel.: 91 624 9977
 - E-mail: nmatteo@math.uc3m.es
- 127. Nuño, Juan Carlos
 - Tel.: 913367107
 - E-mail: juancarlos.nunol@upm.es
- 128. Ortín Rull, Jordi
 - Tel.: 934021189
 - E-mail: ortin@ecm.ub.es
- 129. Ortiz de Zárate Leira, José María
 - Tel.: 913 944 594
 - E-mail: jmortizz@fis.ucm.es
- 130. Pacheco, Jorge M.
 - Tel.: +351 21 790 4891
 - E-mail: pacheco@cii.fc.ul.pt

- 131. Páez Jiménez, Alfonso
 - Tel.: 914978647
 - E-mail: alfonso.paez@uam.es
- 132. Pagonabarraga Mora, Ignacio
 - Tel.: 934021157
 - E-mail: ipagonabarraga@ub.edu
- 133. Palassini, Matteo
 - Tel.: 934039200
 - E-mail: palassini@ub.edu
- 134. Pascual García, Alberto
 - Tel.: 91 196 46 33
 - E-mail: apascual@cbm.uam.es
- 135. Pastor Gutiérrez, Martín
 - Tel.: 948 425 600 Ext: 6412 ó 6562
 - E-mail: jpgutierrez@alumni.unav.es
- 136. Pazó, Diego
 - Tel.: 942 202086
 - E-mail: pazo@ifca.unican.es
- 137. Peñaranda Ayllón, Angelina
 - Tel.: 934017995
 - \bullet E-mail: angelina@fa.upc.edu
- 138. Pérez Cruz , Justo Roberto
 - Tel.: 922318261
 - E-mail: juperez@ull.es
- 139. Pérez Muñuzuri, Alberto
 - Tel.: (+34) 981 563100 x 14002
 - \bullet E-mail: uscfmapm@cesga.es
- 140. Pérez Muñuzuri, Vicente
 - Tel.: 981.957467
 - E-mail: vicente.perez@cesga.es
- 141. Pérez Roca, Carlos
 - Tel.: 916249470
 - E-mail: cproca@math.uc3m.es
- 142. Pérez Serrano, Antonio
 - Tel.: +34 971 25 96 29
 - E-mail: antonio@ifisc.uib.es
- 143. Picallo González, Clara Beatriz
 - Tel.: +34 942 202 086
 - E-mail: picallo@ifca.unican.es

- 144. Planet Latorre, Ramon
 - Tel.: 934039194
 - E-mail: rplanet@ecm.ub.es
- 145. Poncela Casasnovas, Julia
 - Tel.: 976562213
 - E-mail: poncela@unizar.es
- 146. Pont i Pla, Oriol
 - Tel.: 934039206
 - E-mail: opont@ub.edu
- 147. Prada Gracia, Diego
 - Tel.: 976 76 10 00 (Ext:3341)
 - E-mail: dprada@unizar.es
- 148. Pradas Gené, Marc
 - Tel.: 934039194
 - E-mail: marc.pradas@gmail.com
- 149. Prados Montaño, Antonio
 - Tel.: 954559514
 - E-mail: prados@us.es
- 150. Prakash, Manu
 - Tel.: +1 617 253 0748
 - E-mail: manup@mit.edu
- 151. Ramasco Sukia, José Javier
 - Tel.: (39) 011 660 3090 (ext 173)
 - E-mail: jramasco@isi.it
- 152. Revelli, Jorge Alberto
 - Tel.: (34) 942 20 20 86
 - E-mail: revelli@ifca.unican.es
- 153. Rodríguez Cantalapiedra, Inma
 - Tel.: 934016816
 - E-mail: inma@fa.upc.edu

154. Rodríguez Díaz , Miguel Angel

- Tel.: 942201467
- E-mail: rodrigma@ifca.unican.es
- 155. Rodríguez López, Pablo
 - Tel.: 616 949 183
 - E-mail: pablo.rodriguez@fis.ucm.es
- 156. Román Hernández, Francisco Lorenzo
 - Tel.: 923294436 ext 1311
 - E-mail: romanh@usal.es

- 157. Romero Enrique, José Manuel
 - Tel.: 954550942
 - E-mail: enrome@us.es
- 158. Rubio Alvarez, Miguel Angel
 - Tel.: : 913987129
 - E-mail: mar@fisfun.uned.es
- 159. Ruiz Montero, María José
 - Tel.: 954550935
 - E-mail: majose@us.es
- 160. Ruiz Herrero, Teresa
 - Tel.: 914973002
 - E-mail: teresa.ruiz@uam.es
- 161. Sala, Jonàs
 - Tel.: 934017056
 - E-mail: jonas.sala@upc.edu
- 162. Sánchez de La Lama, Marta
 - Tel.: +34 942 202 086
 - E-mail: msanchez@ifca.unican.es
- 163. Sánchez Romero, Pedro A.
 - Tel.: 971173442
 - E-mail: pedro@ifisc.uib.es
- 164. Sánchez Sánchez, Anxo
 - Tel.: 914 976 836
 - E-mail: anxo@math.uc3m.es
- 165. San Miguel, Maxi
 - Tel.: +34-971-173229
 - E-mail: maxi@ifisc.uib.es
- 166. Santos, Luis
 - Tel.: +49 (0)511 762 5890
 - E-mail: santos@itp.uni-hannover.de
- 167. Santos Reyes, Andrés
 - Tel.: 924289540
 - E-mail: andres@unex.es
- 168. Serrano Maestro, Mar
 - Tel.: 91 3987126
 - E-mail: mserrano@fisfun.uned.es
- 169. Sicilia Garcia, Alberto
 - Tel.: ++(33).(0).1.44.27.74.32
 - E-mail: sicilia@lpthe.jussieu.fr
- 170. Sintes Olives, Tomás
 - Tel.: 971 17 1380
 - E-mail: tomas@ifisc.uib.es

- 171. Souza Bacelar, Flora
 - Tel.: 34 971 173369
 - E-mail: florabacelar@ifisc.uib.es
- 172. Tarazona Lafarga, Pedro
 - Tel.: 914974907
 - E-mail: pedro.tarazona@uam.es
- 173. Tiana Alsina, Jordi
 - Tel.: 93 7398286
 - E-mail: jordi.tiana.alsina@gmail.com
- 174. Toral, Raúl
 - Tel.: 971173235
 - E-mail: raul@ifisc.uib.es
- 175. Turiel Martínez, Antonio
 - Tel.: 93 230 9500
 - E-mail: turiel@icm.csic.es
- 176. Vázquez, Federico
 - Tel.: 971-259519
 - E-mail: federico@ifisc.uib.es
- 177. Vázquez Quesada, Adolfo
 - Tel.: 665 35 21 47
 - E-mail: avazquez@bec.uned.es
- 178. Vega Reyes, Francisco
 - Tel.: 924289540
 - E-mail: fvega@unex.es
- 179. Velasco Caravaca, Enrique
 - Tel.: 91 497 49 04
 - E-mail: enrique.velasco@uam.es
- 180. Velasco Maíllo, Santiago
 - Tel.: 923.294436
 - E-mail: santi@usal.es
- 181. Waisman, Eduardo
 - Tel.: 914 468 200
 - \bullet E-mail: eduardow@telefonica.net
- 182. White Sánchez, Juan Antonio
 - Tel.: 923 29 44 36 ext 1311
 - \bullet E-mail: white@usal.es
- 183. Wio, Horacio S.
 - Tel.: 942 202089
 - E-mail: wio@ifca.unican.es
- 184. Zuriguel Ballaz, Iker
 - Tel.: 948425600 Ext 6383
 - E-mail: iker@fisica.unav.es