

# Organismos patrocinadores



## Organiza

Grupo de Física de Líquidos Complejos  
Departamento de Física Aplicada  
Universidad de Huelva

© FisEs09, 2009.

Cubierta: Muelle de la Compañía Riotinto y Logo FisEs  
(composición: F.J. Blas, E. de Miguel y E. M. del Río)

Maquetación y compilación, Felipe J. Blas, Enrique de Miguel y Elvira M. del Río



# Comité Científico

- Ricardo Brito (U. Complutense)
- Carlos Cabrillo (IEM-CSIC)
- Pedro L. Garrido (U. Granada)
- Pere Colet (IFISC-CSIC-UIB)
- Elvira Guardia (U. P. Catalunya)
- Diego Maza (U. Navarra)
- Enrique de Miguel (U. Huelva)
- Conrad Pérez (U. Barcelona)
- Miguel A. Rodríguez (U. Cantabria)
- María José Ruiz (U. Sevilla)
- Pedro Tarazona (U. Autónoma Madrid)
- Juan A. White (U. Salamanca)

# Comité Local

- Felipe J. Blas
- Enrique de Miguel
- Elvira M. del Río



# Índice General

<b>I Conferencias invitadas</b> .....	<b>13</b>
1. <b>Gases granulares: de dónde venimos y a dónde parece que debemos ir</b> J. Javier Brey	15
2. <b>Coarsening</b> Leticia F. Cugliandolo	16
3. <b>Two applications of mutual information in molecular biology</b> P. Grassberger	17
4. <b>Dynamic instabilities and morphology in biological membranes</b> F. Campelo and A. Hernández-Machado	18
5. <b>Charge reversal in model colloids: Experiments, theory, and simulations</b> M. Quesada-Pérez, A. Martín-Molina, and R. Hidalgo-Álvarez	19
6. <b>In search of the elusive biaxial nematic phase: Mixtures of rod and disc-like particles</b> A. Cuetos, A. Galindo, and G. Jackson	20
7. <b>Irreversibilidad y producción de entropía</b> J. M. R. Parrondo	21
8. <b>Molecular folding investigated by mechanically unzipping single DNA molecules</b> F. Ritort	22
9. <b>DNA looping: From loop formation to loop selection</b> M. Rubí	23
10. <b>Networks in soft matter and beyond</b> M. M. Telo da Gama, P. I. C. Teixeira, and J. M. Tavares	24
<b>II Orales</b> .....	<b>25</b>
1. <b>Difusión anómala versus random walks correlacionados. Aplicaciones en nanopartículas</b> Daniel Campos	27
2. <b>Modelo dinámico de vértices para la formación de fronteras en el disco imaginal del ala de la <i>D. Melanogaster</i></b> O. Canela-Xandri, J. Buceta, F. Sagués y J. Casademunt	28
3. <b>Cuasiecosistemas y la catástrofe de extinción</b> José A. Capitán, José A. Cuesta y Jordi Bascompte	29
4. <b>Force and morphological heterogeneities in rod packings</b> Raúl Cruz Hidalgo, Iker Zuriguel, Diego Maza, and Ignacio Pagonabarraga	30
5. <b>Esféricas duras bosónicas confinadas en sistemas cuasi monodimensionales</b> F. de Soto y M. C. Gordillo	31
6. <b>Clustering in interfacial colloids under capillary attraction. Cosmology in a Petri dish?</b> Álvaro Domínguez	32
7. <b>Spiral and target patterns in bivalve nacre: layer growth of a biological liquid crystal</b> Julyan H. E. Cartwright, Antonio G. Checa, Bruno Escribano, and C. Ignacio Sainz-Díaz	33
8. <b>Aplicación del ISM al estudio de la transición de mojado</b> Eva M. Fernández, Enrique Chacón y Pedro Tarazona	34
9. <b>On the dynamics of the formation of colloidal crystals by spin coating</b> M. Giuliani, W. González-Viñas, and A. Yethiraj	35

<b>10. Sobre el papel de las fuerzas de largo alcance en las interfaces</b>	<b>36</b>
Luis G. MacDowell, Rocío de Gregorio y Felipe J. Blas	
<b>11. Characterizing time series through complex networks: The visibility algorithm</b>	<b>37</b>
Lucas Lacasa and Bartolo Luque	
<b>12. Equation of state of <math>d</math>-dimensional hard-core fluids</b>	<b>38</b>
Mariano López de Haro and Andrés Santos	
<b>13. Oceanic turbulence, coherent structures, and the behavior of marine ecosystems</b>	<b>39</b>
Cristóbal López, Vincent Rossi, Emilio Hernández-García, Emilie Tew Kai, Joel Sudre, Henri Weimerskirch, and Veronique Garcon	
<b>14. Dinámica no lineal en motores alternativos de combustión interna</b>	<b>40</b>
A. Medina, P.L. Curto Risso y A. Calvo Hernández	
<b>15. Self-organization without conservation: True or just apparent scale-invariance?</b>	<b>41</b>
Juan A. Bonachela and Miguel A. Muñoz	
<b>16. Optimization and plasticity in disordered media</b>	<b>42</b>
Clara B. Picallo, Mikko J. Alava, Stefano Zapperi, and Juan M. López	
<b>17. Exploring the free energy landscape: From dynamics to networks and back</b>	<b>43</b>
Diego Prada-Gracia, Jesús Gómez-Gardeñes, Pablo Echenique, and Fernando Falo	
<b>18. Understanding the self-assembly of organic molecules onto metal surfaces</b>	<b>44</b>
Thomas Roussel and Lourdes F. Vega	
<b>19. Clonal plant growth and genetic diversity</b>	<b>45</b>
Tomás Sintés	
<b>20. The savanna problem from a Statistical Physics point of view</b>	<b>46</b>
Federico Vázquez, Cristobal López, Justin Calabrese, Miguel Ángel Muñoz, Volker Grimm, and Maxi San Miguel	
<b>21. Cinco años simulando el diagrama de fases del agua. ¿Qué hemos aprendido?</b>	<b>47</b>
C. Vega, J. L. F. Abascal, L. G. MacDowell, M. M. Conde, J. L. Aragonés, E. G. Noya y C. McBride	
<b>III Paneles .....</b>	<b>49</b>
<b>1. Transporte anómalo y reacciones de primer orden: ecuación general de subdifusión-reacción y estudio de sus aplicaciones</b>	<b>51</b>
E. Abad, R. Borrego y S. B. Yuste	
<b>2. Cálculo por simulación de propiedades anómalas del agua: compresibilidad isoterma y viscosidad</b>	<b>52</b>
Miguel Ángel González y José Luis F. Abascal	
<b>3. Efecto de la anisotropía de grano en la descarga de un silo</b>	<b>53</b>
Manuel F. Acevedo Escalante, Iker Zuriguel y Diego Maza	
<b>4. Dynamics of colloidal particles in flowing solvents through nanochannels</b>	<b>54</b>
Laura Almenar, Markus Rauscher, and Siegfried Dietrich	
<b>5. Dinámica de fluidos complejos en nanocanales</b>	<b>55</b>
Laura Almenar, Markus Rauscher y Siegfried Dietrich	
<b>6. Cardiac tissue with mechano-electrical feedback as excitable media with global coupling</b>	<b>56</b>
E. Álvarez-Lacalle and B. Echebarría	
<b>7. Dynamics and control of intracellular calcium dynamics in cells with RyRs</b>	<b>57</b>
E. Álvarez-Lacalle, I. R. Cantalapiedra, B. Echebarría, and A. Peñaranda	

<b>8. Transport properties of ionic liquids and their mixtures with water and CO<sub>2</sub></b>	<b>58</b>
J. S. Andreu and L. F. Vega	
<b>9. Fases de cristal plástico para modelos sencillos de agua</b>	<b>59</b>
Juan L. Aragonés y Carlos Vega	
<b>10. Helicity conservation and persistence of entanglement in reaction-diffusion systems</b>	<b>60</b>
M. Arrayás and J. L. Trueba	
<b>11. Polímeros en flujos de cizalla. Movimientos cíclicos</b>	<b>61</b>
F. Balboa Usabiaga y R. Delgado-Buscalioni	
<b>12. The chaos within: A non-linear attractor for Earth's geomagnetism</b>	<b>62</b>
David Becerra Alonso	
<b>13. Detección y caracterización automática de la actividad espacio-temporal de calcio intracelular en cardiomiocitos</b>	<b>63</b>
Raúl Benítez, Enrique Álvarez-Lacalle, Montserrat Barriga, Anna Llach, Juan Cinca y Leif Hove-Madsen	
<b>14. Monodisperse bubble suspensions in turbulent flows in microgravity. Drop tower experiments</b>	<b>64</b>
Pau Bitlloch, Xavier Ruiz, Laureano Ramírez-Piscina, and Jaume Casademunt	
<b>15. Quasi-deterministic collective ratchets. Some exact results</b>	<b>65</b>
Carles Blanch, Javier G. Orlandi, and Jaume Casademunt	
<b>16. Probabilidad de supervivencia de partículas subdifusivas rodeadas de un mar <math>d</math>-dimensional de trampas subdifusivas</b>	<b>66</b>
R. Borrego Marín, E. Abad Jarillo y S. Bravo Yuste	
<b>17. Influence of the flexibility of the force field model on the adsorption of greenhouse gases</b>	<b>67</b>
Santiago Builes, Aurelio Olivet, and Lourdes F. Vega	
<b>18. Evolución de cuasiespecies moleculares sobre redes neutrales: respuesta dinámica a presiones de selección opuestas</b>	<b>68</b>
Jacobo Aguirre, Javier M. Buldú, Michael Stich y Susanna C. Manrubia	
<b>19. Una teoría de percolación para la extinción viral</b>	<b>69</b>
José A. Capitán, Jacobo Aguirre, Susanna C. Manrubia y José A. Cuesta	
<b>20. Sistemas activos en microemulsión: cambios de estabilidad provocado por campos externos</b>	<b>70</b>
J. Carballido-Landeira, P. Taboada y A. P. Muñozuri	
<b>21. Rheological characterization of a Boger fluid (PAA-glycerol) in shear flow</b>	<b>71</b>
L. Casanellas and J. Ortín	
<b>22. Reducing complexity of recursive neural networks learning using a mean-field approach</b>	<b>72</b>
Alejandro China Manrique de Lara	
<b>23. Lyapunov analysis of the chaotic dynamics of rings of delay-coupled oscillators</b>	<b>73</b>
Miguel C. Soriano, Guy van der Sande, Ingo Fischer, Claudio R. Mirasso, and Pere Colet	
<b>24. Open vs closed loop receivers in all-optical chaos-based communication systems</b>	<b>74</b>
Miguel C. Soriano, Pere Colet, and Claudio R. Mirasso	
<b>25. Dinámica no-local en crecimiento inestable de superficies</b>	<b>75</b>
Matteo Nicoli, Rodolfo Cuerno y Mario Castro	
<b>26. Buscando la fase nemática en fluidos discóticos</b>	<b>76</b>
Alejandro Cueto y Bruno Martínez-Haya	
<b>27. Induction of Turing-like patterns by external spatiotemporal forcing</b>	<b>77</b>
Daniel Cuiñas, Michael Menzinger, Patrick McGraw, and Alberto P. Muñozuri	
<b>28. Transiciones de fase en mezclas de cristales líquidos confinados</b>	<b>78</b>
D. de las Heras, Y. Martínez-Ratón y E. Velasco	

<b>29. Dynamics of nanoscopic capillary waves in simple liquids</b>	<b>79</b>
Rafael Delgado-Buscalioni, Enrique Chacón, and Pedro Tarazona	
<b>30. A computer simulation method for the determination of the elastic constants</b>	<b>80</b>
Enrique de Miguel and Carlos Vega	
<b>31. Aplicaciones de la geometría computacional a la simulación molecular de interfaces</b>	<b>81</b>
Florencio Balboa Usabiaga y Daniel Duque	
<b>32. Estudio del efecto de desorden y defectos de superficie sobre fricción atómica</b>	<b>82</b>
O. Y. Fajardo y J. J. Mazo	
<b>33. Dinámica de “bubbles” en el modelo de Peyrard-Bishop-Dauxois del DNA</b>	<b>83</b>
Rafael Tapia-Rojo, Juan José Mazo y Fernando Falo	
<b>34. The role of ion-interface correlations in softmatter: from charge inversion in liposomes to selectivity inversion in ionic channels</b>	<b>84</b>
Jordi Farauo, Carles Calero, and Marcel Aguilera-Arzo	
<b>35. Aproximación gaussiana para la resolución de ecuaciones maestras</b>	<b>85</b>
Luis F. Lafuerza y Raúl Toral	
<b>36. Estudio de redes complejas en lagunas temporales de Menorca. Implicaciones para la gestión a nivel regional</b>	<b>86</b>
Javier Galeano, Juan Manuel Pastor, José María Iriondo y Pere Fraga	
<b>37. Modelado y simulación de procesos de adsorción en arcillas con pilares intercalados</b>	<b>87</b>
N. G. Almarza, E. Lomba, C. Martín y A. Gallardo	
<b>38. A cluster algorithm for Monte Carlo simulation at constant pressure</b>	<b>88</b>
N. G. Almarza	
<b>39. Hidrodinámica fluctuante en un gas granular</b>	<b>89</b>
J. J. Brey, M. I. García de Soria y P. Maynar	
<b>40. Phase diagram, correlation gap, and critical properties of the Coulomb glass</b>	<b>90</b>
Martin Goethe and Matteo Palassini	
<b>41. Evaluación de la fiabilidad de las aproximaciones del modelo TSAM mediante simulación molecular</b>	<b>91</b>
P. Gómez-Álvarez, A. Dopazo-Paz, D. González-Salgado y L. Romani	
<b>42. Cooperativity of single-headed kinesin motors</b>	<b>92</b>
Javier G. Orlandi, Carles Blanch, Jan Brugués, and Jaume Casademunt	
<b>43. Collective dynamics of interacting Brownian motors under unequal loading</b>	<b>93</b>
Javier G. Orlandi, Carles Blanch, Jan Brugués, and Jaume Casademunt	
<b>44. Spontaneous ordering against an external field in nonequilibrium systems</b>	<b>94</b>
J. C. González-Avella, M. G. Cosenza, V. M. Eguíluz, and M. San Miguel	
<b>45. Efectos cuánticos en el máximo de densidad del agua</b>	<b>95</b>
E. G. Noya, C. Vega, L. M. Sesé y R. Ramírez	
<b>46. Vertical forcing in bidimensional Turing patterns</b>	<b>96</b>
J. Guiu Souto, J. Carballido-Landeira, V. Pérez-Villar, and A. P. Muñuzuri	
<b>47. Structure of Bred vectors in spatio-temporal chaos</b>	<b>97</b>
Sarah Hallerberg, Diego Pazó, Juan M. López, and Miguel A. Rodríguez	
<b>48. Nonlocally interacting particle systems with Lévy flights</b>	<b>98</b>
Els Heinsalu, Emilio Hernández-García, and Cristóbal López	
<b>49. Scaling and robustness of finite-size Lyapunov exponents in surface ocean flows</b>	<b>99</b>
Ismael Hernández-Carrasco, Cristóbal López, Antonio Turiel, and Emilio Hernández-García	



<b>50. Fuerza contractiva del anillo de FtsZ evaluada desde resultados experimentales</b>	<b>100</b>
Ines Hörger y Pedro Tarazona	
<b>51. Realistic dispersion kernels in reaction-dispersion equations. Application to the Neolithic</b>	<b>101</b>
Neus Isern	
<b>52. Interaction of Localized Structures in the oscillatory and excitable regimes</b>	<b>102</b>
Adrian Jacobo, Damià Gomila, Manuel A. Matías, and Pere Colet	
<b>53. Flujo y atascos de un medio granular en la descarga de un silo vibrado</b>	<b>103</b>
A. Janda, D. Maza, A. Garcimartín, E. Kolb, J. Lanuza y E. Clément	
<b>54. Cooling dynamics of a granular gas of irregular particles</b>	<b>104</b>
Takeichi Kanzaki Cabrera, Raúl Cruz Hidalgo, Diego Maza, and Ignacio Pagonabarraga	
<b>55. Constructive effects of diversity in the synchronisation of a model for the circadian clock in mammals</b>	<b>105</b>
Niko Komin, Raúl Toral, Adrian Murza, and Emilio Hernández-García	
<b>56. Controlling drop emission in forced microfilaments using wetting properties</b>	<b>106</b>
R. Ledesma-Aguilar, I. Pagonabarraga, and A. Hernández-Machado	
<b>57. Modulación de la frecuencia perturbante en el comportamiento oscilatorio de la reacción <math>\text{NO}+\text{H}_2/\text{Pt}(100)</math></b>	<b>107</b>
M. C. Lemos, A. Córdoba y J. A. de la Torre	
<b>58. A density functional theory formalism combined with the statistical mechanics based SAFT-VR equation of state for the prediction of interfacial phenomena</b>	<b>108</b>
Félix Llovel, Amparo Galindo, George Jackson, and Felipe J. Blas	
<b>59. Phase behaviour of the hard sphere Maier-Saupe fluid under spatial confinement</b>	<b>109</b>
N. G. Almarza, C. Martín, and E. Lomba	
<b>60. Simple equation of state for hard disks on the hyperbolic plane</b>	<b>110</b>
Mariano López de Haro, Andrés Santos, and Santos Bravo Yuste	
<b>61. Physical and geometrical principles in the structure of viruses</b>	<b>111</b>
Antoni Luque, Roya Zandi, and David Reguera	
<b>62. Dynamical properties of excitable dendritic trees</b>	<b>112</b>
Leonardo L. Gollo, Osame Kinouchi, and Mauro Copelli	
<b>63. Collective effects in intracellular transport</b>	<b>113</b>
Paolo Margaretti and Ignacio Pagonabarraga	
<b>64. Monte Carlo simulation of hybrid nematic films using the Lebwohl-Lasher model</b>	<b>114</b>
Ramona G. Marguta, Noe G. Almarza, and Enrique Velasco	
<b>65. Estudio por simulación del espesor de la capa líquida para la superficie libre del hielo</b>	<b>115</b>
M. M. Conde, C. Vega y A. Patrykiewicz	
<b>66. Estructura intrínseca de la interfase entre dos líquidos</b>	<b>116</b>
Héctor Martínez, Pedro Tarazona y Enrique Chacón	
<b>67. Sedimentation of self-propelled microorganisms</b>	<b>117</b>
Ricard Matas Navarro and Ignacio Pagonabarraga Mora	
<b>68. Fluctuaciones en medios granulares sujetos a la acción de un termostato</b>	<b>118</b>
P. Maynar, M. I. García de Soria y E. Trizac	
<b>69. Oscillatory instabilities in directional solidification with solutal convection. Transient regime</b>	<b>119</b>
Esteban Meca and Laureano Ramírez-Piscina	
<b>70. Modelo mesoscópico para la invasión de plantas</b>	<b>120</b>
Vicenç Méndez	

<b>71. Heterogeneous dynamics and internal stress distributions near dislocation jamming</b>	<b>121</b>
Isabel Corominas, Lasse Laurson, Mikko Alava, and M. Carmen Miguel	
<b>72. Simulación molecular de propiedades interfaciales de metano, dióxido de carbono y agua en condiciones de confinamiento</b>	<b>122</b>
J. M. Míguez, D. González-Salgado, J. L. Legido y M. M. Piñeiro	
<b>73. Aggregation of chemotactic organisms in an advected environment</b>	<b>123</b>
Javier Muñoz-García and Zoltán Neufeld	
<b>74. Cusps, self-organization, and absorbing states</b>	<b>124</b>
Juan A. Bonachelai, Mikko Alava, and Miguel A. Muñoz	
<b>75. Desanclaje térmico de fluxones en anillos Josephson discretos</b>	<b>125</b>
F. Naranjo, J. J. Mazo y K. Segall	
<b>76. Escape térmico de partículas brownianas desde un pozo metaestable. Caso de barrera finita y subamortiguado</b>	<b>126</b>
F. Naranjo, J. J. Mazo y D. Zueco	
<b>77. Opto-electronic devices with double feedback loop</b>	<b>127</b>
R. M. Nguimdo, Pere Colet, and Claudio Mirasso	
<b>78. Dynamics of electro-optic delay oscillators pumped with two lasers</b>	<b>128</b>
R. M. Nguimdo, Pere Colet, Yanne Chembo Kouomou, and Laurent Larger	
<b>79. Evolución y selección de replicones en ambientes cambiantes</b>	<b>129</b>
Juan Carlos Nuño, Javier de Vicente, José Olarrea, Pilar López y Rafael Lahoz-Beltrá	
<b>80. Autoorganización de polímeros vivos: filamentos de FtsZ y el anillo de división celular bacteriano</b>	<b>130</b>
Alfonso Páez y Pedro Tarazona	
<b>81. WINE (Weighted-Interaction Nestedness Estimator): un estimador de anidamiento para matrices de eventos</b>	<b>131</b>
J. M. Pastor, Javier Galeano y José M. Iriondo	
<b>82. Effects of mobility on ordering dynamics</b>	<b>132</b>
Andrea Baronchelli and Romualdo Pastor-Satorras	
<b>83. Role of diversity and noise in a neuronal model of the wake-sleep cycle</b>	<b>133</b>
Marco Patriarca, Emilio Hernández-García, and Raúl Toral	
<b>84. Escalado de los vectores singulares y de los exponentes de Lyapunov de tiempo finito en sistemas con caos espaciotemporal</b>	<b>134</b>
Diego Pazó, Juan M. López y Miguel A. Rodríguez	
<b>85. Reexcitation mechanisms in epicardial tissue: role of <math>I_{to}</math> density heterogeneities and <math>I_{Na}</math> inactivation kinetics</b>	<b>135</b>
A. Peñaranda, I. R. Cantalapiedra, and B. Echebarria	
<b>86. External convective forcings on a reaction-diffusion system</b>	<b>136</b>
Alberto P. Muñuzuri	
<b>87. External noise-induced phenomena in nonlinear surface reactions</b>	<b>137</b>
Miguel Pineda and Raúl Toral	
<b>88. Local dynamics of imbibition fronts</b>	<b>138</b>
Ramon Planet, Jordi Ortín, and Stéphane Santucci	
<b>89. A microcanonical cascade formalism for data inference and forecasting</b>	<b>139</b>
Oriol Pont, Antonio Turiel, and Conrad Pérez-Vicente	
<b>90. Activity statistics, avalanches, and velocity correlations in surface roughening</b>	<b>140</b>
Marc Pradas, A. Hernández-Machado, and Juan M. López	

<b>91. Polarization nonlinear dynamics of vertical-cavity surface-emitting lasers subject to orthogonal optical injection</b>	<b>141</b>
A. Quirce, A. Hurtado, A. Valle, L. Pesquera, and M. J. Adams	
<b>92. Kinetic reconstruction of free energy landscapes</b>	<b>142</b>
David Reguera and Jan Wedekind	
<b>93. Transport on a dynamically disordered lattice: optimal intermittent search strategies</b>	<b>143</b>
J. A. Revelli, F. Rojo, C. E. Budde, and H. S. Wio	
<b>94. Transición fluido-sólido en sistemas de esferas e hiperesferas duras</b>	<b>144</b>
Cesar D. Estrada y Miguel Robles	
<b>95. Cardiac dynamics: a simplified model for the action potential</b>	<b>145</b>
I. R. Cantalapiedra, A. Peñaranda, J. Bragard, and B. Echebarria	
<b>96. Efecto Casimir en sistemas fuera del equilibrio</b>	<b>146</b>
Pablo Rodriguez-Lopez, Ricardo Brito y Rodrigo Soto	
<b>97. El principio de Curie en el efecto ratchet inducido por rotura de simetrías temporales</b>	<b>147</b>
N. R. Quintero, R. A. Nodarse y J. Cuesta	
<b>98. Incapacidad de la prueba 0-1 para la detección del caos Hamiltoniano en el límite termodinámico</b>	<b>148</b>
Mauricio Romero Bastida	
<b>99. Contribución elástica a la energía libre superficial de un nemático en presencia de un sustrato estructurado: ¿es siempre válida la aproximación de Berreman?</b>	<b>149</b>
José Manuel Romero Enrique, Chi-Tuong Pham y Pedro Patrício	
<b>100. Sodium halide aqueous solutions confined in graphene nanochannels: a computer simulation study of the influence of ion and water polarization</b>	<b>150</b>
J. Sala, E. Guàrdia, and J. Martí	
<b>101. Universal fluctuations in correlated systems</b>	<b>151</b>
M. S. de la Lama and J. M. López	
<b>102. Two dimensional glassy water: searching for minimal models of LDA-HDA transitions</b>	<b>152</b>
Pedro A. Sánchez, Valery Ilyin, Tomás Sintés, Oreste Piro, Itamar Procaccia, and Julyan H. E. Cartwright	
<b>103. Adsorption of semiflexible magnetic filaments on flat surfaces</b>	<b>153</b>
Pedro A. Sánchez, Joan J. Cerdá, Tomás Sintés, V. Ballenegger, Christian Holm, and Oreste Piro	
<b>104. Savanna-Fire Model: Combined effects of tree-tree establishment competition and spatially explicit fire on the spatial pattern of trees in savannas</b>	<b>154</b>
Flora S. Bacelar, Justin M. Calabrese, Volker Grimm, and Emilio Hernández-García	
<b>105. Role of noise in a continuous opinion model</b>	<b>155</b>
Raúl Toral, Miguel Pineda, and Emilio Hernández-García	
<b>106. From micro to macro in systems with two symmetric absorbing states</b>	<b>156</b>
Federico Vázquez and Cristobal López	
<b>107. Fase esméctica estable en una dispersión de discos polidispersos en diámetro y de anchura constante</b>	<b>157</b>
Y. Martínez-Ratón, E. Velasco, D. Sun, H.-J. Sue y Z. Cheng	
<b>108. Aplicación de un modelo hipercaótico a la criptografía</b>	<b>158</b>
Gerard Vidal y Héctor Mancini	
<b>109. Phase and interface behavior of pure compounds and binary mixtures with soft-SAFT coupled with density gradient theory</b>	<b>159</b>
Oriol Vilaseca, Rosa M. Marcos, and Lourdes F. Vega	

<b>110. Periodically modulated centrifugal forcing of a reaction-diffusion system</b>	<b>160</b>
Alexandra von Kameke and Alberto P. Munuzuri	
<b>111. Stochastic effects in the precision of the quorum sensing switch in <i>Vibrio fischeri</i></b>	<b>161</b>
Marc Weber and Javier Buceta	
<b>112. Size selectivity of binary mixtures in cylindrical pores</b>	<b>162</b>
A. González, J. A. White, F. L. Román, and S. Velasco	
<b>113. Chaotic transient dynamics in a semiconductor laser with optical feedback</b>	<b>163</b>
J. Zamora-Munt, C. Masoller, and J. Garcia-Ojalvo	
<b>114. Studying delays propagations in aeronautical networks through PageRank</b>	<b>164</b>
Massimiliano Zanin, Miguel Cea, and Samuel Cristóbal	
<b>115. Embedding time in complex networks</b>	<b>165</b>
Massimiliano Zanin, Miguel Cea, and Samuel Cristóbal	
<b>116. Efecto de la vibración en la formación de atascos en la descarga de un silo</b>	<b>166</b>
Cristian Mankoc, Angel Garcimartín, Iker Zuriguel, Luis A. Pugnaloni y Diego Maza	
<b>117. Compactación de un medio granular vibrado verticalmente</b>	<b>167</b>
Iván Sánchez, Iker Zuriguel, Diego Maza, Paula Gago y Luis Pugnaloni	
<b>IV Índice de Autores .....</b>	<b>169</b>
<b>V Asistentes al Congreso .....</b>	<b>175</b>

Parte I

# Conferencias invitadas



## Gases granulares: de dónde venimos y a dónde parece que debemos ir

J. Javier Brey

*Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de Sevilla, Apartado de Correos 1065, 41080 Sevilla, Spain*

Los medios granulares son sistemas constituidos por partículas de tamaño macroscópico que interactúan entre sí de forma inelástica, es decir sin que se conserve la energía mecánica. Son innumerables los sistemas de este tipo que existen en la naturaleza, desde la escala planetaria hasta los constituidos por pequeños granos de arena. Además, gran parte de los procesos industriales involucran la manipulación y transporte de sistemas constituidos por granos, siendo determinantes ambos para el rendimiento y eficacia del proceso. Por estas razones, el estudio de estos sistemas ha atraído la atención de los investigadores orientados hacia las aplicaciones prácticas de los materiales. Por otro lado, la comunidad científica interesada en los aspectos más básicos o fundamentales de la ciencia, ignoraba estos sistemas, pensando que eran simplemente sistemas "sucios", en el sentido que su descripción sólo requería añadir correcciones cuantitativas a la idealidad con que trabaja la ciencia básica. Ni se necesitaban nuevas ideas o paradigmas, ni su estudio podría reportar nada nuevo en relación con la estructura conceptual de la ciencia, y en particular de la física.

Sin embargo, las investigaciones realizadas en los últimos doce años han puesto de manifiesto que las creencias anteriores eran completamente erróneas. Los medios granulares permiten investigar, de forma mucho más directa que los sistemas convencionales moleculares, muchos aspectos conceptuales de la física. En algunos casos, ello ha llevado a extender e incluso modificar algunos

conceptos y leyes básicas que se creían bien establecidos.

El comportamiento de los medios granulares depende de forma crítica de las condiciones en que se encuentren. En esta presentación, el interés se centrará en los llamados gases granulares, caracterizados porque en ellos el movimiento de los granos es una secuencia de colisiones entre las cuales los granos se mueven independientemente. En este régimen, el comportamiento de los granos recuerda al de las moléculas de un gas clásico molecular. No es pues sorprendente que las técnicas utilizadas para estudiar los gases y líquidos normales se estén tratando de extender a los fluidos granulares. Ello incluye la mecánica de fluidos, la teoría cinética y la mecánica estadística. Esta extensión ha requerido una revisión profunda de muchos conceptos, algunos muy básicos, su ampliación y la búsqueda de nuevas leyes más generales que las existentes.

En esta presentación se describirán algunos resultados relevantes recientes de las investigaciones con gases granulares, como por ejemplo la extensión de la ley de Fourier del calor o los que afectan al concepto de temperatura en sistemas fuera del equilibrio. También se prestará atención a la espectacularidad y sencillez de muchos experimentos con sistemas constituidos por granos. Finalmente, se dará una visión subjetiva de algunos problemas fundamentales que existen y de los temas de investigación que en este campo es probable que se aborden en un futuro próximo.

## Coarsening

Leticia F. Cugliandolo

*Prof. Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, France*

When a macroscopic system is driven through a second-order phase transition (a quench) it undergoes an ordering process that is called domain growth or phase ordering. This phenomenon is possibly the simplest example of macroscopic aging dynamics with many similarities and some differences with that is observed in more complex glassy systems in which the mechanism underlying the relaxation is not known.

In this talk I shall review the physics of phase ordering and I shall summarize some recent developments in the study of coarsening phenomena at a mesoscopic scale. In particular I shall present an analytic derivation of the number density of domain areas in two-dimensional clean and dirty ferromagnetic systems. The implications of these results to the physics of glasses will then be briefly discussed.



## Two applications of mutual information in molecular biology

P. Grassberger\*

*NIC, Forschungszentrum Juelich, Juelich, D-52425 Germany*

Mutual information (MI) is a universal measure for dependency between two or more objects. It can be defined in a probabilistic (Shannon) or in an algorithmic (Kolmogorov-Chaitin) framework. In either case it can be used to define distances between objects. A major problem in applying MI is the difficulty of estimating it for given observational data. The two applications I will discuss are: (a) Using algorithmic MI to estimate similarities between DNA sequences, e.g. for constructing phylogenetic trees. A standard way to estimate MI in this case is by concatenation and compression. I will

show that very similar numerical results are obtained from alignments, which sheds interesting new lights both on state-of-the art DNA compression algorithms and on sequence alignment; and (b) Using Shannon MI for inferring regulatory networks from gene expression data. In both applications, it is crucial to go beyond pairwise MI and to use also either three-way MI or conditional MI.

---

\* pgrassbe@ucalgary.ca

## Dynamic instabilities and morphology in biological membranes

F. Campelo and A. Hernández-Machado\*

*Departament d' Estructura i Constituents de la Matèria, Facultat de Física, Universitat de Barcelona, E-08028 Barcelona*

Biological membranes have been of wide interest to biologists, chemists and physicists for many years<sup>1</sup>. They are the frontier which defines the cell and most of their internal organelles and they act as a boundary between internal cellular organization and its surrounding medium. Shapes in cells seem to be determined by relatively simple physical laws and to be the response to an optimal design for precise functionalities. The dynamic evolution of shape membranes could give rise to processes like intracellular transport or cellular division. Deformation of the Golgy apparatus<sup>2</sup> or the endoplasmatic reticulum<sup>3</sup>, leads to budding of transport vesicles which may eventually undergo fission by the action of membrane proteins. Membrane proteins could also produce constriction<sup>4</sup> and pinching giving rise to cellular division. In this presentation we will discuss recent results obtained from a curvature-driven phase-field model that explain morphological dynamic instabilities like pearling<sup>5</sup>, budding and tubulation<sup>6</sup> first described experimentally in

References 7 and 8 .

---

\* a.hernandezmachado@gmail.com

<sup>1</sup> M. Edidin, *Nature Rev. Mol. Cell Biol.* **4**, 414 (2003).

<sup>2</sup> R. Weigert *et al.*, *Nature* **402**, 429 (1999).

<sup>3</sup> G. Voeltz, W. Prinz, Y. Shibata, J. Rist, and T. Rapoport, *Cell* **124**, 573 (2006).

<sup>4</sup> M. Osawa, D. E. Anderson, and H. P. Erickson, *Science* **320**, 792 (2008).

<sup>5</sup> F. Campelo and A. Hernandez-Machado, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 088101 (2007).

<sup>6</sup> F. Campelo and A. Hernandez-Machado, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 158103 (2008).

<sup>7</sup> I. Tsafrir, D. Sagi, T. Arzi, M. A. Guedeau-Boudeville, V. Frette, D. Kandel, and J. Stavans, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1138 (2001).

<sup>8</sup> I. Tsafrir, Y. Caspy, M. A. Guedeau-Boudeville, M. A. Arzi, and J. Stavans, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1138 (2001).

## Charge reversal in model colloids: Experiments, theory, and simulations

M. Quesada-Pérez<sup>†</sup>, A. Martín-Molina<sup>‡</sup>, and R. Hidalgo-Álvarez<sup>‡\*</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Física, Universidad de Jaén, Escuela Politécnica Superior de Linares, 23700 Linares, Jaén*

<sup>‡</sup> *Grupo de Física de Fluidos y Biocoloides, Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada*

Recent studies have revealed the huge interest of the charge reversal in systems such as solid particles, DNA molecules, charged membranes, etc. in the presence of electrolyte<sup>1-4</sup>. Microelectrophoresis measurements show the effective charge of colloidal particles can be inverted when multivalent counterions are used<sup>5</sup>. Some researchers suggest this fact could be due to the size of counterions as well as electrostatic correlations between them<sup>2-4</sup>. These effects become more important for large ions and highly charged surfaces<sup>6</sup>.

Here, this phenomenon is discussed for the case of polystyrene microspheres with different surface charge densities and ionic functionality when several electrolytes are used. Up to now a considerable theoretical effort has been devoted to this topic. Nevertheless there exists a lack of experimental work, particularly at high salt concentrations. We intend to address this matter by carrying out microelectrophoretic mobility measurements of model colloids for high ionic strengths using symmetric and asymmetric electrolytes. These experimental results allow us to test some theoretical models (Integral Equation Theory).

Since the eighties, computer simulation has been a powerful tool to test the validity of the integral equation formalism (as well as the classical PB approach)<sup>7</sup>. Initially, the cases of monovalent and divalent ions were tested thoroughly by Monte Carlo (MC) simulations.

The main goal of this work is to investigate (through computer simulation) the validity of the integral equation formalism for EDL with different ions using more realistic hydrated ion diameters instead of those studied mostly (0.4-0.425 nm) and to compare with experimental microelectrophoretic mobility data.

In short, this work is a critical survey on the relevance of ionic correlations in model colloidal systems (focused mainly on solutions with multivalent counterions) using simultaneously different theoretical approaches in combination with experimental results and simulations.

---

\* rhidalgo@ugr.es

<sup>1</sup> W. M. Gelbart, R. F. Bruinsma, P. A. Pincus, and V. A. Parsegian, *Physics Today* **53**, 38 (2000).

<sup>2</sup> P. Attard, *Adv. Chem. Phys.* **92**, 1 (1996).

<sup>3</sup> Y. Levin, *Rep. Prog. Phys.* **65**, 1577 (2002).

<sup>4</sup> A. Y. Grosberg, T. T. Nguyen, and B. I. Shklovskii, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 329 (2002).

<sup>5</sup> R. H. Ottewill and J. N. Shaw, *J. Colloid Interf. Sci.* **26**, 110 (1968).

<sup>6</sup> A. Martín-Molina, M. Quesada-Pérez, F. Galisteo-González, and R. Hidalgo-Álvarez, *J. Chem. Phys.* **118**, 4183 (2003).

<sup>7</sup> G. M. Torrie and J. P. Valleau, *J. Phys. Chem.* **86**, 3251 (1982).

## In search of the elusive biaxial nematic phase: Mixtures of rod and disc-like particles

A. Cuetos<sup>†</sup>, A. Galindo<sup>‡</sup>, and G. Jackson<sup>‡\*</sup>

<sup>†</sup> *Complex Fluid Physics Group, Departamento de Física Aplicada, Universidad de Almería, 04120 Almería, Spain*

<sup>‡</sup> *Department of Chemical Engineering, Imperial College London, London SW7 2AZ, UK*

A biaxial nematic ( $N_b$ ) phase is characterised by orientational correlations in one of the two perpendicular directions to the main director<sup>1</sup>. The possible existence of such a phase was suggested in 1970 by Freiser<sup>2</sup>, and other theoretical studies confirmed this proposition only a few years later<sup>3,4</sup>. Since then, it has been the subject of much experimental<sup>1,5</sup>, computational<sup>6–9</sup> and theoretical work<sup>10–12</sup>. Biaxial materials would offer significant advantages over conventional nematic liquid crystals in display applications by leading to improved response times and to better viewing characteristics. Experimental reports of nematic biaxial phases of lyotropic and polymeric liquid crystals were made some time ago<sup>13,14</sup>, but it was not until 2004 that three teams independently claimed to provide the first unambiguous evidence of the existence of this phase in thermotropic biaxial mesogens<sup>15–18</sup>.

Mixtures of uniaxial particles with a specifically selected geometry, such as rod- and disc-like molecules, could also be expected to yield stable  $N_b$  phases. This avenue has been explored in some detail using theory and computer simulation<sup>10,11,19,20,12</sup>, but leads one to the conclusion that, at least in the case of mixtures of hard particles, the  $N_b$  phase is thermodynamically unstable with respect to demixing into two uniaxial phases, one rich in rods, and the other rich in discs. It has been pointed out that with an appropriate attractive unlike interaction, a homogeneous biaxial nematic phase could be stabilized<sup>21–23</sup>. Experimental work on mixtures of rod and disc-like molecules has tended to confirm the view that such a system would favour phase separation<sup>1</sup>, until the recent studies of Apreutesei and Mehl<sup>24</sup> who were able to stabilise a homogenous phase of amphiphilic rod-disc dimeric molecules in mixtures with the rod or disc monomers; their system exhibits a homogeneous nematic phase, but unfortunately no biaxial nematic order. This nevertheless points to the strong possibility of stabilising a biaxial nematic phase through mixing. A biaxial smectic A ( $SmA_b$ ) (the so-called McMillan phase predicted by de Gennes in the 1970s) has now been observed in mixtures of rod- and plate-like molecules with strong face-to-face attractive interactions<sup>25</sup>.

In this lecture we present the first examples of thermotropic biaxial mesophases stabilised in model mixtures of attractive uniaxial molecules<sup>26</sup>. Nematic and smectic (McMillan) biaxial phases are identified. Monte Carlo molecular simulations are undertaken to study a model mixture of rod- and disc-like molecules interacting through two simple intermolecular potential models: one incorporating spherically symmetric (isotropic) attractive interactions; another with anisotropic attractive interactions. The models proposed exhibit nematic and smec-

tic biaxial phases; this supports the recent experimental findings.

---

\* g.jackson@imperial.ac.uk

<sup>1</sup> D. W. Bruce, *Chem. Rec.* **4**, 10 (2003).

<sup>2</sup> M. J. Freiser, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 1041 (1970).

<sup>3</sup> R. Alben, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 778 (1973).

<sup>4</sup> J. P. Straley, *Phys. Rev. A* **10**, 1881 (1974).

<sup>5</sup> T. J. Dingemans, L. A. Madsen, N. A. Zafiroopoulos, W. Lin, and E. T. Samulski, *Phil. Trans. R. Soc. A* **364**, 2681 (2006).

<sup>6</sup> D. J. Cleaver, C. M. Care, M. P. Allen, and M. P. Neal, *Phys. Rev. E* **54**, 559 (1996).

<sup>7</sup> M. P. Allen, *Liq. Cryst.* **8**, 499 (1990).

<sup>8</sup> C. Zannoni, *J. Mater. Chem.* **11**, 2637 (2001).

<sup>9</sup> J. Peláez and M. R. Wilson, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 267801 (2006).

<sup>10</sup> A. Stroobants and H. N. W. Lekkerkerker, *J. Phys. Chem.* **88**, 3669 (1984).

<sup>11</sup> H. H. Wensink, G. J. Vroege, and H. N. W. Lekkerkerker, *Phys. Rev. E* **66**, 041704 (2002).

<sup>12</sup> S. Varga, A. Galindo, and G. Jackson, *Mol. Phys.* **101**, 817 (2003).

<sup>13</sup> L. J. Yu and A. Saupe, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1041 (1980).

<sup>14</sup> H. F. Leube and H. Finkelmann, *Macro. Chem. Phys.* **192**, 1317 (1991).

<sup>15</sup> L. A. Madsen, T. J. Dingemans, M. Nakata, and E. T. Samulski, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 145505 (2004).

<sup>16</sup> B. R. Acharya, A. Primak, and S. Kumar, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 145506 (2004).

<sup>17</sup> K. Merkel, A. Kocot, J. K. Vij, R. Korlacki, G. H. Mehl, and T. Meyer, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 237801 (2004).

<sup>18</sup> J. L. Figueirinhas, C. Cruz, D. Filip, G. Feio, A. C. Rebeiro, T. Meyer, and G. H. Mehl, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 107802 (2005).

<sup>19</sup> A. Galindo, G. Jackson, and D. J. Photinos, *Chem. Phys. Lett.* **325**, 631 (2000).

<sup>20</sup> A. Galindo, A. J. Haslam, S. Varga, G. Jackson, A. G. Vanakaras, D. J. Photinos, and D. A. Dunmur, *J. Chem. Phys.* **119**, 5216 (2003).

<sup>21</sup> S. R. Sharma, P. Palffy-Muhoray, B. Bergersen, and D. A. Dunmur, *Phys. Rev. A* **32**, 3752 (1985).

<sup>22</sup> A. G. Vanakaras, S. C. McGrother, G. Jackson, and D. J. Photinos, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **323**, 199 (1998).

<sup>23</sup> A. G. Vanakaras, A. F. Terzis, and D. J. Photinos, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **362**, 67 (2001).

<sup>24</sup> D. Apreutesei and G. H. Mehl, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **449**, 107 (2006).

<sup>25</sup> T. Hegmann, J. Kain, S. Diele, G. Pelzl, and C. Tschierske, *Angew. Chem. Int. Ed.* **40**, 887 (2001).

<sup>26</sup> A. Cuetos, A. Galindo, and G. Jackson, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 237802 (2008).

## Irreversibilidad y producción de entropía

J. M. R. Parrondo\*

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

La irreversibilidad o "flecha del tiempo" en un proceso puede cuantificarse gracias a un concepto de la teoría de la información: la distancia de Kullbak-Leibler o entropía relativa entre dos distribuciones de probabilidad. Esta distancia mide la dificultad para distinguir una distribución de otra. Aplicada a los estados estadísticos de un sistema en un instante dado de un proceso y en el mismo instante en la inversión temporal de dicho proceso, la entropía relativa cuantifica cuán distinta es una dirección temporal de su contraria. Recientemente hemos demos-

trado que esta medida de la flecha del tiempo es igual a la producción de entropía a lo largo del proceso original. Se trata por tanto de una relación cuantitativa entre irreversibilidad y producción de entropía, que puede además aplicarse para calcular o estimar esta última. En la charla presentaremos este resultado con cierto detalle y algunas de sus aplicaciones.

---

\* parrondo@fis.ucm.es

## Molecular folding investigated by mechanically unzipping single DNA molecules

F. Ritort\*

*Small Biosystems Lab, Departament de Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de Barcelona, Diagonal 647, 08028 Barcelona, Spain*

Recent developments in micro and nano technologies allow for the controlled manipulation of individual molecules by exerting and detecting forces in the piconewton range<sup>1</sup>. The possibility to detect such tiny forces together with the ability of measuring extensions with nanometer resolution allows scientists to monitor molecular reactions in real time (such as molecular folding) and characterize thermodynamics and kinetics of individual molecules (e.g. nucleic acids and proteins) with unprecedented accuracy within tenths of a kcal/mol.

In this talk I will present experimental results carried out in our lab<sup>2</sup> on single molecule manipulation of nucleic acids using optical tweezers aiming to explore complex molecular free energy landscapes<sup>3,4</sup> and nonequilibrium behavior in small systems<sup>5,6</sup>. For this we have designed DNA hairpins of specific sequences with complex free energy landscapes to investigate the thermodynamics and kinetics of folding<sup>7</sup>.

ve high signal-to-noise ratios in the measurements we have synthesized novel constructs with short handles (29 base pairs). We have investigated the kinetics of misfolding in hopping and pulling experiments for two hairpin sequences (Fig. 2): One sequence (HB) contains a bulge and forms a longer extension misfolded structure. The other sequence (M2) contains a palindromic segment that allows for the formation of two non-native hairpins that are separated by a linker. For the latter the stretched and the native or misfolded conformations are separated by respective molecular intermediates. We have measured the rates between all conformations, the pathway rates and the probability to form a misfolded structure in pulling experiments. We have also investigated how force-jump protocols markedly reduce the probability of misfolding, thereby suggesting possible mechanisms used by RNA chaperones to optimize RNA folding.

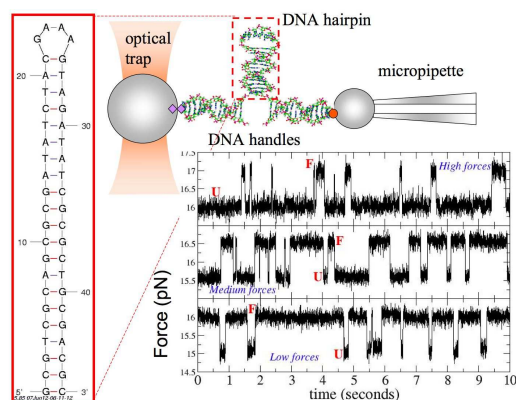


Figura 1. Experimental setup, DNA sequence of a two-state hopper and force traces at high, medium and low forces (passive mode).

Short DNA hairpins often show force-induced folding/unfolding cooperative behavior (Fig. 1). Under the action of a pulling force the hairpin unfolds reaching a stretched conformation. Force folding/unfolding kinetics can be investigated carrying out hopping experiments where either the trap is kept at a constant position (passive mode) or the force is kept constant to a preset value (constant force mode). In this talk I will address the folding/unfolding kinetics of DNA sequences that show misfolding (i.e. they can reach a higher free energy non-native folded conformation). We have designed DNA sequences of a few tens of base pairs that show at least two different folding pathways. In order to achieve

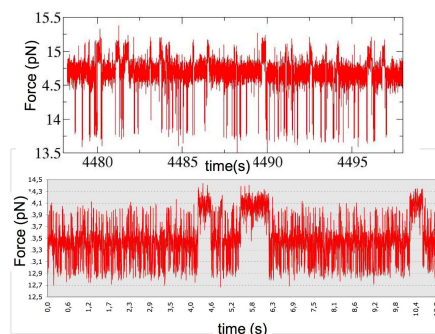


Figura 2. Hopping traces (passive mode) for two DNA sequences (HB, upper panel and M2, lower panel) that form misfolded structures. Note the different (more than two) force levels in the traces indicating the presence of several states.

\* fritort@gmail.com

<sup>1</sup> F. Ritort, *J. Phys.:* Condens. Mat. **18**, R531 (2006).

<sup>2</sup> <http://www.ffn.ub.es/ritort>.

<sup>3</sup> M. T. Woodside, P. C. Anthony, W. M. Behnke-Parks, K. Larizadeh, D. Herschlag, and S. M. Block, *Science* **314**, 1001 (2006).

<sup>4</sup> A. Mossa, M. Manosas, N. Forns, J. M. Hugué, and F. Ritort, *J. Stat. Mech.* P02060 (2009).

<sup>5</sup> C. Bustamante, J. Liphardt, and F. Ritort, *Phys. Today* **58**, 43 (2005).

<sup>6</sup> F. Ritort, *Adv. Chem. Phys.* **137**, 31 (2008).

<sup>7</sup> N. Forns, K. Hayashi, M. Manosas, J. M. Hugué, and F. Ritort, in preparation.

## DNA looping: From loop formation to loop selection

M. Rubí\*

*Departament de Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de Barcelona, 08028 Barcelona*

The formation of DNA loops by the binding of proteins at distal DNA sites plays a fundamental role in many cellular processes such as transcription, recombination and replication. In gene regulation, proteins bound far away from the genes they regulate can be brought to the initiation of transcription region by looping the intervening DNA. The knowledge of the free energy cost of this process is important because it determines how easily DNA can loop and therefore the extent to which distal sites

can affect each other. We show how to calculate this quantity from a mesoscopic thermodynamics theory. The interactions between the chain and the proteins makes it possible the formation of different loops which may compete. We analyze the loop selection mechanism and its implications in genetic transcription.

---

\* mrubi@ub.edu

## Networks in soft matter and beyond

M. M. Telo da Gama<sup>†‡</sup>, P. I. C. Teixeira<sup>†§</sup>, and J. M. Tavares<sup>†§</sup>

<sup>†</sup>*Centro de Física Teórica e Computacional, Avenida Professor Gama Pinto 2, P-1649-003 Lisbon, Portugal*

<sup>‡</sup>*Departamento de Física, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, P-1749-016 Lisbon, Portugal*

<sup>§</sup>*Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro 1, P-1950-062 Lisbon, Portugal*

We have investigated the influence of directional or bonding interactions on the structure and phase diagram of complex fluids. Using a generalisation of the theory of associating fluids we have studied the interplay between the equilibrium self-assembly process, driven by the bonding interactions, and thermodynamic phase transitions.

We investigated the isotropic-nematic transition, driven by the anisotropic shape of the equilibrium clusters. For a model consisting of particles with two bonding sites the specific heat is shown to exhibit pronounced structure at the onset of self-assembly as well as at the nematic-isotropic transition<sup>1</sup>. The transition is claimed to be in the percolation universality class.

We have also investigated the liquid-vapour condensation driven by anisotropic site-site interactions, for a model consisting of particles with three bonding sites, two of type A and one of type B. In systems where unlike sites do not interact, the critical point exists all the way to  $\epsilon_{BB}/\epsilon_{AA} = 0$ . By contrast, when  $\epsilon_{BB} = 0$ , there is no critical point below a certain finite value of  $\epsilon_{AB}/\epsilon_{AA}$ . These somewhat surprising results are rationalised in terms of the different network structures of the two systems: two long *AA* chains are linked by one *BB* bond (X-junction) in the former case, and by one *AB* bond (Y-junction) in the latter. The vapour-liquid transition may be then

viewed as the condensation of these junctions, and we found that X-junctions condense for any attractive  $\epsilon_{BB}$  (i.e., for any fraction of *BB* bonds), whereas condensation of the Y-junctions requires that  $\epsilon_{AB}$  be above a finite threshold (i.e., there must be a finite fraction of *AB* bonds)<sup>2</sup>. In addition, criticality in the limit of vanishing *AA* interactions may be realised through two different types of condensation: of dimer clusters and of hyperbranched polymers. In the limit of dimers ( $\epsilon_{BB} \gg \epsilon_{AB}$  and  $\epsilon_{BB} \gg \epsilon_{AA}$ ) condensation occurs for finite values of the *AA* attraction. Likewise, in the limit of hyperbranched polymers ( $\epsilon_{BB} = 0$  and  $\epsilon_{AB} \gg \epsilon_{AA}$ ) the critical density and temperature vanish as  $\epsilon_{AA}$  vanishes<sup>3</sup>.

Finally, we calculate the percolation threshold and the emergence of the critical condensation and percolation transitions, from the ideal limits of linear chains, hyperbranched polymers and dimers.

---

<sup>1</sup> J. M. Tavares, B. Holder, and M. M. Telo da Gama, *Phys. Rev. E*, **79** 021505 (2009).

<sup>2</sup> J. M. Tavares, P. I. C. Teixeira, and M. M. Telo da Gama, *Mol. Phys.* **107**, 453 (2009).

<sup>3</sup> J. M. Tavares, P. I. C. Teixeira, and M. M. Telo da Gama, *Phys. Rev. E*, accepted for publication (2009).



Parte II  
**Orales**



## Difusión anómala versus random walks correlacionados. Aplicaciones en nanopartículas

Daniel Campos\*

Grupo de Física Estadística, Universidad Autónoma de Barcelona, 08193 Bellaterra

Recientemente el comportamiento dinámico de nanopartículas autopropulsadas ha sido objeto de numerosos trabajos, dado el interés intrínseco de estas partículas como posibles motores moleculares, como portadoras de otras partículas, etc. Muchos de estos trabajos se han centrado en nanopartículas con geometrías aproximadamente cilíndricas. Éstas se mueven de forma autopropulsada a lo largo de su eje longitudinal gracias a un gradiente químico generado entre sus extremos. Asimismo, las partículas experimentan también un comportamiento difusivo debido a las fluctuaciones e interacciones con el medio que las rodea.

Diferentes trabajos experimentales<sup>1</sup> han hallado que del análisis de la dinámica general de estas partículas resulta un comportamiento aparentemente superdifusivo, caracterizado por una ley de escala para el desplazamiento cuadrático medio  $\langle x^2 \rangle \sim t^\alpha$ , con  $\alpha > 1$ . Los modelos analíticos propuestos para explicar este fenómeno, sin embargo, sugieren que esta ley de escala corresponde en realidad a un régimen transitorio debido a correlaciones en el patrón de movimiento de las partículas<sup>2,3</sup>. Estas correlaciones son consecuencia de la combinación de los mecanismos de autopropulsión y difusivos, junto con las fluctuaciones en la orientación angular de la partícula. Por lo tanto, no puede hablarse propiamente de superdifusión en estos sistemas. De esta manera, se ha reactivado el debate sobre cómo distinguir un comportamiento auténticamente superdifusivo (o anómalo, en general) de un movimiento correlacionado, un problema que también aparece en otros campos como en el movimiento de bacterias o en la dispersión de especies biológicas<sup>4</sup>.

En esta exposición pretendo, en primer lugar, repasar brevemente los últimos modelos teóricos propuestos para explicar a nivel estadístico el movimiento de nanopartículas autopropulsadas. En estos modelos se observa (ver Figura) que existen regiones de tiempos donde el comportamiento esperado es difusivo ( $t > t_2$ ) y otras donde es balístico ( $t < t_1$ ). Para valores de los parámetros tales que las escalas de tiempo  $t_1$  y  $t_2$  sean muy diferentes, con frecuencia existirá una fase de transición  $t_1 < t < t_2$  donde la curva de  $\langle x^2 \rangle$  en función del tiempo se asemeja mucho a una ley de potencias con un

exponente entre 1 y 2. Si la ventana de tiempos experimentales cae dentro de esta fase transitoria, esto puede conducir a la interpretación errónea de que el comportamiento es superdifusivo.

Finalmente, discutiré cómo se pueden plantear algunos posibles criterios formales que permitan distinguir, a partir de una serie de datos experimentales, un comportamiento propiamente superdifusivo de un random walk correlacionado. Estos criterios se basan en el estudio de las correlaciones temporales de la velocidad o la distribución de las partículas en el espacio.

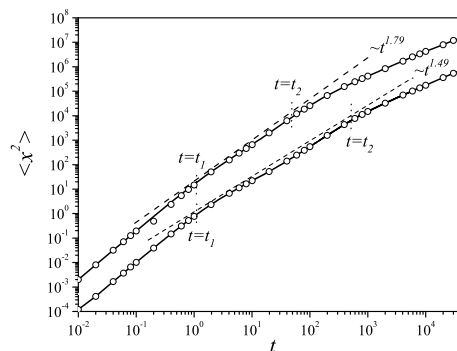


Figura 1. Desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo predicho por los modelos para el movimiento de nanopartículas autopropulsadas.

\* daniel.campos@uab.es

<sup>1</sup> P. Dhar, Th. M. Fischer, Y. Wang, T. E. Mallouk, W. F. Paxton y A. Sen, *Nano Lett.* **6**, 66 (2006).

<sup>2</sup> F. Peruani y L. G. Morelli, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 010602 (2007).

<sup>3</sup> D. Campos y V. Méndez, *J. Chem. Phys.* **130**, 134711 (2009).

<sup>4</sup> G. M. Viswanathan, E. P. Raposo, F. Bartumeus, J. Catalan y M. G. E. da Luz, *Phys. Rev. E* **72**, 011111 (2005).

## Modelo dinámico de vértices para la formación de fronteras en el disco imaginal del ala de la *D. Melanogaster*

O. Canela-Xandri\*, J. Buceta, F. Sagués y J. Casademunt  
*CoSMo Lab, Parc Científic de Barcelona, 08028 Barcelona*

La regulación genética genera patrones de expresión. Mediante ellos, las células de un organismo en desarrollo reciben información posicional. Ésta, a su vez, es utilizada para la formación de nuevos patrones, diferenciación de distintos tejidos o regulación de la proliferación celular. Uno de los patrones más sencillos en los que se puede pensar es la formación de fronteras<sup>1</sup> donde un grupo especializado de células genera una barrera que separa dos poblaciones celulares o compartimentos. Esta frontera juega distintos roles como, por ejemplo, evitar que se mezclen células de distintos compartimentos.

Dentro de este contexto, este trabajo se centra en el disco imaginal del ala de la mosca *D. Melanogaster*, formado por una monocapa de células epiteliales, en la cual se genera una frontera que separará las células de la parte dorsal y ventral del ala<sup>2</sup>. Para simular el disco hemos usado un modelo dinámico de vértices donde la monocapa es descrita como una red de polígonos en dos dimensiones (Fig. 1) en la que cada polígono representa una célula. La dinámica de la red viene determinada por el movimiento de sus vértices, cada uno de los cuales tiene asociado un potencial. Este potencial depende de términos elásticos, de la afinidad entre células vecinas (tensión superficial) y de la contractilidad de la membrana celular. A su vez, cada célula puede crecer, dividirse o morir generando cambios topológicos en la red. El modelo nos servirá para analizar los requisitos, en términos de polaridad, velocidad de crecimiento y afinidad entre células, necesarios para el desarrollo de una frontera estable tal

y como se observa en los experimentos.

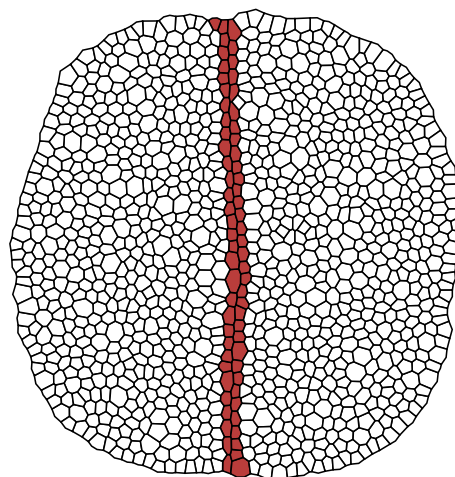


Figura 1. Red de polígonos usada para simular el disco imaginal. Cada polígono representa una célula. Las células que forman parte de la frontera se indican con distinto color.

\* ocanela@pcb.ub.es

<sup>1</sup> J.-P. Vincent, *Int. J. Dev. Biol.* **42**, 311 (1998).

<sup>2</sup> O. Canela-Xandri, F. Sagués, R. Reigada y J. Buceta, *Biophys. J.* **95**, 5111 (2008).

## Cuasiecosistemas y la catástrofe de extinción

José A. Capitán<sup>†\*</sup>, José A. Cuesta<sup>†</sup> y Jordi Bascompte<sup>‡</sup>

<sup>†</sup> *GISC y Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid, Avda. de la Universidad 30, 28911 Leganés, Madrid*

<sup>‡</sup> *Estación Biológica de Doñana, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Pabellón del Perú, Avenida María Luisa s/n, 41013 Sevilla*

Los “assembly models”<sup>1</sup> han sido ampliamente utilizados al estudiar la formación de redes ecológicas mediante la invasión sucesiva de especies que pueden adaptarse, extinguirse o provocar a su vez extinciones de algunas de las especies presentes. En un trabajo previo<sup>2</sup>, presentamos un “assembly model” basado en un modelo sencillo de ecosistema que, invadido sucesivamente por especies a un ritmo dado por una tasa de invasión  $\xi$ , nos permite determinar cuál es el ecosistema final que se alcanza tras cada invasión, y además permite caracterizar todos los ecosistemas posibles que se pueden alcanzar mediante invasiones y que satisfacen una condición de viabilidad. Los resultados de este trabajo indican que los ecosistemas evolucionan, mediante invasiones, hacia una única estructura de comunidad o hacia un conjunto cerrado de ellas, y una vez que se llega a este conjunto el ecosistema no vuelve a salir de él. Sucesivas invasiones producen transformaciones de la comunidad en otras de ese conjunto cerrado, de modo que todas ellas se visitan “infinitas” veces, en general con distinta frecuencia. Sin embargo, entendido como estructura estable, el ecosistema permanece, fluctuando entre las diferentes comunidades que integran el conjunto cerrado. A eso es a lo que denominaremos *cuasiecosistema*, por analogía con la teoría de cuasiespecies<sup>3</sup>, en las que no una, sino un conjunto de secuencias genéticas (asociadas normalmente a virus), relacionadas entre sí por un cierto número de mutaciones, sobrevive y se perpetúa como un todo global, dando significado al concepto de especie. Continuando con la analogía con las cuasiespecies, observamos que estas últimas presentan la denominada *catástrofe de error*.

Para buscar el análogo de esa transición hemos introducido en el modelo una tasa de extinción espontánea  $\eta$  de las especies de un ecosistema, que mide la probabilidad por unidad de tiempo de que una especie sufra algún contratiempo (epidemia, caza intensiva, destrucción de su hábitat, etc.) que la lleve a la extinción. Ahora, para cualquier valor de  $\eta > 0$ , por pequeño que sea, hay una probabilidad no nula de que el ecosistema entero desaparezca. Entonces, cualquier estado del ecosistema, incluido el “ecosistema vacío”, se visitará con probabilidad no nula. Hemos estudiado la dependencia de  $P_{\text{rec}}$ , la probabilidad de que el ecosistema se encuentre en el conjunto que era estable cuando  $\eta = 0$ , en función del cociente  $\eta/\xi$ . También hemos obtenido  $P_\phi$ , la probabilidad de encontrar al ecosistema en el estado vacío (esto es, extinto). Vemos (Fig. 1a) que  $P_{\text{rec}}$  muestra el aspecto de una transición de fase en un valor  $\eta/\xi < 1$  al mismo tiempo que, a partir de ese valor,  $P_\phi$  aumenta de forma abrupta. Denominaremos a este fenómeno *catástrofe de extinción*, de nuevo por analogía con las cuasiespecies.

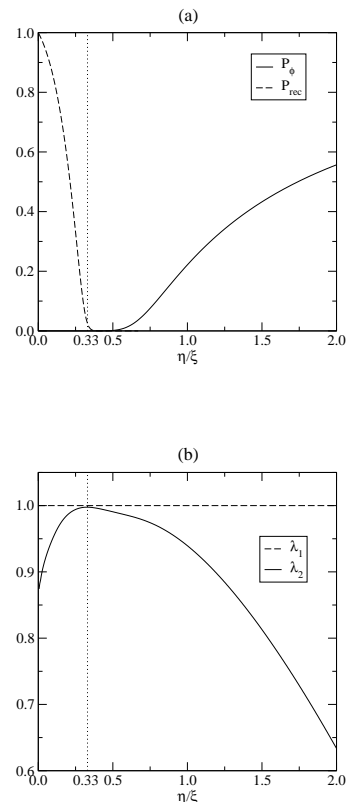


Figura 1. (a)  $P_{\text{rec}}$  y  $P_\phi$  en función de  $\eta/\xi$ , en total hay 3979 ecosistemas accesibles. (b) Segundo autovalor de la matriz asociada al proceso.

Estrictamente, el fenómeno no puede ser una transición porque el número de ecosistemas accesibles es finito. Sin embargo, el comportamiento del segundo autovalor de la matriz estocástica asociada al proceso nos indica que estamos observando la “traza” de una transición en tamaño finito (Fig. 1b). El acercamiento pronunciado al primer autovalor nos da una estimación del punto de transición, y además encontramos que este acercamiento es tanto mayor cuanto mayor es el número total de estados. Esta transición de fase quizá permitiría poner en un contexto nuevo y general los colapsos que se observan en las explotaciones pesqueras cuando aumenta la presión de pesca.

\* jcapitan@math.uc3m.es

<sup>1</sup> R. D. Morton y R. Law, *J. Theor. Biol.* **187**, 321-331 (1997).

<sup>2</sup> J. A. Capitán, J. A. Cuesta y J. Bascompte, *arXiv:0903.2691v1* (2009).

<sup>3</sup> M. Eigen, *Naturwissenschaften* **58**, 465 (1971).

## Force and morphological heterogeneities in rod packings

Raúl Cruz Hidalgo<sup>†\*</sup>, Iker Zuriguel<sup>‡</sup>, Diego Maza<sup>‡</sup>, and Ignacio Pagonabarraga<sup>§</sup>

<sup>†</sup> *AMADE, Departament de Física, Universitat de Girona*

<sup>‡</sup> *Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra*

<sup>§</sup> *Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona*

The experimental and theoretical results of the effect of particle aspect ratio on sedimenting packings of rods are presented. We systematically study how the packing properties of rods settling under gravity vary with their length. The orientation distribution of very elongated particles shows a maximum corresponding to the particles lying horizontally. As the aspect ratio decreases the preference for this orientation also decreases and for the limiting case of square particles, the most favorable configuration corresponds to the squares diagonal oriented parallel to gravity. Given the considerable effect that the aspect ratio has on the particle orientation, we also look into its impact on the structure formation within the packing. Since the deposits are highly compacted, we analyzed the distribution of clusters (or domains) of aligned particles. Hence, we examined the interrelation between the packing morphology and force transmission. For the limiting case of the squares, we observe that the distribution of cluster sizes follows a power law  $D(s) = s^{-\frac{3}{2}}$ . The normal force distribution for square particles shows the exponential decay characteristic of chain-like structures. Nevertheless, for elongated rods the force chains are distorted and the normal force distribution displays a Gaussian behavior. Tangential forces turn out to be almost an order of magnitude smaller than normal ones, and are distributed exponentially for all the aspect ratios analyzed. The abrupt decay of the tangential force, as particle aspect ratio is increased, indicates their lower relevance.

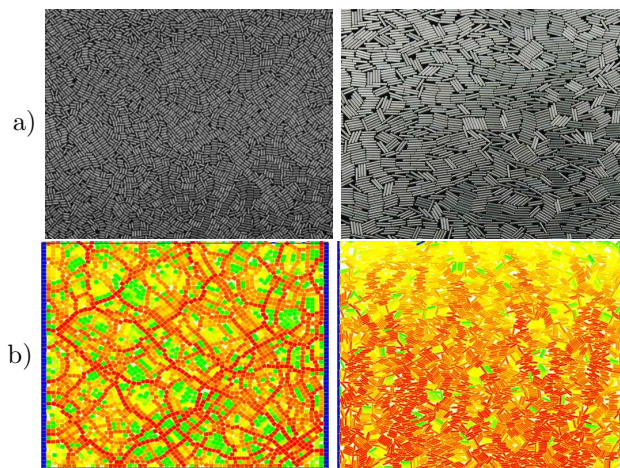


Figura 1. Packings of particles obtained for different aspect ratios,  $d$ . a) Pictures from the experiment for  $d = 2.4$  (left) and  $d = 5.4$  (right) and b) numerical graphs for squares  $d = 1$  (left) and  $d = 5.4$  (right). In b) the local mean value of the contact force  $\bar{F}_c^l$  is shown as a color map.

\* raul.cruz@udg.edu

<sup>1</sup> <http://fisica.unav.es/granular/default.html>

## Esferas duras bosónicas confinadas en sistemas cuasi monodimensionales

F. de Soto\* y M. C. Gordillo

Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Universidad Pablo de Olavide, 41013, Sevilla

El estudio de sistemas de bosones en geometrías de baja dimensionalidad ha recibido una gran atención en los últimos años debido, en gran medida, a resultados experimentales de confinamiento de  $^4\text{He}$  en zeolitas o nanotubos de carbono<sup>1</sup>. Los sistemas de baja dimensionalidad acentúan el papel de las fluctuaciones cuánticas, responsables de la aparición en este tipo de sistemas de una fenomenología radicalmente diferente de los sistemas tridimensionales.

El objetivo del presente trabajo es estudiar un sistema de esferas duras confinadas en una dimensión ( $x$ ) cuando en las otras dos direcciones hay un potencial armónico

$$V(x, y, z) = \alpha(y^2 + z^2). \quad (1)$$

Se considerarán los casos en que las esferas duras tienen un diámetro  $a$  y cuando se trata de funciones delta (puntuales).

Para ello se utilizará el método de *diffusion* Monte Carlo utilizando como función trial la función de onda exacta para dos esferas duras

$$\psi_T(x) = \sin\left(\frac{\pi(x-a)}{L-a}\right), \quad (2)$$

donde  $L$  es la longitud de la celda de simulación y una función trial externa gaussiana que es solución exacta del potencial armónico (1) para una partícula. Esta función de ondas representa una aproximación muy buena a la exacta en los límites  $n \rightarrow 0$  y  $\alpha \rightarrow \infty$ , lo que permite obtener muy buenos resultados numéricos (las barras de error en las figuras son inapreciables).

El límite  $\alpha \rightarrow \infty$  corresponde al caso puramente unidimensional, en el que la función de onda y energía se conocen analíticamente<sup>2</sup>. En unidades de  $\hbar^2/2m$ , la energía por partícula resulta

$$\frac{E_{1D}}{N} = \frac{\pi^2 n^2}{3(1-an)^2}, \quad (3)$$

donde  $n = N/L$  es la densidad de partículas. La utilización de un potencial armónico en la dirección normal permite pasar de forma continua del caso puramente unidimensional a un caso tridimensional, posibilitando por una parte evaluar el efecto de la baja dimensionalidad sobre el sistema y, por otra, una comparación con sistemas físicos como nanotubos de carbono.

La energía del sistema se representa en la Fig. 1. Se ha representado el exceso de energía respecto a la del potencial armónico en 2 dimensiones,  $E' = E - 2\sqrt{\alpha}$ . Puede apreciarse cómo la energía se aproxima al caso unidimensional al aumentar la constante del potencial.

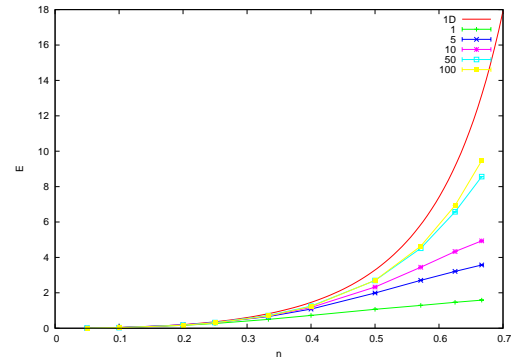


Figura 1. Energía por partícula frente a densidad  $n$ , para varios valores de  $\alpha$  (en la leyenda). Se ha sustraído la energía de una partícula en un potencial armónico.

A altas densidades, el sistema de esferas duras en una dimensión presenta un orden que se corresponde a una fase *cuasi-sólida*<sup>3</sup>. Cuando se reduce la constante del potencial (ver Fig. 2), este orden va desapareciendo, de forma que los picos que aparecen en la distribución radial en el eje,  $g(x)$ , se suavizan para tubos cuya anchura es comparable al diámetro de las esferas duras,  $\sqrt{\alpha}a \sim 1$ .

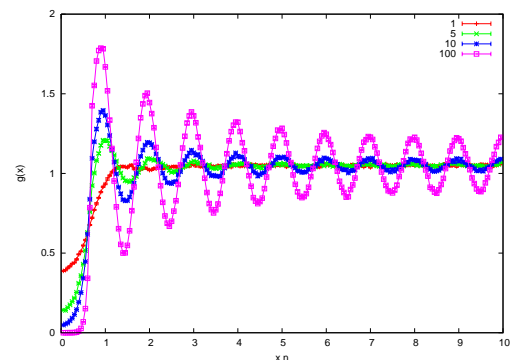


Figura 2. Función de distribución radial de dos partículas en la dirección del eje  $x$  para  $n = 0.5$  y diferentes valores de  $\alpha$  (en la leyenda).

\* fcsotbor@upo.es

<sup>1</sup> G. Stan *et al.*, *Low Temp. Phys.* **113**, 447 (1998).

<sup>2</sup> T. Nagamiya, *Proc. Phys. Math. Soc. Jpn.* **22**, 705 (1940);  
E. H. Lieb y W. Liniger, *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963).

<sup>3</sup> F. Mazzanti *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 020401 (2008).

## Clustering in interfacial colloids under capillary attraction. Cosmology in a Petri dish?

Álvaro Domínguez\*

*Física Teórica, Universidad de Sevilla, Apdo. 1065, E-41080 Sevilla*

Two-dimensional (2D) colloids form when colloidal ( $\sim$  micron-sized) particles are trapped at a fluid interface in an effectively irreversible manner. The particles will generically deform the interface (due to, e.g., buoyancy weight of the particles or electric stresses by charged or polarized particles) and this will create an effective interaction between the particles of capillary origin. On length scales below the capillary length ( $\approx 3\text{mm}$  for an air/water interface), the capillary attraction is formally analogous to 2D gravity and the capillary monopole (vertical force pulling on the particle) plays the role of the gravitational mass<sup>1</sup>. One can ask to what extent the evolution under capillary attraction resembles cosmological structure formation and whether it can be observed in experiments with micron-sized particles.

We present a mean-field formulation, appropriate for a gravity-like interaction, of the evolution of the particle density  $\varrho(\mathbf{r}, t)$  in the overdamped limit. A clustering instability is identified, much like in the cosmological scenario, such that a homogeneous particle distribution is unstable if its linear extension is larger than its characteristic **Jeans' length**  $L_J$ , which depends on the parameters of the system (density, temperature, surface tension, and capillary monopole). We discuss the spherically symmetric density profiles following from balancing the long-ranged capillary attraction with thermal diffusion and possible short-ranged, repulsive forces. These profiles are actually identical to the predictions of 2D cosmological models.

The equilibrium profiles are the final stage of the process of collapse of an initially homogeneous distribution. We study analytically the evolution of an spherical overdensity in the *cold-collapse approximation*. The most interesting result is the time of collapse of the spontaneous

density fluctuations of size  $L$  about a homogeneous background with average density  $\bar{\varrho}$ ,  $T_{\text{coll}} = \tau_J \ln(\bar{\varrho}L^2)$ , where  $\tau_J$  is the characteristic **Jeans' time**, which depends on  $\bar{\varrho}$ , the surface tension, and the capillary monopole, but not on  $L$ . Due to the weak logarithmic dependence on  $L$ , the spontaneous fluctuations of all sizes are predicted to collapse simultaneously—in the language of cosmology, the system evolves at the verge between the *bottom-up* scenario (structure forms at small scales first) and the *top-down* one (first structures arise at the larger scales). These predictions seem to be confirmed by preliminary numerical simulations.

Finally, we address the relevance for experiments. Both the Jeans' length and time depend sensitively on several parameters which can be easily controlled in experiments. When the capillary monopole of particles of radius  $R$  is due to buoyancy forces,  $L_J \sim R^{-2}$  and  $\tau_J \sim R^{-3}$ . Alternatively, the capillary monopole can be generated by an external electric field  $E$  which polarizes the particles, as demonstrated in recent experiments<sup>2</sup>, in which case  $L_J \sim E^{-4/3}$ ,  $\tau_J \sim R^{-1}E^{-4}$ . We discuss the possibility of realizing the scenario of gravitational-like clustering for colloidal particles in the range of parameters reachable in a laboratory and suggest that this capillary-driven instability could be relevant for certain recent observations of unexpected colloidal coagulation<sup>3</sup>.

---

\* dominguez@us.es

<sup>1</sup> A. Domínguez, M. Oettel, and S. Dietrich, J. Chem. Phys. **128**, 114904 (2008).

<sup>2</sup> N. Aubry, P. Singh, M. Janjua, and S. Nudurupati, Proc. Natl. Acad. Sci. **105**, 3711 (2008).

<sup>3</sup> S. Reynaert, P. Moldenaers, and J. Vermant, Langmuir **22**, 4936 (2006).



## Spiral and target patterns in bivalve nacre: layer growth of a biological liquid crystal

Julyan H. E. Cartwright<sup>†</sup>, Antonio G. Checa<sup>‡</sup>, Bruno Escribano<sup>†</sup>, and C. Ignacio Sainz-Díaz<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra CSIC-Universidad de Granada, 18071 Granada*

<sup>‡</sup>*Departamento de Estratigrafía y Paleontología, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada*

Nacre, or mother of pearl, is the iridescent material that forms an inner layer of the shells of numerous species of molluscs, as well as the pearls that many of those same species produce. Under the microscope one can see that the nacreous surfaces of bivalve molluscs are made up of a striking arrangement of spiral, target and labyrinthine patterns<sup>1</sup>. The structure of nacre is often likened to a brick wall, composed of bricks of aragonite tablets (approximately 95%) and mortar of organic so-called interlamellar membranes (polysaccharide and protein, ~5%), but it is a brick wall built in a peculiar fashion, as first the mortar is put in place, and then the bricks grow within it. From an examination of the extrapallial space of the bivalve mollusc, the narrow liquid-filled cavity between the soft tissues and the shell of the organism, it is seen that the first visible feature in nacre growth is the formation of a new interlamellar membrane in the fluid<sup>2</sup>. The core of these membranes is composed of rod-shaped crystallites of the polysaccharide chitin in its  $\beta$  polymorph. This must be secreted into the extrapallial liquid together with the mineral and protein components of nacre. Interlamellar membrane formation is then necessarily a process of self-assembly within the extrapallial fluid. A fresh layer of nacre is laid down every 1–24 hours, so the system does not have time to arrive at equilibrium, and the liquid-crystalline ordering of  $\beta$ -chitin is only partial. It comprises a lamellar structure, but within the layers there is disorder, with the crystallites forming a feltlike mesh, like a logjam on a lake.

Artificial liquid crystals are formed by altering a global variable (temperature, concentration, electric field, etc) that causes the whole of a domain to crystallize, forming many layers at once. Molluscs, on the other hand, perform liquid crystallization in quite a different manner: layer by layer. The narrowness of the molluscan extrapallial space implies that as chitin crystallites are secreted into the extrapallial fluid they can only self-assemble through their mutual interactions into one new liquid-crystal layer. This is concurrently transformed with the addition of proteins and aragonite into the solid biocomposite that is nacre. Here we concentrate on understanding the mode of liquid-crystal construction employed by the mollusc, in which it is built up layer by layer. This method is novel in terms of artificial liquid crystals, but is the manner in which solid crystals generally grow, and this connection allows us to comprehend the spiral and

target patterns on the surface of nacre.

We formulate a minimal model containing the fundamental physics of the liquid crystallization<sup>3</sup>. Growth proceeds by the incorporation of individual growth units, which are the chitin crystallites that compose the liquid crystal. As this is an essentially discrete process we employ a discrete coupled map lattice, or lattice Boltzmann model, with a square lattice of discrete space and time but continuous state variables. The surface is divided up into a randomized grid of cells, to avoid anisotropic growth. Each cell has a growth height, initially zero, updated at the end of each iteration of the growth. The surface is scanned on each iteration and in each cell there may occur either nucleation, growth, or neither, as a function of the relative height of the nearest neighbours. The neighbours to each cell are assigned by proximity, defining a circle around the cell.

The essential physics we wish to capture in our model is that a fresh growth unit is incorporated into the growing surface most probably at a site where it is more strongly bound by virtue of having most neighbours. There is no probability of a growth unit settling above a step, as it will slide down to occupy a more favourable site below; there is a rather low probability of a growth unit settling on a flat surface; and a very high probability of it occupying a site at the base of a step.

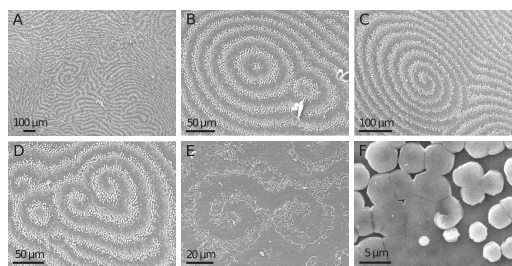


Figura 1. Scanning electron micrographs of the growth surface of bivalve nacre.

<sup>1</sup> K. Wada, *Nature* **211**, 1427 (1966).

<sup>2</sup> J. H. E. Cartwright and A. G. Checa, *J. R. Soc. Interface* **4**, 491 (2006).

<sup>3</sup> J. H. E. Cartwright *et al.*, *PNAS* (in press).

## Aplicación del ISM al estudio de la transición de mojado

Eva M. Fernández<sup>†\*</sup>, Enrique Chacón<sup>†</sup> y Pedro Tarazona<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, E-28049 Madrid*

<sup>‡</sup>*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid*

Un problema ya clásico en Física de la Materia Condensada es el estudio de la transición de mojado, más concretamente, la transición de mojado crítica en un fluido tridimensional con fuerzas de corto alcance frente a una pared. El interés de este sistema reside en que 3D es la dimensión crítica superior de la transición y no está claro si el sistema se comporta como campo-medio o está dominado por las fluctuaciones. La herramienta que se utiliza para estudiar estos sistemas son hamiltonianos interfaciales efectivos en función de la distancia local de la superficie de la capa líquida a la pared. El primer hamiltoniano propuesto fue el modelo local usualmente denominado Capillary-Wave (CW) que es válido solamente para describir fluctuaciones mesoscópicas con una longitud de onda suficientemente grande.

$$H_{CW}[l] = \int dx \left\{ \frac{\Sigma}{2} (\nabla l)^2 + W(l) \right\} \quad (1)$$

Este hamiltoniano contiene un término en gradiente y un potencial de interacción fluido-pared. Sin embargo, las previsiones de este modelo están en contradicción con diferentes simulaciones Monte Carlo, lo que ha llevado a la aparición de dos hamiltonianos efectivos: el modelo de Fisher-Jin<sup>1</sup> y el hamiltoniano no local<sup>2</sup>. El modelo de Fisher-Jin generaliza el modelo CW introduciendo un prefactor al término dependiente de la posición en gradiente. Por el contrario, el hamiltoniano no local incluye un potencial de interacción fluido-pared no local. Actualmente hay una gran discusión sobre cuál de los dos hamiltonianos describe mejor el sistema.

En los últimos años nuestro grupo ha estudiado la superficie libre de los líquidos y ha establecido una conexión entre la Teoría de Ondas Capilares (CWT) y el nivel microscópico a través del Intrinsic Sampling Method<sup>3,4</sup> (ISM). Este método ofrece una herramienta para extraer la información relevante de la estructura molecular mi-

croscópica a partir de simulaciones por ordenador de soft-matter. El ISM permite identificar, para cada configuración, las moléculas que forman parte del líquido y las que forman parte del vapor, definiéndose así la superficie intrínseca de separación entre ambas fases. Esta metodología ha sido aplicada con éxito al estudio de la interfase líquido-vapor de líquidos simples de metales, del agua, y más recientemente a las interfases entre agua y un líquido hidrofóbico.

En este trabajo hemos generalizado el ISM al estudio de la superficie de un líquido adsorbido frente a una pared. Nuestro primer objetivo era estudiar cómo afecta la presencia de la pared al espectro de ondas capilares de la superficie líquido-vapor. Sin embargo, el objetivo principal de nuestro trabajo es validar, mediante la conexión que establece la ISM entre el mundo microscópico y mesoscópico, cuál de los dos hamiltonianos efectivos (el de Fisher-Jin o el no local) describe mejor la realidad o si ninguno de los dos lo hace. Para ello, usando el ISM, hemos obtenido la probabilidad de que la superficie del líquido adsorbido se encuentre a una distancia  $l$  de la pared y hemos estudiado su dependencia con la corrugación. La comparación de estos resultados con las predicciones de los dos hamiltonianos efectivos nos ha permitido obtener conclusiones muy significativas sobre los mismos.

---

\* efernand@icmm.csic.es

<sup>1</sup> M. E. Fisher y A. J. Jin, *Phys. Rev. B* **44**, 1430 (1991).

<sup>2</sup> A. O. Parry, J. M. Romero-Enrique, N. R. Bernardino y C. Rascón, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 505102 (2008).

<sup>3</sup> E. Chacón y P. Tarazona, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 166103 (2003).

<sup>4</sup> E. Chacón y P. Tarazona, *J. Phys.: Condens. Matter* **17** (45), S3493 (2005).

## On the dynamics of the formation of colloidal crystals by spin coating

M. Giuliani<sup>†\*</sup>, W. González-Viñas<sup>†</sup>, and A. Yethiraj<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Departamento de Física y Matemática Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra, Pamplona, Spain*

<sup>‡</sup>*Department of Physics and Physical Oceanography Memorial University, St. John's, Newfoundland and Labrador, Canada*

In the last decade interest in colloidal crystals has increased considerably due to its potential technological relevance. Despite this, little achievement has been obtained in terms of good quality crystals at short processing times and low cost. Recently, it has been observed that the spin coating technique<sup>1</sup> can produce large-area crystals in very short times and with long-range orientational correlation. Previous work using evaporative spin coating has shown that the crystals obtained present hexagonal and square structures<sup>2</sup>. In particular, experiments show that both structures can be obtained in the same crystal<sup>3</sup>. We study the effect of the dynamics (i.e. the spinning and drying processes that take place) on the creation of the long-range orientational order. We present the result obtained from 458nm diameter silica spheres suspended in methyl ethyl ketone (MEK). We use direct imaging of the drying process in order to relate the different states in the dynamics with the final crystallo-

graphic structure and film thickness. We observe that the drying process occurs in multiple stages, and results in different predominant structures. Long-range ordering, as well as a transition between symmetries is observed in the spinning colloidal suspension. In addition, changes in thickness are also observed prior to drying.

---

\* mgiuliani@alumni.unav.es

<sup>1</sup> P. Jiang and M. McFarland, *J. Am. Chem. Soc.* **126**, 13778 (2004).

<sup>2</sup> A. Mihi, M. Ocaña, and H. Míguez, *Adv. Mater.* **18**, 2244 (2006).

<sup>3</sup> C. Arcos, K. Kumar, W. González-Viñas, R. Sirera, K. M. Poduska, and A. Yethiraj, *Phys. Rev. E* **77**, 050402R (2008).

## Sobre el papel de las fuerzas de largo alcance en las interfases

Luis G. MacDowell<sup>†</sup>, Rocío de Gregorio<sup>†</sup> y Felipe J. Blas<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid*

<sup>‡</sup>*Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva*

A medida que aumenta la relación superficie/volumen en los dispositivos miniaturizados, el papel de los efectos interfaciales cobra cada vez mayor importancia. Si bien la estructura microscópica en la interfase puede ser difícil de describir, dentro del marco de la aproximación capilar son únicamente las tensiones superficiales las que determinan el estado termodinámico del sistema.

Aunque las simulaciones por ordenador se presentan en principio como una herramienta ideal para el estudio de las interfases, hay dos dificultades importantes que es preciso solventar. 1) En primer lugar, el procedimiento aparentemente más directo, es decir, la evaluación explícita de las fuerzas de tensión sobre la interfaz, presenta numerosas dificultades, particularmente en sistemas complejos con ligaduras sobre los enlaces de las moléculas. 2) En segundo lugar, la necesidad de considerar fuerzas de largo alcance, ya sean coulombicas o dispersivas, supone una dificultad que en gran número de casos se ignora en detrimento de un acuerdo cuantitativo con los resultados experimentales.

En este trabajo presentaremos resultados recientes que

permiten resolver estos dos problemas. Por un lado, presentaremos un método general para el cálculo de tensiones superficiales en el que se muestrea el área de la interfase y se extraen las tensiones superficiales a partir de la correspondiente distribución de probabilidades<sup>1</sup>. Al igual que el método Test Area,<sup>2</sup> este procedimiento obvia por completo la necesidad de evaluar explícitamente el virial.

Por otro lado, estudiamos distintos métodos propuestos recientemente para el cálculo de las interacciones de largo alcance en interfases libres o confinadas.

Los métodos propuestos los aplicaremos a casos de interés tales como la determinación de la temperatura de wetting en sistemas adsorbidos, las interfases eléctricas o las interfases de polímeros.

---

<sup>1</sup> L. G. MacDowell y P. Bryk, *Phys. Rev. E* **75**, 061609 (2009).

<sup>2</sup> G. J. Gloor, G. Jackson, F. J. Blas y E. de Miguel, *J. Chem. Phys.* **123**, 134703 (2005).

## Characterizing time series through complex networks: The visibility algorithm

Lucas Lacasa and Bartolo Luque

*Departamento de Matemática Aplicada y Estadística, ETSI Aeronáuticos, Universidad Politécnica de Madrid, 28040 Madrid*

In this work we will present a simple and fast computational method, the visibility algorithm<sup>1</sup>, that converts a time series into a graph. The constructed graph inherits several properties of the series in its structure. Thereby, periodic series convert into motif-like graphs, and random series do into random graphs. Moreover, fractal series convert into scale-free networks, enhancing the fact that power law degree distributions are related to fractality, something highly discussed recently. Accordingly, many different measures, recently developed within the complex network theory, could by means of this new approach characterize time series from a new point of view. In the first part we will present the method along with some of its properties, and provide some interesting examples on how the correlations of a given series are mapped topologically to its associated visibility graph. In particular, periodic, random, fractal and chaotic series will be addressed. In a second step, we will make use of the visibility algorithm to quantify fractal signals. Fractional Brownian motion (fBm) has been used as a theoretical framework to study real time series appearing in diverse scientific fields. Because its intrinsic nonstationarity and

long-range dependence, its characterization via the Hurst parameter  $H$  requires sophisticated techniques that often yield ambiguous results. In this work we will also show that fBm series map, via the visibility algorithm, into scale free visibility graphs whose degree distribution is a function of  $H$ . In particular, it is shown that the exponent of the power law degree distribution depends linearly on  $H$ . This also applies to fractional Gaussian noises (fGn) and colored noises. Taking advantage of these facts, we propose a brand methodology<sup>2</sup> to quantify long-range dependence in these series. Its reliability is confirmed with extensive numerical simulations and analytical developments. Finally, we will illustrate this method quantifying the persistent behavior of human gait dynamics, a well-known real series that evidence fractal behavior.

---

<sup>1</sup> L. Lacasa, B. Luque, F. Ballesteros, J. Luque, and J. C. Nuño, PNAS **105**, 13 (2008).

<sup>2</sup> L. Lacasa, B. Luque, F. Ballesteros, and J. C. Nuño, Europhys. Lett. **86**, 30001 (2009).

## Equation of state of $d$ -dimensional hard-core fluids

Mariano López de Haro\* and Andrés Santos

*Departamento de Física, Universidad de Extremadura, E-06071 Badajoz, Spain*

In this work<sup>1,2</sup> we discuss the convergence properties of the virial series of hard-core fluids in  $d$ -dimensions. First, using the results of a recently derived method<sup>3</sup> to obtain the exact solution of the Percus–Yevick (PY) equation for a fluid of hard spheres in (odd)  $d$  dimensions, we consider the equations of state of these systems derived through the virial and the compressibility routes. In both cases, the virial coefficients  $b_j$  turn out to be expressed in terms of the solution of a set of  $(d-1)/2$  coupled algebraic equations which become nonlinear for  $d \geq 5$  and we show results derived up to  $d = 13$ . These confirm the alternating character of the series of the PY theory for  $d \geq 5$ , due to the existence of a branch point on the negative real axis, which in turn allows one to obtain the corresponding radius of convergence for each dimension. The resulting scaled density per dimension  $2\eta^{1/d}$ , where  $\eta$  is the packing fraction, is wholly consistent with the limiting value of 1 for  $d \rightarrow \infty$ .

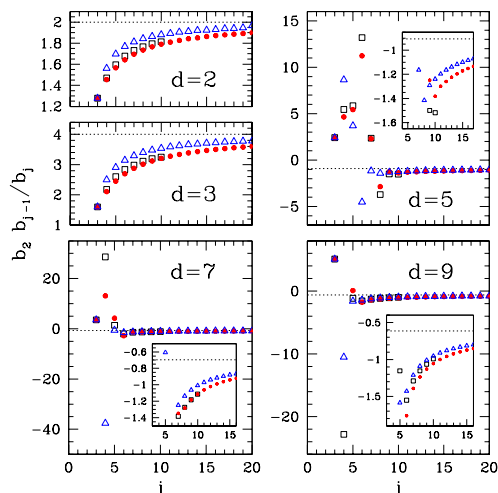


Figure 1. Ratio  $b_2 b_{j-1}/b_j$  as a function of  $j$  for  $3 \leq j \leq 20$  and  $d = 2, 3, 5, 7,$  and  $9$ ;  $b_j^{(v)}$  (triangles),  $b_j^{(c)}$  (circles), and exact value<sup>4,6,7</sup>  $b_j$  (squares). The dash-dotted line is the limiting value of this ratio for both PY virial coefficients when  $j \rightarrow \infty$ . The insets in the cases  $d = 5, 7$  and  $9$  show in more detail how the limiting value is approached.

Next, using the first seven known (‘exact’) virial coefficients<sup>4</sup> and forcing it to possess two branch-point singularities, we introduce a new proposal for the equation of state of hard-core fluids in  $d$ -dimensions. For  $d = 3$  this equation of state predicts accurate values of

the higher-order virial coefficients, a radius of convergence smaller than the close-packing value and it is as accurate as the rescaled virial expansion<sup>5</sup> and better than the Padé [3/3] equations of state. Finally, some possible consequences regarding the convergence properties of the true virial series will be pointed out.

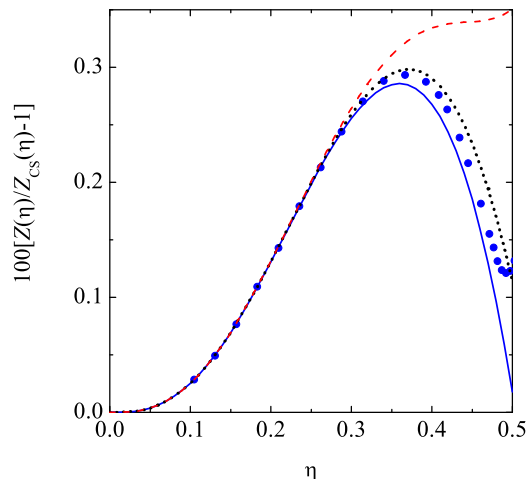


Figure 2. Plot of  $100[Z(\eta)/Z_{CS}(\eta) - 1]$  in the three-dimensional case. Solid line:  $Z(\eta)$  given by the branch-point approximant; dotted line:  $Z(\eta)$  given by the rescaled virial approximant; dashed line:  $Z(\eta)$  given by the Padé [3/3] approximant. The circles are simulation data from Ref. 8.

\* malopez@servidor.unam.mx; on sabbatical leave from Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México (U.N.A.M.), Temixco, Morelos 62580, México.

<sup>1</sup> R. D. Rohrmann, M. Robles, M. López de Haro, and A. Santos, *J. Chem. Phys.* **129**, 014510 (2008).

<sup>2</sup> A. Santos and M. López de Haro, *J. Chem. Phys.* (in press); preprint arXiv:0903.3877.

<sup>3</sup> R. D. Rohrmann and A. Santos, *Phys. Rev. E* **76**, 051202 (2007).

<sup>4</sup> N. Clisby and B. M. McCoy, *J. Stat. Phys.* **122**, 15 (2006).

<sup>5</sup> M. Baus and J. L. Colot, *Phys. Rev. A* **36**, 3912 (1987).

<sup>6</sup> N. Clisby and B. M. McCoy, *J. Stat. Phys.* **114**, 1343 (2004).

<sup>7</sup> M. Bishop, N. Clisby, and P. A. Whitlock, *J. Chem. Phys.* **128**, 034506 (2008).

<sup>8</sup> J. Kolafa, S. Labík, and A. Malijevský, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6**, 2335 (2004).

## Oceanic turbulence, coherent structures, and the behavior of marine ecosystems

Cristóbal López<sup>†\*</sup>, Vincent Rossi<sup>‡</sup>, Emilio Hernández-García<sup>†</sup>, Emilie Tew Kai<sup>§</sup>, Joel Sudre<sup>‡</sup>, Henri Weimerskirch<sup>¶</sup>,  
and Veronique Garçon<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB), Palma de Mallorca, Spain*

<sup>‡</sup>*LEGOS, Centre National de la Recherche Scientifique, Toulouse, France*

<sup>§</sup>*IRD UR 109 THETIS, Centre de Recherche Halieutique, Sete, France*

<sup>¶</sup>*Centre d'Etudes Biologiques de Chizé, Centre National de la Recherche Scientifique, Villiers en Bois, France*

The turbulence in oceans forms a complex network of structures that range in size from the microscopic to thousands of kilometres across. In particular, meso and submeso-scales structures (fronts, eddies, filaments) that are on the scale of between 1 and 100 kilometers seem specially important for ocean life with all kinds of predator/prey activity concentrated on them. In this work<sup>1</sup> we focus on the role of oceanic submesoscale structures on the behavior of a top marine predator, the great frigatebird living in the Mozambique channel. Using a Lagrangian dynamic concept, the finite-size Lyapunov exponent (FSLE), we identified Lagrangian coherent structures (LCSs) present in the surface flow in the channel.

By comparing seabird satellite positions with LCS locations, we demonstrate that frigatebirds track precisely these structures in the Mozambique Channel, providing the first evidence that a top predator is able to track these FSLE ridges to locate food patches. After comparing bird positions during long and short trips and different parts of these trips, we propose several hypotheses to understand how frigatebirds can follow these LCSs.

---

\* clopez@ifisc.uib-csic.es

<sup>1</sup> E. T. Kai *et al.*, PNAS (in press).

## Dinámica no lineal en motores alternativos de combustión interna

A. Medina\*, P.L. Curto Risso y A. Calvo Hernández

Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca

Diversos trabajos experimentales muestran las importantes fluctuaciones que se observan en las variables termodinámicas de un motor de combustión interna de un ciclo a otro<sup>1</sup>. Estas fluctuaciones, denominadas habitualmente, *variabilidad ciclo a ciclo*, están esencialmente asociadas a la combustión turbulenta de la mezcla gaseosa dentro del cilindro y dan lugar a variaciones importantes de los parámetros de salida del motor, por ejemplo, potencia y rendimiento. Las causas físicas de esta variabilidad hay que buscarlas en la complejidad de la combustión, que está afectada por muchas variables tales como: el movimiento turbulento del gas dentro del cilindro, la variación de las cantidades de combustible, aire y gases residuales en el cilindro en cada ciclo, la variación en la composición química de la mezcla y el desplazamiento del núcleo inicial del frente de llama respecto a la posición de la bujía.

La dinámica no lineal de este tipo de sistemas ha sido analizada desde diversos puntos de vista, tanto experimentales como teóricos. Letelier y otros<sup>2</sup> han analizado la evolución ciclo a ciclo de la presión durante la combustión de un motor de encendido por chispa. Utilizando herramientas como la reconstrucción del espacio de las fases, el análisis de las secciones de Poincaré y mapas de retorno concluyen que las variaciones ciclo a ciclo no son gobernadas por un proceso caótico sino por la superposición de una dinámica no lineal determinista con una componente estocástica. Daw y otros<sup>3</sup> han comparado resultados teóricos con un modelo matemático simple considerando combustible residual en el cilindro de un ciclo a otro y han realizado un análisis de la irreversibilidad de las series temporales del calor liberado durante la combustión.

En esta comunicación presentamos una simulación *cuasi-dimensional*<sup>4</sup> de un motor tipo Otto que trata de incorporar esta variabilidad para obtener resultados similares a los experimentales. Para ello planteamos un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden para la temperatura y la presión en el interior del cilindro a partir del primer principio de la termodinámica para sistemas abiertos. Durante la combustión estas ecuaciones están, a su vez, acopladas con las que describen la evolución en el tiempo de la masa de mezcla quemada. El modelo de combustión considera que el frente de llama avanza en el cilindro con cierta velocidad, pero que dentro de ese frente de llama quedan remolinos o vórtices de gases sin quemar que tienen una cierta longitud característica,  $l_t$ . Mostraremos que este parámetro, entre los demás que intervienen en el modelo de combustión, es básico a la hora de reproducir las fluctuaciones que muestran los experimentos<sup>5</sup>.

Los resultados obtenidos, tanto para la presión como para el calor liberado durante la combustión, muestran una buena concordancia con los experimentos. En la figura adjunta se muestran los mapas de retorno para el calor liberado en cada ciclo,  $Q_{r,i}$ , para diversos valores de la razón de equivalencia combustible-aire,  $\phi$ . En la parte superior de la figura se representan los resultados de nuestras simulaciones. Para cada valor de  $\phi$  se observa un núcleo central correspondiente al caso determinista, es decir, se resuelven las ecuaciones termodinámicas sin añadir fluctuaciones en  $l_t$ , y la dispersión introducida al incorporarlas. En la parte inferior de la figura se reproducen algunos resultados experimentales de Daw y otros<sup>6</sup> para valores similares de la relación de equivalencia.

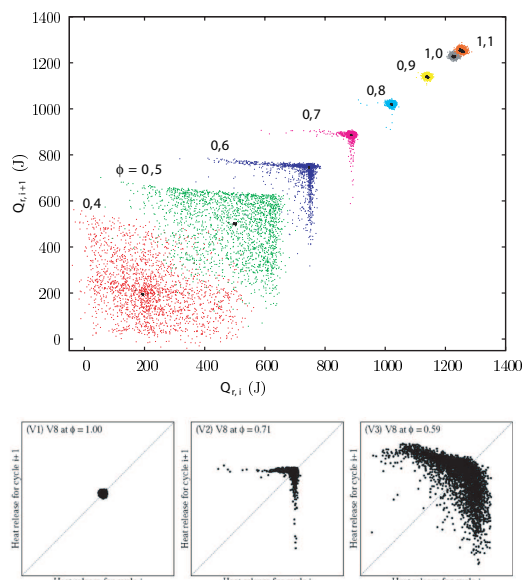


Figura 1. Mapas de retorno para el calor liberado durante la combustión. Arriba: resultados de la simulación para diversos valores de  $\phi$ . Abajo: resultados experimentales<sup>6</sup>.

\* amd385@usal.es. Web: [www.usal.es/gtfe](http://www.usal.es/gtfe)

<sup>1</sup> J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals* (McGraw-Hill, 1988).

<sup>2</sup> C. Letelier *et al.*, SAE Paper No. 971640 (1997).

<sup>3</sup> C. S. Daw *et al.*, Phys. Rev. E **57**, 2811 (1998); **62**, 1912 (2000).

<sup>4</sup> P. L. Curto-Risso, A. Medina y A. Calvo Hernández, J. Appl. Phys **104**, 094911 (2008); **105**, 094904 (2009).

<sup>5</sup> P. L. Curto-Risso, A. Medina y A. Calvo Hernández, Phys. Rev. E (enviado, 2009).

<sup>6</sup> C. S. Daw *et al.*, SAE Paper No. 1999-01-0221 (1999).



## Self-organization without conservation: True or just apparent scale-invariance?

Juan A. Bonachela 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*

The existence of true scale-invariance in models of self-organized criticality *without* a conservation law, as forest-fires or earthquake automata, is scrutinized in this paper. By using three different levels of description: (i) a simple mean field, (ii) a more detailed mean-field description in terms of a (self-organized) branching processes, and (iii) a full stochastic representation in terms of a Langevin equation, it is shown on general grounds that non-conserving dynamics does *not* lead to *bona fide* criticality. Contrarily to conserving systems, a parameter, which we term “re-charging” rate (e.g. the tree-growth rate in forest-fire models), needs to be *fine-tuned* in non-conserving systems to obtain criticality. In the infinite size limit, such a fine-tuning of the loading rate is easy

to achieve, as it emerges by imposing a second separation of time scales but, for any finite size, a precise tuning is required to achieve criticality and a coherent finite-size scaling picture. Using the approaches above, we shed light on the common mechanisms by which “apparent criticality” is observed in non-conserving systems, and explain in detail (both qualitatively and quantitatively) the difference with respect to true criticality obtained in conserving systems. We propose to call this *self-organized quasi-criticality* (SOqC). Some of the reported results are already known and some of them are new. We hope the unified framework presented here helps to elucidate the confusing and contradictory literature in this field.

## Optimization and plasticity in disordered media

Clara B. Picallo<sup>†\*</sup>, Mikko J. Alava<sup>‡</sup>, Stefano Zapperi<sup>§¶</sup>, and Juan M. López<sup>+</sup>

<sup>†</sup>*Departamento de Física Moderna, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain*

<sup>‡</sup>*Laboratory of Physics, Helsinki University of Technology, HUT 02015, Finland*

<sup>§</sup>*Institute for Scientific Interchange (ISI) Foundation, 10133 Torino, Italy*

<sup>¶</sup>*CNR-INFM, S3, Dipartimento di Fisica, Università di Modena e Reggio Emilia, 41100 Modena, Italy*

<sup>+</sup>*Instituto de Física de Cantabria (CSIC-UC), 39005 Santander, Spain*

When subject to large loads, materials can deform plastically, changing irreversibly their shape. Macroscopically, this process is described by the continuum theory of plasticity, stating that at the yield stress the sample develops plastic strain. When plastic strain grows without further increase of the external stress, one talks about perfect plasticity (PP). In amorphous materials yielding is due to irreversible atomic rearrangements mostly studied by extensive molecular dynamics simulations.

Bridging the lengthscales between microscopic models and continuum theories is yet one of the most challenging problems in materials science. Here we will address the issue of plasticity in amorphous media making use of a perfectly plastic version of the random fuse model, a scalar lattice electrical analog of the elasticity equations that describes the materials at a mesoscopic level.

A powerful analogy relates plastic strain localization to minimum energy (ME) surfaces<sup>2</sup>. In two dimensions the ME surface is equivalent to a directed polymer at zero temperature and is thus self-affine with a roughness exponent  $\zeta = 2/3$ . Furthermore, the yield stress should display finite size corrections of the type  $\sigma_c = \sigma_\infty + AL^{\theta-1}$ , where  $\theta = 1/3$  in  $d = 2$  is the energy exponent describing the size scaling of the energy standard deviation in the equivalent ME problem.

Here we show by numerical simulations and theoretical arguments that the relation between PP and ME should be revised<sup>1</sup>. The resulting PP and ME interfaces for the same disorder configuration can partly overlap as it is shown in the top panel of figure 1 but, while the ME surface is a smooth nearly directed surface, the PP one exhibits many overhangs. In consequence, the PP energy (sum of local yield stresses over the surface) is higher than the ME one. However, the PP actual current (global yield stress) is lower.

We demonstrate that the yield PP surface is the one that minimizes not the global energy but the yield stress. This is based on the fact that whereas overhangs mean positive contributions to the energy, they change the orientation of the surfaces and hence reduce the global stress. Therefore, in the presence of overhangs, the system is always able to get yielded at a PP stress lower or at most equal to ME. These differences in the yield strength do not disappear increasing the global system size as it is shown in the right bottom panel of figure 1.

This implies that overhangs do not have a characteristic scale but they grow with the global system size indicating that this effect will not vanish at the thermodynamic limit.

This effect is also evident looking at the geometric properties of the interfaces. ME surfaces are self-affine with the expected roughness exponent  $\zeta_q^{ME} = 2/3$ . Although PP surfaces also present  $\zeta = 2/3$  and hence belong to the same universality class, looking at higher orders of the correlation function they exhibit multiscaling at small scales due to the presence of overhangs and only above a certain length scale, which grows with the system size, we recover self-affinity.

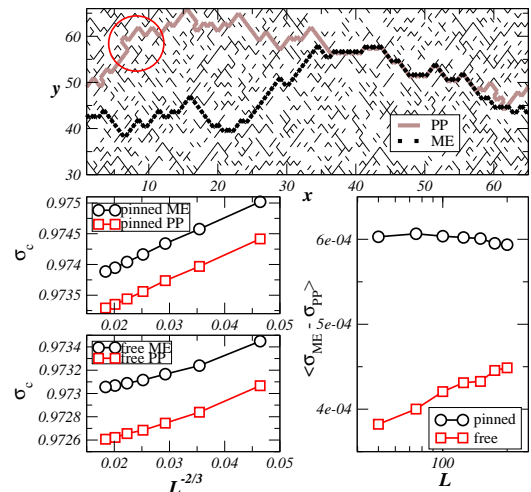


Figure 1. Top: ME surface and PP yield surface for the same realization of disorder in a  $L=64$  diamond lattice. Bottom: On the left, scaling of critical stress with system size in PP and ME both with fixed and free ends. On the right it can be observed that the difference between the critical stress for ME and PP grows very slowly but systematically with system size.

\* picallo@ifca.unican.es

<sup>1</sup> C. B. Picallo, M. J. Alava, S. Zapperi, and J. M. López (in preparation).

<sup>2</sup> S. Roux and A. Hansen, J. Phys. II (France) **2**, 1007 (1992).

## Exploring the free energy landscape: From dynamics to networks and back

Diego Prada-Gracia\*, Jesús Gómez-Gardeñes, Pablo Echenique, and Fernando Falo  
*Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza*

A complete description of complex polymers, such as proteins, includes information about their structure and their dynamics. The determination of the conformers and the basins of attraction takes a central role for studying molecular isomerization reactions. In particular it is of utmost importance to answer the following questions: What are the structural conformations possible? Is there any relevant hierarchy among these conformers? What are the transition paths between them? These and other questions can be addressed by analyzing in an efficient way the Free Energy Landscape (FEL) of the system. With this knowledge, several problems about biomolecular reactions (such as enzymatic activity, protein folding, protein deposition diseases, etc) can be tackled. Therefore, the knowledge of the FEL topology is the essential key to understand many biochemical processes.

In this work<sup>1</sup> we present a novel framework to unveil the features of the FEL of peptides. Exploring the landscape by molecular dynamics simulations, the microscopic data of the trajectory are encoded into a graph: the Conformational Markov Network (CMN). Regions of the conformational space of the same volume are represented by nodes, and weights and links are dictated by the dynamics. The structure of this graph reveals the regions of the conformational space corresponding to the basins of attraction. In addition, this approach provides us with a coarse grained description of the protein dynamics across the FEL: how many meta-stable conformers are, how the hierarchical relationship among them is, or what the structure of the transition paths are. The compromise between the physical nature of the process and the magnitudes that characterize the network allows us also to offer relevant kinetic magnitudes as dwell times and rate constants.

Unlike other approaches used to characterize biopolymers, this is done without the estimation of the volume of each conformational macro-state in the coordinates space and without the 'a priori' knowledge of the saddle points or minima. Neither the basins of attraction were defined by the unique criterion of clustering conformations with a geometrical distance, nor the rate constants were projected from the potential energy surface with transition state theory. The peptide explores its landscape building the corresponding CMN and the success of extracting the relevant information is up to the ability of dealing with it.

In conclusion, we propose how to reveal the structure of the FEL in a straightforward way and with a remarkable efficiency. The large amount of information obtained by working with the CMN, its potential application to any peptide with a large number of monomers, and the possibility of performing the analysis on top of CMN constructed via several short MD simulations, make the approach presented here a promising way to describe the FEL of large peptides and proteins.

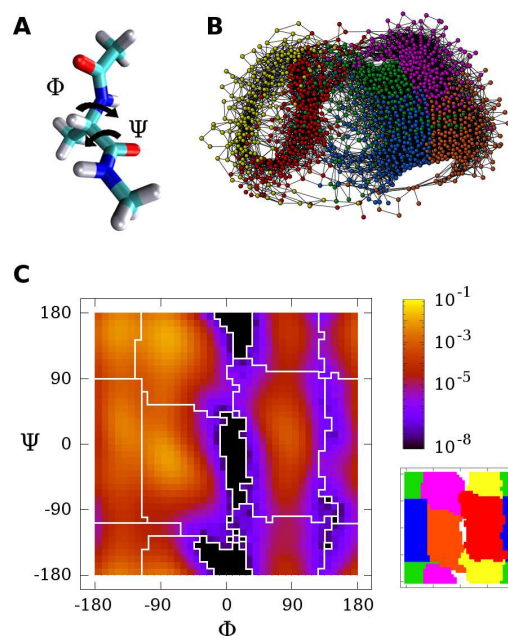


Figura 1. Free energy basins of the Alanine dipeptide: (A) The dialanine dipeptide with the dihedral angles  $\phi$  and  $\psi$ . (B) Plot of the CMN generated. The structure of the network reveals 6 sets of nodes (different colors) corresponding to 6 basins of the FEL. (C) Left: Ramachandran plot with the occupation probabilities of the cells used to build the CMN. The boundaries of the free energy basins are shown in white. Right: the 6 basins represented as regions of different color.

\* dprada@unizar.es

<sup>1</sup> D. Prada-Gracia, J. Gómez-Gardeñes, P. Echenique, and F. Falo. PLoS Comput. Biol., <http://arxiv.org/abs/0905.2071> (in press).

## Understanding the self-assembly of organic molecules onto metal surfaces

Thomas Roussel\* and Lourdes F. Vega

*Molecular Simulation Group,*

*Institut de Ciència de Materials de Barcelona, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (ICMAB-CSIC),  
MATGAS Research Center, Campus de la UAB, s.n. 08193, Bellaterra (Barcelona)*

The fabrication of nano-components is becoming the next step towards the miniaturization of the existing electronic devices<sup>1</sup>. One of the main challenges for molecular electronics is to precisely position the molecular building blocks such that they eventually form a functioning structure like wires, or logic operators for integrated circuits with functional molecules<sup>2</sup>. Phthalocyanine (M-Pc-X) onto a Ag(111) surface represents an ideal system to understand the driving parameters leading the self-assembly process of organic molecules onto a surface. Indeed, a metal atom (M) is located in the center of the molecule, and can be substituted, changing the optical (Zn, Cu), electronic (As, Ge) and magnetic (Fe, Co) properties of the molecule, and thus, the interactions molecule-substrate. Furthermore, the self-assemblies of half-halogenated (ZnPcCl<sub>8</sub> and ZnPcF<sub>8</sub>) and nonhalogenated zinc phthalocyanine ZnPc molecules on Ag(111) surface have been recently reported<sup>3</sup> by means of a combined experimental and *ab initio* theoretical studies, showing compact arrangements governed by the activation of Cl...H-C hydrogen bonds network<sup>4</sup>.

Density-functional theory (DFT) calculations on the corresponding 2D molecular networks were showing differences in the nature of the H...F and H...Cl hydrogen bonds, and also differences in the equilibrium molecular lattice parameter, modifying the mismatch with the atoms of the surface and the surface tension of the adsorbed layer.

Scanning tunneling microscopy (STM) reveals different coexisting phases and phase transitions during the heat treatment. Usually, DFT calculations are based on experimental STM observations. They assess a precise description of the intermolecular interactions, based upon electron density (at zero Kelvin). However, as the molecules are composed of 57 atoms, *ab initio* calculations suffer of a very demanding computational time, and are limited to the isolated molecule, or few molecules. Thus, some fundamental questions remain open, such as the thermostatic description for a better understanding of the entropically driven stabilization of each phases. As these molecules are  $\pi$ -conjugated flat-lying onto the surface, we use a Grand Canonical Monte-Carlo method to describe the effect of the subtle interplay of molecule-molecule and molecule-surface interactions, assuming a two-dimensional system. The molecules are coarse-grained, reducing their structure to 13 beads (8 halogens (X), 4 organic groups (O), and the metal atom (M)). Only three types of interactions are taken in account: metal-surface, dispersion interactions, and orientational hydrogen bonds at short distances

between halogens and organic part of the molecule. To improve the efficiency of the code, we precalculate the interactions between one molecule and one unit cell of the surface, and use the periodicity of the substrate to extend to an infinite surface. It allows us to simulate a large number of molecules, improving statistics and reaching phase equilibria after maximizing the entropy of the system.

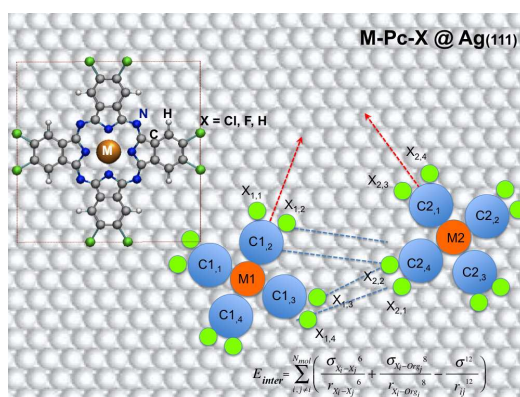


Figura 1. Schematic representation of a coarse-grained halogenated Metal-Phthalocyanine (M-Pc-X) on Ag(111); the metal M can be Zn, Cu, Co, Fe, Ge ..., Pc = Phthalocyanine, and X can be H, Cl, F.

Our main goal is to provide a predictive and simple model as a tool-kit to characterize and predict the self-assembly of bi-molecular systems<sup>5,6</sup> as a function of their relative concentrations, and respectively symmetries.

This project is supported by the Spanish Government (CTQ2008-05370/PPQ) and NANOSELECT Consolider of the Programa Ingenio 2010, and resources from the Supercomputer Center of Catalonia, CIESCA.

\* troussel@icmab.es

<sup>1</sup> C. Joachim, J. K. Gimzewski, and A. Aviram, *Nature* **408**, 541 (2000).

<sup>2</sup> A. Kühnle, *Curr. Opin. Colloid In.* **14**, 157 (2009).

<sup>3</sup> V. Oison, M. Koudia, M. Abel, and L. Porte, *Phys. Rev B* **75**, 035428 (2007).

<sup>4</sup> V. Oison, *Surf. Sci.* **601**, 1040 (2007).

<sup>5</sup> M. Sassi, V. Oison, and J.-M. Debierre, *Surf. Sci.* **602**, 2856 (2008).

<sup>6</sup> B. Calmette, S. Nagarajan, A. Gourdon, M. Abel, L. Porte, and R. Coratger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 6994 (2008).

## Clonal plant growth and genetic diversity

Tomás Sintes\*

*Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos IFISC (UIB-CSIC), Campus Universitat de les Illes Balears, 07122 Palma de Mallorca*

Theoretical modeling and, more recently, advances in computation techniques<sup>1</sup> give researchers powerful tools to understand the mechanisms of spatial and genetic pattern formation. Recent studies of the development of marine phanerogams (*Posidonia*, *Cymodocea*...) <sup>2,3</sup> have observed nonlinearities in growth rates and colonization rhythms that are difficult to understand in terms of the usually considered variables. Recently, the adaptation of numerical models known in the context of non-equilibrium condensed matter physics and pattern formation studies to the growth to clonal plants has been successful in explaining the variability in occupation rates and morphologies<sup>4,5</sup>.

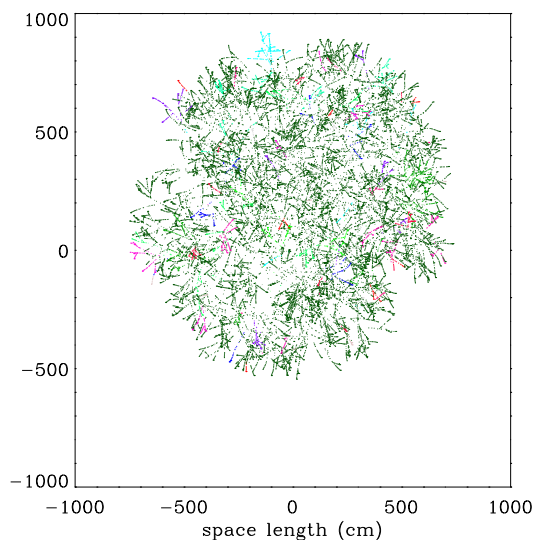


Figura 1. Snapshot of *Posidonia oceanica* after 150 years. The plant extends over 125 m<sup>2</sup>, contains barely 22500 nodes and 135 distinct genets identified with different colours.

One of the aspects not yet considered concerns the understanding of the high degree of polymorphism (or endogamy) observed in the meadows<sup>6,7</sup>. This observation is relevant for the adaptability to physico-chemical environmental changes and species competition. One of the objectives in this work is to advance in the comprehension of these phenomena by integrating in the same study the modelling of genetic variability and spatial distribution of genotypes. In a previously developed model of clonal plant growth<sup>4</sup> the probability of generation of a new genet has been implemented. This probability will act effectively in such a way that resumes the behavior of species that are able to reproduce both sexually and asexually as well as the mutation probability in the process of meristematic cell division. The generation of different genotypes will be considered together with the size and age of the plant.

\* tomas@ifisc.uib-csic.es

<sup>1</sup> P. Meakin, *Fractals, scaling and growth far from equilibrium* (Cambridge Univ. Press, 1997).

<sup>2</sup> B. Vidondo, A. Middleboe, K. Stefansen, T. Lützen, S. L. Nielsen, and C. M. Duarte, *Mar. Ecol-Prog. Ser.* **158**, 131 (1997).

<sup>3</sup> N. Marbà and C. M. Duarte, *Mar. Ecol-Prog. Ser.* **174**, 269 (1998).

<sup>4</sup> T. Sintes, N. Marbà, C. M. Duarte, and G. Kendrick, *Oikos* **108**, 165 (2005).

<sup>5</sup> T. Sintes, N. Marbà, and C. M. Duarte, *Estuaries Coasts* **29**, 72 (2006).

<sup>6</sup> M. R. Billingham, T. B. Reush, F. Alberto, and E. A. Serrão, *Mar. Ecol-Prog. Ser.* **265**, 77 (2003).

<sup>7</sup> S. Arnaud-Haond, M. Migliaccio, E. Diaz-Almela, S. Teixeira, M. Susanne van de Vliet, F. Alberto, G. Procaccini, C. M. Duarte, and E. A. Serrão, *J. Biogeogr.* **34**, 963 (2007).

## The savanna problem from a Statistical Physics point of view

Federico Vázquez<sup>†\*</sup>, Cristobal López<sup>†</sup>, Justin Calabrese<sup>†</sup>, Miguel Ángel Muñoz<sup>‡</sup>, Volker Grimm<sup>§</sup>, and Maxi San Miguel<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, Campus Universitat de les Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain*

<sup>‡</sup>*Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia and Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada, Spain*

<sup>§</sup>*Department of Ecological Modelling, Helmholtz Centre for Environmental Research-UFZ, Permoserstrasse 15, 04318 Leipzig, Germany*

What is unique about savannas that allows the coexistence of trees and grasses? What are the factors that govern that coexistence? Despite many scientific efforts during the last decades, these questions are still open. Recent empirical work suggests that tree-tree competition and external forcing like fire and varying weather conditions are key factors that regulate savanna dynamics. To tackle the combined effects of these mechanisms from a Statistical Physics point of view, we develop a minimalistic and analytically tractable stochastic model, which is a variant of the Contact

Process. The model exhibits a transition from grassland to tree-grass coexistence, whose nature depends on the values of the internal parameters. We also study the spatial structure of tree distribution and characterize the mechanisms leading to clustering.

---

\* federico@ifisc.uib-csic.es

<sup>1</sup> J. Calabrese *et al.* (submitted).

<sup>2</sup> F. Vázquez *et al.* (preprint).

## Cinco años simulando el diagrama de fases del agua. ¿Qué hemos aprendido?

C. Vega, J. L. F. Abascal, L. G. MacDowell, M. M. Conde, J. L. Aragonés, E. G. Noya y C. McBride

*Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense, Ciudad Universitaria s/n, 28040, Madrid, Spain*

El diagrama de fases del agua puede determinarse utilizando los modelos de agua que se utilizan habitualmente en simulación. En este trabajo se presentará el diagrama de fases<sup>1-4</sup> para los modelos TIP3P, TIP4P, SPC/E y TIP5P. El único modelo que proporciona una descripción cualitativamente correcta del diagrama de fases es el TIP4P. El modelo puede ser modificado para mejorar las predicciones de la temperatura de fusión y del diagrama de fases. El modelo mejorado ha sido denominado TIP4P/2005<sup>5</sup>. Se presentarán las predicciones del nuevo modelo para las siguientes propiedades: 1) equilibrio líquido vapor y propiedades críticas; 2) tensión superficial (utilizando la metodología del test area); 3) propiedades de los hielos; 4) diagrama de fases; 5) punto de fusión; 6) máximo en densidad a presión ambiente; 7) estructura del agua y del hielo; 8) ecuación de estado a altas presiones; 9) coeficiente de difusión y viscosidad; y 10) constante dieléctrica.

Mostraremos cómo el modelo proporciona excelentes predicciones para prácticamente todas estas propiedades. El modelo puede utilizarse por tanto con confianza para

explorar nuevos fenómenos físicos, para los cuales el número de resultados experimentales es limitado, como por ejemplo la existencia de una capa líquida en la superficie libre del hielo, la existencia de mínimos en densidad en agua subenfriada, la posible existencia de fases de cristal plástico en el diagrama de fases del agua, las propiedades de los clatratos, y el impacto de los efectos cuánticos nucleares sobre las propiedades del agua.

---

<sup>1</sup> E. Sanz, C. Vega, J. L. F. Abascal y L. G. MacDowell, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 2557011 (2004).

<sup>2</sup> C. Vega, J. L. F. Abascal, M. M. Conde y J. L. Aragonés, *Faraday Discuss.* **141**, 251 (2009).

<sup>3</sup> J. L. F. Abascal y C. Vega, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 237801 (2007).

<sup>4</sup> C. Vega, E. Sanz, J. L. F. Abascal y E. G. Noya, *J. Phys.: Condens. Matt.* **20**, 153101 (2008).

<sup>5</sup> J. L. F. Abascal y C. Vega, *J. Chem. Phys.* **123**, 234505 (2005).





Parte III  
**Paneles**



## Transporte anómalo y reacciones de primer orden: ecuación general de subdifusión-reacción y estudio de sus aplicaciones

E. Abad<sup>†‡\*</sup>, R. Borrego<sup>†</sup> y S. B. Yuste<sup>†</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06011 Badajoz*

<sup>‡</sup> *Structural Bioinformatics and Computational Biochemistry Unit, Department of Biochemistry, University of Oxford, South Parks Road, Oxford OX1 3QU, United Kingdom*

En el presente trabajo desarrollamos la teoría de sistemas subdifusivos con reacción de primer orden mediante un formalismo CTRW (continuous time random walk) generalizado. A diferencia de trabajos previos, que se centran en el caso de reactividad constante<sup>1</sup>, aquí consideramos el caso en el que la reactividad es una función arbitraria del tiempo. Cabe recordar que la importancia de este caso reside en que la cinética reactiva de orden mayor que uno (no lineal) puede en ocasiones reducirse de forma efectiva a cinética de primer orden si se introduce una dependencia temporal de la reactividad.

El estudio de sistemas cuyos constituyentes satisfacen leyes no markovianas de evolución adquiere en la actualidad especial relevancia a la luz de recientes experimentos que ponen de manifiesto la importancia de efectos de memoria en una larga serie de sistemas físicos, químicos y biológicos. En sistemas donde el transporte mediante saltos aleatorios juega un papel central, es bien sabido que los efectos de memoria pueden describirse empleando ecuaciones maestras generalizadas que contienen núcleos no locales caracterizados por distribuciones de cola larga.

Un caso particular pero paradigmático es la ecuación integral para el CTRW, postulada en sus orígenes por Montroll y Weiss<sup>2</sup> y aplicada por Scher y Lax<sup>3</sup> al estudio de problemas de conductividad en medios desordenados. Posteriormente el formalismo CTRW ha sido utilizado con éxito en multitud de problemas (transporte de excitaciones en sólidos amorfos, procesos de envejecimiento, evolución de mercados financieros, etc.). En el régimen de tiempos mucho mayores que la duración típica de los saltos elementales, puede demostrarse que la evolución descrita por el CTRW con una distribución de tiempos de espera suficientemente dispersa viene dada por una ecuación fraccional de difusión cuya solución exhibe un desplazamiento cuadrático medio que crece sublinealmente, es decir  $\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle \propto t^\gamma$ , donde  $\gamma < 1$ . Pero, ¿cómo se modifica esta ecuación cuando se superponen procesos

de creación o destrucción de constituyentes al transporte subdifusivo?

Está claro que dichos procesos alteran la distribución de edades de los constituyentes y por ello uno espera que interfieran significativamente con el proceso de transporte anómalo que depende de la misma; en otras palabras —y como acreditan trabajos recientes<sup>1,4</sup>—, los efectos de reacción y transporte no son separables; ni siquiera en los casos más sencillos de reacciones de primer orden, comúnmente utilizadas para la modelización de procesos de desintegración, polimerización, recombinación, transiciones de/a estados excitados, o degradación de morfogenes asociados a la irrupción y desarrollo de estructuras biológicas, entre otros.

Para el estudio cuantitativo de este tipo de sistemas, partimos de la ecuación integral de un CTRW con reacción lineal<sup>4</sup>, y mediante una transformación apropiada obtenemos una ecuación con un término reactivo y otro de transporte anómalo en el que la reactividad interviene de forma no trivial. Consideramos aplicaciones de esta nueva ecuación de difusión-reacción a versiones subdifusivas de problemas clásicos en cinética química. La estrategia para resolver este tipo de problemas consiste en reducirlos a soluciones de problemas de subdifusión puros pero con condiciones de contorno dependientes del tiempo, que pueden tratarse mediante un teorema análogo al de Duhamel para difusión clásica<sup>5</sup>.

---

\* eabad@unex.es

<sup>1</sup> I. M. Sokolov, M. G. W. Schmidt y F. Sagués, *Phys. Rev. E* **73**, 031102 (2006).

<sup>2</sup> E. W. Montroll y G. Weiss, *J. Math. Phys.* **6**, 167 (1965).

<sup>3</sup> H. Scher y M. Lax, *Phys. Rev. B* **7**, 4491 (1973).

<sup>4</sup> B. I. Henry, T. A. M. Langlands y S. L. Wearne, *Phys. Rev. E* **74**, 031116 (2006).

<sup>5</sup> H. S. Carslaw y J.C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, 2ª ed. (Oxford University Press, 2000).

## Cálculo por simulación de propiedades anómalas del agua: compresibilidad isoterma y viscosidad

Miguel Ángel González y José Luis F. Abascal

*Departamento Química-Física I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense, 28040 Madrid, Spain*

Las llamadas propiedades “anómalas” del agua son un elemento característico del comportamiento de esta importante molécula. En este trabajo se pretende investigar si algunas propiedades anómalas representativas —compresibilidad isoterma y viscosidad— son correctamente reproducidas por simulaciones en ordenador usando diversos modelos de agua (muy en particular TIP4P/2005). Los resultados muestran que el modelo TIP4P/2005 predice, a la presión de 1 bar, un mínimo en la compresibilidad isoterma a temperaturas muy próximas a la experimental. Otros modelos (SPC/E y TIP4P) también predicen el mínimo en la compresibilidad aunque a temperaturas notablemente diferentes de la experimental. Finalmente, el modelo TIP5P no predice dicho mínimo dentro del rango de temperaturas investigado. Con el modelo

TIP4P/2005 hemos hecho cálculos adicionales a una presión superior (1000 bar) observando de nuevo la presencia de un mínimo que, en concordancia con los datos experimentales, se desplaza hacia menores temperaturas respecto al obtenido a presión ambiental.

Los resultados obtenidos para una propiedad dinámica como la viscosidad (“shear viscosity”) van en la misma línea que los obtenidos para la compresibilidad isoterma. El modelo TIP4P/2005 predice cuantitativamente la variación de la viscosidad con la presión para distintas isothermas aunque la concordancia con el experimento empeora al disminuir la temperatura. Aun así el modelo es capaz de predecir el mínimo en la viscosidad para temperatura  $T = 298\text{K}$  y la desaparición del mismo a temperaturas superiores. Los resultados son mucho más pobres para los modelos SPC/E, TIP3P, TIP4P y TIP5P.

## Efecto de la anisotropía de grano en la descarga de un silo

Manuel F. Acevedo Escalante\*, Iker Zuriguel y Diego Maza

Departamento de Física y Matemática Aplicada, Universidad de Navarra, 31008 Pamplona

Los medios granulares como la grava, el arroz o la arena, son grupos de partículas similares entre sí que se comportan de un modo colectivo. Las leyes que rigen el comportamiento de estos medios granulares han sido estudiadas en profundidad por las comunidades de físicos e ingenieros, produciéndose un gran avance en el conocimiento de algunas de sus principales propiedades. Sin embargo la mayoría de los trabajos en los que se basa este conocimiento de la física de los medios granulares han sido realizados utilizando partículas isótropas (discos en dos dimensiones y esferas en tres). Solo en unos pocos estudios recientes se muestra que la forma del grano tiene una gran influencia en las propiedades de los medios granulares<sup>1,2</sup>.

En este trabajo experimental se analiza estadísticamente el tamaño de las avalanchas generadas en el proceso de descarga por gravedad de partículas anisótropas (arroz) en un silo. La comparación de estos resultados con trabajos anteriores realizados con esferas revela interesantes aspectos característicos de partículas anisótropas.

Cuando se descarga un silo, las partículas pueden interactuar entre sí formando arcos que son capaces de atascar el orificio, deteniendo el flujo completamente. En trabajos anteriores<sup>3</sup> se propuso que el proceso de atasco para partículas esféricas se puede interpretar mediante un modelo de percolación unidimensional donde, para un tamaño de orificio dado, cada partícula pasa a través del orificio (sin atascarlo) con una probabilidad  $p$ . Así, si la probabilidad de que una esfera atasque el orificio es  $1 - p$ , la distribución en el tamaño de las avalanchas vendrá dada por

$$n_D(s) = p^s(1 - p) \quad (1)$$

Esta ecuación explica la distribución exponencial obtenida para los tamaños de avalancha ( $s$ ) mostrada en la figura 1a. Este fenómeno es robusto y se obtiene para cualquier valor de tamaño de orificio ( $D$ ).

Cuando, en lugar de partículas isótropas se usan granos de arroz, la distribución no es exponencial para todos los valores de  $D$ . En efecto, aunque para agujeros pequeños la distribución se asemeja a una exponencial, cuando el tamaño del orificio se agranda se evidencia un cambio de comportamiento (figura 1b). Este cambio en la forma de la distribución implica que la probabilidad  $p$  de que

un grano de arroz pase por el orificio sin atascarlo no es constante durante la descarga.

Adicionalmente se presentará la comparación, entre los dos tipos de partículas, de las fluctuaciones del flujo durante las avalanchas.

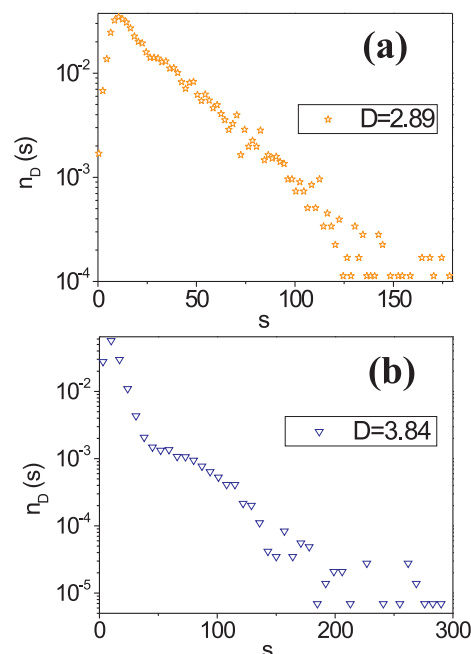


Figura 1. Distribución de tamaño de avalanchas  $n_s$  en la descarga de un silo con (a) partículas esféricas y (b) granos de arroz.

\* macevedo@alumni.unav.es

<sup>1</sup> A. Donev, I. Cisse, D. Sachs, E. A. Variano, F. H. Stillinger, R. Connelly, S. Torquato y P. M. Chaikin, *Science* **303**, 990 (2004).

<sup>2</sup> I. Zuriguel y T. Mullin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 0280011 (2007).

<sup>3</sup> I. Zuriguel, L. A. Pugnaloni, A. Garcimartín y D. Maza, *Phys. Rev. E* **68**, 030301(R) (2003).

## Dynamics of colloidal particles in flowing solvents through nanochannels

Laura Almenar, Markus Rauscher, and Siegfried Dietrich  
*Max-Planck-Institut for Metals Research, Stuttgart, Germany*  
*ITAP, University of Stuttgart, Stuttgart, Germany*

Brownian motion in confined geometries has received considerable attention in the last century. The transport of suspended particles within microfluidic and nanofluidic channels is of central importance to many biologically and industrially relevant processes.

Suspended particles interact with other particles or with container walls in many ways. Most important are direct interactions, hydrodynamics interactions and electrical interactions. We are mainly interested in the influence of direct and hydrodynamic interactions which play a major role in the transport of suspensions through nano-channels in the presence of a flow. With hydrodynamic chromatography (HD) as an application in mind we aim for a better understanding of these transport processes.

We consider a simplified model system of two suspended

particles diffusing through a two-dimensional narrow channel. We focus first on steady state situations and we obtain, both analytically and numerically, the correlation function and the size-dependent throughput of the particles using a finite element method.

We observe that the flux changes the distribution of the particles across the channel. In equilibrium the small particles are concentrated at the channel wall and the big particles are almost homogeneously distributed across the channel. The numerical solution in equilibrium yields good agreement with the analytical one. For strong flow, we observe that the large particle moves towards the centre of the channel and the small particle is pushed towards the wall.

---

## Dinámica de fluidos complejos en nanocanales

Laura Almenar, Markus Rauscher y Siegfried Dietrich  
*Max-Planck-Institut for Metals Research, Stuttgart, Germany*  
*ITAP, University of Stuttgart, Stuttgart, Germany*

El comportamiento de un fluido confinado puede ser diferente en muchos aspectos del comportamiento de un fluido libre. En primer lugar, el confinamiento induce inhomogeneidades en la densidad y la presencia de superficies, no sólo cambia las propiedades de equilibrio de los fluidos, sino también afecta a su comportamiento dependiente del tiempo, como la difusión. Por consiguiente, el comportamiento de un fluido que se mueve a través de microcanales y nanocanales, tanto en sistemas en equilibrio como en sistemas fuera del equilibrio, se ha convertido en objeto de estudio tanto experimental como teórico y es de gran relevancia en muchos procesos biológicos e industriales. Las partículas suspendidas interactúan con otras partículas o con las paredes del canal desde muchos puntos de vista. Los más importantes son las interacciones directas, interacciones hidrodinámicas e interacciones eléctricas. Nuestro objetivo es entender teóricamente la influencia de las interacciones directas e hidrodinámicas las cuales desempeñan un papel importante en el transporte de suspensiones por nanocanales en presencia de un flujo mediante la ecuación de Fokker-Planck y el método de cromatografía hidrodinámica (HDC). Con esta técnica es posible la separación de partículas de diferente tamaño las cuales son transportadas por un fluido en fase estacionaria. La separación de las partículas se logra porque las partículas grandes están confinadas en el

centro del canal debido a que la velocidad del flujo es mayor, mientras que las partículas pequeñas pasan más tiempo en las paredes del canal donde el flujo es mucho más lento. Por tanto, las partículas de mayor tamaño viajarán más rápidamente por el canal, y esto nos permitirá separar las partículas grandes de las pequeñas.

Consideramos un simplificado sistema de dos partículas suspendidas que se difunden por un canal de dos dimensiones. Asumimos que la dinámica de las partículas es no inercial (overdamped) y Browniana, así como invarianza translacional a lo largo del sistema, reduciéndose nuestro estudio a la ecuación de Smuluchowski. Nos concentramos primero en estados estacionarios y obtenemos, tanto analíticamente como numéricamente, la función de correlación y el "throughput" dependiente del tamaño de las partículas usando un método de elemento finito (Comsol).

Observamos que el flujo cambia la distribución de las partículas a través del canal. En el equilibrio las partículas pequeñas están concentradas en las paredes del canal debido a que la velocidad del flujo es más lenta en las proximidades de las paredes que en el centro del canal y las partículas grandes están casi homogéneamente distribuidas a través del canal. La solución numérica en el equilibrio guarda concordancia con la solución analítica.

---

## Cardiac tissue with mechano-electrical feedback as excitable media with global coupling

E. Álvarez-Lacalle\* and B. Echebarría

*Departament de Física Aplicada, Universitat Politècnica de Catalunya, Av. Dr. Marañón 44-50, E-08028, Barcelona*

Cardiac arrhythmias are associated with problems in the propagation of the cellular transmembrane potential, leading to the formation and, eventually, destabilization of rotors (spiral or scroll waves)<sup>1</sup>. To study this transition, mechanical contraction is usually neglected, being considered to be a passive consequence of electrical activity. However, simulations of simplified models of excitation-contraction coupling<sup>2</sup>, as well as of reaction-diffusion equations in a medium with a varying (oscillatory) metric<sup>3</sup>, suggest that mechanical deformation could play an important role on the stability of spiral waves. In cardiac muscle, besides excitation-contraction coupling, where electrophysiological changes initiate mechanical contraction in the heart, there is a feedback system whereby mechanical deformations (e.g. stretch) can modulate electric activity<sup>4</sup>. This is called mechanoelectric feedback (MEF), and is mediated by stretch-activated channels (SAC) in the cellular membrane<sup>5</sup>.

We will discuss how mechano-electric models which describe both the electric propagation and the mechanic contraction of cardiac tissue with the presence of MEF naturally lead to close systems of equations with global coupling among the variables<sup>6</sup>. We exemplify this using the Nash-Panfilov model, which reduces to a Fitzgugh-Nagumo type equation with global coupling

in the linearly elastic regime. The simplicity of the resulting model allows us to get a better understanding of the different mechano-electric behavior in cardiac tissue both from an analytical and numerical perspective. We explicitly explain the appearance of self-oscillatory regimes in terms of the system nullclines, and describe numerically the different dynamical attractors. Finally, we present the basin of attraction in terms of the system size and the strength of the electro-mechanic feedback provided by stretch-activated currents.

---

\* enrical@fa.upc.edu

<sup>1</sup> See, e.g., Focus issue: Fibrillation in normal ventricular myocardium, A. T. Winfree (ed.) *Chaos* **8**, 1 (1998).

<sup>2</sup> A. V. Panfilov, R. H. Keldermann, and M.P. Nash, *PNAS* **104**, 7922 (2007).

<sup>3</sup> H. Zhang, B.-W. Li, Z.-M. Sheng, Z. Cao, and G. Hu, *Europhys. Lett.* **76**, 1109 (2006); H. Zhang, X. S. Ruan, B. Hu, and Q. Ouyang, *Phys. Rev. E* **70**, 016212 (2004).

<sup>4</sup> See, e.g., the Special issue on Mechano-Electric Feedback and Cardiac Arrhythmias, P. Kohl, U. Ravens Eds., *Prog. Biophys. Mol. Biol.*, Vol. 82, Nos. 1-3 (2003).

<sup>5</sup> P. Kohl, P. Hunter, and D. Noble, *Prog. Biophys. Mol. Biol.* **71**, 91 (1999).

<sup>6</sup> E. Alvarez-Lacalle and B. Echebarria, *Phys. Rev. E* **79**, 031921 (2009).



## Dynamics and control of intracellular calcium dynamics in cells with RyRs

E. Álvarez-Lacalle<sup>\*</sup>, I. R. Cantalapiedra, B. Echebarría, and A. Peñaranda

*Departament de Física Aplicada, Universitat Politècnica de Catalunya, Av. Dr. Marañón 44-50, E-08028, Barcelona*

Calcium signaling in human cells plays a crucial role in a wide range of cellular mechanisms such as cell motility, enzyme regulation and muscle contraction. In cardiac muscle contraction, calcium acts as a secondary messenger which, upon entering the cell, triggers the release of further calcium ions from the sarcoplasmic reticulum (SR) of the cell. This process, known as Calcium-induced-Calcium-release (CIRC) leads to a high concentration of calcium in the cell which in turn, triggers the generation of an active force in the sarcomere.

Calcium is released from the sarcoplasmic reticulum via the ryanodine receptors (RyRs) calcium channels. In contrast with other cells which present inositol triphosphate receptor (IP3R) as calcium channels, ventricular myocytes have an extensive network of RyRs close to the cell membrane with a curved/bended geometry which makes the RyRs channels activate simultaneously and uniformly through the cytoplasm of the cell. This opens the possibility of modelling the intracellular calcium dynamics without taking into account the spatial propagation of calcium ions.

We propose an intracellular ventricular calcium dynamics model to study the evolution of the cytoplasmic calcium concentration when it is periodically stimulated by changing the membrane

potential with a certain periodicity. The model includes not only the evolution of the calcium concentration in the cytoplasm and in the SR, but also the concentration of calcium close the cell membrane and the dynamics of the RyRs channels, which trigger the CIRC mechanism. The calcium ions released close to the membrane diffuse to the cytoplasm where they are uptaken by the SR via the Sarco/Endoplasmic Reticulum  $\text{Ca}^{2+}$ -ATPase (SERCA) pumps.

The model includes all the basic ingredients to analyze how the dynamics is controlled by the parameters which define the behavior of RyRs channels and the SERCA pumps. We also demonstrate the influence of the Sodium-Calcium pump, which interchanges calcium for sodium ions from the cell into the intercellular medium, and internal diffusion in setting the normal functioning of the calcium signalling. Finally, we will address under which conditions the control mechanism fails and can lead to the generation of period doubling bifurcations. This leads to an alternate behavior (alternans) in the amplitude of the calcium concentration at successive external stimulations.

---

<sup>\*</sup> enrical@fa.upc.edu

## Transport properties of ionic liquids and their mixtures with water and CO<sub>2</sub>

J. S. Andreu and L. F. Vega\*

Molecular Simulation Group,

Institut de Ciència de Materials de Barcelona, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (ICMAB-CSIC)  
MATGAS Research Center, Campus de la UAB, s.n. 08193, Bellaterra (Barcelona)

Ionic liquids (ILs) are molten salts composed by organic and/or inorganic ions with melting points at or below room temperature. They are generally characterized by having low volatility and flammability, moderate viscosities and good thermal and electrical stability. Moreover, all these properties can be easily tuned by changing the structure of their ions in order to design ILs for specific applications. Some properties like viscosity, play an important role when these ILs are used in industrial applications. For instance, when used as a solvent, a low viscosity is generally desired to minimize pumping costs and increase mass transfer rates. Even so, the large number of ILs that can be synthesized (and mixtures of them) and the dramatic change in their properties due to some impurities make it difficult their study from the experimental as well as from the simulation point of view.

Nowadays, several ILs have been already synthesized even if the understanding of the underlying mechanisms which drive their properties is not well understood yet. Among all these ILs the alkyl-imidazolium family with the bis(trifluoromethylsulfonyl)imide anion (Tf<sub>2</sub>N) have attracted the attention of several groups thanks to its good performance as CO<sub>2</sub> absorbent and its relatively low viscosity, requirements for efficient and viable applications.

Several force fields for the alkyl-imidazolium family of ILs within different approaches have been developed by different groups<sup>1,2</sup>. Obviously, the reliability of those force fields is directly related to their accuracy when predicting, not only the main thermodynamic properties of those substances but also in a wide range of thermodynamic conditions. This fact, and also the validation of these force fields for different cations within the imidazolium family is what make them transferable and reliable for predicting their properties with good accuracy.

In this work we present results concerning the transport properties of a series of ILs based in the alkyl-imidazolium family with the Tf<sub>2</sub>N anion and its mixtures with water and CO<sub>2</sub>.

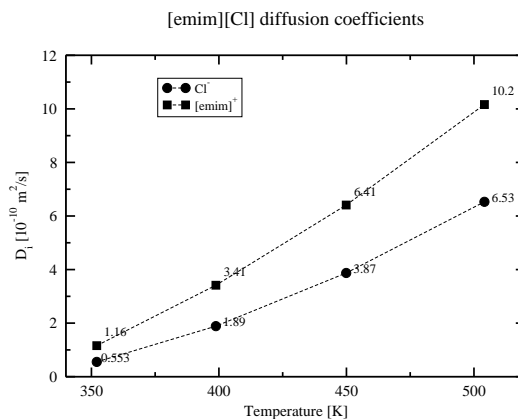


Figura 1. Self-diffusion coefficient for the [emim][Cl] at different temperatures obtained from MD simulations.

As in previous works in our group<sup>3,4</sup> we have used the Green-Kubo relationships based on the autocorrelation functions to explore the self-diffusion, the shear viscosity and electrical conductivity of a series of ILs. We have analyzed the dependence of these properties on temperature and on the alkyl-chain length of the cation for pure ILs. In addition, the effect of water and CO<sub>2</sub> on these properties was also investigated. Possible drawbacks related to the force field or to the used methodology were checked by comparison with available experimental and simulation data.

This work has been financed by the Spanish Government under project CTQ2008-05370/PPQ as well as NANOSELECT and CENIT2008-1027, a Consolider and CENIT project, respectively, both belonging to the Programa Ingenio 2010. Computational time from the Supercomputer Center of Catalonia, CESCA, is also acknowledged. JSA also acknowledges a grant from Air Products through a MATGAS project.

\* vegal@matgas.com

<sup>1</sup> J. N. Canongia Lopes and A. A. H. Padua, *J. Phys. Chem. B* **108**, 16893 (2004).

<sup>2</sup> S. M. Urahata and M. C. Ribeiro, *J. Chem. Phys.* **120**, 1855 (2004).

<sup>3</sup> C. Rey-Castro, A. L. Tormo, and L. F. Vega, *J. Phys. Chem. B* **110**, 14426 (2006).

<sup>4</sup> C. Rey-Castro and L. F. Vega, *Fluid Phase Equilib.* **62**, 256 (2007).

## Fases de cristal plástico para modelos sencillos de agua

Juan L. Aragonés\* y Carlos Vega

Departamento de Química-Física I, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid

En este trabajo de simulación molecular se presenta la aparición de dos fases de cristal plástico a altas presiones y temperaturas. En una, los oxígenos forman una estructura cúbica centrada en el cuerpo (bcc) y en la otra, una estructura cúbica centrada en las caras (fcc). En ambos casos, las moléculas de agua son capaces de rotar parcialmente libres. Se ha encontrado que cuando el cristal plástico bcc es calentado a presión constante se transforma en el cristal plástico fcc mediante una transición de fase martensítica. Se ha llevado a cabo la caracterización y localización en el diagrama de fases de estas fases de cristal plástico para los modelos de potencial de agua SPC/E, TIP4P y TIP4P/2005<sup>1</sup>. Para el modelo TIP4P/2005 se realizaron cálculos de energía libre para los cristales plásticos bcc y fcc mediante un nuevo método (una variante del método del cristal de Einstein) propuesto para este tipo de sólidos<sup>2</sup>. Para los modelos de potencial SPC/E y TIP4P los puntos de coexistencia iniciales fueron obtenidos usando integración Gibbs-Duhem Hamiltoniana. Una vez se calcularon los puntos de coexistencia iniciales, el resto de las líneas de coexistencia se obtuvieron mediante integración Gibbs-Duhem. Para todos los modelos, estas dos fases de cristal plástico aparecen en la región de altas presiones y temperaturas del diagrama de fases. Sería interesante estudiar si estas fases de cristal plástico también se encuentran para el agua real<sup>3,4</sup>. Esto serviría para arrojar algo de luz sobre la cuestión de si estos modelos son capaces de describir satisfactoriamente la región de altas presiones del diagrama de fases del agua, y dónde

y por qué fallan.

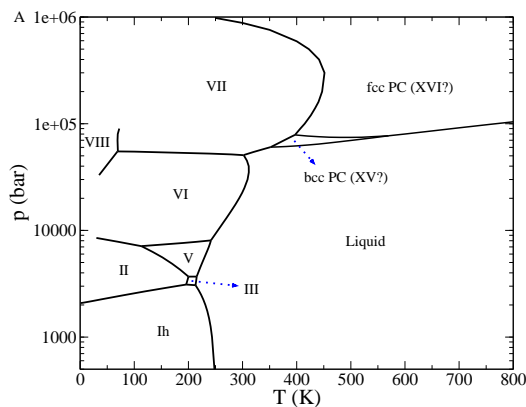


Figura 1. Diagrama de fases para el modelo TIP4P/2005.

\* juan@ender.quim.ucm.es

- <sup>1</sup> J. L. F. Abascal y C. Vega, *J. Chem. Phys.* **123**, 234505 (2005).
- <sup>2</sup> J. L. Aragonés, M. M. Conde, E. G. Noya y C. Vega, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**, 543 (2009).
- <sup>3</sup> D. H. Dolan, M. D. Knudson, C. A. Hall y C. Deeney, *Nature Physics* **3**, 339 (2007).
- <sup>4</sup> B. Schwager y R. Boehler, *High Pressure Res.* **28**, 431 (2008).

## Helicity conservation and persistence of entanglement in reaction-diffusion systems

M. Arrayás\* and J. L. Trueba

Área de Electromagnetismo, Universidad Rey Juan Carlos, Camino del Molino s/n, 28943 Fuenlabrada, Madrid, Spain

We show that a global description of the stability of entangled structures in reaction-diffusion systems can be made by means of a helicity integral. A vorticity vector field is defined for these systems, as in electromagnetism or fluid dynamics. We have found under which conditions the helicity is conserved or lost through the boundaries of the medium, so the entanglement of structures observed are preserved or disappear during time evolution. We illustrate the theory with an example of knotted entanglement in a FitzHugh-Nagumo model. For this model we introduce new non-trivial initial conditions using the Hopf fibration and follow the time evolution of the entanglement.

Many physical phenomena giving rise to natural patterns can be understood in terms of a short-range self-enhancing reaction between two species (or reactions) coupled with transport<sup>1</sup>. A reaction-diffusion (RD) system combines Fick's law of diffusion with a kinetic reaction rate term. Examples of such systems arise in the phenomenological theory of superconductivity known as Ginzburg-Landau equations<sup>2</sup>, chemical reaction waves<sup>3</sup>, optics<sup>4</sup>, models of cardiac fibrillation<sup>5,6</sup>, etc. One of the most interesting aspects of RD systems in a three dimensional space is that they support vortices, called spiral or scroll waves. Spiral waves are characterized by the fact that they rotate around a topological point defect called phase singularity or rotor. Since spiral waves are the cross sections of a scroll wave, the phase singularity can be interpreted as the cross section of a filament in three dimensions. These curves can be linked or constitute knots. In numerical experiments, it was found that there are configurations which present an unusual stability for those phase singularities<sup>7</sup>. The stability of phase singularities has been analyzed locally<sup>8</sup>, however definitive conclusions on its global behaviour have not been obtained.

An alternative approach to this problem could come from the study of non-local mechanisms that allow certain topological invariants of the organizing centres to be conserved. There are preliminary studies

on topologically non-trivial field configurations in the literature<sup>9,10</sup>. Examples are the work by Berry and Dennis<sup>11</sup> on phase singularities in the Helmholtz equation or studies on the stability of ball lightning<sup>12,13</sup>.

In this work we introduce a vorticity vector field for any reaction-diffusion system that includes all the information about the global entanglement. We define a helicity integral of the vorticity vector field in analogy to Moffatt's vortex helicity<sup>14</sup>. We then prove that the persistence of entanglement in the RD system depends on the conservation of the helicity. We give the conditions to be fulfilled for the conservation of the helicity, that depend on the boundary conditions in a non-trivial way. In order to illustrate how this mechanism works a new case of knotted entanglement in the FitzHugh-Nagumo model is provided.

---

\* manuel.arrayas@urjc.es

<sup>1</sup> R. Satnoianu, in *Encyclopedia of Nonlinear Science*, ed. A. Scott, pp. 783-789 (Routledge, New York, 2005).

<sup>2</sup> V. L. Ginzburg and L. D. Landau, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950).

<sup>3</sup> M. Ipsen, L. Kramer, and P. G. Sorensen, *Phys. Rep.* **337**, 193 (2000).

<sup>4</sup> F. T. Arecchi, S. Bocaletti, and P. Ramazza, *Phys. Rep.* **318**, 1 (1999).

<sup>5</sup> R. A. Gray, J. Jalife, A. V. Panfilov, W. T. Baxter, C. Cabo, J. M. Davidenko, and A. M. Pertsov, *Science* **270**, 1222 (1995).

<sup>6</sup> A. T. Winfree, *Science* **266**, 1003 (1994).

<sup>7</sup> A. T. Winfree, *Phys. D* **84**, 126 (1995).

<sup>8</sup> J. P. Keener, *Phys. D* **31**, 269 (1988).

<sup>9</sup> J. F. Nye, *J. Opt. Soc. Am. A* **15**, 1132 (1998).

<sup>10</sup> P. M. Sutcliffe and A. T. Winfree, *Phys. Rev. E* **68**, 016218 (2003).

<sup>11</sup> M. W. Berry and M. R. Dennis, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34**, 8877 (2001).

<sup>12</sup> A. F. Rañada and J. L. Trueba, *Nature* **383**, 32 (1996).

<sup>13</sup> A. F. Rañada, M. Soler, and J. L. Trueba, *Phys. Rev. E* **62**, 7181 (2000).

<sup>14</sup> H. K. Moffatt, *J. Fluid Mech.* **35**, 117 (1969).

## Polímeros en flujos de cizalla. Movimientos cíclicos

F. Balboa Usabiaga y R. Delgado-Buscalioni

*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid*

Los polímeros inmersos en fluidos son sistemas complejos que en los últimos años están siendo estudiado por grupos experimentales y teóricos. Por medio de los modelos de Rouse y Zimm para polímeros gaussianos se han obtenido propiedades muy relevantes como los tiempos de relajación o el radio de giro; sin embargo, las simulaciones están siendo fundamentales para cadenas dentro de flujos o con comportamientos no lineales. Nosotros nos hemos centrado en un flujo de cizalla como el que se puede formar para fluidos circulando dentro de un canal. En este sistema el polímero realiza volteos sobre sí mismo debido a la fuerza de arrastre del fluido<sup>1</sup>. Se sabe que el tiempo medio entre volteos decrece con el número de Weissenberg ( $Wi$ , intensidad de la cizalla normalizada al tiempo de relajación del polímero) y que la probabilidad de realizar volteos a tiempos altos decae exponencialmente. Sin embargo hasta ahora no se ha explicado de forma simultánea la probabilidad de realizar volteos a tiempos cortos y largos.

Hemos realizado simulaciones de dinámica browniana con interacciones hidrodinámicas. Seguimos el método desarrollado por otros autores, en el que la interacción hidrodinámica se introduce a través del tensor de difusión de Rotne-Prager-Yamakawa y para el ruido térmico se usa la aproximación polinómica de Chebyshev<sup>2</sup>. Nosotros reducimos el problema a una ecuación estocástica para una variable angular  $\phi$  que determina cuándo se produce un volteo. Obteniendo a partir de la simulación un pseudopotencial y una fuente de ruido para esta variable podemos aplicar las teorías de ecuaciones estocásticas para explicar los tiempos de volteo.

---

<sup>1</sup> S. Gerashchenko y V. Steinberg, Phys. Rev. Lett. **96**, 038304 (2006).

<sup>2</sup> R. M. Jendrejack, M. D. Graham y J. J. de Pablo, J. Chem. Phys. **113**, 2894 (2000).

## The chaos within: A non-linear attractor for Earth's geomagnetism

David Becerra Alonso

*Computing Department, University of the West of Scotland, High St, Paisley, PA12EU, United Kingdom*

In 1972, W.V.R. Malkus invented and constructed the waterwheel that bears his name, along with a publication on toroidal convection that presents the same dynamics. The waterwheel was intended as a lab device capable of resembling the behaviour of the equations published a decade before by E. Lorenz. These equations and the discovery of systems with sensitive dependence on the initial conditions, lay the foundations of a few of the main aspects of chaotic behaviour in dynamical systems. Though simple in its conception, Malkus' waterwheel is not completely intuitive in its performance. Since it was first proposed, many experimental and real-world applications for the waterwheel where also presented.

A series of lab and natural phenomena share the dynamics of Malkus' Waterwheel: Electro-rotation (see Lemaire), Haline Oceanic Flow (see Huang), Rayleigh-Benard Convection (see Brown). In this poster, the general equations of geomagnetism are proposed to be derived and reduced to a spherical extension of Malkus' waterwheel. Numerical results show how dynamics of the regular waterwheel already show a first order approximated resemblance to the excursions and reversals of the Earth's magnetism.

---

## Detección y caracterización automática de la actividad espacio-temporal de calcio intracelular en cardiomiocitos

Raúl Benítez\*, Enrique Álvarez-Lacalle, Montserrat Barriga, Anna Llach, Juan Cinca y Leif Hove-Madsen  
 Departamento de Ingeniería de Sistemas, Automática e Informática Industrial, Universitat Politècnica de Catalunya,  
 C/ Compte d'Urgell 187, 08036 Barcelona  
 Servicio de Cardiología y Centro de Investigación Cardiovascular CSIC-ICCC, Hospital de Sant Pau, Barcelona

La distribución espacio-temporal del calcio intracelular en miocitos cardíacos determina el acoplamiento electro-mecánico que se produce durante la contracción del corazón. Los recientes avances en técnicas de microscopía confocal de fluorescencia permiten obtener secuencias de imágenes experimentales a frecuencias de muestreo de 5–10 milisegundos, y por tanto resolver temporalmente la dinámica del calcio. Entre los eventos de liberación de calcio, los más relevantes son las espículas de calcio (calcium sparks) y las ondas de calcio que se producen en el interior de la célula.

El objetivo de este estudio es desarrollar un sistema de procesamiento que, a partir de secuencias de imágenes experimentales, permita detectar y caracterizar el tamaño, la cinética y la frecuencia de sparks y ondas de calcio en miocitos auriculares humanos. El sistema de detección desarrollado combina técnicas de procesamiento estadístico de señal con métodos de análisis wavelet, permitiendo identificar y caracterizar los patrones espacio-temporales en los niveles de calcio. En concreto, el algoritmo normaliza las imágenes con el promedio de cada píxel durante la secuencia, y utiliza la distribución estadística de los píxeles para determinar las potenciales regiones de interés. Finalmente, la transformada wavelet es utilizada para determinar la localización temporal de los eventos e identificar la estructura espacio-temporal de los sparks.

El sistema de detección desarrollado ha sido aplicado a secuencias de imágenes de 22 miocitos auriculares aislados de la aurícula derecha de 9 pacientes sometidos a cirugía cardíaca. El sistema detectó sparks con una eficacia de  $131 \pm 23\%$  frente a la detección manual por parte de un técnico especializado, presentando una fracción de falsas alarmas del  $12 \pm 5\%$  y una tasa de

omisiones del  $4 \pm 3\%$ .

Los sparks detectados presentan un diámetro medio (FWHM) de  $3.33 \pm 0.26$  micras y una constante de tiempo de relajación media de  $115 \pm 8$  ms. Adicionalmente, se ha observado que incrementando el potencial de membrana de  $-80$  mV a  $-50$  mV se produce un aumento significativo en la frecuencia de sparks de  $6.0 \pm 1.2$  a  $11.8 \pm 4.7$  sparks por minuto y célula. De forma similar, las ondas de calcio pasan de no estar presentes a aparecer con una frecuencia de  $6.5 \pm 1.9$  ondas por minuto y célula.

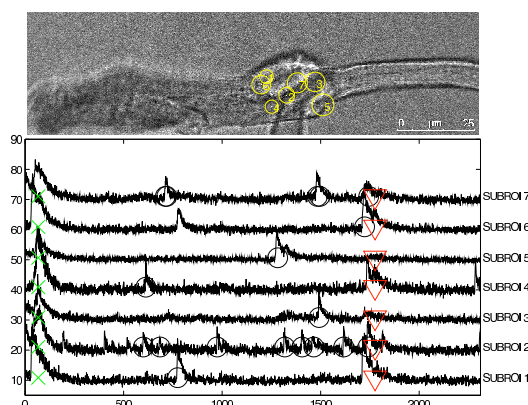


Figura 1. Panel superior: Imagen del miocito indicando las regiones en las que se han detectado sparks. Panel inferior: Evolución temporal de calcio en cada una de las regiones de la imagen superior. Los círculos indican los sparks detectados y las cruces las ondas de calcio.

\* raul.benitez@upc.edu

<sup>1</sup> H. Cheng *et al.*, *Biophys. J.* **2**, 606 (1999).

<sup>2</sup> L. Hove-Madsen *et al.*, *Cardiovasc. Res.* **2**, 292 (2006).

## Monodisperse bubble suspensions in turbulent flows in microgravity. Drop tower experiments

Pau Bitlloch<sup>†\*</sup>, Xavier Ruiz<sup>‡¶</sup>, Laureano Ramírez-Piscina<sup>§¶</sup>, and Jaume Casademunt<sup>†¶</sup>

<sup>†</sup> *Universitat de Barcelona, Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, 08028 Barcelona*

<sup>‡</sup> *Universitat Rovira i Virgili, Departament de Física Aplicada, 43005 Tarragona*

<sup>§</sup> *Universitat Politècnica de Catalunya, Departament de Física Aplicada, 08034 Barcelona*

The physics of bubbly flows in the absence of gravity is very different from that of a neutrally buoyant colloidal suspension (which could be studied in normal gravity), in several crucial aspects: (i) the slip boundary condition in a bubble has strong implications in the generation of vorticity and thus the resulting effective drag on the bubbles; (ii) bubbles are in principle deformable through their interaction with the carrying flow; (iii) bubbles can coalesce and break-up. In addition, given the difficulty to generate bubbles of controlled size in the absence of buoyancy, there is virtually no experimental information on the physics of monodisperse bubble suspensions in microgravity. On the other hand, the numerical difficulty to accurately simulate two-phase flows is well-known in general, but in particular if the carrying flow is turbulent. The problem nevertheless is of primary importance for the rocket industry and for Life Support Systems in space.

Recently, a series of microgravity experiments in the ZARM Drop Tower in Bremen<sup>1</sup> have introduced a new method of bubble generation (later tested also in Parabolic Flights<sup>2</sup> and on ground<sup>3</sup>), which is insensitive to gravity and which is capable to inject large numbers of virtually monodisperse bubbles of prescribed size into a liquid cavity in the absence of gravity. It is thus possible for the first time to study monodisperse bubble suspensions in microgravity.

During 2009 a new experimental set-up is being constructed and tested in the ZARM Drop Tower, which provides 4,7 seconds of high quality microgravity. This new experiment has scheduled 36 drops, in which a combination of four injectors of the type of Ref.<sup>1</sup> will produce an approximately uniform bubble suspension in a co-flow pipe with Reynolds number up to 20000. The conditions are designed such that typical bubble sizes (1.5 mm) are larger than the Kolmogorov cut-off length, but smaller compared to the most energetic eddies (typically 10 mm), which are in turn smaller than the pipe width (100 mm). These parameters are optimized so that bubbles have a significant interaction with the turbulence, but are efficiently spread through the pipe with minimal degree of coalescence. The Weber number is also sufficiently small so that the bubbles are spherical (but not point-like). The regime studied is interesting from a fundamental perspective within the

theory of turbulence and lies outside the accessibility of any of the possible analytical approximations.

At the same time, large scale numerical simulations of the same problem are being carried out within a Lattice-Boltzmann numerical scheme, following a specific implementation for the case of spherical, non-coalescing bubbles<sup>4</sup>. The interplay and mutual feedback between the numerics and the experiments is of crucial importance to gain theoretical insights and a fundamental understanding of a challenging problem of great relevance to space technology.



Figure 1. Jet of bubbles in a cubic cavity of 10 cm side in microgravity conditions<sup>1</sup> from a drop tower experiment.

\* bitlloch@ecm.ub.es

¶ Institut d'Estudis Espacials de Catalunya (IEEC), 08034 Barcelona

<sup>1</sup> J. Carrera, X. Ruiz, L. Ramírez-Piscina, J. Casademunt, and M. Dreyer, *AIAA J.* **46**, 2010 (2008).

<sup>2</sup> S. Arias, R. González-Cinca, X. Ruiz, J. Casademunt, and L. Ramírez-Piscina, 47th ESA Parabolic Flight Campaign (2007).

<sup>3</sup> S. Arias, X. Ruiz, J. Casademunt, L. Ramírez-Piscina, and R. González-Cinca, *Microgravity Sci. Tec.* **21**, 107 (2009).

<sup>4</sup> X. Yin, D. L. Koch, and R. Verberg, *Phys. Rev. E* **73**, 026301 (2006).



## Quasi-deterministic collective ratchets. Some exact results

Carles Blanch\*, Javier G. Orlandi, and Jaume Casademunt

*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de Barcelona, Avinguda Diagonal 647, E-08028 Barcelona, Spain*

It has been recently emphasized that, in the context of intracellular transport, cooperativity of relatively small numbers of processive motor proteins is necessary to pull on cargoes that are deformable and bounded by a fluid-like membrane (such as vesicles or endoplasmic reticulum tubes)<sup>1</sup>. This cooperativity arises from the crucial fact that the external load can only be applied on one or a few of the leading motors, while other motors cooperate by exerting force directly on them, not on the cargo, through their mutual interactions<sup>2,3</sup>. This arrangement of unequal loading of a group of motors that interact but are free to move relative to each other has been shown to give rise to remarkable and nontrivial cooperative phenomena, such as nonmonotonic velocity-force curves or strong increase of collective efficiency<sup>4</sup>.

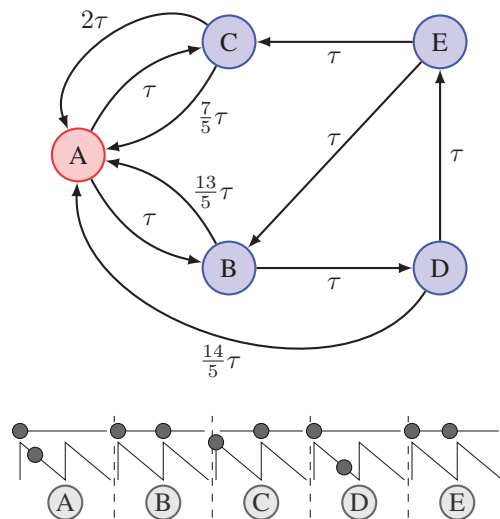


Figure 1. Example of graph of configurations of a two motor system for a given external load. At each state the system chooses with probability 1/2 between the two outgoing possibilities, each one contributing a different duration and displacement.

Here we study the origin of this enhanced cooperativity by defining the simplest possible Brownian ratchet model for such situation. We restrict to the limit of vanishing noise strength (quasi-deterministic) where the ratchet effect of a single motor vanishes, and show how new mechanisms of motor cooperativity take place. The collective action of the motors can then overcome a given finite force with a finite positive velocity (thus performing work) in situations where a single motor would move backwards. This is a strong deviation from a mean-field

type analysis, that would predict that the velocity of a couple of motors  $V_2(F)$  under a force  $F$  would be that of a single motor  $V_1(F/2)$  at half the force. For the case of two motors we find several exact results for the stall force and the speed at zero load. We also prove that, for wide ranges of parameters, enhanced cooperativity, defined by the inequality  $V_N(F) > V_1(F/N)$  or, equivalently  $F_N(V) > NF_1(V)$  is the rule.

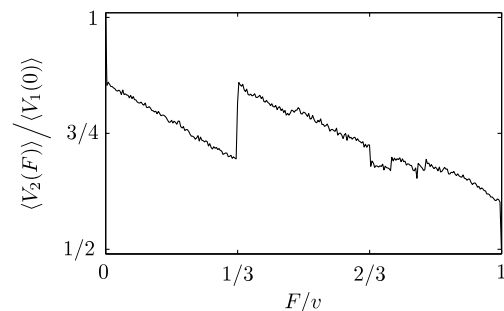


Figure 2. Velocity of a motor pair normalized to the single-motor velocity at zero load, in the limit of vanishing noise as a function of external load normalized to the stall force, for a representative set of parameters

Remarkably, in the quasi-deterministic limit we show that the collective dynamics can be mapped into a random walk on a (weighted) graph, and reduce the calculation of the velocity-force curve to a summation on that graph (see Fig. 1). This computation can be carried out exactly in some cases and in general by Monte Carlo sampling of the graph with arbitrary accuracy. For a given parameter set, the span of the external load describes a family of graphs. Topological changes in the graph produce discontinuities of the velocity-force curve, and induces a complex structure of that curve (see Fig. 2). Unfolding the mathematical structure behind the phase space of such quasi-deterministic ratchets may yield a deeper understanding of the cooperativity mechanisms of interacting molecular motors.

\* blanch@ecm.ub.es

<sup>1</sup> C. Leduc, O. Campàs, K. B. Zeldovich, A. Roux, P. Jolimitre, L. Bourel-Bonnet, B. Goud, J. Joanny, P. Basserau, and J. Prost, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **101**, 17096 (2004).

<sup>2</sup> O. Campàs, Y. Kafri, K. B. Zeldovich, J. Casademunt, and J.-F. Joanny, Phys. Rev. Lett. **97**, 038101 (2006).

<sup>3</sup> O. Campàs, C. Leduc, P. Basserau, J. Casademunt, J.-F. Joanny, and J. Prost, Biophys. J. **94**, 5009 (2008).

<sup>4</sup> J. Brugués and J. Casademunt, Phys. Rev. Lett. **102**, 118104 (2009).

## Probabilidad de supervivencia de partículas subdifusivas rodeadas de un mar $d$ -dimensional de trampas subdifusivas

R. Borrego Marín\*, E. Abad Jarillo y S. Bravo Yuste  
*Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06011 Badajoz*

En el presente trabajo calculamos el valor asintótico para tiempos grandes de la probabilidad de supervivencia de una partícula subdifusiva inmersa en un mar de trampas subdifusivas  $d$ -dimensional con  $d = 2$  y  $d = 3$ . Suponemos que la densidad de la trampas es constante en el tiempo. Generalizamos así los resultados obtenidos recientemente para  $d = 1$  con partículas subdifusivas y trampas subdifusivas<sup>1</sup> y, para cualquier dimensión, con trampas subdifusivas y partículas difusivas<sup>2</sup>.

Este problema, cuando las partículas y trampas se difunden de forma normal, ha sido objeto de un intenso estudio desde hace más de 40 años. Ya en la década de los 70, Balagurov, Vaks, Donsker and Varadhan publicaron su trabajo sobre la cinética del problema del *trapping* en un medio en el que las trampas no se mueven y ocupan posiciones aleatorias. Demostraron que la probabilidad de supervivencia de una partícula difusiva en un medio  $d$ -dimensional  $P(t)$  decrece con el tiempo mediante la ley:

$$P(t) \sim \exp[-k_d \rho^{\frac{2}{d+2}} (D_A t)^{\frac{d}{d+2}}] \quad (1)$$

donde  $\rho$  es la densidad de trampas,  $D_A$  es el coeficiente de difusión de la partícula, y  $k_d$  una constante que depende de  $d$ . Balagurov y Vaks obtuvieron  $P(t)$  de forma exacta para  $d = 1$ . Donsker y Varadhan fueron los primeros en obtener una solución exacta para cualquier dimensión  $d$ . Observemos que esta ley contrasta con el decaimiento exponencial puro predicho para la cinética química estándar de la reacción  $A+B \rightarrow B$  con partículas y trampas móviles. También contrasta con el modelo de Smoluchowski, el cuál es la base teórica del estudio de las reacciones controladas por difusión. Según el modelo de Smoluchowski para  $d = 3$  se cumple que:

$$P(t) \sim \exp(-kt) \quad (2)$$

donde  $k$  es una constante positiva.

Los primeros resultados sobre la probabilidad de supervivencia de una partícula  $A$  rodeada de trampas  $B$  cuando las dos especies son difusivas fueron realizados por Toussaint y Wilczek. Nuestro objetivo ahora es extender estos resultados para  $d = 2$  y  $d = 3$  con trampas y partículas subdifusivas. Sea  $\gamma$  [ $\gamma'$ ] el exponente de subdifusión de las trampas [partícula] definidos por la relación  $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$  [ $\langle r^2 \rangle \sim t^{\gamma'}$ ], siendo  $\langle r^2 \rangle$  el desplazamiento cuadrático medio. Para  $t$  grande y  $d = 2$  obtenemos:

$$\ln(P(t)) \sim -\frac{\omega \rho k_\gamma t^\gamma}{\ln(4k_\gamma t^\gamma)} \quad (3)$$

Para  $t$  grande y  $d = 3$  obtenemos

$$\ln(P(t)) \sim -\omega \rho k_\gamma t^\gamma \quad (4)$$

donde  $k_\gamma$  es la constante de difusión y  $\omega$  es una constante que depende de  $\gamma$  y del medio.

Además de obtener analíticamente estos resultados, hemos realizado simulaciones por ordenador de este sistema físico. Los resultados obtenidos en las simulaciones concuerdan bien con los resultados teóricos (véase la Fig.1).

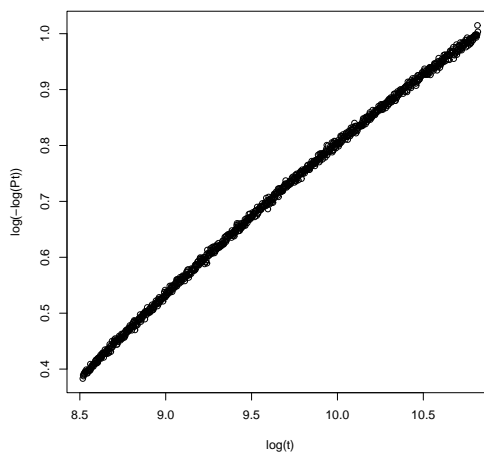


Figura 1. Sistema físico con parámetros  $\gamma = 0.25$ ,  $\gamma' = 0.5$ ,  $\rho = 0.05$ ,  $d = 2$ . La pendiente teórica es igual a  $\gamma = 0.25$  y la del ajuste lineal a los datos de la simulación es 0.26.

\* rafaborrego@unex.es

<sup>1</sup> S. B. Yuste y K. Lindenberg, Phys. Rev. E **72**, 061103 (2005).

<sup>2</sup> S. B. Yuste, G. Oshanin, K. Lindenberg, O. Bénichou y J. Klafter, Phys. Rev. E **78**, 021105 (2008).

<sup>3</sup> R. A. Blythe y A. J. Bray, Phys. Rev. E **67**, 041101 (2003).

## Influence of the flexibility of the force field model on the adsorption of greenhouse gases

Santiago Builes<sup>†‡</sup>, Aurelio Olivet<sup>†‡</sup>, and Lourdes F. Vega<sup>†‡§\*</sup>

<sup>†</sup> *MATGAS Research Center, Campus UAB, 08193 Bellaterra, Barcelona*

<sup>‡</sup> *Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (ICMAB-CSIC),  
Campus UAB, 08193 Bellaterra, Barcelona*

<sup>§</sup> *Carburos Metálicos - Air Products Group, Campus UAB, 08193 Bellaterra, Barcelona*

Social awareness and legal requirements have increased in recent years the concern about the effects of greenhouse gases (GHG), especially since the establishment of their reduction and/or alternatives set by the Kyoto protocol and the IPCC reports. Carbon dioxide is the most abundant GHG that is produced as a result of human activities, thus research on reduction of emissions of GHGs has focused largely on CO<sub>2</sub>. Furthermore it is important to study other trace GHG such as freons and SF<sub>6</sub> because, although their concentrations in the atmosphere are very low compared to CO<sub>2</sub>, they have larger greenhouse potential<sup>1</sup>. Hence research is focused not only on CO<sub>2</sub> capture, but also in capturing all GHGs with high efficiency.

The adsorption of gases in a porous adsorbent is one of the most promising mid-term alternatives to achieve this reduction<sup>2</sup>. The design and optimization of adsorption processes for GHG require an understanding of the physics behind them, which can be achieved by using molecular simulations. In fact, molecular simulations relate the microscopic behavior of the molecules during the adsorption process to the macroscopic behavior of the system, allowing one to search for the best materials for separating a mixture of gases. However, in order to precisely reproduce the adsorption process, simulations require an accurate model capable of describing the behavior of the molecules inside the adsorbent.

We present here results concerning the adsorption behavior of two GHG, carbon dioxide and sulfur hexafluoride, by carrying out Grand Canonical Monte Carlo simulations on simple adsorbent materials. The objective of the work is to check the influence of the force field used for the fluid on the final behavior in the confined system. A second objective is to check the accuracy of the model to predict experimental results.

We have applied GCMC simulations to different flexible and rigid representations of the CO<sub>2</sub> and the SF<sub>6</sub> molecules. Three different representations were used

to model the SF<sub>6</sub> molecule: (i) a simple one-site LJ potential, (ii) the rigid anisotropic force field proposed by Pawley<sup>3</sup>, and (iii) the flexible anisotropic force field proposed by Olivet and Vega<sup>4</sup>. In order to model the absorbent phase a simplified cylindrical pore representation of the Mobil Catalytic Material MCM-41 material has been used. Likewise, three models were used for the CO<sub>2</sub> molecule: (i) a one-site LJ potential; (ii) a rigid three-sites forcefield, TraPPE, proposed by Potoff and Siepmann; and (iii) a flexible three-site forcefield based on TraPPE<sup>5</sup>. The adsorbent phase is a porous carbon modeled as a slit pore.

One of the most interesting conclusions of this work is that the pressure for the formation of the monolayer is higher for the flexible model for all the cases studied. We have also found that at near critical conditions the predictions of the model can be improved if the reduced temperature, the actual temperature divided by the critical temperature predicted by the model, is used as the input data instead of the temperature.

This work has been financed by the Spanish government under project CTQ2008-05370/PPQ as well NANOSELECT and CEN2008-01027, a Consolider and a CENIT project, respectively, both belonging to the Programa Ingenio 2010. Computational time from the Supercomputer Center of Catalonia, CESCA, is also acknowledged.

---

\* vegal@matgas.com

<sup>1</sup> D. Archer, *Global Warming. Understanding the Forecast*, p 194 (Blackwell Publishing Ltd: Oxford, UK, 2006).

<sup>2</sup> D. Aaron and C. Tsouris, *Separ. Sci. Technol.* **40**, 321 (2005).

<sup>3</sup> G. S. Pawley, *Mol. Phys.* **43**, 1321 (1981).

<sup>4</sup> A. Olivet and L. F. Vega, *J. Chem. Phys.* **126**, 144502 (2007).

<sup>5</sup> W. Shi and E. J. Maginn, *J. Phys. Chem. B* **112**, 2045 (2008).

## Evolución de cuasiespecies moleculares sobre redes neutrales: respuesta dinámica a presiones de selección opuestas

Jacobo Aguirre<sup>†</sup>, Javier M. Buldú<sup>‡</sup>, Michael Stich<sup>†</sup> y Susanna C. Manrubia<sup>†</sup>

<sup>†</sup> Centro de Astrobiología (INTA-CSIC) Ctra. de Ajalvir km. 4, 28850 Torrejón de Ardoz, Madrid

<sup>‡</sup> Universidad Rey Juan Carlos, c/ Tulipán s/n, 28933 Móstoles, Madrid

La dinámica adaptativa de poblaciones naturales se sustenta sobre una propiedad no siempre considerada en los modelos evolutivos: la degeneración existente entre genotipo y fenotipo. Este aspecto no está incluido, por ejemplo, en la teoría clásica de cuasiespecies, donde se habla de un *genotipo maestro* y de una *nube de mutantes* que lo acompaña y es generada de forma continua a partir del primero. Una consecuencia inmediata de esta suposición es la existencia de un umbral de error para la tasa de mutación por encima del cual la cuasiespecie no puede mantener su identidad biológica<sup>1</sup>. Efectivamente, una tasa de mutación elevada limita la longitud de las secuencias (o los genomas) que pueden transmitir información genética de manera fiable. Sin embargo, la restricción en la longitud es más débil cuando se toma en consideración que la selección actúa sobre el fenotipo. La astronómica degeneración existente entre genotipo y fenotipo define regiones de distinta *neutralidad* en el espacio de genomas. En una imagen algo simplificada podemos asociar zonas de alta conectividad, donde muchos genomas parecidos dan lugar al mismo fenotipo, con regiones donde el efecto de las mutaciones se reduce. Estos dominios de alta neutralidad son finalmente localizados y ocupados, a tiempo suficientemente largo, por toda población que evoluciona en un ambiente constante.

Un buen modelo de la relación entre genotipo y fenotipo viene dado por secuencias de RNA plegadas en su estructura secundaria<sup>2</sup>. Todas las secuencias que pliegan en la misma estructura  $S$  definen la red neutral correspondiente a  $S$ . Las secuencias son los nodos de la red, y dos secuencias  $i$  y  $j$  están conectadas si sólo difieren en un nucleótido, es decir, si el paso de una a otra implica una mutación puntual. Así se define la matriz de adyacencia  $A_{ij}$ . Si suponemos que la estructura secundaria representa una aproximación aceptable a la función molecular, una población de secuencias puede moverse sobre esta red sin ver su funcionalidad afectada, teniendo de esta forma acceso a grandes porciones del espacio de genomas. En ausencia de otras presiones selectivas, la población selecciona una zona de máxima

neutralidad que está caracterizada por el radio espectral de  $A_{ij}$ <sup>3</sup>.

Hemos estudiado la dinámica de poblaciones de secuencias sujetas a replicación y mutación sobre redes neutrales artificiales. Las propiedades topológicas de la red y el estado inicial de la población determinan el tiempo  $T$  necesario para alcanzar los estados de máxima neutralidad, dependiente de los valores propios no principales de  $A_{ij}$ . A continuación hemos caracterizado cada secuencia por la energía correspondiente a su configuración plegada (que depende de su composición) y hemos introducido un parámetro de desorden  $\beta$ . A medida que  $\beta$  aumenta desde valor cero (caso de todos los nodos idénticos) a valores mayores se observa una transición de la población de las zonas de máxima neutralidad a las de mínima energía (secuencias más estables en su estado plegado). La topología de la red neutral y la distribución de energías sobre la misma no son factores separables. Ambas afectan el estado de la población y determinan, para cada valor de  $\beta$ , cuál es la presión de selección dominante<sup>4</sup>. Finalizaremos con la presentación de las propiedades de algunas redes neutrales de RNA obtenidas mediante enumeración exhaustiva del espacio de genomas, y discutiendo la relación entre neutralidad y energía en estas redes naturales.

Este estudio ilustra cómo las tensiones derivadas de presiones de selección de distinto signo pueden condicionar la diversidad genómica y la dinámica de poblaciones cuando existe una degeneración significativa entre genotipo y fenotipo. En último término, éste es un ejemplo de cómo relacionar el nivel microscópico con el macroscópico en la dinámica adaptativa de cuasiespecies.

<sup>1</sup> M. Eigen, *Naturwissenschaften* **58**, 465 (1971).

<sup>2</sup> P. Schuster, *Rep. Prog. Phys.* **69**, 1419 (2006).

<sup>3</sup> E. van Nimwegen, J. P. Crutchfield y M. Huynen, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **96**, 9716 (1999).

<sup>4</sup> J. Aguirre, J. Buldú y S. C. Manrubia (preprint, 2009).

## Una teoría de percolación para la extinción viral

José A. Capitán<sup>†\*</sup>, Jacobo Aguirre<sup>‡</sup>, Susanna C. Manrubia<sup>‡</sup> y José A. Cuesta<sup>†</sup>

<sup>†</sup> *GISC y Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid, Avda. de la Universidad 30, 28911 Leganés, Madrid*

<sup>‡</sup> *Centro de Astrobiología, CSIC-INTA, Ctra. de Ajalvir km. 4, 28850 Torrejón de Ardoz, Madrid*

El fenómeno de la extinción viral a través de la llamada *mutagénesis letal* ha sido objeto de estudios recientes<sup>1</sup>. Este fenómeno consiste en el decrecimiento del *fitness* (entendido como la progenie por generación y genoma) de una población al aumentar la tasa de mutación mediante sustancias que actúan como mutágenos. Este hecho ha sido interpretado dentro del marco de la teoría de *cuasi-especies* de Eigen<sup>2</sup>, según la cual las poblaciones virales tienden a un equilibrio heterogéneo en el que distintas clases de fitness permanecen en proporción constante, aunque se estén continuamente seleccionando y sufriendo sucesivas mutaciones. La teoría predice la llamada *catástrofe de error*, que es la desaparición del tipo de mayor fitness (la llamada “master class” o *clase maestra*) cuando la tasa a la que se replica es menor que la de la clase mutante. Hay un umbral de error, que es el valor de la probabilidad de mutación para el que desaparece la clase maestra. Por tanto, este umbral se puede relacionar con la mutagénesis letal, ya que el efecto de incrementar el mutágeno podría hacer que se cruzase dicho umbral, dando lugar a la extinción de la clase maestra. Sin embargo, experimentalmente se observa que la población completa de virus (no sólo la clase maestra) puede llegar a extinguirse. Además, el modelo original de Eigen sólo tiene en cuenta mutaciones deletéreas (desfavorables, que decrecen el fitness), y es mucho más realista considerar también mutaciones favorables.

Basándonos en un trabajo reciente<sup>1</sup>, proponemos un modelo de extinción viral que tiene en cuenta los efectos de competición espacial cuando la infección se propaga bidimensionalmente. El modelo está inspirado en los resultados que se observan experimentalmente al estudiar la mutagénesis en placas de Petri: se forman unas pequeñas regiones puntuales (placas de lisis), formadas por unas cuantas monocapas celulares, donde cada célula ha sido infectada por el virus. La difusión de mutantes va haciendo que la placa de lisis crezca y, cuando la propagación es suficiente, el crecimiento de la placa se concentra en el contorno y se aproxima por un frente plano.

La característica fundamental de este modelo es que no tiene umbral de error y predice una transición de fase conforme se incrementan las tasas de mutación. El proceso se inicia cuando un virión (con, a lo sumo,  $F$  clases de fitness posibles) comienza a replicarse en una célula susceptible, y muta de acuerdo con dos tasas:  $p$  (mutación deletérea, pasa de fitness  $f$  a  $f - 1$ ) y  $q \ll p$  (mutación favorable, pasa de  $f$  a  $f + 1$ ). La célula en cuestión puede morir y liberar los virus mutantes, que se

difunden en el medio y vuelven a infectar células sanas con probabilidad  $\pi$ .

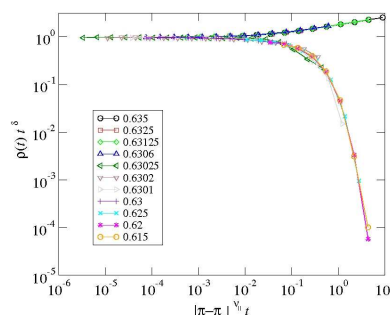


Figura 1. Colapso de curvas cerca de la transición utilizando los exponentes numéricos de DP ( $p = 0.25$ ,  $q = 0.01$ ).

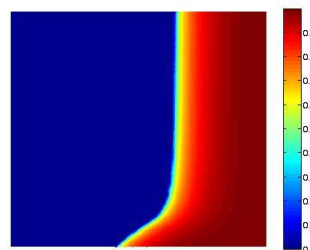


Figura 2. Línea de transición entre fase inactiva ( $\rho = 0$ , izquierda) y fase activa ( $\rho \neq 0$ , derecha) para una tasa de mutación  $q = 0.02$ . El eje  $X$  representa  $\pi$ , y el eje  $Y$  es  $p$ .

La propagación en el contorno de la placa de lisis se ha modelado mediante un autómata celular unidimensional, con ciertas reglas probabilísticas que son función de  $p$ ,  $q$  y  $\pi$ . Para este autómata, la conjetura de *percolación dirigida* (DP) sugiere que el modelo pertenece a esa clase de universalidad. Numéricamente hemos determinado la transición de fase, y utilizando los exponentes numéricos de DP demostramos que este modelo pertenece a dicha clase de universalidad (Fig. 1). Además, hemos calculado las líneas de transición (Fig. 2) en todo el espacio de parámetros  $(p, \pi)$  y hemos realizado diversas aproximaciones analíticas a estas curvas de transición.

\* jcapitan@math.uc3m.es

<sup>1</sup> J. Aguirre y S. C. Manrubia, Phys. Rev. Lett. **100**, 038106 (2008).

<sup>2</sup> M. Eigen, Naturwissenschaften **58**, 465 (1971).

## Sistemas activos en microemulsión: cambios de estabilidad provocado por campos externos

J. Carballido-Landeira,\* P. Taboada y A. P. Muñuzuri

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Santiago de Compostela, 15872 Santiago de Compostela*

Belousov-Zhabotinsky (BZ) reaction is one of the most studied reaction-diffusion systems. Special interest is placed on patterns when BZ reaction is dispersed in aerosol OT (AOT) water-in-oil microemulsions (BZ-AOT system). Due to the polar reagents of BZ reaction, they are encapsulated into the aqueous phase of AOT droplets surrounded by the surfactant in an oil pool. Several nonpolar intermediates are generated, the reaction inhibitor being among them. Two different mechanisms of diffusion are present: nonpolar species diffuse via molecular diffusion through the oil phase, and BZ polar species diffuse with the entire droplet. Turing conditions are possible because we have slow-diffusing (water soluble) activator and fast-diffusing (oil soluble) inhibitor.

When a continuous electric field is applied, two

different results are obtained depending on Turing structures. Spacetime plots show changes in the stability of the system. When the field is applied under Spot configuration, we find transitioning from a stationary regime to a time-dependence one, but remaining space periodic, thus, exhibiting some sort of Hopf bifurcation. In Spots configuration, application of an external field induced a movement of spots in the sense of the electric field. In stripe configuration, the resulting pattern is dependent on the applied voltage; large voltages completely reoriented the stripes in the direction of the electric field.

---

\* jorge.carballido@usc.es

## Rheological characterization of a Boger fluid (PAA-glycerol) in shear flow

L. Casanellas\* and J. Ortín

*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de Barcelona*

Complex fluids may present several non-Newtonian effects when submitted to an external (shear) flow, due to the coupling between the flow and the inner mesoscopic structure of the fluid. In particular, viscoelastic fluids can show viscous or solid behavior depending on the time scale in which they are operating. An specific kind of viscoelastic fluids, designed by D. Boger in 1977<sup>1</sup>, exhibits a constant viscosity over a wide range of shear rates, which permits to isolate viscoelasticity from other non-desired non-Newtonian effects, mainly shear-thinning. In the present work oscillatory and rotational shear experiments have been performed, using a cone-plate stress-controlled rheometer, in order to completely characterize a Boger fluid obtained by mixing a very small amount (25 to 150 ppm) of polyacrylamide (PAA) in a Newtonian solvent (glycerol 76%-distilled water 24%)<sup>2</sup>. Nearly constant values of the steady shear viscosity have been obtained and viscoelastic properties have been determined. The elastic modulus versus the applied oscillatory frequency reveals an instability which is, indeed, reproducible and systematically shifts when varying both the PAA concentration and temperature. Measurements at different temperatures in the range from 10 to 60 °C have allowed to determine the master curve of the fluid and an estimation of the activation energy<sup>3</sup> (see Fig. 1).

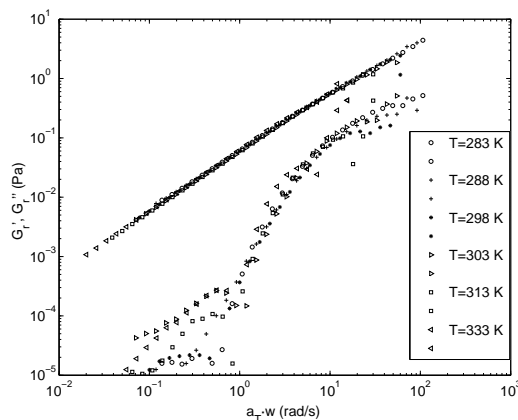


Figura 1. Viscoelastic moduli as a function of shear frequency in reduced variables, at different temperatures.

\* laurac@ecm.ub.es

<sup>1</sup> D. Boger, *J. Non-Newton Fluid* **3**, 87 (1977).

<sup>2</sup> J. Stokes, L. Graham, N. Lawxon, and D. Boger *J. Fluid Mech.* **429**, 67 (2001).

<sup>3</sup> R. Bird, R. Armstrong, and O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids* (Singapore: Word Scientific, 1992).

## Reducing complexity of recursive neural networks learning using a mean-field approach

Alejandro China Manrique de Lara

*Universidad Nacional de Educación a Distancia, Departamento de Física Fundamental, Paseo Senda del Rey 9, 28040 Madrid*

This paper introduces an approximate second order stochastic learning algorithm for training recursive neural networks based on a mean-field approximation. Recursive neural networks are machine learning models using graphs to create the internal representations of the network rather than fixed-size vectors. These information processing models are characterized by a complex and computationally expensive learning phase. Moreover, they are of particular interest because there are many challenging real-world problems where data is organized into a structured form. The most popular training method for these models is back-propagation through the structure. However, this algorithm is not appropriate for structured processing due to its problems of convergence while more sophisticated training methods enhance the speed of convergence at the expense of increasing significantly the computational

cost.

The proposed algorithm is able to achieve a good trade-off between speed of convergence and the computational effort required by setting the local learning rate for each synapse of the network inversely proportional to the standard deviation of its stochastic gradient. The algorithm operates in both on-line and batch modes. Furthermore, the scaling properties of the algorithm make it suitable for the computational requirements of the recursive model as is not affected by the vanishing gradients problem. This implies that the network is able to learn long term dependencies that could eventually appear encoded within the graph patterns composing the training set. The advantages of the proposed algorithm are analyzed and demonstrated with a real-world application example coming from the Intelligent Transportation research field.



## Lyapunov analysis of the chaotic dynamics of rings of delay-coupled oscillators

Miguel C. Soriano\*, Guy van der Sande, Ingo Fischer, Claudio R. Mirasso, and Pere Colet

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

We study the chaotic dynamics of a ring with  $N$  nonlinear dynamical elements. In particular, we couple oscillators to each other in a ring configuration with a certain time delay. The coupling is considered to be unidirectional as indicated by the arrow in Fig. 1. We would like to put forward the ring configuration as a way to generate a chaotic signal with higher chaoticity than possible with a single element. We analyze the statistical properties of the generated chaotic dynamics and their dependence on the number of oscillators in the ring  $N$ . We quantify the dynamical behaviour by the Lyapunov exponents ( $\lambda_i$ ), the Kaplan-Yorke dimension ( $d_{KY}$ ), and the Kolmogorov-Sinai entropy ( $h_{KS}$ ).

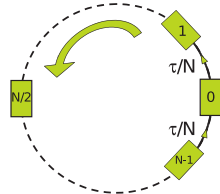


Figura 1. A ring configuration of  $N$  unidirectionally delay-coupled oscillators.

Bünner *et al.*<sup>1</sup> have pointed out the correspondence between time-delay systems as studied here and spatially extended systems. More specific, they have pointed out that a linear spatial system with a nonlinear boundary condition has the same solution as a time delay system. Indeed, in the ring of nonlinear oscillators, the chaotic signal propagates linearly between oscillators. In this spatial system, the elements of the ring act as *localized nonlinearities*. Following this concept through, Bünner *et al.* have conjectured that<sup>1</sup>

$$h_{KS} \propto \frac{N}{\tau_c}, \quad (1)$$

with  $N$  the number of elements or localized nonlinearities and  $\tau_c$  the finite correlation time of the chaotic dynamics. To the best of our knowledge, this conjecture has not been checked in any system. A difficulty is that in many delay systems or extended systems it is not easy to identify clearly the number of localized nonlinearities. Here, we can clearly identify the number of nonlinearities and so test the hypothesis.

We consider the following model equation for an oscillator in the ring with number  $j$ :

$$\frac{dx_j}{dt} = -x_j + \eta \sin [x_{j-1}(t - T/N) + \theta], \quad (2)$$

with  $t$  being a dimensionless time,  $T$  the round trip time of the ring,  $\eta$  the coupling strength and  $\theta$  the coupling

phase. We choose  $\eta = 5$  and  $T = 50$ . The indexing of the oscillators is as defined in Fig. 1, while to close the ring  $x_0 \equiv x_N$ .

The degree of chaos of a system can be measured from a generalization of the concept of entropy for state space dynamics. The Kolmogorov-Sinai entropy measures the average loss of information rate, or equivalently is inversely proportional to the time interval over which the future evolution can be predicted. Its range of values goes from zero for regular dynamics, it is positive for chaotic systems and infinite for a perfectly stochastic process. The computation of the Kolmogorov-Sinai entropy is performed from the Lyapunov exponents through the so-called Pesin identity<sup>2</sup> which states that

$$h_{KS} = \sum_{i|\lambda_i > 0} \lambda_i \quad (3)$$

i.e., the Kolmogorov-Sinai entropy is equal to the sum of all the positive Lyapunov exponents. To be precise, the sum of the positive Lyapunov exponents is an upper bound to the Kolmogorov-Sinai entropy but Eq. (3) seems to hold in very general situations and it is usually the only way to obtain a good estimation of  $h_{KS}$ .

If we use this spectrum to calculate  $h_{KS}$  (see Fig. 2), we find that the entropy increases linearly  $h_{KS} \propto N$ .

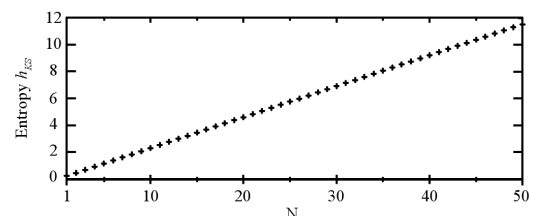


Figura 2. Kolmogorov-Sinai entropy  $h_{KS}$  vs. the number of oscillators  $N$ .

In summary, we show that coupling more nonlinear elements in a unidirectional ring configuration, the larger the unpredictability of the system dynamics. The complexity of the dynamics is characterized by way of a full Lyapunov exponent analysis and a calculation of the corresponding Kolmogorov-Sinai entropy. This system illustrates the conjecture of Bünner.

\* miguel@ifisc.uib-csic.es, <http://ifisc.uib-csic.es>

<sup>1</sup> M. J. Bünner, Th. Meyer, A. Kittel, and J. Parisi, *Z. Naturforsch.* **52a**, 573 (1997).

<sup>2</sup> H. Kantz and T. Schreiber, *Nonlinear Time Series Analysis* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).

## Open vs closed loop receivers in all-optical chaos-based communication systems

Miguel C. Soriano\*, Pere Colet, and Claudio R. Mirasso

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

One of the main questions that remains open in chaos-based communications<sup>1</sup> is how much security can this technique offer?

Security aspects are often associated, by many researchers, directly to the receiver architecture although the security is related only indirectly with the receiver characteristics. Security is related to the difficulty of extracting the message from the chaotic carrier without using the authorized receiver.

It is our aim to show that privacy and security in all-optical chaos-based communication systems can only be achieved when small amplitude messages are used, which can be only recovered with a closed loop receiver. To that end, we have performed numerical simulations using the standard rate equations model for two emitter and receiver lasers unidirectionally coupled<sup>2</sup>, as depicted in Figure 1.

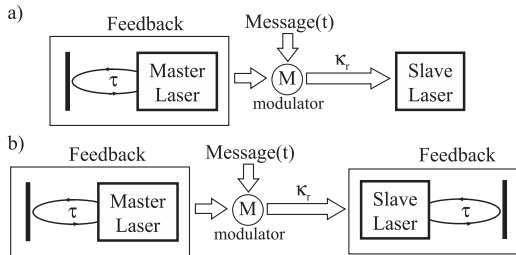


Figure 1. Master laser and slave laser schemes used for all-optical chaos communication systems in a back-to-back configuration, a) open loop b) closed loop.

To quantify the degree of correlation between the master laser (ML) and the slave laser (SL) we use the average mutual information (MI). MI is a non-linear measure of the similarities between two quantities  $x$ ,  $y$  and is defined as  $J_{xy} = \sum_{i,j} p_{ij} \log_2[p_{ij}/(p_i p_j)]$ , where  $p_{ij}$  is the joint probability of  $x = x_i$  and  $y = y_j$ ,  $p_i$  ( $p_j$ ) is the probability of  $x = x_i$  ( $y = y_j$ ). This quantity essentially measures the extra information one gets from a signal when the outcome of the other signal is known. For two independent signals  $p_{ij} = p_i p_j$ , and  $J_{xy}$  is zero. Otherwise,  $J_{xy}$  will be positive, taking its maximum value for identical signals.

Figure 2 shows the MI between the optical intensity of the ML ( $P_M(t)$ ) and SL ( $P_S(t)$ ), denoted as  $J_{ms}$  and the MI between the transmitted signal,  $P_T(t)$ , and the slave signal  $P_S(t)$  ( $J_{ts}$ ), for the closed and open loop schemes. Both quantities,  $J_{ms}$  and  $J_{ts}$ , are evaluated when a binary message of 1Gbit/s is codified in the output of the ML. The scheme we choose to encode the

information is the chaos modulation (CM) scheme. In the synchronization regime  $J_{ms} > J_{ts}$  and the receiver is able to filter out the message. It can be seen that the discrimination between the master output and the transmitted signal, i.e.,  $J_{ms} - J_{ts}$  (shown in the insets of the figures), is larger for the closed loop scheme than for the open one. The better chaos-pass filtering properties of the closed loop allows for the use of small amplitude encoded messages.

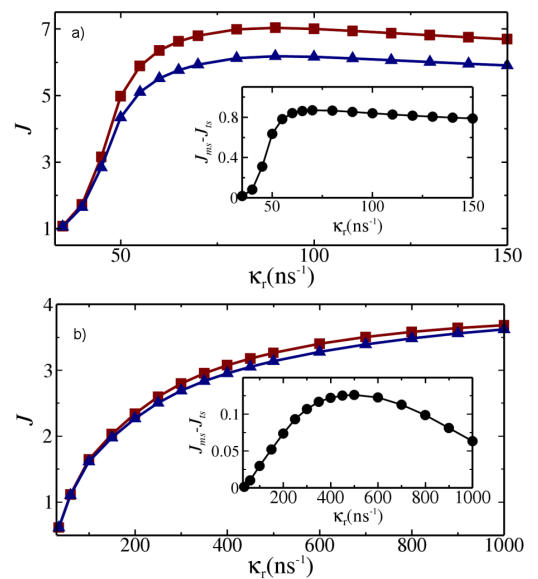


Figure 2. Average mutual information between the ML and SL in the a) closed loop and b) open loop scheme vs. coupling strength (triangles for  $J_{ts}$  and squares for  $J_{ms}$ ). The insets show the difference between  $J_{ms}$  and  $J_{ts}$  in both schemes.

Our numerical results show that the best and most efficient way to transmit and recover small amplitude messages, which guarantees a certain degree of security in all-optical chaos-based communication systems, is to operate with the closed loop scheme in the receiver. On the contrary, the open loop scheme requires large amplitude messages that compromise the security.

\* miguel@ifisc.uib-csic.es, <http://ifisc.uib-csic.es>

<sup>1</sup> A. Argyris, D. Syvridis, L. Larger, V. Annovazzi-Lodi, P. Colet, I. Fischer, J. Garcia-Ojalvo, C. R. Mirasso, L. Pesquera, and K. A. Shore, *Nature* **438**, 343 (2005).

<sup>2</sup> R. Vicente, T. Pérez, and C. R. Mirasso, *IEEE J. Quantum Electron.* **38**, 1197 (2002).

## Dinámica no-local en crecimiento inestable de superficies

Matteo Nicoli<sup>†\*</sup>, Rodolfo Cuerno<sup>†</sup> y Mario Castro<sup>‡</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Matemáticas y Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC)  
Universidad Carlos III de Madrid, 28911 Leganés Madrid*

<sup>‡</sup> *GISC y Grupo de Dinámica No Lineal (DNL), Escuela Téc. Sup. de Ingeniería (ICAI),  
Universidad Pontificia Comillas, E-28015 Madrid*

Los efectos no-locales contribuyen a la evolución dinámica de muchas intercaras fuera de equilibrio, debido a mecanismos como procesos de transporte difusivos, balísticos o anómalos. Mientras que las interacciones elementales son de corto alcance y locales, en la evolución de la intercara intervienen mecanismos no-locales efectivos (a través de la proyección de la dinámica sobre la intercara) o genuinos (como en medios elásticos o flujos viscosos). Este tipo de no-localidades aparecen en muchos campos, un ejemplo relevante es el crecimiento limitado por difusión. En este contexto, un agregado crece por la incorporación de especies reactivas de una fase (típicamente vapor). De esta manera, el movimiento difusivo en dicha fase conlleva que las estructuras que estén más expuestas al flujo difusivo recibirán un aporte neto mayor que las que lo estén menos. Este efecto de sombreado resulta en una inestabilidad morfológica. Este tipo de inestabilidades se cuantifican mediante la relación de dispersión lineal. Cuando se tienen en cuenta efectos no lineales y el de las fluctuaciones microscópicas, se puede escribir con gran generalidad una familia de ecuaciones estocásticas que da cuenta de estos ingredientes (no-localidad, inestabilidad, no linealidad y fluctuaciones) de la forma:

$$\partial_t h_{\mathbf{k}}(t) = \sigma_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}(t) + \frac{\lambda}{2} \mathcal{F}[(\nabla h)^2] + \eta_{\mathbf{k}}(t), \quad (1)$$

con relación de dispersión  $\sigma_{\mathbf{k}} = -\nu k^\mu - \mathcal{K}k^m - \mathcal{N}k^n$ , que al variar los exponentes  $\mu$ ,  $m$  y  $n$ , reproduce diferentes inestabilidades lineales que tienen una relevancia experimental. En (1) consideramos casos que satisfacen las relaciones  $0 < \mu \leq 2$ ,  $m \geq 2$ ,  $n > m$ , y con parámetros elegidos de modo que las escalas pequeñas ( $k \rightarrow \infty$ ) sean estables. El signo de  $-\nu$  puede variar entre un valor negativo ( $\sigma_{\mathbf{k}}$  estable) y uno positivo (inestabilidad morfológica). El término proporcional a  $\lambda$  es la no-linealidad de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ), presente cuando en la evolución de la intercara no intervienen leyes de conservación, mientras que  $\eta_{\mathbf{k}}(t)$  es un ruido Gaussiano sin correlaciones. La Ec. (1) es local cuando  $\sigma_{\mathbf{k}}$  es un polinomio en  $k^2$ , como en el caso de la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky ( $\mu = 2$ ,  $m = 4$  y  $\mathcal{N} = 0$ ). Por el contrario, la no-localidad se debe a potencias impares o, de forma más general, no enteras de  $k$ , generando términos que dependen de kernels con un decaimiento lento en espacio real<sup>1</sup>. Ejemplos notables son la inestabilidad de MS o de Saffman-Taylor ( $\mu = 1$ ,  $m = 3$ )<sup>2</sup> y la inestabilidad de Darrieus-Landau ( $\mu = 1$ ,  $m = 2$ )<sup>3</sup>. Esta última se encuentra en los fenómenos de propagación de flujos laminares de llamas, en los que la

expansión de los gases producidos por el calentamiento induce arrugas en el frente de llamas.

Mientras que el análisis dimensional logra describir la invariancia de escala de las intercaras producidas por una dinámica no-local estable, en las condiciones con inestabilidad morfológica se necesitan herramientas más sofisticadas. Utilizando un método de integración numérica pseudo-espectral se han estimado los exponentes críticos de la Ec. (1) en  $1 + 1$  and  $2 + 1$  dimensiones al variar del exponente  $\mu$ . Además, se ha utilizado el Grupo de Renormalización Dinámico (DRG) para estudiar analíticamente el comportamiento asintótico de esta familia de ecuaciones. Los resultados analíticos y numéricos son compatibles y evidencian que para un rango de  $\mu$ , la dinámica asintótica es invariante de escala con exponentes que no dependen de la dimensión del sistema y que satisfacen una invariancia de Galileo oculta (las ecuaciones con  $\sigma_{\mathbf{k}}$  estable no satisfacen esta simetría). La no-linealidad de KPZ resulta irrelevante en este rango de parámetros pero no deja de jugar un papel fundamental en el comportamiento hidrodinámico de las Ec. (1) con inestabilidad morfológica<sup>4</sup>.

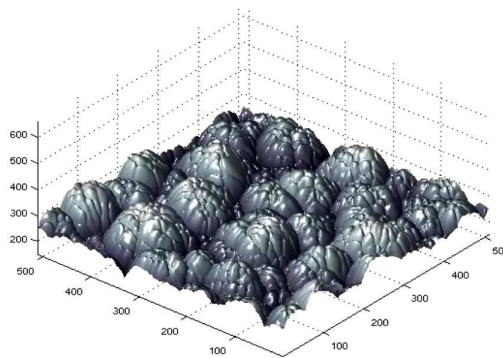


Figura 1. Superficie generada por (1) con  $\mu = 1$  y  $m = 3$ .

\* nmatteo.math@gmail.com

<sup>1</sup> M. Nicoli, M. Castro y R. Cuerno, J. Stat. Mech. Theor. Exp. P02036 (2009).

<sup>2</sup> M. Nicoli, M. Castro y R. Cuerno, Phys. Rev. E **78**, 021601 (2008).

<sup>3</sup> G. I. Sivashinsky, Acta Astronaut. **4**, 1177 (1977); D. M. Michelson y G. I. Sivashinsky, *ibid.* **4**, 1207 (1977).

<sup>4</sup> M. Nicoli, R. Cuerno y M. Castro, enviado a Phys. Rev. Lett. (2009).

## Buscando la fase nemática en fluidos discóticos

Alejandro Cueto<sup>†\*</sup> y Bruno Martínez-Haya<sup>‡</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Física Aplicada, Universidad de Almería, 04020 Almería, Spain*

<sup>‡</sup> *Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Universidad Pablo de Olavide, 41013 Sevilla, Spain*

La existencia de la fase nemática en fluidos de moléculas en forma de disco es una de las cuestiones abiertas en el campo de los cristales líquidos. De esta forma, mientras que para fluidos con moléculas alargadas está bien establecido el rango de estabilidad de la fase nemática, para fluidos oblatos no está tan claro donde buscar. Este es un hecho que limita las posibles aplicaciones tecnológicas de este tipo de materiales. En este trabajo realizamos un estudio de simulación por ordenador sobre la posible existencia de la fase nemática en fluidos de moléculas oblatas. Por una parte exploramos la posible existencia de la fase nemática en función del tamaño de las partículas para fluidos de esferocilindros oblatos duros. A continuación estudiamos

la posibilidad de favorecer la existencia de la fase nemática introduciendo diversos modelos de interacción entre las partículas, queriendo emular la existencia de diversos grupos funcionales. Finalmente investigamos si el efecto de la polidispersidad en tamaño favorece la existencia de la fase nemática. Como conclusión, obtenemos que la fase nemática tiene una presencia muy limitada en fluidos de moléculas oblatas, mientras que las fases columnares muestran una sorprendente robustez y estabilidad.

---

\* acuetos@ual.es

## Induction of Turing-like patterns by external spatiotemporal forcing

Daniel Cuiñas\*, Michael Menzinger, Patrick McGraw, and Alberto P. Muñuzuri

*Grupo de Física no lineal Departamento de Física de la Materia Condensada*

*Universidad de Santiago de Compostela*

*21071 Santiago de Compostela*

The response of a growing CDIMA reaction to an external periodic forcing at the boundary is analyzed both experimentally and numerically. When the system is close to Turing and Hopf instabilities, and convectively unstable the CDIMA reaction can exhibit Turing structures or FDO waves depending on the relation between the velocity chosen for the growth and the period of the external forcing. We demonstrate that for low frequencies at a given velocity FDO waves are expected,

while for moderate high frequencies stable Turing patterns develop. This work presents the experimental results obtained for the case of Turing structures and the harmonics found, and offers a comparison with numerical simulations.

---

\* daniel.cuinas@usc.es

## Transiciones de fase en mezclas de cristales líquidos confinados

D. de las Heras<sup>†\*</sup>, Y. Martínez-Ratón<sup>‡</sup> y E. Velasco<sup>†§</sup>

<sup>†</sup> Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

<sup>‡</sup> Departamento de Matemáticas, Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III, 28911 Leganés

<sup>§</sup> Instituto Nicolás Cabrera, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

Las mezclas binarias de cristales líquidos han recibido muy poca atención desde un punto de vista teórico, probablemente debido a las dificultades que se presentan a la hora de modelar tales sistemas. Recientemente se ha desarrollado un funcional de la densidad, basado en la teoría de las medidas fundamentales, para el tratamiento de mezclas de cilindros duros paralelos<sup>1</sup>. Los resultados obtenidos mediante la minimización del funcional para el caso de fluidos monodispersos concuerdan muy bien con los datos de simulación disponibles<sup>2</sup>.

En el presente trabajo presentamos los resultados, obtenidos con el funcional mencionado previamente, de una mezcla de cilindros duros paralelos con diferente longitud ( $L_2/L_1 = 3$ ) e igual diámetro. El estudio abarca diferentes aspectos como el diagrama de fases de volumen, las propiedades de adsorción de la mezcla en contacto con una pared dura o el confinamiento de la mezcla en un poro formado por dos paredes duras paralelas.

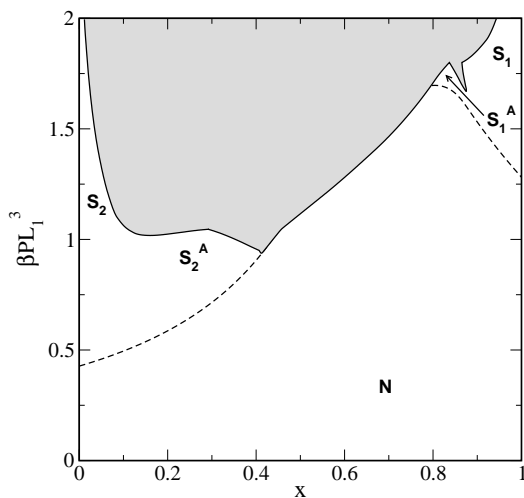


Figura 1. Diagrama de fases de volumen en el plano presión frente a composición de la mezcla ( $x$  es la fracción molar de la especie 1, es decir, las partículas cortas).

En la figura se ha representado el diagrama de fases de volumen de la mezcla. La región sombreada es una zona de inestabilidad termodinámica y las líneas a trazos indican transiciones continuas. A presiones bajas la fase estable es un nemático ( $N$ ). Si aumentamos la presión se estabilizan fases esmécticas ( $S$ ) que difieren en la composición de la especie mayoritaria y en cómo están situadas las capas esmécticas de las dos especies, bien sea en fase ( $S_i$ ) o en antifase ( $S_i^A$ ).

En el sistema formado por una pared dura y la mezcla hemos estudiado las propiedades de adsorción y *wetting*. Existe *wetting* completo por una fase esméctica con mayoría de partículas de la especie larga ( $S_2$ ) cuando situamos un nemático en volumen. La forma en que el sistema alcanza el *wetting* completo difiere según la presión de la mezcla. Para presiones elevadas el estado de *wetting* completo se alcanza vía una serie de transiciones de *layering*, mientras que por debajo de una determinada presión la fase esméctica crece de manera continua sobre el sustrato.

Al confinar la mezcla entre dos sustratos paralelos la distancia de separación entre ellos juega un papel muy relevante en el diagrama de fases. Aparecen transiciones de *layering* relacionadas con efectos de conmensuración entre el tamaño del poro y la longitud de las partículas. Estas transiciones interaccionan con las transiciones de *layering* debidas a las propiedades de adsorción de una única pared. Presentamos diferentes cortes del diagrama de fases en el plano presión frente a composición (para una anchura de poro fija), así como en el plano anchura de poro frente a la composición (para una presión determinada), que facilitan una comprensión global de la rica fenomenología que tiene lugar.

\* daniel.delasheras@uam.es

<sup>1</sup> Y. Martínez-Ratón, J. A. Capitán y J. Cuesta, Phys. Rev. E **77**, 051205 (2008).

<sup>2</sup> J. A. Capitán, Y. Martínez-Ratón y J. Cuesta, J. Chem. Phys. **128**, 194901 (2008).

## Dynamics of nanoscopic capillary waves in simple liquids

Rafael Delgado-Buscalioni<sup>†\*</sup>, Enrique Chacón<sup>‡</sup>, and Pedro Tarazona<sup>†</sup>

<sup>†</sup> *Dpto. Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid*

<sup>‡</sup> *Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC*

We study the dynamics of thermally excited capillary waves (CW) at molecular scales using molecular dynamics simulations of simple liquid slabs. The analysis starts upon the Fourier modes of the liquid surface, constructed via the intrinsic sampling method<sup>1</sup>. The equipartition theorem provides a structural route to the surface tension ( $\gamma_s$ ), using the variance of the capillary modes. On the other hand one can also use dynamical information: the wave frequency and damping rate of each mode are obtained from the time autocorrelation of the corresponding Fourier mode at wavenumber  $q$ . Continuum hydrodynamics predictions can be used to obtain a “hydrodynamic” measure of the surface tension,  $\gamma_d$ . Comparison of the structural ( $\gamma_s$ ) and hydrodynamical ( $\gamma_d$ ) surface tensions and their corresponding wavenumber dependence provides a great deal of information which shall be hereby explored<sup>2</sup>. For instance, both measures of the surface tension only agree if one considers the (structurally) optimal liquid surface, showing that a proper definition of the liquid surface

exists: the surface which provides both hydrodynamic and structural consistency. An important result is that the surface tension increases monotonically with the wavenumber, in clear contrast with previous controversial theoretical and experimental claims<sup>3</sup>. Another relevant observation is that the limit of the hydrodynamic behaviour of capillary waves is astonishingly small (about 4 molecular diameters). We will consider Lennard-Jones fluids and soft-alkali<sup>4</sup> fluids along the coexistence line. Results for water (SPC/E) shall be also presented.

---

\* rafael.delgado08@uam.es

<sup>1</sup> E. Chacón and P. Tarazona, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 166103 (2003).

<sup>2</sup> R. Delgado-Buscalioni, E. Chacón, and P. Tarazona, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 106102 (2008).

<sup>3</sup> C. Fradin *et al.*, *Nature*, **403**, 871 (2000); S. Mora *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 216101 (2003).

<sup>4</sup> E. Chacón *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 166101 (2001).

## A computer simulation method for the determination of the elastic constants

Enrique de Miguel<sup>†\*</sup> and Carlos Vega<sup>‡</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Física Aplicada, Universidad de Huelva, 21071 Huelva*

<sup>‡</sup> *Departamento de Química Física, Facultad de Química, Universidad Complutense, 28040 Madrid*

According to the general theory of elasticity, the elastic constants control the mechanical response of a crystalline solid to external stresses<sup>1</sup>. Apart from the obvious importance in practical uses of material design, a knowledge of the elastic constants provides a useful means of probing the interatomic interactions. The evaluation of the elastic constants from computer simulation has traditionally been accomplished by using one of the following three approaches: (a) Explicit computation of appropriate microscopic quantities that involve first- and second-order derivatives of the interatomic interactions<sup>2</sup>. This approach may turn out to be quite tedious for non-trivial interaction models, for which obtaining explicit expressions of the derivatives of the intermolecular interactions is far from trivial. (b) Use of the linear relation between stress and strain<sup>1</sup> for small deformations. This approach involves an evaluation of the pressure tensor of the target system subject to different types of deformations<sup>3</sup>. (c) Fluctuation methods, where the elastic constants are computed from the mean squared fluctuations of the corresponding stress components, the averages being evaluated in the unstrained system<sup>4</sup>.

In this contribution we consider an alternative method to the evaluation of the elastic constants for a solid in the absence of external stresses. The approach is based on an expansion of the Helmholtz free energy

of the solid in terms of a (small) expansion parameter related with appropriate deformations. One can show that the second-order term involves a combination of the components of the pressure tensor and the elastic constants. The method involves a direct computation of the second-order term from the evaluation of simple ensemble averages involving the Boltzmann factors associated with virtual deformations of the solid. In practice, these deformations are carried out by applying (virtual) coordinate transformations. On top of its simplicity, the main advantage of the new methodology is that no explicit computation of the derivatives of the interaction potential is required. The validity of the method is assessed by comparing the calculated elastic constants with experimental values for different crystalline structures of ice.

---

\* demiguel@uhu.es

<sup>1</sup> D. C. Wallace, *Thermodynamics of crystals* (Dover, New York, 1998).

<sup>2</sup> D. R. Squire, A. C. Holt, and W. G. Hoover, *Physica* **42**, 388 (1969).

<sup>3</sup> J. Q. Broughton, G. H. Gilmer, and J. D. Weeks, *Phys. Rev. B* **25**, 4651 (1982).

<sup>4</sup> M. Parrinello and A. Rahman, *J. Chem. Phys.* **76**, 2662 (1982).



## Aplicaciones de la geometría computacional a la simulación molecular de interfases

Florencio Balboa Usabiaga<sup>†</sup> y Daniel Duque<sup>‡\*</sup>

<sup>†</sup> Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid

<sup>‡</sup> Dpto. Enseñanzas Básicas de la Ingeniería Naval, ETS Ingenieros Navales, Avd. Arco de la Victoria, s/n, E-28040 Madrid

Las interfases, las fronteras entre fases homogéneas, son ubicuas en la Naturaleza y juegan un papel fundamental en el comportamiento de muchos sistemas complejos. Dada la inherente dificultad de su análisis, comparado con el de los sistemas homogéneos de volumen, existen todavía muchas preguntas abiertas sobre su estructura, dinámica y estabilidad. El interés en estas estructuras ha ido creciendo recientemente, no sólo por intereses fundamentales, sino también por su relevancia en gran cantidad de problemas en química física, biología y las ciencias de materiales y de la salud. Los últimos progresos en este área suelen aprovechar los avances en potencia de cálculo y simulación numérica a escala molecular. La simulación se ha establecido en una posición importante entre los experimentos y la teoría<sup>1</sup>. Sin embargo, los abundantes resultados de una simulación deben ser cuidadosamente analizados, y algunos rasgos de las configuraciones resultantes pueden ser difíciles de obtener, o incluso definir. Este es el caso de la región interfacial entre dos fluidos en coexistencia, que se obtiene claramente en cierto tipo de simulaciones (las “simulaciones explícitas de interfases”), pero cuya definición precisa es esquivada.

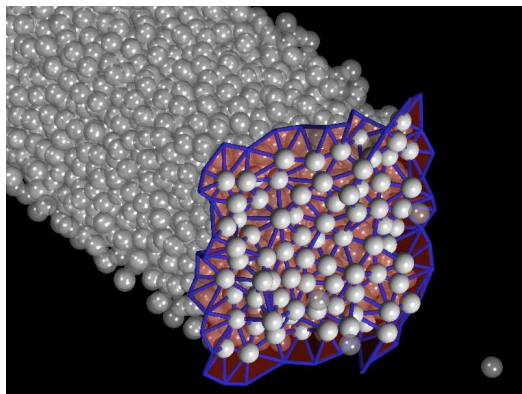


Figura 1. Fotograma de una de nuestras configuraciones. Las moléculas se representan con bolas blancas, translúcidas salvo las que pertenecen a la SI, que son opacas. La frontera de la forma  $\alpha$ , para  $\alpha = R^2$ ,  $R = 1.2\sigma$ , es la triangulación roja, con aristas azules.

Presentamos aquí un novedoso enfoque del análisis de las configuraciones resultantes de una simulación molecular de un sistema interfacial. Nos ayudamos para ello de ciertos conceptos de geometría computacional, una rama de la informática matemática que se dedica al estudio de problemas geométricos tales como la “forma” de un conjunto de puntos. Nuestra propuesta<sup>2</sup> es utilizar métodos de este campo para analizar configuraciones interfaciales obtenidas mediante simulación.

En particular, presentamos una aplicación del concepto de “forma  $\alpha$ ” ( $\alpha$ -shape) a la identificación de la superficie intrínseca (SI) de una interfase líquido-vapor. La SI es la superficie que separa, a escala molecular, dos fases; su definición es bastante sutil y por ello este tipo de propuestas puede ser muy útil en este campo. Determinamos el único parámetro de nuestra construcción (la  $\alpha$ ) de distintas maneras: criterios estructurales, dinámicos<sup>3</sup> y comparación directa con métodos previos<sup>4</sup>. Respecto a estos últimos, la presente propuesta se comporta algo peor, ya que proporciona perfiles intrínsecos de densidad algo más suaves. Sin embargo, es elegante y muy sencillo computacionalmente. La SI resultante es una malla triangulada, que es una entidad matemática perfectamente regular. Como resultado, se puede calcular su transformada de Fourier hasta cualquier resolución (número de ondas). Nuestros resultados para la tensión de superficial efectiva (una función del número de ondas) son cualitativamente similares a los obtenidos antes<sup>4</sup> y no muestran ningún mínimo (existe cierta polémica sobre la posible presencia de éste).

\* daniel.duque@upm.es, <http://debin.etsin.upm.es/daniel>

<sup>1</sup> D. Frenkel y B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*, 2<sup>a</sup> ed. (Academic Press, London, 2002).

<sup>2</sup> F. Balboa Usabiaga y D. Duque, *Phys. Rev. E* **79**, 046709 (2009).

<sup>3</sup> D. Duque, E. Chacón y P. Tarazona, *J. Chem. Phys.* **128**, 134704 (2008).

<sup>4</sup> E. Chacón y P. Tarazona, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, S3493 (2005) y referencias anteriores.

## Estudio del efecto de desorden y defectos de superficie sobre fricción atómica

O. Y. Fajardo\* y J. J. Mazo

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, España  
e Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, CSIC-Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, España*

Analizamos el efecto de desorden y defectos superficiales sobre procesos de fricción atómica y su comportamiento a diferentes temperaturas. Nuestro modelo de partida es el ampliamente conocido modelo unidimensional de Tomlinson. Este sistema ha sido recientemente empleado para estudiar la interacción punta-superficie en un microscopio de fuerza de fricción<sup>1-7</sup>.

En este marco de trabajo, la punta se comporta como una partícula masiva atada a un soporte móvil a través de un resorte tipo armónico que se mueve sobre un potencial de sustrato unidimensional  $V(x)$ :

$$M \frac{d^2 x}{dt^2} + M\gamma \frac{dx}{dt} + \frac{\partial E(R, x)}{\partial x} = \xi(t), \quad (1)$$

$$E(R, x) = \frac{k}{2} [R(t) - x]^2 + V(x). \quad (2)$$

Aquí  $E(R, x)$  es el potencial efectivo el cual incluye los efectos de acoplamiento elástico de la punta con el soporte, el cual se mueve a velocidad constante  $v_s$  y la interacción punta-superficie  $V(x)$ .  $M$  y  $x$  son la masa efectiva y la posición lateral de la punta,  $k$  es la constante de resorte.  $\xi(t)$  es el término de ruido aleatorio que satisface la relación de fluctuación-disipación  $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2M\gamma k_B T \delta(t-t')$  con  $\gamma$  el coeficiente microscópico de fricción y  $k_B$  la constante de Boltzmann.

Consideramos el efecto de introducir desorden en la superficie incluyendo un término armónico en el potencial punta-superficie,

$$V(x) = -U_0 \left[ 1 + \epsilon \sin \left( \frac{2\pi x}{b} \right) \right] \cos \left( \frac{2\pi x}{a} \right). \quad (3)$$

$\eta = \frac{a}{b}$  es el factor de commensurabilidad,  $\epsilon$  mide la importancia del segundo armónico y  $a$  y  $U_0$  son el espa-

ciamiento de red y la amplitud del potencial de superficie, respectivamente.

Adicionalmente se analiza el caso de un potencial de sustrato con una densidad de defectos dada. Los defectos se introducen a través de términos Gaussianos y localizados en posiciones,  $x_j$ , seleccionadas en los máximos del potencial libre de defectos [ $x_j = (2n + 1)a/2$ ]. De esta manera, buscamos introducir el efecto de vacantes de átomos en la superficie. El potencial total punta-superficie entonces toma la forma:

$$V(x) = -U_0 \left[ 1 + \cos \left( \frac{2\pi x}{a} \right) \right] + \sum_j A_o \exp \frac{-(x - x_j)^2}{2\sigma^2} \quad (4)$$

donde  $x_j$  y  $A_o$  son la posición y amplitud del término de defecto y  $\sigma$  es su anchura.

---

\* yovany@unizar.es

<sup>1</sup> T. Gyalog, E. Gnecco y E. Meyer, *Fundamental of Friction and Wear on the Nanoscale* (Springer, Berlin, 2007).

<sup>2</sup> Z. Tshiprut, S. Zelner y M. Urbakh, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 136102 (2009).

<sup>3</sup> J. Nakamura, S. Wakunami y A. Natori, *Phys. Rev. B.* **72**, 235415 (2005).

<sup>4</sup> S. N. Medyanik, W. K. Liu, I. Sung y R. W. Carpick, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 136106 (2006).

<sup>5</sup> E. Gnecco, R. Bennewitz, T. Gyalog, Ch. Loppacher, M. Bammerlin, E. Meyer y H.-J. Guntherrodt, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1172 (2000).

<sup>6</sup> Y. Sang, M. Dube y M. Grant, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 174301-1 (2001).

<sup>7</sup> M. Urbakh, J. Klafter, D. Gourdon y J. Israelachvili, *Nature* **430**, 525 (2004).

## Dinámica de “bubbles” en el modelo de Peyrard-Bishop-Dauxois del DNA

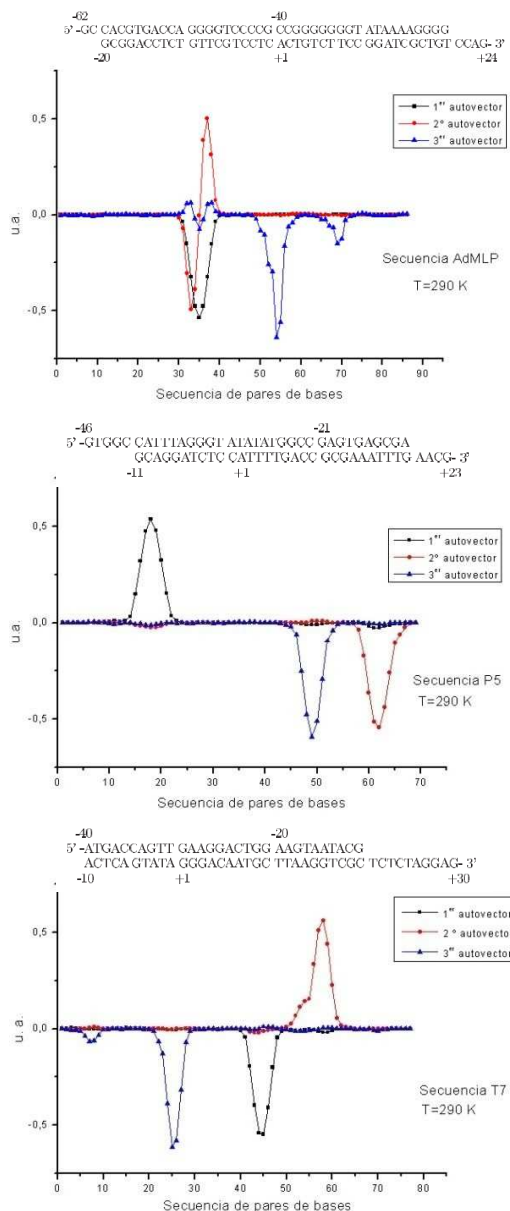
Rafael Tapia-Rojo, Juan José Mazo y Fernando Falo\**Departamento de Física de la Materia Condensada, Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA), Universidad de Zaragoza*

Figura 1. Primeros tres modos del análisis de componentes principales de los promotores de los tres virus estudiados.

El estudio de la dinámica del DNA en modelos mesoscópicos tales como el propuesto por Peyrard, Bishop y Dauxois (PBD)<sup>1</sup> para el análisis de la desnaturalización térmica de la molécula está recibiendo un fuerte empuje en la investigación en física biológica. La utilización de estos modelos en otros contextos, como

la desnaturalización mecánica<sup>2</sup> o como la formación de “bubbles” y su correlación con sitios de relevancia biológica<sup>3</sup> no está exenta de controversia. Algunos grupos afirman el carácter predictivo del modelo PBD<sup>4</sup>, mientras otros niegan esta posibilidad<sup>5</sup>, basándose en las limitaciones de un modelo mesoscópico con pocos parámetros ajustables.

En esta contribución analizamos el modelo de PBD en varias secuencias cortas de promotores (las mismas que en el trabajo de la referencia 3) algunos virus (AdML, P5 y T7). Para ello realizamos la integración numérica de las ecuaciones de Langevin para el modelo PBD estándar y de un modelo modificado<sup>6</sup> en el que el potencial morse es completado con un término que tiene en cuenta el solvente. Las trayectorias generadas (mediante la dinámica de Langevin) son estudiadas utilizando el análisis de componentes principales diagonalizando la matriz de covarianza de las separaciones de cada par de bases. Este estudio nos permite correlacionar las posiciones más flexibles de la secuencia con el conjunto de bases relevantes (puntos de inicio de transcripción y zonas reguladoras). Estas zonas son las que, posiblemente, sufrirán una apertura más sencilla y por tanto formarán “bubbles” con mayor probabilidad. En la figura mostramos, los tres primeros autovectores de la matriz de covarianza para los tres virus estudiados.

Finalmente relacionamos las componentes principales con excitaciones no-lineales localizadas en la cadena de DNA que identificamos con “breathers” discretos. El carácter no-lineal de las interacciones permite la existencia de estas excitaciones con tiempos de vida largos. Discutimos la relación de estos “breathers” con la burbujas responsables de la desnaturalización térmica.

\* fff@unizar.es

<sup>1</sup> M. Peyrard, A. R. Bishop, and T. Dauxois, *Phys. Rev. E* **47**, 684 (1993).

<sup>2</sup> S. Cuesta-Lopez, J. Errami, F. Falo, and M. Peyrard, *J. Biol. Phys.* **31**, 273 (2005).

<sup>3</sup> G. Kalosakas, K. O. Rasmussen, and A. R. Bishop, C. H. Choi, and A. Usheva, *Europhys. Lett.* **68**, 127 (2004).

<sup>4</sup> S. Ares, N. K. Voulgarakis, K.O. Rasmussen, and A. R. Bishop, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 035504 (2005).

<sup>5</sup> T. S. van Erp, S. Cuesta-Lopez, J. G. Hagmann, and M. Peyrard, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 239802 (2006).

<sup>6</sup> G. Weber, *Europhys. Lett.* **73**, 806 (2006).

## The role of ion-interface correlations in softmatter: from charge inversion in liposomes to selectivity inversion in ionic channels

Jordi Faraudo<sup>†\*</sup>, Carles Calero<sup>†</sup>, and Marcel Aguilera-Arzo<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Institut de Ciència de Materials de Barcelona, ICMAB-CSIC, Campus de la UAB, Bellaterra, E-08193, Spain*

<sup>‡</sup>*Departament de Física, Universitat Jaume I, Castelló, 12005, Spain*

The statistical mechanics of electrolyte solutions near charged interfaces is of key importance in determining electrostatic and electrokinetic properties of soft matter systems. The case in which the counterions are multivalent is attracting a great experimental and theoretical interest due to their ability to induce complex and rich new phenomena. A typical example is the inversion of electrostatic forces between equally charged interfaces: charged surfaces which repel in presence of monovalent electrolyte, develop strong electrostatic attractive forces in presence of multivalent counterions. Another example is the inversion of electrokinetic quantities such as electrophoretic mobility or streaming current: in presence of large enough concentrations of multivalent ions, the mobility or the current is opposite to what is observed with monovalent electrolyte. The effect has been observed in many different systems: phospholipid liposomes, DNA, sulfonated latex colloids and silica nanochannels to mention only a few examples. The fact that (a) the new effects are present in many different systems with very similar trends and (b) they show a strong dependency on the ion valence, has suggested the existence of a generic electrostatic mechanism. It is also clear that the classical theory of electrolyte solutions near interfaces, based on the mean-field Poisson-Boltzmann approach, is unable to provide such a mechanism. Modern statistical-mechanical theories of electrolyte solutions show that multivalent counterions develop strong electrostatic correlations near a charged plane with high charge density. It is tempting to suggest

that these correlations may be involved in the effects observed in complex real systems such as the examples mentioned above. But it is also clear that the underlying mechanism must take into account some specificity from both the ions and the interface. For example, it is known that the electrophoretic mobility inversion observed in negatively charged phospholipid liposomes in presence of divalent cations depends strongly on the chemical structure of the phospholipids headgroup. In the case of divalent cations (which is particularly important in the biophysical context) the electrokinetic mobility inversion also depends slightly on the specific divalent cation involved. Our objective in this contribution is to show that correlations between the charged groups of the interface and divalent cations provide a mechanism for the observed inversion of electrokinetic behaviour. First, we will illustrate the concept with results from a simple model of a nanostructured charged interface in contact with divalent electrolyte. Then, the relevance of the proposed mechanism will be analyzed using molecular dynamics simulations of realistic models of systems of interest. We will consider the case of phospholipid membranes and the case of a protein ion channel (the e-coli OmpF channel) in divalent electrolyte. All the reported MD simulations are performed with atomic resolution including explicit water (between  $10^5$ - $10^6$  atoms in a simulation cell in simulation runs of at least 10 nsec).

---

\* jfaraudo@icmab.es

## Aproximación gaussiana para la resolución de ecuaciones maestras

Luis F. Lafuerza\* y Raúl Toral

IFISC Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB),  
Campus de la Univesidad de las Islas Baleares, E-07122 Palma de Mallorca

Analizamos un método para obtener los momentos de un proceso estocástico que sigue una ecuación maestra con la siguiente forma general:

$$\frac{dP(n,t)}{dt} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k (E^k - 1) \left[ \frac{G_k(n)}{\Omega^{g_k-1}} P(n,t) \right] \quad (1)$$

donde  $P(n,t)$  es la densidad de probabilidad a tiempo  $t$ ,  $E^k f(n,t) = f(n+k,t)$ ,  $G_k(n)$  es un polinomio en  $n$  de grado  $g_k$  y  $\Omega$  es un parámetro “grande” del sistema (típicamente el volumen).

A partir de la ecuación anterior podemos obtener las ecuaciones para la evolución de los momentos, pero cuando alguno de los polinomios  $G_k(n)$  tiene grado igual o mayor que dos, la ecuación para cada momento depende de otros momentos de orden superior, de modo que no es posible obtener un sistema finito de ecuaciones cerrado. Este problema puede resolverse si suponemos que la distribución  $P(n,t)$  es gaussiana (para todo  $t$ ) ya que en ese caso todos los momentos pueden expresarse a partir de los dos primeros y de este modo podemos obtener un sistema de ecuaciones cerrado para el valor medio y la

varianza. Esta suposición no es arbitraria ya que a partir del desarrollo de van Kampen<sup>1</sup> puede demostrarse que la distribución de probabilidad es gaussiana salvo términos de orden  $\Omega^{-1/2}$ .

En este trabajo mostramos que esta aproximación no es totalmente equivalente al desarrollo de van Kampen a primer orden en  $\Omega^{-1/2}$ , aunque se reduce a éste en el límite  $\Omega \rightarrow \infty$ , y discutimos las diferencias entre los dos métodos. Esta aproximación presenta ventajas en cuanto a sencillez para obtener las ecuaciones macroscópicas y para las fluctuaciones. Lo hemos aplicado, como ejemplo, a un modelo de formación de opinión con dos variables<sup>2</sup>. Presentamos, también, fórmulas generales para la aplicación directa del método.

---

\* luis@ifisc.uib-csic.es

<sup>1</sup> N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, Chap. X (North-Holland, Amsterdam, 2004).

<sup>2</sup> M. S. de la Lama, I. G. Szendro, J. R. Iglesias y H. S. Wio, *Eur. Phys. J. B* **51**, 435 (2006).

## Estudio de redes complejas en lagunas temporales de Menorca. Implicaciones para la gestión a nivel regional

Javier Galeano<sup>†\*</sup>, Juan Manuel Pastor<sup>†</sup>, José María Iriondo<sup>‡</sup> y Pere Fraga<sup>§</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Ciencia y Tecnología Aplicadas a la I.T. Agrícola, Universidad Politécnica de Madrid*

<sup>‡</sup> *Área de Biodiversidad y Conservación, Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles, Madrid*

<sup>§</sup> *Projecte LIFE BASSES, Consell Insular de Menorca, Illes Balears*

La red de estanques estacionales de Menorca está compuesta por 70 estanques temporales y se caracteriza por tener una gran diversidad biológica de características únicas. Las fluctuaciones estacionales del nivel de agua provoca que el conjunto de plantas vasculares adaptadas a estas condiciones sea muy particular. Dichas comunidades bióticas se caracterizan por presentar un patrón espacial heterogéneo, condicionado por la presencia de un tipo de hábitat tan singular, y además, por disponer de hábitats de reducidas dimensiones. El propósito de este trabajo es identificar cuáles son los condicionantes principales de la heterogeneidad de esta riqueza florística en las diferentes charcas temporales utilizando teoría de redes.

Los estanques temporales de la isla de Menorca y la flora vascular que habita en sus fases seca e inundada constituyen un buen ejemplo para ilustrar el empleo de teoría de redes en el estudio de metacomunidades. La relación entre los estanques temporales de Menorca y la flora vascular puede considerarse una red bipartita. Una forma de ver la importancia relativa de las especies en cada estanque, bajo una perspectiva de red, es a través de los gráficos de anidamiento pesado. Para ello hemos usado el estimador WINE<sup>1</sup>. En el caso de los estanques de Menorca, encontramos que dicho estimador nos da diferentes valores de anidamiento para la fase inundada y la fase seca. En el primer caso el anidamiento (0.30) es ligeramente inferior al obtenido en la fase seca (0.48).

Otra aproximación a las redes complejas a partir de la metacomunidad de estanques temporales de Menorca consiste en estudiar la distribución espacial de los estanques. Para ello se consideran como nodos los estanques temporales y se definen los enlaces entre los estanques a partir de una distancia umbral, es decir, los estanques tendrán un enlace si su distancia espacial es inferior a la distancia que hemos elegido como umbral. Hemos estudiado diferentes distancias umbral, típicamente: 1, 3, 5 y 8 km, que representarían diferentes distancias promedios recorridas por animales. En la figura se presenta un ejemplo de las distintas redes, para la distancia umbral de 5 km. Se puede apreciar

que en esta figura la mayoría de los grandes grupos de estanques están unidos, formando una única componente, cosa que no ocurre cuando se utiliza la distancia umbral de 3 km.

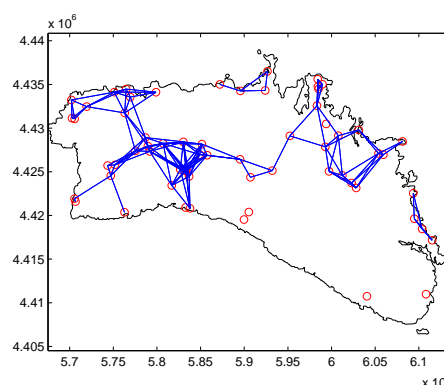


Figura 1. Red espacial de los estanques temporales de Menorca con una distancia umbral de 5 km.

Hemos analizado además la variación de las distribuciones de grado dependiendo de la distancia umbral y la superficie de la charca. Para ello, hemos definido 6 tipos de charcas dependiendo de su superficie y hemos ido eliminando los estanques de menor a mayor superficie para estudiar la influencia de la sequía en la distribución de grado en la red. Las distribuciones de los grados dependiendo de la distancia umbral y de la eliminación de las charcas dependiendo de su superficie cambian su comportamiento. Este tipo de comportamiento ya fue encontrado por Fortuna y colaboradores<sup>2</sup>.

\* javier.galeano@upm.es

<sup>1</sup> J. Galeano, J. M. Pastor y J. M. Iriondo, *Environmental Modelling & Software*, in press (2009).

<sup>2</sup> M. A. Fortuna, C. Gómez-Rodríguez y J. Bascompte, *Proc. R. Soc. B* **273**, 1429 (2006).

## Modelado y simulación de procesos de adsorción en arcillas con pilares intercalados

N. G. Almarza, E. Lomba, C. Martín y A. Gallardo\*

*Grupo de Química-Física Teórica, Instituto de Química-Física Rocasolano, CSIC, 28006 Madrid*

En la actualidad existe un gran interés por el estudio de materiales microporosos debido a sus aplicaciones industriales. Algunos de los materiales microporosos más importantes son las zeolitas, arcillas y carbonos activos. En nuestro trabajo, nos centramos en el estudio de las arcillas con pilares intercalados (PILCS). Estas arcillas pueden sintetizarse con composiciones y distancias interlaminales diferentes, lo que les proporciona propiedades catalíticas y de adsorción también diferentes. Una de las características más importante de estos materiales es el volumen de microporos, esta magnitud no puede determinarse de forma única por medio de técnicas de espectroscopía de rayos X, por lo que es necesario recurrir a técnicas experimentales de adsorción<sup>1</sup>. Con las técnicas espectroscópicas tan sólo puede determinarse la altura de las cavidades del microporo (altura de los pilares). La técnica más utilizada para la caracterización de la microporosidad es el análisis de las isothermas de adsorción. La información que se obtiene con este tipo de análisis no es sólo del volumen de microporos, ya que también se puede obtener información de factores energéticos.

Estudiamos modelos simples de estas arcillas PILCS, cuyos poros se describen como dos láminas paralelas con pilares cilíndricos intercalados y distribuidos aleatoriamente.

Mediante simulaciones de Monte Carlo en dos dimensiones y utilizando la colectividad canónica creamos configuraciones desordenadas de pilares. Con el conjunto de configuraciones de pilares estudiamos el volumen accesible por el adsorbato y además realizamos estudios de percolación para determinar el radio umbral de pilar para el que se impide la adsorción de las partículas de fluido.

Por otro lado, simulamos los procesos de adsorción de las partículas de fluido mediante métodos de Monte Carlo en la colectividad macrocanónica. En estudios anteriores realizados por otros autores se hicieron simulaciones de adsorción en materiales porosos con pilares distribuidos uniformemente<sup>2</sup>. La aleatoriedad en la distribución de los pilares hace que se trate de un problema más complejo, propio de los sistemas con *quenched randomness* que poseen otros sistemas físicos como los vidrios de spin.

---

\* a.gallardo@iqfr.csic.es

<sup>1</sup> J. M. Guil, J. A. Perdigón-Melón, M. Brotas de Carvalho, A. P. Carvalho y J. Pires, *Micropor. Mesopor. Mater.* **51**, 145 (2002).

<sup>2</sup> D. Cao y W. Wang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **3**, 3150 (2001).

## A cluster algorithm for Monte Carlo simulation at constant pressure

N. G. Almarza\*

*Grupo de Química-Física Teórica, Instituto de Química-Física Rocasolano (CSIC), C/ Serrano 119, 28006 Madrid*

We propose an efficient algorithm<sup>1</sup> to sample the volume in Monte Carlo simulations in the isobaric-isothermal ensemble.

The method is designed to be applied in the simulation of hard-core models at high density. The algorithm is based in the generation of clusters of particles. At the volume change step, the distances between pairs of particles belonging to the same cluster do not change. This is done by rescaling the positions of the center of mass of each cluster instead of the position of each individual particle.

We have tested the performance of the algorithm by simulating fluid and solid phases of hard spheres, finding that in both cases the algorithm is much more efficient than the standard procedure. Moreover, the efficiency of the method measured in terms of correlation "time"

does not depend on the system size in contrast with the standard method, in which the sampling becomes rapidly inefficient as the system size increases.

We have used the procedure to compute with high precision the equation of state of the face-centered cubic phase of the hard sphere system for different system sizes. Using these results we have estimated the equation of state at the thermodynamic limit. The results are compared with different equations of state proposed in the literature<sup>2,3</sup>.

---

\* noe@iqfr.csic.es, <http://www.qft.iqfr.csic.es>

<sup>1</sup> N. G. Almarza, J. Chem. Phys. **130**, 184106 (2009).

<sup>2</sup> J. Kolafa, S. Labík, and A. Malijevský, Phys. Chem. Chem. Phys. **6**, 2335 (2004).

<sup>3</sup> R. J. Speedy, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 4387 (1998).



## Hidrodinámica fluctuante en un gas granular

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

Área de Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de Sevilla, Apartado de Correos 1065, 41080 Sevilla

Partiendo de las ecuaciones cinéticas para las fluctuaciones y correlaciones de un gas diluido de esferas duras inelásticas con coeficiente normal de restitución  $\alpha$ , es posible construir una ecuación de Boltzmann-Langevin para la función de distribución monoparticular del estado de enfriamiento homogéneo. Esta ecuación es la ecuación de Boltzmann linealizada con un término fluctuante de ruido blanco. Las ecuaciones de balance para los campos hidrodinámicos fluctuantes han sido derivadas. Aparecen en las ecuaciones hidrodinámicas nuevas fuerzas fluctuantes que no aparecían en el límite elástico ( $\alpha \rightarrow 1$ ).

El caso particular de la velocidad transversal en el estado de enfriamiento homogéneo es analizado en detalle. Sus fluctuaciones pueden ser descritas por medio de una ecuación de Langevin, que presenta dos diferencias fundamentales con la teoría de Landau-Lifshitz: el ruido no es blanco y su segundo momento no viene dado por la viscosidad  $\tilde{\eta}$ , sino por otro coeficiente  $\tilde{\eta}'$ . Esto representa un fuerte fallo de las relaciones de fluctuación-disipación<sup>1</sup>. En la figura, se ha representado la viscosidad  $\tilde{\eta}$  (círculos) y el nuevo coeficiente  $\tilde{\eta}'$  (cuadrados) determinando ambos las fluctuaciones de la velocidad transversal. Las líneas continua y discontinua son las predicciones teóricas, respectivamente, normalizadas con el valor elástico de la viscosidad,  $\tilde{\eta}_e$ . Los círculos ( $\tilde{\eta}/\tilde{\eta}_e$ ) y cuadrados ( $\tilde{\eta}'/\tilde{\eta}_e$ ) son los resultados de simulaciones de Dinámica Molecular<sup>2</sup>. La línea punteada es el resultado que se obtiene en la aproximación de ruido blanco. Como puede

verse, los resultados de simulación están en muy buen acuerdo con nuestras predicciones teóricas.

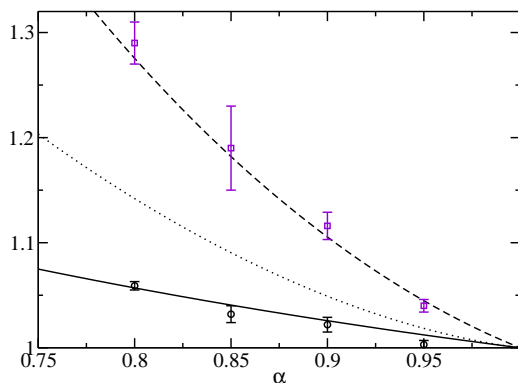


Figura 1. La viscosidad  $\tilde{\eta}$  (círculos) y el nuevo coeficiente  $\tilde{\eta}'$  (cuadrados) que determinan las fluctuaciones de la velocidad transversal en el estado de enfriamiento homogéneo.

\* gsoria@us.es

<sup>1</sup> J. J. Brey, P. Maynar y M. I. García de Soria, Phys. Rev. E. **79**, 051305 (2009).

<sup>2</sup> J. J. Brey, M. I. García de Soria y P. Maynar, Europhys. Lett. **84**, 24002 (2008).

## Phase diagram, correlation gap, and critical properties of the Coulomb glass

Martin Goethe and Matteo Palassini

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

In disordered insulators, the localized electrons cannot screen effectively the Coulomb interaction at low temperature. Therefore, many-electron correlations are important in this regime. The long-range repulsion induces a soft ‘‘Coulomb’’ gap in the single-particle density of states (DOS). Efros and Shklovskii (ES)<sup>1</sup> showed that the gap has a universal form  $g(\epsilon) \propto |\epsilon - \mu|^\delta$  near the chemical potential  $\mu$ , with  $\delta \geq d - 1$  in  $d$  dimensions, and argued for a saturated bound  $\delta = d - 1$ , which modifies the variable-range hopping resistivity  $\ln R \sim T^{-x}$  from Mott’s law  $x = 1/(d + 1)$  to  $x = 1/2$ . Both the existence of the gap and the crossover to  $x \simeq 1/2$  at low temperature  $T$  have been confirmed experimentally and in numerical simulations, but the validity of  $\delta = 2$  for  $d = 3$  has yet to be firmly established.

It was also suggested long ago<sup>2</sup> that disordered insulators might enter a glass state at low temperature. Ample experimental and numerical evidence of glassy nonequilibrium effects in these systems has been obtained since<sup>3</sup>. However, the existence of an *equilibrium* glass phase (GP), and the relation between glassy behavior and the Coulomb gap, remain unclear.

In the poster, we investigate these issues via extensive Monte Carlo simulations of the Coulomb glass lattice model with on-site disorder, described by the Hamiltonian

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (n_i - 1/2) \frac{1}{r_{ij}} (n_j - 1/2) + W \sum_i n_i \varphi_i \quad (1)$$

where  $n_i \in \{0, 1\}$  are the occupation numbers for the  $N = L^3$  sites of a cubic lattice with  $\sum_{i=1}^N n_i = N/2$  and  $r_{ij}$  is the distance between  $i$  and  $j$ . The on-site energies  $\varphi_i$  are independently drawn from a Gaussian distribution with zero mean and variance unity. We surround the central simulation cell by infinite periodic images and include all pairwise interactions. This reduces finite size effects and unphysical side effects like a hard gap in the DOS very close to  $\mu$ .

Our results<sup>6</sup> presented in the poster are as follows. (i) No Glass phase is found for  $T$  well below the mean-field prediction  $T_g$ <sup>4</sup>. (ii) The correlation length  $\xi_{L=\infty}^G$  increases rapidly, and possibly diverges, as  $T \rightarrow 0$ , as a consequence of the long-range interaction. (iii) For large  $W$ , the DOS scales as  $g(\epsilon, T) = T^\delta f(\epsilon/T)$  with  $\delta \simeq 2$ , in agreement with the ES law. (iv) As  $W$  is decreased towards the charge-ordered phase (COP), scaling breaks down and the effective  $\delta$  increases continuously to  $\delta > 3$ .

We also study in detail the fluid-COP transition of this model, which for  $W > 0$  had previously not been characterized, except at the mean-field level<sup>4,5</sup>.

We find: (v) A COP exists below a critical disorder strength  $W(T)$ . (vi) The fluid-COP transition is consistent with the Random Field Ising model (RFIM) universality class, which shows that the Coulomb interaction is effectively screened near the transition.

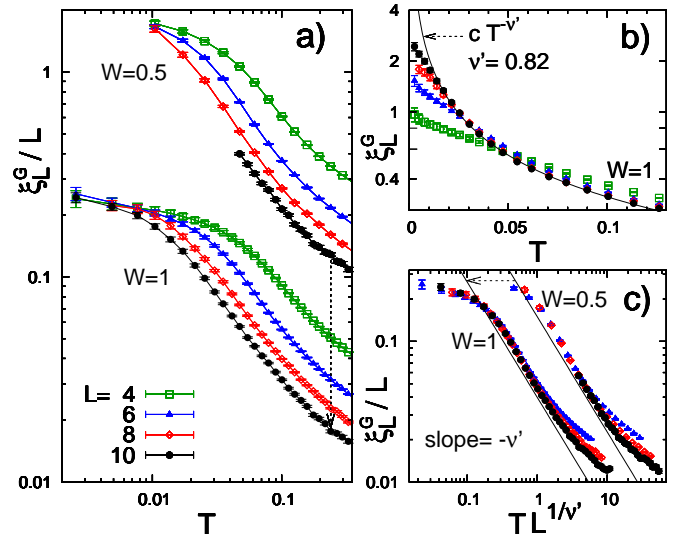


Figure 1. (a) Glass correlation length  $\xi_L^G$  at  $W = 1$  and  $W = 0.5$  (shifted upwards by a factor 7). The absence of crossing is evidence against the existence of an equilibrium glass transition<sup>6</sup>. (b) Power-law fit of  $\xi_{L=10}^G = c T^{-\nu'}$  for  $W = 1$ . (c) Scaling plot  $\xi_L^G = L f(T L^{1/\nu'})$  for  $W = 1$  and  $W = 0.5$  (shifted to the right by a factor 5). Figure (b) and (c) suggest a divergence of the correlation length in the limit  $T \rightarrow 0$ .

- <sup>1</sup> A. L. Efros and B. I. Shklovskii, J. Phys. C **8**, 49 (1975).
- <sup>2</sup> J. H. Davies, P. A. Lee, and T. M. Rice, Phys. Rev. B **29**, 4260 (1984).
- <sup>3</sup> M. Müller and S. Pankov, Phys. Rev. B **75**, 144201 (2007) and references therein.
- <sup>4</sup> S. Pankov and V. Dobrosavljević, Phys. Rev. Lett. **94**, 046402 (2005).
- <sup>5</sup> V. Malik and D. Kumar, Phys. Rev. B **76**, 125207 (2007).
- <sup>6</sup> M. Goethe and M. Palassini, cond-mat/08101047 (2008).

## Evaluación de la fiabilidad de las aproximaciones del modelo TSAM mediante simulación molecular

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

*Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias de Ourense, Universidad de Vigo, As Lagoas s/n, 32004 Ourense*

Los fluidos asociados, tales como alcoholes o aminas, exhiben un comportamiento termodinámico singular que se manifiesta especialmente en las derivadas segundas del potencial termodinámico.

En los últimos años, se ha propuesto el modelo de dos estados TSAM<sup>1-4</sup> con el objeto de explicar la dependencia de la capacidad calorífica isobárica residual  $C_p^{res}$  con la temperatura  $T$  para este tipo de sistemas. La idea principal del TSAM consiste en que cada molécula del fluido puede residir en dos únicos estados: estado disociado o como monómero (denotado por A y con energía  $U_A$  y volumen  $V_A$ ) y estado asociado (denotado como  $A_i$  con energía  $U_{A_i}$  y volumen  $V_{A_i}$ ). Aunque, en principio, estos parámetros pueden depender de la temperatura y presión, el modelo se aplica bajo las aproximaciones de que la energía y el volumen de disociación,  $U_A - U_{A_i}$  y  $V_A - V_{A_i}$  respectivamente, y las derivadas de  $U_A$  y  $V_A$  se mantienen constantes. Bajo estas simplificaciones, las curvas  $C_p^{res} - T$  han sido cualitativamente descritas por el modelo. Así mismo, se ha aplicado satisfactoriamente a otras funciones respuesta como la expansividad térmica isobárica y la compresibilidad isotérmica.

Aunque las aproximaciones del modelo parecen adecuadas, es conveniente profundizar en esta cuestión. En este sentido, se ha llevado a cabo un análisis de las mismas mediante simulación molecular por el método de Monte Carlo. Concretamente, se han realizado

simulaciones en el colectivo NpT de metanol descrito por el potencial OPLS en la isobara de 50 MPa entre 160 y 1500 K. Para cada estado termodinámico, se ha computado el número de monómeros y de moléculas asociadas, así como la energía y volumen correspondiente a cada uno de los dos estados con la ayuda del criterio geométrico de puentes de hidrógeno<sup>5</sup> y un análisis de poliedros de Voronoi<sup>6</sup>. A partir de estas cantidades, se han determinado los parámetros del modelo y se ha estudiado su comportamiento con la temperatura.

---

\* ga\_paula@uvigo.es

<sup>1</sup> M. Medeiros, J. Phys. Chem. B **108**, 2676 (2004).

<sup>2</sup> C. A. Cerdeiriña, D. González-Salgado, L. Romaní, M. C. Delgado, L. A. Torres y M. Costas, J. Chem. Phys. **120**, 6648 (2004).

<sup>3</sup> M. Medeiros, C. O. Armas-Alemán, M. Costas y C. A. Cerdeiriña, Ind. Eng. Chem. Res. **45**, 2150 (2006).

<sup>4</sup> C. A. Cerdeiriña, J. Troncoso, D. González-Salgado, G. García-Miaja, G. O. Hernández-Segura, D. Bessiéres, M. Medeiros, L. Romaní y M. Costas, J. Phys. Chem. B **111**, 1119 (2007).

<sup>5</sup> M. Chalaris y J. Samios, J. Phys. Chem. B **103**, 1161 (1999).

<sup>6</sup> J. C. Gil Montoro y J. L. F. Abascal, J. Phys. Chem. B **97**, 4211 (1993).

## Cooperativity of single-headed kinesin motors

Javier G. Orlandi<sup>†\*</sup>, Carles Blanch<sup>†</sup>, Jan Brugués<sup>‡</sup>, and Jaume Casademunt<sup>†</sup>

<sup>†</sup> *Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de Barcelona, Avinguda Diagonal 647, E-08028 Barcelona, Spain*

<sup>‡</sup> *Department of Systems Biology, Harvard Medical School, 200 Longwood Avenue, WAB536, Boston, MA 02115, USA*

From the myriad of different molecular motors involved in intracellular transport, one clearly differentiates itself from the rest: the single-headed kinesin KIF1A<sup>1</sup>. While most processive motors are composed of two motor domains that bind sequentially to the microtubule, KIF1A has only one. Due to this structural difference, its movement becomes very different from that of most motors of the kinesin family.

The commonly used “hand-over-hand” models fail to describe the dynamics of KIF1A. Its dynamics are better described by models that “jump” through the microtubule, rather than walk. Due to these jumps, in which it weakly detaches from the microtubule, the motor movement becomes dominated by diffusion, yet paradoxically it may be even more processive than conventional kinesin.

It is believed that KIF1A, which is found mostly in neurons, is involved in the anterograde axonal transport. This transport (from the cell body to the axon terminus), being essential for neurons, supplies materials consumed in both the axon and the synapse. The reason why neurons rely on KIF1A and not conventional kinesins for this transport remains a mystery. Indeed, KIF1A motors are rather inefficient when taken individually, compared to conventional kinesins. However, axonal transport specifically requires ensuring processivity over long distances, which is typically achieved by increasing the number of motors pulling on the transported organelle. Accordingly, KIF1A motors could be advantageous if they would perform collectively much better than conventional kinesin. Remarkably, most neurodegenerative diseases (such as Alzheimer) are associated to disorders in intracellular traffic, so understanding the collective dynamics of single-headed kinesin motors could be potentially very important in neuromedicine.

It turns out that the dynamics of KIF1A are well described by a very simple model of an isothermal, two-state Brownian ratchet, for which all parameters have been determined experimentally, and which happens to be a paradigmatic model of nonequilibrium transport in general. Furthermore, recent studies of the collective behavior of such ratchet-like models when the external load in unevenly distributed on the motors (such as for transport of soft cargoes) have revealed nontrivial collective dynamics, leading generically to enhanced cooperativity that largely outperforms the naive superposition of the effect of individual motors<sup>2</sup>. It is thus plausible to expect that a high level of cooperativity of KIF1A motors could be one of the

reasons why it is involved in axonal traffic. Solving this issue and understanding the unconventional structure of this motor has been our main motivation for this study.

In this work we present a detailed numerical study of the collective dynamics of unequally loaded, interacting KIF1A motors, modeled individually as a two-state Brownian ratchet (see Fig. 1) with realistic parameters for the single-motor description. We consider hard-core repulsion and also different types of attractive potentials superposed to the hard-core repulsion. We also include the kinetics of attachment/detachment of motors to/from the microtubule, including force-dependent rates. With this ingredients the model is quantitatively predictive and will be the base for design of future experiments. This could include, on the one hand, a biomimetic set-up equivalent to that of Ref. [3] but now with single-headed kinesin motors, which would allow a good quantitative comparison of the collective performance of single-headed and two-headed kinesins. On the other hand, the role of the interaction between motors on their collective performance could be explored experimentally through the appropriate choice of cargoes, for instance taking advantage of the magnetic response of superparamagnetic beads to an external field.

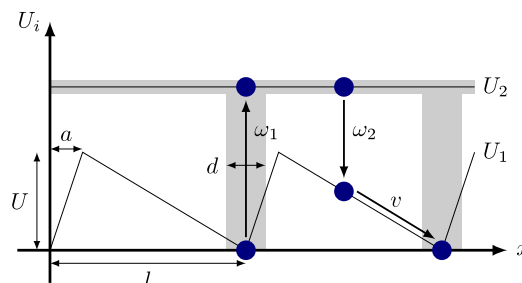


Figura 1. Representation of the potential describing the KIF1A-microtubule interaction. In grey, the localized transitions' zones. See text for further information.

\* orlandi@ecm.ub.es

<sup>1</sup> Y. Okada, H. Higuchi, and N. Hirokawa, *Nature* **424**, 574 (2003).

<sup>2</sup> J. Brugués and J. Casademunt, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 118104 (2009).

<sup>3</sup> C. Leduc, O. Campàs, K. B. Zeldovich, A. Roux, P. Jolimaître, L. Bourel-Bonnet, B. Goud, J. Joanny, P. Basserau, and J. Prost, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101**, 17096 (2004).

## Collective dynamics of interacting Brownian motors under unequal loading

Javier G. Orlandi<sup>†\*</sup>, Carles Blanch<sup>†</sup>, Jan Brugués<sup>‡</sup>, and Jaume Casademunt<sup>†</sup>

<sup>†</sup> *Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de Barcelona, Av. Diagonal 647, Barcelona, Spain*

<sup>‡</sup> *Department of Systems Biology, Harvard Medical School, 200 Longwood Avenue, WAB536, Boston, MA 02115, USA*

The collective behavior of small groups of molecular motors plays a crucial role in different biological processes, such as in the context of intracellular traffic. In transport of soft cargoes (fluid-like membranes such as vesicles or endoplasmic reticulum tubes) it has been shown that the cooperative action of groups of processive motors is required<sup>1,2</sup> even though the physics of the membrane restricts very much the number of motors that can exert force directly on the cargo. As a result, motors can only cooperate and transmit forces through their mutual motor-motor interactions. In this context, the spontaneous arrangement of motors is such that the external load is unevenly distributed among motors, and as a consequence of the single-motor velocity-force relationship, clusters of motors are naturally formed even with only repulsive interactions.

The collective dynamics of self-organized clusters of weakly coupled motors (free to move relative to each other) under unequal loading, has been studied recently from different perspectives<sup>2,3</sup>. It has been emphasized that unequal loading of processive interacting molecular motors gives rise to surprising, nontrivial collective behavior. As a general rule, unequal loading strongly enhances cooperativity of motors, in such a way that the cooperative action may largely outperform the naive superposition of individual motors. In addition, if there is a (weak) attraction between motors, then the cluster is able to self-adjust its size to optimize the collective performance even further. In that case, the individual contribution of each motor to the group under a finite load is even larger than the maximal possible effect of the (unloaded) motor if isolated<sup>3</sup>.

Extending the work of Ref. [3] based on a two-state isothermal ratchet model, which in the biological context is particularly adequate for the modeling of single-headed kinesin, we perform exhaustive numerical simulations to elucidate in detail the interplay between the type of interactions between motors (attractive and/or repulsive, short vs. long-ranged), the individual force-velocity curves and the collective performance, characterized by velocity-force curves and efficiency curves.

On the one hand we focus on the quantitative characterization of enhanced cooperativity and on the understanding of the underlying mechanisms responsible for the different types of nontrivial cooperativity, such as the generation of non-monotonic velocity-force curves. On the other hand, we pay particular attention to the criteria to ensure mean-field behavior (additive cooperativity) and their direct numerical check of convergence to this limiting case.

Finally, we explore different ranges of parameters and extensions of the model to characterize to some extent the degree of generality of our results. As a general

conclusion we show that for ratchet-like molecular motors, the enhanced cooperativity of motors when they are unequally loaded is quite generic. It remains an open question to what extent biological systems may take advantage of these effects.

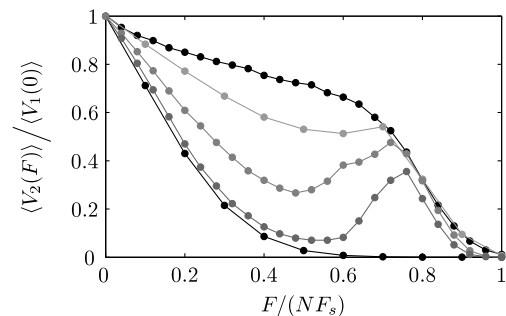


Figure 1. Velocity of a motor pair normalized to the velocity of a free motor, as a function of the external load normalized to the stall force and  $N = 2$  motors with hard-core repulsion. Different curves show the effect of changing the hard-core size.

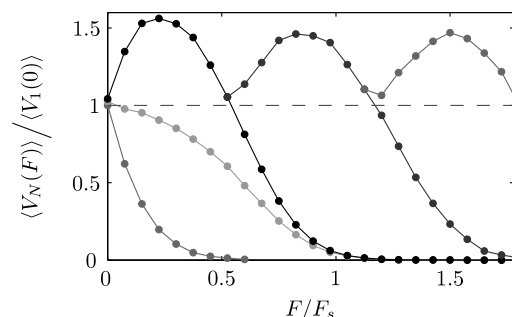


Figure 2. Velocities of different types of interactions and cluster sizes. Curves with “hops” correspond to a weakly binding interaction between motors, for  $N = 2, 3, 4$  respectively. Other two curves show hard-core repulsion (middle) and mean-field (bottom).

\* orlandi@ecm.ub.es

<sup>1</sup> C. Leduc, O. Campàs, K. B. Zeldovich, A. Roux, P. Jolimaître, L. Bourel-Bonnet, B. Goud, J. Joanny, P. Basserau, and J. Prost, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **101**, 17096 (2004).

<sup>2</sup> O. Campàs, Y. Kafri, K. B. Zeldovich, J. Casademunt, and J.-F. Joanny, Phys. Rev. Lett. **97**, 038101 (2006).

<sup>3</sup> J. Brugués and J. Casademunt, Phys. Rev. Lett. **102**, 118104 (2009).

## Spontaneous ordering against an external field in nonequilibrium systems

J. C. González-Avella\*, M. G. Cosenza, V. M. Eguíluz, and M. San Miguel

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

A rather general question considered in the framework of statistical physics of interacting particles (particles, spins, agents) is the competition between local particle-particle interactions (collective self-organization) and particle interaction with a global externally applied field or with a global mean field<sup>1,2</sup>. Common wisdom answer to this question is that a strong external field dominates over local particle-particle interactions and orders the system by aligning particles with the broken symmetry imposed by the field. However, this is essentially an equilibrium concept which is not generally valid for generic non-potential interactions.

In the context of studies of collective phenomena in general systems of interacting particles, including biological and social systems, new forms of particle-particle and particle-field interactions are being considered. There are forms of interaction for which it turns out that a sufficiently intense external field induces disorder in the system<sup>2-4</sup>, in contrast with the behavior in, for example, Ising-type systems. Other intriguing dynamical phenomenon is the collectively ordering in a state different from the one preferred by the forcing field. The external field might break symmetry in a given direction, but the system orders, breaking symmetry in a different direction. In this paper we examine this situation showing that these phenomena happen in two recently well studied non-equilibrium models<sup>5-9</sup>. What is common to these two models is that the particle-particle interaction rule is such that no interaction exists for some relative values of the states characterizing the particles that compose the system. A subsidiary question is the dependence of this phenomenon on the topology of the network of interactions. We show that the phenomenon is not found for particles interacting with its nearest neighbors in a regular lattice, but it occurs in a globally coupled system: it emerges as long range links in the network are introduced when going from the regular lattice to a random network via small world network<sup>10</sup>.

In these sense, we study the collective behavior

of nonequilibrium systems subject to an external field with a dynamics characterized by the existence of non-interacting states. Aiming at exploring the generality of the results, we consider two types of models according to the nature of their state variables: (i) a vector model, where interactions are proportional to the overlap between the states, and (ii) a scalar model, where interaction depends on the distance between states. In both cases the system displays three phases: two ordered phases, one parallel to the field, and another orthogonal to the field; and a disordered phase. The phase space is numerically characterized for each model in a fully connected network. By placing the particles on a small-world network, we show that, while a regular lattice favors the alignment with the field, the presence of long-range interactions promotes the formation of the ordered phase orthogonal to the field.

---

\* juancarlos@ifisc.uib-csic.es

<sup>1</sup> D. Lima, D. Battogtokh, A. S. Mikhailov, G. Dewel, and P. Borkmans, *Europhys. Lett.* **42**, 631 (1998).

<sup>2</sup> J. C. González-Avella, V. M. Eguíluz, M. G. Cosenza, K. Klemm, J. L. Herrera, and M. San Miguel, *Phys. Rev. E* **73**, 046119 (2006).

<sup>3</sup> F. Gargiulo, S. Lottini, and A. Mazzoni, arXiv:0807.3937 (2008).

<sup>4</sup> J. C. González-Avella, M. G. Cosenza, and K. Tucci, *Phys. Rev. E* **72**, 065102(R) (2005).

<sup>5</sup> R. Axelrod, *J. Conflict Res.* **41**, 203 (1997).

<sup>6</sup> C. Castellano, M. Marsili, and A. Vespignani, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3536 (2000).

<sup>7</sup> G. Deffuant, D. Neau, F. Amblard, and G. Weisbuch, *Adv. Complex Syst.* **3**, 87 (2000).

<sup>8</sup> G. Weisbuch, G. Deffuant, F. Amblard, and J. P. Nadal, *Complexity* **7**, 55 (2002).

<sup>9</sup> C. Castellano, F. Santo, and V. Loreto, arxiv:0710.3256 (2007).

<sup>10</sup> D. J. Watts and S. H. Strogatz, *Nature* **393**, 440 (1998).

## Efectos cuánticos en el máximo de densidad del agua

E. G. Noya<sup>†</sup>, C. Vega<sup>†</sup>, L. M. Sesé<sup>‡</sup> y R. Ramírez<sup>§</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Química-Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, E-28040 Madrid*

<sup>‡</sup> *Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas, Facultad de Ciencias, UNED, Paseo Senda del Rey 9, 28040 Madrid*

<sup>§</sup> *Instituto de Ciencia de Materiales, CSIC, Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid*

Una de las propiedades más características del agua es la existencia de un máximo en la densidad a 4°C. Experimentalmente se ha observado que dicho máximo aparece a distintas temperaturas para diferentes isótopos del agua. En particular, se ha encontrado que el máximo desplaza a temperaturas mayores a medida que la masa del hidrógeno aumenta. Así para el agua deuterada el máximo aparece a 11.18°C y para el agua triteada a 13.40°C. Este comportamiento se debe a la existencia de efectos cuánticos en el agua. En este trabajo, hemos investigado dichos efectos cuánticos para varios isótopos de agua mediante simulaciones Monte Carlo con el formalismo path integral. Las moléculas de agua se han descrito utilizando el modelo de potencial TIP4P/2005, que es rígido y no polarizable. Las simulaciones realizadas predicen que el máximo en el agua triteada aparece a una temperatura en torno a 9K mayor que en el agua, en excelente concordancia con los resultados

experimentales. Además, hemos obtenido que el máximo en una simulación clásica se desplaza a una temperatura 30K mayor con respecto al máximo del agua simulado cuánticamente. Este es un resultado sorprendente, ya que en la literatura está ampliamente aceptado que la diferencia entre el máximo del agua y del agua clásica (es decir, con masa infinita) es del orden 10-15K, lo que se obtiene de representar los datos experimentales de la temperatura del máximo en función del inverso de la masa de hidrógeno y extrapolando a masa infinito. Nuestros resultados indican que dicha convergencia no es lineal o, dicho de otra forma, que existen efectos no lineales en la convergencia de la temperatura del máximo con el inverso de la masa del hidrógeno. Finalmente, hemos propuesto un nuevo modelo de agua, el TIP4PQ/2005, que reproduce la temperatura del máximo en densidad experimental cuando se realizan simulaciones que incluyen efectos cuánticos.

## Vertical forcing in bidimensional Turing patterns

J. Guiu Souto<sup>\*</sup>, J. Carballido-Landeira, V. Pérez-Villar, and A. P. Muñuzuri

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Santiago de Compostela, 15872 Santiago de Compostela*

Belousov-Zhabotinsky reaction is one of the most studied reaction-diffusion system. When this reaction is included in micelles (BZ-AOT), a huge variety of structures occurs, including Turing patterns. In our experiment, we apply a vertical forcing over 2D-pattern formation surface. Preliminary results indicate changes in Turing wavelength due to this extra energy. Finally, to explain the results obtained we include numerical results. When the field is applied under Spots configuration, there is a transition from a stationary regime to a time-dependence one, but remaining space periodic,

thus, exhibiting some sort of Hopf bifurcation. In Spots configuration, application of an external field induced a movement of spots in the sense of the electric field. In stripe configuration, the resulting pattern is dependent on the applied voltage; large voltages completely reoriented stripes in the direction of the electric field.

---

<sup>\*</sup> [jacobo.guiu@rai.usc.es](mailto:jacobo.guiu@rai.usc.es)



## Structure of Bred vectors in spatio-temporal chaos

Sarah Hallerberg\*, Diego Pazó, Juan M. López, and Miguel A. Rodríguez

*Instituto de Física de Cantabria (IFCA), CSIC-Universidad de Cantabria, 39005 Santander*

We propose a method to estimate the spectrum of Lyapunov exponents corresponding to the most expanding directions using Bred vectors. Bred vectors are stationary finite fluctuations which are periodically normalized. Their most frequent application are ensemble forecasts for weather predictions, since their computation is less demanding than the computation of Lyapunov vectors. The dynamics of perturbations in spatially extended chaotic systems can be related to properties of scale invariant growing surfaces<sup>1-3</sup>. We study now, in the model proposed by Lorenz in 1996<sup>4</sup>, whether similar scaling properties, can also be observed for Bred vectors. Therefore we use one Bred vector instead of an ensemble of Bred vectors and vary its perturbation amplitude  $\epsilon_0$ <sup>5</sup>. If  $\epsilon_0$  is very small, the corresponding Bred vector is effectively the leading Lyapunov vector. As  $\epsilon_0$  increases, the size of the perturbation increases and the corresponding perturbed trajectory differs significantly from the unperturbed trajectory. In analogy to Lyapunov exponents, we can now compute “Bred exponents”

$$\lambda_m^{BV} = \frac{1}{\Delta t} \left\langle \ln \frac{|\delta \mathbf{u}_m(x, t + \Delta t)|}{|\delta \mathbf{u}_m(x, t)|} \right\rangle \quad (1)$$

in order to estimate the Lyapunov spectrum. Note however, that the index  $m$  of the Bred vectors does not correspond to the index of Lyapunov vectors. More precisely,  $m$  is in fact a continuous variable, given by the logarithm of the perturbation amplitude  $\epsilon_0$ . In order to estimate the spectrum of Lyapunov exponents we have to find a mapping  $f : m \rightarrow n$ , which relates a Bred vector with a given logarithmic perturbation amplitude  $m$  to the  $n$ -th Lyapunov vector.

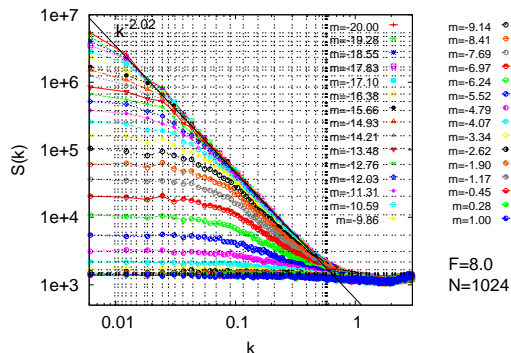


Figure 1. The structure factors  $S(k)$  for a Lorenz '96 system of length  $L = 1024$  and  $F = 8.0$  and varying perturbation amplitudes.

We obtain this mapping indirectly by constructing a surface  $h_m(x, t) = \ln |\delta \mathbf{u}_m(x, t)|$ , with  $\delta \mathbf{u}_m(t) =$

$[\delta u_m(x, t)]_{x=1}^{x=L}$ . The surface growth formalism allows to identify different universality classes in spatio-temporal chaotic systems<sup>1</sup>, especially the universality class of KPZ (Kardar-Parisi-Zhang), which has been widely observed in non-Hamiltonian systems as e.g., in the Lorenz '96 system studied in this contribution<sup>3</sup>. Consequently, the structure factors  $S(k) = \langle \hat{h}_m(k, t) \hat{h}_m(-k, t) \rangle_t$ , with  $\hat{h}_m(k, t) = \sum_x \exp(ikx) h_m(x, t)$  decay as  $k^{-2}$  as  $\epsilon_0 \rightarrow 0$ . For larger values of the perturbation strength  $\epsilon_0$  and small  $k$  the structure factors decays significantly slower than  $k^{-2}$  up to a certain value  $k_c(m)$ , (see Fig. 1). Thus, the values  $k_c(m)$ , indicate the crossover between the two different regimes, (flat and  $k^{-2}$ ) and represent cut off lengths  $l_c$ . Frequencies larger than  $k_c(m)$  correspond to KPZ-like structures of sizes smaller than  $l_c$ . We can use the estimated values  $k_c(m)$  in order to relate Lyapunov and Bred exponents via their corresponding cut of lengths  $l_c^{LV} \approx (L/n)^\theta$ , with  $\theta \approx 1$  and  $l_c^{BV} = \pi/k_c(m)$ . We then identify corresponding exponents by identifying corresponding length scales, i.e.,  $\lambda_n^{LV} = \lambda_m^{BV}$ , if  $l_c^{LV}(n) = l_c^{BV}(m)$ .

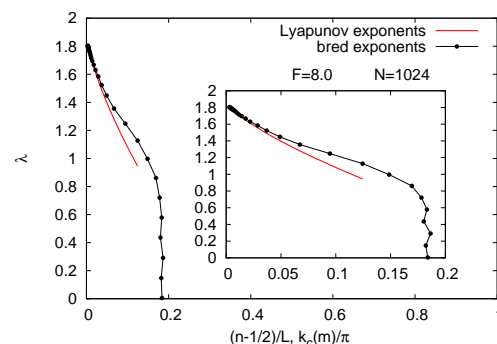


Figure 2. The obtained estimate of the Lyapunov spectrum.

As Fig. 2 indicates, this method works well for the first part of the spectrum, close to the leading Lyapunov exponent, since the Bred vectors have a piecewise KPZ structure in this regime.

\* sarah@ifca.unican.es

<sup>1</sup> A. Pikovsky and A. Politi, *Nonlinearity* **11**, 1049 (1998).

<sup>2</sup> I. G. Szendro *et al.*, *Phys. Rev. E* **76**, 025202(R) (2007).

<sup>3</sup> D. Pazó *et al.*, *Phys. Rev. E* **78**, 016209 (2008).

<sup>4</sup> E. N. Lorenz in *Proceedings of the Seminar on Predictability, Vol I. ECMWF Seminar*, edited by T. Palmer (ECMWF, Reading, 1996).

<sup>5</sup> C. Primo *et al.*, *Phys. Rev. E* **72**, 015201 (R) (2005).

## Nonlocally interacting particle systems with Lévy flights

Els Heinsalu<sup>\*</sup>, Emilio Hernández-García, and Cristóbal López

*IFISC, Institute for Cross-Disciplinary Physics and Complex Systems (UIB-CSIC), Campus Universitat de les Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain*

Interacting particle systems help us to model and to understand various problems in fields as diverse as condensed matter physics, chemical kinetics, population biology (individual based models), or sociology (agent based models).

A simple model that has been considered by several authors in the context of population dynamics, in particular in order to address plankton distribution and patchiness, is the Brownian bug model<sup>1,2</sup>. It consists of an ensemble of Brownian particles, each one dying or reproducing with given probabilities per unit of time. This basic model lacks any interaction between the particles, present in real biological systems. In more realistic models the inter-particle interaction has been taken into account through the fact that the birth and death of individuals depends on the spacial distribution of the bugs<sup>3,4</sup>: the birth and death rates of the bugs were assumed to be functions of the number of neighbors within a given distance of each bug.

At the same time, it is known that many systems are characterized by anomalous diffusion, i.e., the mean

square displacement does not grow linearly in time as in the case of normal Brownian motion, but slower (subdiffusion) or faster (superdiffusion). In particular, it has been reported that bacterial motion is described by Lévy statistics<sup>5</sup>, as well as the movement of spider monkeys in search of food. Motivated by this we investigate how the occurrence of the long jumps of the individuals influences the collective behavior.

---

<sup>\*</sup> els@ifisc.uib-csic.es, <http://ifisc.uib-csic.es/>

<sup>1</sup> Y.-C. Zhang, M. Serva, and M. Polikarpov, *J. Stat. Phys.* **58**, 849 (1990).

<sup>2</sup> B. Houchmandzadeh, *Phys. Rev. E* **66**, 052902 (2002).

<sup>3</sup> E. Hernández-García and C. López, *Phys. Rev. E* **70**, 016216 (2004).

<sup>4</sup> E. Hernández-García and C. López, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, S4263 (2005).

<sup>5</sup> R. Metzler and J. Klafter, *Phys. Rep.* **339**, 1 (2000).

## Scaling and robustness of finite-size Lyapunov exponents in surface ocean flows

Ismael Hernández-Carrasco<sup>†</sup>, Cristóbal López<sup>†</sup>, Antonio Turiel<sup>‡</sup>, and Emilio Hernández-García<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB), Campus Universitat de les Illes Balears, 07122 Palma de Mallorca*

<sup>‡</sup>*ICM, Institut de Ciències del Mar (CSIC), Passeig Marítim de la Barceloneta, 37-49, 08003 Barcelona*

Mixing and transport properties of the sea surface have been widely studied in recent years from the Lagrangian viewpoint, for which chaotic dynamics techniques have proven to be useful. Among these Lagrangian techniques the most used ones involve the computation of local Lyapunov exponents which measure the relative dispersion of transported particles. Finite-size Lyapunov exponents (FSLEs)<sup>1-4</sup> are quantities of this type which give information on dispersion processes but also, and even more importantly, can be used to detect and visualize Lagrangian Coherent Structures in the flow such as vortices, barriers to transport, fronts, etc.

We have analyzed surface velocity data of the Mediterranean Sea as obtained from the DieCAST circulation model. We have computed the FSLE from this data set, which provides a measure of oceanic horizontal stirring, and with their extreme values organizing transport. In order to study the intermittency and its impact in transport and mixing, the robustness

and other statistical properties, the FSLEs are computed at different spatial resolutions, both above and below that of the velocity field. In particular we have analyzed: i) the multifractal character of the spatial distribution of the FSLEs, ii) the influence of the eddy diffusivity in the filamental and vortex structures, iii) the robustness of the FSLEs by introducing errors in the velocity data, iv) the stretching in ocean flow.

---

<sup>1</sup> E. Aurell, G. Boffetta, A. Crisanti, G. Paladin, and A. Vulpiani, *J. Phys. A* **30**, 1 (1997).

<sup>2</sup> G. Boffetta, G. Lacorata, G. Redaelli, A. Vulpiani, and *Physica D* **159**, 58 (2001).

<sup>3</sup> F. d'Ovidio, V. Fernández, E. Hernández-García, and C. López, *Geophys. Res. Lett.* **31**, L17203 (2004).

<sup>4</sup> F. d'Ovidio, J. Isern-Fontanet, C. López, E. Hernández-García, and E. García-Ladona, *Deep-Sea Res. I* **56**, 15 (2009).

## Fuerza contractiva del anillo de FtsZ evaluada desde resultados experimentales

Ines Hörger y Pedro Tarazona\*

Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid

Con este trabajo queremos dar un paso hacia el entendimiento del mecanismo biofísico de la división celular bacteriana. Resultados experimentales recientes<sup>1</sup> indican que la proteína FtsZ es capaz, por si sola, de formar anillos sobre una membrana cilíndrica y producir una fuerza constrictiva.

En estos experimentos<sup>1</sup> *in vitro* se ha observado la deformación de liposomas cilíndricos causada por anillos formados por FtsZ-mts. FtsZ-mts es una proteína modificada que se ancla directamente a la membrana fosfolípida mediante una hélice anfipática. Al añadir GTP se formaron anillos asociados a hendiduras leves en la membrana.

Hemos estimado la fuerza radial, producida por el anillo de FtsZ, necesaria para estas deformaciones de la membrana y la hemos comparado con predicciones<sup>2</sup> basadas en otros experimentos *in vitro* donde se observaron filamentos de FtsZ adsorbidos en mica mediante microscopía de fuerza atómica (AFM). Las imágenes de AFM muestran polímeros formando espirales que hemos reproducido en simulaciones de dinámica de Langevin mediante atracción lateral entre filamentos. La extrapolación del modelo en 2D a geometría cilíndrica indica que debido a esta atracción lateral los filamentos pueden condensar formando un anillo que produce una fuerza de  $\approx 50 - 100 pN$ .

La energía libre de la membrana del liposoma en terminos del Hamiltoniano de Helfrich es:

$$F_{mem} = \int dA \left[ \frac{\kappa}{2} (H - H_0)^2 + \sigma \right], \quad (1)$$

siendo  $\sigma$  la tensión superficial,  $\kappa$  el módulo de curvatura y  $H_0$  la curvatura preferente. La contribución del anillo de FtsZ a la energía libre,

$$F_r = \oint dl \tau, \quad (2)$$

fue considerada como un multiplicador de Lagrange, con tensión de línea,  $\tau$ , que determina el alcance de la deformación. La minimización de la energía libre lleva a la forma de la deformación y a la fuerza necesaria para ella. La forma general de la deformación es una oscilación amortiguada que se convierte en oscilación no amortiguada solo en el límite de  $\sigma = 0$ . Para las deformaciones observadas en los liposomas esta fuerza es parecida a la fuerza estimada antes.

También hemos analizado un liposoma en el que una distribución de anillos de FtsZ formados a distancias pequeñas colapsa hasta dejar una distribución de anillos aparentemente estable. Hemos ampliado el análisis teórico a una distribución periódica de anillos a lo largo de un tubo cilíndrico y hemos visto que a distancias cortas los anillos sienten una fuerza efectiva atractiva entre ellos que se convierte en repulsiva cuando la distancia alcanza un valor crítico (ver Fig.1).

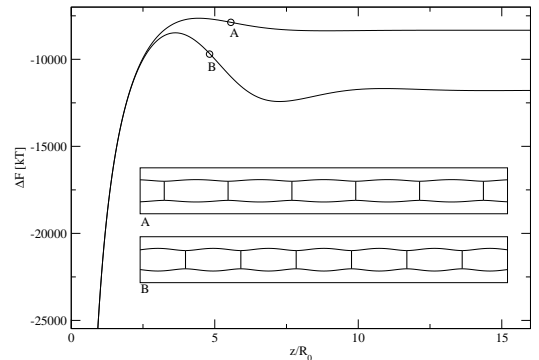


Figura 1. Diferencia en la energía libre de una membrana de liposoma con una distribución periódica de anillos de FtsZ en función de la distancia entre anillos. Las dos curvas representan diferentes valores de la curvatura preferente de la membrana.

Nos hemos preguntado también por las posibles implicaciones *in vivo* de los anillos de FtsZ en bacterias. Para ello tuvimos que tener en cuenta que la membrana bacteriana está envuelta por una pared rígida y que las bacterias mantienen una diferencia en la presión osmótica entre el citoplasma y el medio exterior. Los resultados obtenidos para la forma de la deformación y la fuerza solo son cualitativos, para su cuantificación harían falta más datos experimentales.

\* pedro.tarazona@uam.es

<sup>1</sup> M. Osawa, D. Anderson y H. Erickson, *Science* **320**, 792 (2008).

<sup>2</sup> I. Hörger *et al.*, *Phys. Rev. E* **77**, 011902 (2008).

## Realistic dispersion kernels in reaction-dispersion equations. Application to the Neolithic

Neus Isern\*

*Departament de Física, Universitat de Girona, 17071 Girona (Spain)*

Reaction-dispersion fronts have been applied to many physical and biological systems including population dispersals, combustion flames, tumor growth, etc.<sup>1</sup> The spread of the Neolithic in Europe is a particular case of population dispersal which has been object of study in the last years<sup>2</sup>. Here we study how the use of dispersion probability distributions (dispersion kernels) may modify the speed of the propagating front. For the sake of comparing the obtained speeds with the Neolithic transition we use dispersion data from real preindustrial human populations<sup>3</sup>.

In order to study the effect of the dispersion kernel, we may use an evolution equation for the population density  $p(x, y, t)$ ,

$$R_T \left[ \int \int p(x + \Delta_x, y + \Delta_y, t) \phi(\Delta_x, \Delta_y) d\Delta_x d\Delta_y \right] = p(x, y, t + T) \quad (1)$$

where the term in square brackets is the dispersion term, with  $\phi(\Delta_x, \Delta_y)$  being the dispersion kernel that gives the probability per unit area that an individual initially placed at  $(x + \Delta_x, y + \Delta_y)$  moves to  $(x, y)$  during a time interval  $T$  (one generation); and  $R_T[p(x, y, t)]$  is the reproduction term. The logistic growth is well-known to be a good description for many populations. Then,

$$R_T[p(x, y, t)] = \frac{p(x, y, t) p_{\max} e^{aT}}{p_{\max} + p(x, y, t) (e^{aT} - 1)} \quad (2)$$

where  $a$  is the population growth rate and  $p_{\max}$  the carrying capacity.

There exist other possible evolution equations<sup>1</sup>, but equation (1) is a realistic one for human populations as, for humans, dispersion and population growth are interrelated processes (humans bring their children up, i.e., migrate with the offsprings, while for other biological species the parent and child generations do not migrate together).

For the dispersion kernel  $\phi(\Delta_x, \Delta_y)$  we use data from six human populations, but mathematically we treat these data using different probability distributions. As dispersion data on human populations are usually set in intervals, a simple and useful kernel might be a sum of Dirac deltas

$$\varphi_{Dirac-deltas}(\Delta) = \sum_{i=0}^n p_i \delta(\Delta - r_i) \quad (3)$$

where  $\varphi(\Delta) = 2\pi\Delta\phi(\Delta)$  is the linear distribution of probability,  $p_i$  is the probability for the individuals to move a distance  $r_i = i \cdot d$ , for  $i = 0, 1 \dots n$ , and with  $d$  the width of the intervals used when recording the data.

Other distributions that have been frequently used in population dispersal are the Gauss and Laplace distributions<sup>4</sup>,

$$\varphi_{Gauss}(\Delta) = (2\Delta/\alpha^2) e^{-(\Delta/\alpha)^2} \quad (4)$$

$$\varphi_{Laplace}(\Delta) = (\Delta/\beta^2) e^{-\Delta/\beta} \quad (5)$$

which for the evolution equation (1) lead to explicit expressions for the front speed. The parameters  $\alpha$  and  $\beta$  are calculated from the mean-squared displacement,  $\langle \Delta^2 \rangle$ , of the population dispersion data (this yields  $\alpha^2 = \langle \Delta^2 \rangle$  and  $\beta^2 = \langle \Delta^2 \rangle / 6$ ).

We calculate the front speed for the six populations and a realistic range for the population growth rate,  $a$ , using the three dispersion kernels. The results show that for a fixed value of the growth rate,  $a$ , the relative difference between the speeds from the Gauss and the Laplace distributions, (4) and (5), is a constant value (lower than 10%) for all six populations. However, comparing the results from kernel (3) with those from the Gauss kernel (4), we find that kernel (3) leads to speeds that can be from 8% slower to 31% faster (for  $a = 0.023 \text{ yr}^{-1}$ ). This is due to the fact that for the Gauss and Laplace distributions the front speed has been calculated from a fixed parameter,  $\langle \Delta^2 \rangle$ , which is characteristic of each population, but does not contain all of the information about the shape of the kernel. On the other hand, the Dirac deltas kernel (3), although being a simplification of the real kernel, does have information on the shape which has a significant effect on the front speed.

---

\* neus.isern@udg.edu

<sup>1</sup> J. Fort and T. Pujol, Rep. Prog. Phys. **71**, 086001 (2008).

<sup>2</sup> J. Fort and V. Méndez, Phys. Rev. Lett. **82**, 867 (1999).

<sup>3</sup> N. Isern, J. Fort, and J. Pérez, J. Stat. Mech.: Theor. & Exp. P10012 (2008).

<sup>4</sup> M. Kot, A. Mark, P. Lewis, and P. van der Driessche, Ecology **77**, 2027 (1996).

## Interaction of Localized Structures in the oscillatory and excitable regimes

Adrian Jacobo<sup>\*</sup>, Damià Gomila, Manuel A. Matías, and Pere Colet  
*Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos IFISC (CSIC-UIB), E-07122,  
 Campus Universitat de les Illes Balears, Palma de Mallorca*

Localized Structures (LS), also known in general as dissipative solitons, or cavity solitons in the nonlinear optics context, are commonplace in any field of science dealing with spatially extended systems. Examples can be found in chemical reactions, gas discharges, vegetation patterns, granular media, fluids, ferrofluids, nonlinear optics, etc.

Beyond stationary LS, a number of instabilities, like start moving, breathing, or oscillating, have also been observed, leading to more complicated dynamical regimes. Oscillating LS have been observed, for instance, in nonlinear optical cavities, reaction-diffusion systems or in a vibrated layer of sand. It has also been demonstrated the existence of a route in which oscillating Localized Structures are destroyed, leading to an excitable regime<sup>1</sup>.

We study the interaction between LS in the oscillatory and excitable regimes using the Driven and Damped Non-Linear Schrödinger Equation (DDNLSE)

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -(1 + i\theta)E + i\nabla^2 E + E_{in} + i|E|^2 E, \quad (1)$$

where  $\vec{x} = (x, y)$  is the transverse plane and  $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ . This equation describes, for instance, the dynamic of the slowly varying amplitude of the electric field  $E(\vec{x}, t)$  inside a cavity filled with a nonlinear self-focusing Kerr medium. The first term in the rhs of Eq. (1) describes the losses and  $E_{in}$  is the input field (driving).  $\theta$  is a detuning between the cavity and  $E_{in}$ , and the sign of the cubic term corresponds to the so called self-focusing case.

If  $E_{in} = E_0$ , where  $E_0$  is a homogeneous field, Eq. (1) has a homogeneous steady state solution implicitly given by  $E_s = E_0/[1 + i(\theta - I_s)]$ , where  $I_s = |E_s|^2$ . Depending on the values of  $I_s$  and  $\theta$  the system can support stationary, oscillatory or excitable LS.

Oscillating LS are an example of non-punctual oscillators, i.e. oscillators with an internal structure. The interplay between the coupling and the internal structure of non-punctual oscillators is a general phenomenon not well understood, and this work aims to be an approach to the subject by means of the study of a prototypical case. Here we show how, when two oscillating LS are placed close together, the mutual interaction locks the LS to three different equilibrium distances and leads to the appearance of two limit cycles, one in phase and one in anti-phase. We also show that for very close distances between the structures a beating of the two frequencies of these new limit cycles is observed. Examples of this behaviors are illustrated in Fig. 1, where we show the

maximum of each structure as a function of time, for different distances and values of the parameters.

We also study the possible application of the interaction of localized structures in the excitable regime to perform logical operations. Using three localized structures and adding localized perturbations to the input field  $E_{in}$  we are able to modify the distances between the structures and their excitability threshold<sup>2</sup> allowing us, for different configurations of the input field, to perform AND and OR logical operations.

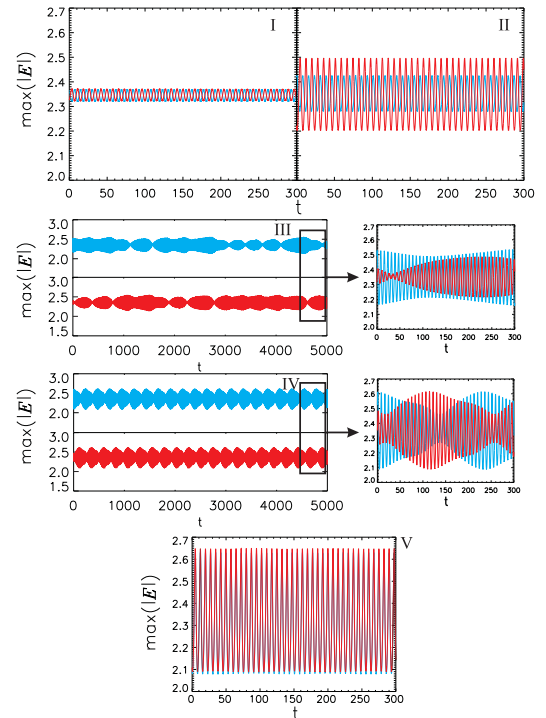


Figure 1. Different oscillatory regimes for two coupled localized structures, for different parameter regimes. Each curve corresponds to the maximum value of one of the LS. I) Symmetric antiphase oscillations, II) Asymmetric antiphase oscillations III) Mixed mode beating IV) Phase locking V) In phase oscillations.

<sup>\*</sup> jacobco@ifisc.uib-csic.es, <http://ifisc.uib-csic.es>

<sup>1</sup> D. Gomilla, M. A. Matías, and P. Colet, Phys. Rev. Lett. **94**, 063905 (2005).

<sup>2</sup> A. Jacobo, D. Gomila, M. A. Matías, and P. Colet Phys. Rev. A **78**, 053821 (1-9) (2008).

## Flujo y atascos de un medio granular en la descarga de un silo vibrado

A. Janda<sup>†\*</sup>, D. Maza<sup>†</sup>, A. Garcimartín<sup>†</sup>, E. Kolb<sup>‡</sup>, J. Lanuza<sup>‡</sup> y E. Clément<sup>‡</sup>

<sup>†</sup> Grupo de Medios Granulares, Departamento de Física y Matemática Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra, 31080 Pamplona

<sup>‡</sup> Laboratoire de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes, École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles, Paris (France)

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. Esta formación de atascos es común para orificios de tamaño comparable al de los granos<sup>1,2</sup>, generando un gran problema en la industria cuando se quieren dosificar pequeñas cantidades de material.

En este trabajo presentamos un estudio experimental sobre el flujo de descarga en un silo continuamente vibrado en su base mediante un piezoeléctrico. Mediante la aplicación de vibraciones, se consigue la descarga de granos para aberturas muy por debajo del límite usual en el cual se producen atascos en silos no vibrados. Este flujo granular persiste hasta el límite físico del diámetro de un grano, el cual se alcanza para un amplitud de vibración finita. Para los orificios más pequeños, observamos un régimen intermitente caracterizado por periodos alternos de flujo y atascos. El análisis de las características de la estadística de los tiempos de flujo muestra que existe un tiempo característico de flujo, el cual aumenta significativamente con la amplitud de la vibración. Sin embargo, a bajas amplitudes de vibración y orificios pequeños, la distribución de la duración de los atascos muestra un estadística anómala.

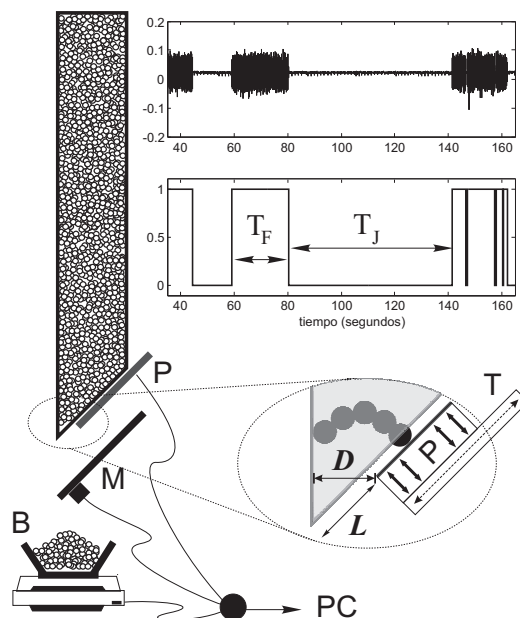


Figura 1. Esquema del sistema experimental. En la parte superior derecha se muestra una señal del micrófono donde se puede apreciar la naturaleza intermitente de flujo, con periodos alternos de flujo  $T_F$  y de atasco  $T_J$ .

\* ajandaga@alumni.unav.es,  
<http://fisica.unav.es/granular/>

<sup>1</sup> I. Zuriguel, A. Garcimartín, D. Maza, L. A. Pugnaloni y J. M. Pastor, Phys. Rev. E **71**, 051303 (2005).

<sup>2</sup> A. Janda, I. Zuriguel, A. Garcimartín, L. A. Pugnaloni y D. Maza, Europhys. Lett. **84**, 44002 (2008).

## Cooling dynamics of a granular gas of irregular particles

Takeichi Kanzaki Cabrera<sup>\*†</sup>, Raúl Cruz Hidalgo<sup>†</sup>, Diego Maza<sup>‡</sup>, and Ignacio Pagonabarraga<sup>§</sup>

<sup>†</sup> *AMADE, Departament de Física, Universitat de Girona*

<sup>‡</sup> *Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra*

<sup>§</sup> *Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona*

The cooling dynamics of a 2D granular gas of irregular particles is examined. The granular gas was simulated using particles with an *effective* velocity dependent restitution coefficient and by Molecular Dynamics. The influence of particle's shape and anisotropy on the cooling process was clarified. For low-dissipative particles, we found that the total kinetic energy (see Fig.1) decreases asymptotically as

$$\frac{E(t)}{E_0} = \frac{1}{(1+t/\tau)^{5/3}},$$

which agrees with Brilliantov and Pöschel predictions for the homogeneous cooling state regimen (HCS) of viscoelastic particles<sup>1</sup>.

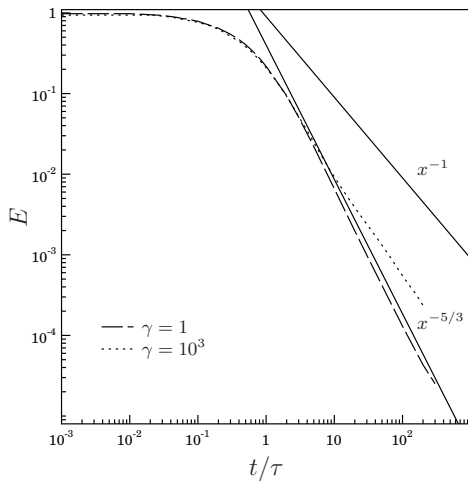


Figure 1. Evolution of the total translation kinetic energy.

Contrary, high dissipation induces an inhomogeneous cooling process where the energy decays as

$$\frac{E(t)}{E_0} = \frac{1}{(1+t/\tau)^\alpha},$$

where  $\alpha \rightarrow 1$  as dissipation increases. The rotational energy (see Fig. 2), however, always decays as

$$\frac{R(t)}{R_0} = \frac{1}{(1+t/\tau)^2},$$

which is in very good agreement with Haff's prediction for the HCS of inelastic particles<sup>2</sup>. The spatial and velocity correlations were also examined, clarifying the coupling between rotational and translational motion. Our numerical results are explained in terms of previous analytical theories<sup>1-3</sup>.

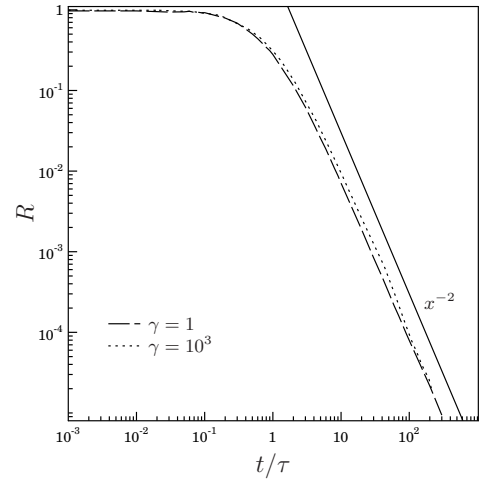


Figure 2. Evolution of the total rotational kinetic energy.

\* tkanzakic@gmail.com

<sup>1</sup> N. V. Brilliantov and T. Pöschel, Phys. Rev. E **61**, 5573 (2000).

<sup>2</sup> P. K. Haff, J. Fluid Mech. **134**, 401 (1983).

<sup>3</sup> S. Luding, M. Huthmann, S. McNamara, and A. Zippelius, Phys. Rev. E **58**, 3416 (1998).



## Constructive effects of diversity in the synchronisation of a model for the circadian clock in mammals

Niko Komin\*, Raúl Toral, Adrian Murza, and Emilio Hernández-García  
*IFISC (CSIC-UIB), 07122 Palma de Mallorca*

It is a well known fact that biological systems, such as different cells from a tissue, are far from being identical, an assumption widely accepted in coupled physical systems. Here we want to investigate how the the right amount of diversity can be advantageous for the result of cooperating biological units.

The daily rhythm of mammals is governed by periodic processes which are thought to origin from a cellular pacemaker situated in the brain. It is a small region of about 20000 neurons (less than 5mm in diameter) called the *suprachiasmatic nucleus* (SCN). It is known that gene expression of some proteins within the SCN has a periodicity of roughly 24h whereas isolated neurons produce oscillations whose periods vary between 20h and 28h. It has been shown in experiments that the rhythm of the mammal's activity in darkness is larger than 24h; coupling between retina and SCN synchronises the circadian rhythm to the light-dark cycle.

To study the oscillations of coupled SCN-neurons a variety of models with transcriptional and translational feedback loops have been proposed. The first models<sup>1</sup> were based on the Goodwin oscillator, more insight into the biological background lead to models with growing complexity<sup>2</sup>. They can show sustained oscillations entrained to an external light signal. In most works the diversity of the different neurons has been introduced but not studied thoroughly.

In the presented work we investigate how an ensemble of diverse neurons responds collectively to an external periodic signal (the light-dark cycle) with strength  $L$ , in dependence on the amount of diversity in the individual periods. First we study the response  $R = \frac{16}{L^2} |\langle \langle x_i(t) \rangle_N e^{i\Omega t} \rangle_t|^2$  and other order-parameters in numerical simulations. It becomes obvious that - depending on parameters as the light intensity and the coupling strength - the response to the signal is best for intermediate values of diversity. Figure 1 shows the results of example simulations.

To explain this effect on a mathematical base we study the system of coupled differential equations for increasing ensemble sizes without a light signal. It turns out that rising diversity turns the eigenvalues of the corresponding Jacobians from all positive to all negative. In other words: self sustained oscillations get damped and it is here, where entrainment to the external frequency increases. As one can see in Figure 2, the response is non-monotonous (and thus having an optimal diversity) even when only inside the region of damped oscillations. The maximal response is a consequence of a balance between a not-too-stable fix point and not-too-much

diversity.

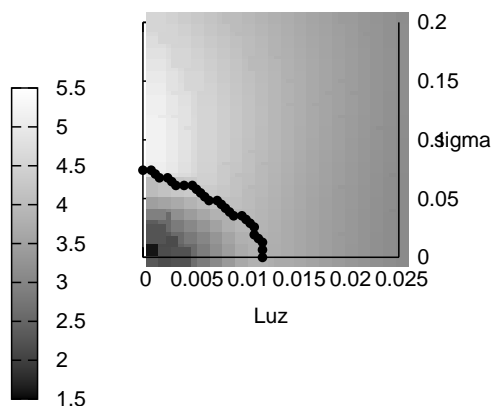


Figura 1. Response (logarithmic) as greyvalue vs. the strength of light and the diversity in the neuron's period obtained from numerical simulations. Black dots indicate the transition from sustained to damped oscillations in the unforced equations.

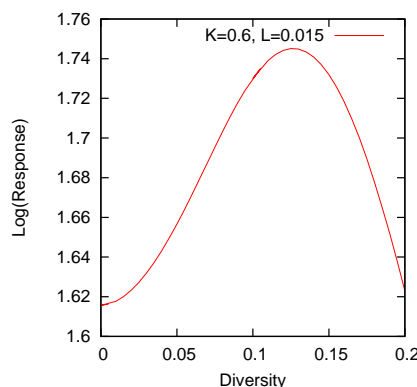


Figura 2. Cut through Fig. 1 along  $L = 0.015$ . The response for 10000 SCN-neurons to a 24h-periodic signal is optimal for intermediate amounts of diversity.

\* niko@ifisc.uib-csic.es

<sup>1</sup> D. Gonze *et al.*, Biophys J. **89**, 120 (2005).

<sup>2</sup> S. Bernard *et al.*, PLoS Comput. Biol. **3**, 667 (2007).

## Controlling drop emission in forced microfilaments using wetting properties

R. Ledesma-Aguilar<sup>†\*</sup>, I. Pagonabarraga<sup>‡</sup>, and A. Hernández-Machado<sup>†</sup>

<sup>†</sup> *Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de Barcelona, Diagonal 647, Barcelona 08028*

<sup>‡</sup> *Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1, Barcelona 08028*

Drops in microfluidics<sup>1</sup> are crucial to a wide number of processes, where they take roles that range from structural, as in microemulsions, to functional, as in cell carrier devices<sup>2</sup> or logical microfluidic chips<sup>3</sup>.

Drop making is therefore a hot topic in microfluidics, that demands increasing precision in drop size, monodispersity, emission period and even the position in which drops are placed.

Normally, drops in microfluidic systems are produced by taking advantage of a closed microchannel geometry, such as in flow focusing<sup>4</sup>, T-junction breakup<sup>5</sup>, among others. These techniques have the strong disadvantage of high flow resistance and propensity to clogging.

In this talk we will present a drop emission process that relies on a totally novel mechanism, which depends ultimately on the solid-liquid interactions that arise when a liquid microfilament is forced on a chemical stripe, as shown in Fig. 1. In such a system, highly monodisperse drops are produced in a periodic manner above a threshold forcing. The onset for drop emission depends on the details of the fluid flow in the vicinity of the chemical stripe, and changes sharply from hydrophilic to hydrophobic substrates<sup>6</sup>. As a consequence, one can turn the emission process “on” or “off” by choosing the wetting properties of the stripe. Moreover, for a drop emitting filament, the size of the drops and the rate at which they are produced can be controlled accurately by

further tuning of the wetting properties of the stripe and the velocity at which the filament is forced.



Figura 1. Drop emission in a microfilament forced on a chemical stripe

---

\* ra.ledesma@gmail.com

<sup>1</sup> J. Atencia and D. J. Beebe, *Nature* **437**, 648 (2005).

<sup>2</sup> J. F. Edd, D. Di Carlo, K. J. Humphry, S. Köster, D. Irimia, D. A. Weitz, and M. Toner, *Lab. Chip.* **8**, 1262 (2008).

<sup>3</sup> M. Prakash and N. Gershenfeld, *Science* **315**, 832 (2007).

<sup>4</sup> B. Dollet, W. van Hoeve, J.-P. Raven, P. Marmottant, and M. Versluis, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 034504 (2008).

<sup>5</sup> D. R. Link, S. L. Anna, D. A. Weitz, and H. A. Stone, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 054503 (2004).

<sup>6</sup> C. Clanet, C. Duez, C. Ybert, and L. Bocquet, *Nat. Phys.* **3**, 180 (2007).

## Modulación de la frecuencia perturbante en el comportamiento oscilatorio de la reacción $\text{NO} + \text{H}_2 / \text{Pt}(100)$

M. C. Lemos\*, A. Córdoba y J. A. de la Torre

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Sevilla, 41080 Sevilla*

El modelo propuesto por Makeev y Nieuwenhuys<sup>1</sup> simula el comportamiento oscilatorio observado experimentalmente en la reacción catalítica de NO por  $\text{H}_2$  sobre Pt(100). En concreto, reproduce bastante bien las oscilaciones cinéticas y la transición al caos a través de la ruta de Feigenbaum, o sea, mediante bifurcaciones que implican duplicaciones del periodo. El modelo se basa en la aproximación estándar de campo medio y consiste en un conjunto de seis ecuaciones acopladas no lineales que describe la evolución temporal de las densidades de partículas adsorbidas NO, H, N, O, NH y  $\text{NH}_3$ .

A partir del modelo, mostramos la respuesta de las oscilaciones naturales ante perturbaciones externas. Para ello, en una primera etapa, elegimos un estado del sistema autónomo que exhibe oscilaciones de periodo-1 (P1, un máximo) a la frecuencia natural  $f_0$  y le aplicamos una perturbación en la presión parcial del gas  $\text{H}_2$ , usando una función sinusoidal de una única frecuencia,  $p_{\text{H}_2}^* = p_{\text{H}_2} [1 + A \sin(2\pi ft)]$ , donde  $A$  y  $f$  son la amplitud normalizada y la frecuencia de la perturbación, respectivamente. La variación sistemática de  $A$  y  $f$  nos permitirá obtener el diagrama de fases del sistema perturbado que mostrará los estados dinámicos observados y sus posibles puntos de bifurcación. La resolución del sistema de ecuaciones del modelo perturbado se lleva a cabo usando el método de Runge-Kutta. Para el análisis de las series temporales usamos algunas de las herramientas típicas de la dinámica no-lineal como son la transformada de Fourier, el mapa de Poincaré, el de máximos próximos y el máximo exponente de Lyapunov, este último para algunos de los estados caóticos observados.

El diagrama de fases cinético del modelo perturbado muestra una gran riqueza de comportamientos oscilatorios. Además de los estados periódicos observados en el modelo autónomo, el modelo perturbado muestra oscilaciones de periodo-3 (P3, tres máximos) no observadas allí a los mismos valores de temperatura y presiones parciales y sí descubiertas experimentalmente. La aparición de caos se produce a través tanto de la ruta de Feigenbaum como de la intermitencia, fenómeno que muestra en la misma evolución temporal alternancia de oscilaciones periódicas con intervalos de oscilaciones desordenadas más o menos cortos. La aparición de intermitencia es posible en sistemas dinámicos que presentan escenario de Feigenbaum. En el diagrama de fases puede observarse que si la amplitud normalizada de la perturbación,  $A$ , es apreciable, la respuesta del sistema perturbado es prácticamente periódica. Sin embargo, cuando disminuye  $A$ , el régimen periódico pierde su

estabilidad y se vuelve caótico debido a que el sistema tiene una tendencia a oscilar con una frecuencia menor que su frecuencia natural.

En una segunda etapa de nuestro estudio, imponemos una variación sinusoidal en la frecuencia de la perturbación, tal que ahora  $f = f_0 [1 + A' \sin(2\pi f't)]$ , siendo  $f_0$  la frecuencia natural. Las variables  $f'$  y  $A'$  representan la frecuencia y la amplitud normalizada modulantes de la perturbación, respectivamente.

Elegimos un estado del sistema perturbado que muestra oscilaciones P1 ( $A = 0,2$ ,  $f = f_0 = 0,10376$ ) y analizamos la respuesta de este estado cuando se modula la frecuencia perturbante  $f$ . Hemos llevado a cabo simulaciones para  $f'_1 = 0,01f$ ,  $f'_2 = 0,05f$  y  $f'_3 = 0,1f$ . Para cada valor fijo de  $f'$  se varía la amplitud modulante  $A'$  en un 1, 2, 3, 4, 5 y 10 por ciento de la amplitud normalizada de la perturbación  $A$ . Los resultados obtenidos son similares en todos los casos. El comportamiento de periodo-1 pierde su regularidad conforme aumenta  $A'$  hasta que finalmente la oscilación periódica se pierde. La aparición del comportamiento aperiódico es más temprana cuanto mayor es  $f'$ . Así, la periodicidad se pierde para  $A' = 10\%A$  con  $f'_1 = 0,01f$ ; para  $A' = 2\%A$  con  $f'_2 = 0,05f$  y para  $A' = 1\%A$  cuando  $f'_3 = 0,1f$ .

En conclusión, la perturbación periódica de la cinética de la reacción reproduce los resultados del modelo autónomo y constituye una clara alternativa en los estudios de reacciones catalíticas heterogéneas, sobre todo ante posibles limitaciones experimentales. La forma de perturbar periódicamente la reacción oscilatoria como los resultados que de ello se deducen son generales y pueden ser aplicados a otros modelos que exhiban oscilaciones cinéticas. De hecho, utilizando el mismo esquema de trabajo, anteriormente hemos perturbado armónicamente las reacciones  $\text{CO} + \text{O}_2$  (Ref. [2]) y  $\text{N}_2\text{O} + \text{H}_2$  (Ref. [3]).

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por los proyectos P06-TIC-02025 de la Junta de Andalucía y FIS2008-04120 del Gobierno de España.

\* lemos@us.es

<sup>1</sup> A. G. Makeev y B. E. Nieuwenhuys, *J. Chem. Phys.* **108**, 3740 (1998).

<sup>2</sup> A. Córdoba, M. C. Lemos y F. Jiménez, *J. Chem. Phys.* **124**, 014707 (2006); *Phys. Rev. E.* **74**, 016208 (2006).

<sup>3</sup> M. C. Lemos y A. Córdoba, *Catal. Lett.* **121**, 121 (2008).

## A density functional theory formalism combined with the statistical mechanics based SAFT-VR equation of state for the prediction of interfacial phenomena

Félix Llovell<sup>†\*</sup>, Amparo Galindo<sup>†</sup>, George Jackson<sup>†</sup>, and Felipe J. Blas<sup>‡</sup>

<sup>†</sup> Department of Chemical Engineering, Imperial College London, South Kensington Campus, London SW7 2AZ, UK

<sup>‡</sup> Departamento de Física Aplicada, Universidad de Huelva, 21071 Huelva

A formalism based on the Density Functional Theory has been coupled to a molecular-based equation of state, named SAFT (Statistical Associating Fluid Theory)<sup>1</sup> to study interfacial phenomena. The original equation is based on statistical mechanics fundamentals and comes from Wertheim's theory<sup>2</sup>. It provides a framework in which the different molecular effects of a compound are separated and quantified. However, as it is based in a mean-field theory, it is only able to estimate homogeneous properties. If one wants to consider other regions of the phase diagram, as the interfacial profiles, a specific treatment must be added.

In this work, the statistical associating fluid theory for attractive potentials of variable range (SAFT-VR)<sup>3</sup> has been linked to a Helmholtz free energy density functional. The functional is constructed by partitioning the free energy density into a reference term (which incorporates all of the short-range interactions and is treated locally) and an attractive perturbation (which incorporates the long-range dispersion interactions). In this work, two different approaches are compared. The first one uses a mean-field version of the theory to treat the long-range dispersive interaction, but incorporates a treatment of the effect of the correlations on the attractive energy between the segments by introducing a short range attractive contribution in the reference term. The second one approximates the correlation function among the molecules by averaging densities between two positions, following the ideas proposed by Toxvaerd<sup>4</sup>.

The SAFT-VR DFT equation is then used to study interfacial adsorption phenomena in the interface. An analysis of molecular parameters influence is performed checking at several binary mixture models with different chain length, segment diameter, dispersive energy and attractive range ratios. The effect of the asymmetry on the adsorption phenomena is qualitatively observed. This information is then tested with some real mixtures

in order to check if the same features are observed. Moreover, both formalisms are used to examine the vapour-liquid interfacial tension of some symmetric and asymmetric mixtures of industrial interest. Comparison with experimental data shows general agreement in all cases without any further adjustment.

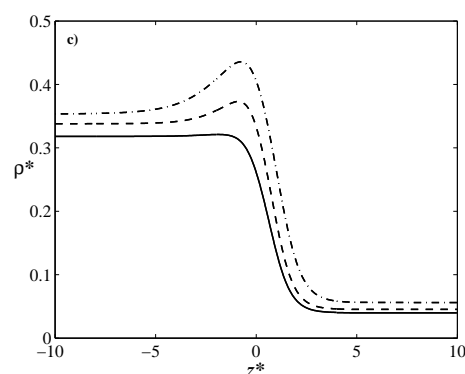


Figura 1. Influence of the dispersive energy in the monomer density profile of three mixtures with dispersive energy ratios of  $\varepsilon_2/\varepsilon_1 = 1.5$  (full line),  $\varepsilon_2/\varepsilon_1 = 1.75$  (dashed line) and  $\varepsilon_2/\varepsilon_1 = 2.0$  (dashed and dotted line)

\* f.llovell@imperial.ac.uk

<sup>1</sup> W. G. Chapman, K. E. Gubbins, G. Jackson, and M. Radosz, *Ind. Eng. Chem. Res.* **29**, 1709 (1990).

<sup>2</sup> M. S. Wertheim, *J. Stat. Phys.* **35**, 19 (1984); *ibid* **35**, 35 (1984).

<sup>3</sup> A. Gil-Villegas, A. Galindo, P. J. Whitehead, S. J. Mills, G. Jackson, and A. N. Burgess, *J. Chem. Phys.* **106**, 4168 (1997).

<sup>4</sup> S. Toxvaerd, *J. Chem. Phys.* **64**, 2863 (1976).

## Phase behaviour of the hard sphere Maier-Saupe fluid under spatial confinement

N. G. Almarza, C. Martín, and E. Lomba\*

*Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, Serrano 119, E-28006 Madrid*

The Maier-Saupe hard sphere fluid is one of the simplest models that accounts for the isotropic-nematic transition characteristic of liquid crystal phases. At low temperatures the model is known to present a gas-liquid transition that couples to the order-disorder phase change<sup>1</sup>.

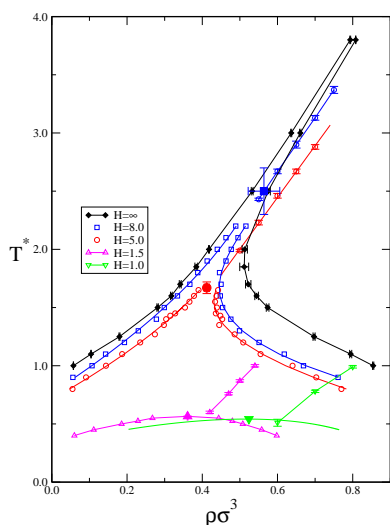


Figura 1. Phase diagrams for the bulk and confined Maier-Saupe hard sphere fluids

Spatial dimensionality directly conditions the character of the orientational phase change, that goes from a first order transition in

the purely three dimensional case, to a Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-like continuous transition which occurs when the three dimensional Maier-Saupe spins are constrained to lie on a plane<sup>2-4</sup>. In the latter instance, the ordered phase is not endowed with true long range order.

In this work we investigate how the continuous transition transforms into a true first order phase change, by analyzing the phase behavior of a system of three dimensional Maier-Saupe hard spheres confined between two parallel plates, with separations ranging from the quasi-two-dimensional regime to the bulk three dimensional limit. Our results indicate that spatial confinement in one direction induces the change from first order to a continuous transition in a gradual manner, with a corresponding decrease of the transition temperatures. As to the gas-liquid transition, the estimated critical temperatures and densities also decrease as the fluid is confined, in agreement with previous results for other simple systems. The global changes induced in the phase diagram of the Maier-Saupe hard sphere fluid when confined in a slit pore are shown in Figure 1 for various interwall separations.

\* e.lomba@iqfr.csic.es

<sup>1</sup> E. Lomba, C. Martín, and N. G. Almarza, Phys. Rev. E **74**, 021503 (2006).

<sup>2</sup> E. Lomba, C. Martín, and N. G. Almarza, Phys. Rev. E **76**, 066107 (2007).

<sup>3</sup> M. M. Telo da Gama, P. Tarazona, M. P. Allen, and R. Evans, Mol. Phys. **71**, 801 (1990).

<sup>4</sup> M. M. Telo da Gama and P. Tarazona, Phys. Rev. A **41**, 1149 (1990).

## Simple equation of state for hard disks on the hyperbolic plane

Mariano López de Haro<sup>†‡\*</sup>, Andrés Santos<sup>†</sup>, and Santos Bravo Yuste<sup>†</sup>

<sup>†</sup>Departamento de Física, Universidad de Extremadura, E-06071 Badajoz, Spain

<sup>‡</sup>Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos 62580, México

A few years ago we proposed a simple and accurate equation of state for a hard-disk fluid<sup>1</sup>. This equation is built so as to yield the exact second virial coefficient and also to have a single pole singularity at the close-packing fraction, namely

$$Z \equiv \frac{p}{\rho k_B T} = \frac{1}{1 - b_2 \eta - (1 - b_2 \eta_{\max}) \eta^2 / \eta_{\max}^2}, \quad (1)$$

where  $Z$  is the compressibility factor,  $p$  is the pressure,  $\rho$  is the number density,  $k_B$  is the Boltzmann constant,  $T$  is the absolute temperature,  $b_2 = 2$  is the reduced second virial coefficient,  $\eta = a(\sigma)\rho$  is the packing fraction, with  $a(\sigma) = (\pi/4)\sigma^2$  the area of a hard disk of diameter  $\sigma$ , and  $\eta_{\max} = (\sqrt{3}\pi/6) \simeq 0.9069$  is the value corresponding to crystalline close-packing. The idea is that this two-point Padé approximant yields correctly both the low density and the high density limits of the system. Since recently a system of hard disks on the hyperbolic plane has been studied<sup>2,3</sup>, the question naturally arises of whether a proposal such as Eq. (1), properly generalized, may also be useful for such a system. In the present work<sup>4</sup> we provide an answer to this question.

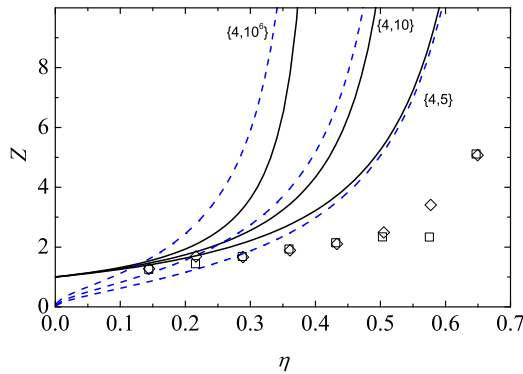


Figure 1. Compressibility factor  $Z$  as a function of  $\eta$  for the isotstatic  $\{4, 10^6\}$ ,  $\{4, 10\}$ , and  $\{4, 5\}$  tessellations ( $\sigma = 1.7628, 1.6169$ , and  $1.0613$ , and  $\eta_{\max} = 0.4142, 0.5750$ , and  $0.7206$ , respectively). Solid lines: Eq. (1); dashed lines: free area theory of Ref. 2. The symbols are the results of simulation also obtained in Ref. 2 for  $\sigma = 1.060$  (squares) and  $\sigma = 1.062$  (diamonds).

The development goes as follows. We maintain the simple form of Eq. (1) but adapt it to disks of diameter  $\sigma$  on the hyperbolic plane. First, we note that on a two-dimensional manifold with constant intrinsic curvature  $K < 0$ , the area of a disk is<sup>5</sup>  $a(\sigma) = 2\pi [\cosh(\sigma/2) - 1]$ , and that the packing fraction is still given by  $\eta = a(\sigma)\rho$ . Furthermore, on such a manifold the associated (reduced) second virial coefficient depends on  $\sigma$ , namely<sup>2</sup>  $b_2(\sigma) = a(2\sigma)/2a(\sigma)$ .

Thus, for a given  $\sigma$ , the only other requirement in our formulation is the value of  $\eta_{\max}$  corresponding to that  $\sigma$ , irrespective of the fact that the resulting configuration be an ordered one or not. This value is only known analytically for a  $\{p, q\}$  tessellation (restricted in the hyperbolic plane by the condition  $1/p + 1/q < 1/2$ ) in which the packing corresponding to the highest possible density and the associated diameter are given by

$$\eta_{\max} = \frac{1}{p/2 - 1 - p/q} \left[ \frac{\cos(\pi/q)}{\sin(\pi/p)} - 1 \right]$$

and

$$\sigma = 2 \cosh^{-1} \left[ \frac{\cos(\pi/q)}{\sin(\pi/p)} \right],$$

respectively<sup>2</sup>.

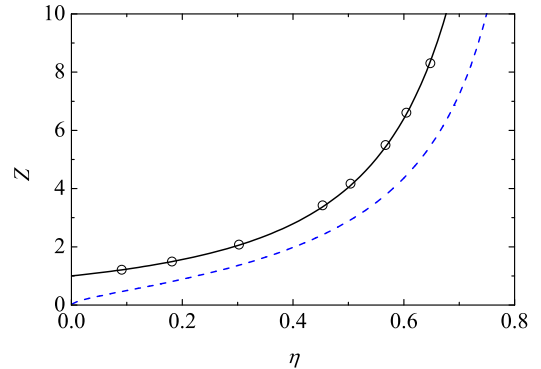


Figure 2. Compressibility factor  $Z$  as a function of  $\eta$  for the (Euclidean) hexagonal  $\{6, 3\}$  tessellation ( $\sigma = 0$ ,  $\eta_{\max} = \sqrt{3}\pi/6$ ). Solid line: Eq. (1); dashed line: free area theory of Ref. 2. The symbols are the results of simulation from Ref. 6.

\* malopez@servidor.unam.mx

<sup>1</sup> A. Santos, M. López de Haro, and S. B. Yuste, *J. Chem. Phys.* **103**, 4622 (1995); M. López de Haro, A. Santos, and S. B. Yuste, *Eur. J. Phys.* **19**, 281 (1998).

<sup>2</sup> C. D. Modes and R. D. Kamien, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 235701 (2007); *Phys. Rev. E.* **77**, 041125 (2008).

<sup>3</sup> F. Sausset, G. Tarjus, and P. Viot, *J. Stat. Mech.* P04022 (2009).

<sup>4</sup> M. López de Haro, A. Santos, and S. B. Yuste, *J. Chem. Phys.* **129**, 116101 (2008).

<sup>5</sup> As in Ref. 2,  $|K|^{-1/2}$  (rather than  $\sigma$ ) defines the length unit. In the formula for the area, we have taken  $K = -1$ .

<sup>6</sup> J. J. Erpenbeck and M. Luban, *Phys. Rev. A.* **32**, 2920 (1985).

## Physical and geometrical principles in the structure of viruses

Antoni Luque<sup>†\*</sup>, Roya Zandi<sup>‡</sup>, and David Reguera<sup>†</sup>

<sup>†</sup> *Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, 08028 Barcelona*

<sup>‡</sup> *Department of Physics and Astronomy, University of California Riverside, CA 92521, USA*

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 ecological, 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.

About half of the viral species posses a roughly spherical capsid with icosahedral symmetry, characterized by a triangulation number  $T$ , introduced by Caspar and Klug<sup>1</sup> (CK). However, many other 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 a handicap for their structural characterization.

The first attempt to justify the structure of prolate viruses was made by Moody<sup>2</sup>, who proposed an extension of the CK model based on an elongation of the central triangles of an icosahedron centered on a 5-fold axis (CKM). This model successfully explains the architecture of several bacteriophages, and predicts a selection rule for the number of proteins of a capsid. However, there are many bacilliform viruses -specially among plant viruses- which do not follow this classification (Fig.1a). Moreover, the geometrical and physical principles governing the architecture of prolate viruses have not yet been fully revealed.

In this work, we present a general geometrical model, based on the pioneering ideas of Caspar and Klug and Moody, to describe *prolate* or *bacilliform* shells closed by hemispherical icosahedral caps centered on any of their symmetry axis (5-fold, 3-fold, or 2-fold)<sup>3</sup>. We show that the structure and geometry of the caps in fact restricts and controls the properties of the tube. In particular, the length and number of proteins in these capsids adopt a very special set of discrete values. In addition, our geometrical model allows us to calculate the radius and length of these structures, the helicity, and even the positions of the capsomers on the body. These geometrical predictions are tested against simulation using a very simple physical model that successfully explained the origin of icosahedral symmetry for spherical viruses<sup>4</sup>.

Using Monte Carlo simulation, we show that the peculiar well-defined geometry of these elongated viruses

arises as a consequence of free energy minimization of a generic interaction between the structural units that make the capsid<sup>5</sup>. Hemispherical  $T$ -number caps centered along the 5-, 3- and 2-fold axis, with hexagonally-ordered cylindrical bodies are shown to be local energy minima, thus justifying their occurrence as optimal virus structures. However, the results of our simulations indicate that not all prolate architectures that can be geometrically envisioned are indeed local free energy minima. Moreover, prolate viruses show a sequence of magic numbers for the caps leading to strict selection rules for the length and structure of the body, as well as for the number of capsomers and proteins a capsid can have, in accordance with the geometrical predictions.

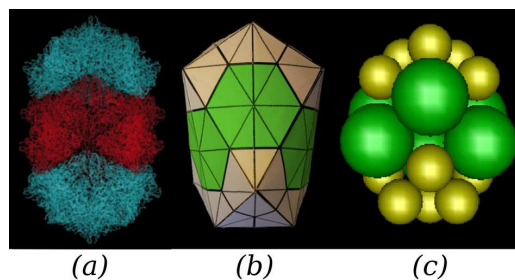


Figure 1. (a) Hypothetical 3D reconstruction of the Flock House Virus based on X-ray<sup>6</sup>. (b) Geometrical model of a 3-fold prolate (a). (c) Local free energy minima structure obtained in our simulations in agreement with the putative (a) and geometrical (b) prediction.

The model reproduces the architecture of spherical and bacilliform viruses both *in vivo* and *in vitro* (Fig.1b-1c). In addition, the results of our model should be helpful to characterize viruses from simple measurements and diffraction analysis, and also to reconstruct their 3D structure. 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.

\* luque@ffn.ub.es

<sup>1</sup> D. Caspar and A. Klug, Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol. **27**, 1 (1962).

<sup>2</sup> M. F. Moody, Virology **26**, 567 (1965).

<sup>3</sup> A. Luque and D. Reguera, in preparation.

<sup>4</sup> R. Zandi *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. **101**, 15556 (2004).

<sup>5</sup> A. Luque, R. Zandi, and D. Reguera, Proc. Natl. Acad. Sci. (submitted).

<sup>6</sup> X. F. Dong *et al.*, Journal of Virol. **72**, 6024 (1998).

## Dynamical properties of excitable dendritic trees

Leonardo L. Gollo<sup>†</sup>, Osame Kinouchi<sup>‡</sup>, and Mauro Copelli<sup>§</sup>

<sup>†</sup> *IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB), Campus Universitat Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain*

<sup>‡</sup> *Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo*

<sup>§</sup> *Laboratório de Física Teórica e Computacional, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, Brazil*

Most neurons present cellular tree-like extensions known as dendrites, which receive input signals from synapses with other cells. Some neurons have indeed very large and impressive dendritic arbors. What is the function of such elaborate and costly structures? The functional role of dendrites is not obvious because it is known that, if dendrites were an electrical passive medium, then signals from their periphery could not influence the neuron output activity. Dendrites, however, are not passive, but rather active media that amplify and support pulses (dendritic spikes). These voltage pulses do not simply add but can also annihilate each other when they collide.

To try to understand the net effect of the complex interactions among dendritic spikes under massive synaptic input, here we examine a computational model of excitable dendritic trees. Each site (dendritic branchlet) has a cyclic cellular automaton dynamics and a Cayley tree topology, as depicted in Fig. 1.

We show that, in contrast to passive trees, they have a very large dynamic range<sup>1</sup>, which is a quantity that accounts for the capacity of the neuron to distinguish among the widely different intensities of input which it receives. We claim that enhancement of dynamic range is the primary functional role of active dendritic conductances. We predict that neurons with larger dendritic trees should have larger dynamic range and that blocking of active conductances should lead to a decrease of dynamic range. Moreover, we show that the response of the neuron becomes more robust to strong inputs: owing to active dendrites, it is almost independent of the size of the dendritic arbor. The model also yields double-sigmoid response functions as experimentally observed in retinal ganglion cells.

The system has a nice robustness, we present results on three variants of the basic model showing that asymmetric propagation of spikes, periphery-centrality non-homogeneous activation rate and random (quenched) activation rate do not change qualitatively the results for the dynamic range. Although new features appear like shoulders enlargement on double-sigmoid input-output response curves and (in the non-homogeneous case) the appearance of dynamical ranges up to 80 dB (in contrast to the 50 dB) observed in the other cases.

Our results provide an explanation to the concentration invariance property observed in olfactory

processing, due to the very similar response to different inputs. In addition, our modeling approach also suggests a microscopic neural basis for the century old psychophysical laws.

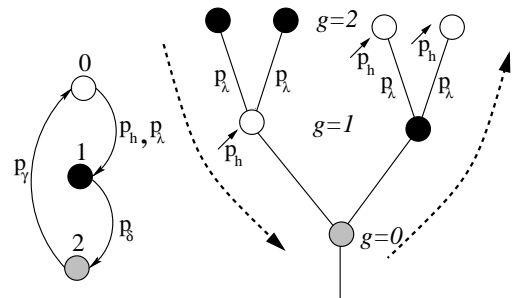


Figure 1. Morphology and dynamics of the model. Left panel, definition of dynamical states: each dendritic branchlet can be in one of three states: quiescent (0), active (1) or refractory (2). A quiescent state becomes active due to integrated synaptic input (with probability  $p_h$ ) or transmission from an active neighbor (with probability  $p_\lambda$ , also called the coupling parameter). The active state has a fixed duration, changing to the refractory state after a single time step ( $p_\delta = 1$ ). The refractory state returns to the quiescent state with probability  $p_\gamma$  ( $= 0.5$  unless otherwise stated). Right panel, example of an active dendritic tree with  $G = 2$ : branchlets connected in a Cayley tree topology with coordination number  $Z = 3$ . The probability that activity in one branchlet activates its neighbor is  $p_\lambda$  (if the neighbor is in a quiescent state). Forward propagating activity coming into the apical site ( $g=0$ ) is represented by large arrow on the left side and backpropagating activity going to the border direction is represented by the large arrow on the right hand side.

We further study the system analytically by writing down the master equation and solving it in the mean field approximation. In both single site and pairs approximation there is a non-equilibrium phase transition not allowed in the model. Therefore we developed a directed mean field approximation in an undirected Cayley tree. It separates the activity propagating forward to the apical site from the backpropagating one, and when compared to the simulations results we find good agreement.

<sup>1</sup> L. L. Gollo, O. Kinouchi, and M. Copelli, PLoS Comput. Biol. accepted for publication (2009).



## Collective effects in intracellular transport

Paolo Malgaretti\* and Ignacio Pagonabarraga

*Departamento de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, 08028 Barcelona*

Eukaryotic cells present a very complex network of “highways” on which materials like vesicles or organelles are actively transported. The carriers are molecular motors that produce mechanical work by the hydrolyzation of ATP. Each motor has a specific molecular structure that determines its mechanical properties like the velocity or the direction in which it walks along the biofilament. Moreover molecular motors exhibit rich dynamics: motors attach or detach from the biofilaments, motors that walk in the same direction can cooperate in the transport of the same cargo<sup>1</sup> while motors that walk in different directions can play a “tug of war”<sup>2</sup> when attached at the same cargo. Many models have been proposed to study molecular motors at different scales ranging from mechanochemical models for a single motor<sup>3</sup> to continuum models which describe large motor ensembles walking on the same track<sup>4,5</sup>.

We have modeled the molecular motors like Brownian motors that walk in a high viscous fluid. In particular we are interested in the study of the hydrodynamic interactions between ensembles of motors walking on the same track. To study such interactions we have developed a numerical model that permits us to couple the ratchet-like movement of motors to the cytoplasmic fluid they move in.

We have studied the velocities of ensembles of motors as a function of the concentration of motors, the fluid viscosity and the ratio between the dimension of the motor and the ratchet period. In all cases we have found a marked dependence of the motors’ average velocity on their concentration. We have assessed the relative relevance of direct motor-motor interaction and dynamical coupling through the solvent in the collective perspective of motor transport.

In particular we have found that for low concentration of motors the hydrodynamic coupling speeds up the motors while for high concentration values the excluded volume interaction between motors dominates and prevents motors to move in agreement with previous results on a simplified discrete 2D model<sup>8</sup>. In particular, while rising the motors’ concentration, we find that motors move in a coordinate way. This coordination

increases with motors’ concentration and produce a collective mechanism which allows the ensemble to switch from (short) fast collective running periods to (long) waiting periods as shown in Figure(1). Moreover we found that the typical distance at which hydrodynamic interactions are relevant is the order of some motor radii.

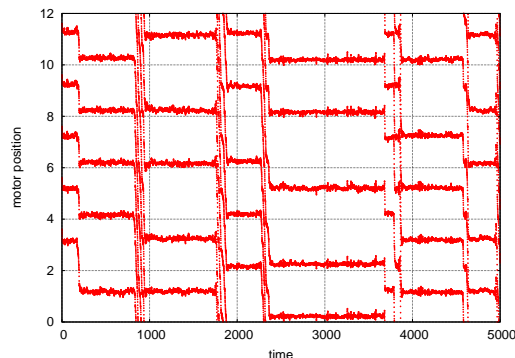


Figure 1. System of 5 motors at 0.83 volume fraction. The ensemble of motors switches from short fast running collective phases to long stopping phases.

\* paolomalgaretti@ffn.ub.es

<sup>1</sup> A. J. Hunt, F. Gittes, and J. Howard, *Biophys. J.* **67**, 766 (1994).

<sup>2</sup> M. J. I. Muller, S. Klumpp, and R. Lipowsky, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **105**, 0706825105 (2008).

<sup>3</sup> A. Bowling and A. F. Palmer, *J. Biomech.*, in press

<sup>4</sup> A. Parmeggiani, T. Franosch, and E. Frey, *Phys. Rev. E* **70**, 046101 (2004).

<sup>5</sup> S. Muhuri and I. Pagonabarraga, *Europhys. Lett.* **84**, 58009 (2008).

<sup>6</sup> C. P. Lowe, *Europhys. Lett.* **47**, 145 (1999).

<sup>7</sup> F. Julicher, A. Adjari, and J. Prost, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 1269 (1997).

<sup>8</sup> D. Houtman, I. Pagonabarraga, C. P. Lowe, A. Esseling-Ozdoba, A. M. C. Emons, and E. Eiser, *Europhys. Lett.* **78**, 1800 (2007).

## Monte Carlo simulation of hybrid nematic films using the Lebwohl-Lasher model

Ramona G. Marguta<sup>†‡\*</sup>, Noe G. Almarza<sup>‡</sup>, and Enrique Velasco<sup>†</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid*

<sup>‡</sup> *Grupo de Química-Física Teórica, Instituto de Química-Física Rocasolano (CSIC), C/ Serrano 119, 28006 Madrid*

We performed Monte Carlo simulations of the confined Lebwohl-Lasher model. The system is defined over a cubic lattice of dimensions  $L \times L \times h$  and at each site of the lattice there is a particle with orientation defined by a three dimensional unit vector. The system is confined in the  $z$ -direction and periodic boundary conditions are applied in the  $x$  and  $y$  directions. Opposite interactions of the form:

$$u_{w,i} = -\frac{1}{2} \left[ 3 (\hat{s}_i \cdot \hat{e}_x)^2 - 1 \right]; \text{ for } z_i = 1, \quad (1)$$

$$u_{w,i} = -\frac{1}{2} \left[ 3 (\hat{s}_i \cdot \hat{e}_z)^2 - 1 \right]; \text{ for } z_i = h, \quad (2)$$

where  $\hat{e}_\alpha$  represent unit vectors, are applied to sites contained in planes  $z = 1$  and  $z = h$ . Different temperatures  $T$  and system sizes  $L$  have

been investigated for fixed values of the slit width  $h$ . We compute the potential energy and the order parameter in each layer. In agreement with earlier predictions found in the literature<sup>1-3</sup>, we found that the orientational structure changes continuously or discontinuously, depending on the temperature. The structural transition is monitored by the change in the order parameter and heat capacity.

---

\* rmarguta@iqfr.csic.es

<sup>1</sup> G. Chiccoli, A. Pasini, A. Sarlah, C. Zannoni, and S. Zumer, Phys. Rev. E **67**, 050703R (2003).

<sup>2</sup> D. de las Heras, L. Mederos, and E. Velasco, Phys. Rev. E **79**, 011712 (2009).

<sup>3</sup> P. I. C. Teixeira, F. Barmes, C. Anquetil-Deck, and D. J. Cleaver, Phys. Rev. E **79**, 011709 (2009).

**Estudio por simulación del espesor de la capa líquida para la superficie libre del hielo**

M. M. Conde<sup>†</sup>, C. Vega<sup>†</sup> y A. Patrykiewicz<sup>‡</sup>

<sup>†</sup> *Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense, 28040 Madrid, Spain*

<sup>‡</sup> *Faculty of Chemistry, MCS University, 20031 Lublin, Poland*

Se llevaron a cabo simulaciones de Dinámica Molecular para el hielo Ih en contacto con una superficie libre usando cuatro modelos de potencial: SPC/E, TIP4P, TIP4P/Ice y TIP4P/2005. Se analizó el comportamiento de los planos basal, prismático primario y prismático secundario cuando estaban expuestos al vacío. Se observó la formación de una capa líquida en la superficie del hielo a temperaturas por debajo del punto de fusión para todos los modelos y los planos considerados. Para un plano dado, se encontró que el espesor de la capa líquida era similar para los diferentes modelos de potencial estudiados, cuando la comparación se hacía para el mismo grado de subenfriamiento con respecto al punto de fusión del modelo. El espesor de la capa líquida presenta un incremento con la temperatura. Para una temperatura concreta se encontró que el espesor de

la capa líquida decrecía en el siguiente orden: plano basal, plano prismático primario y prismático secundario. En el caso particular del modelo TIP4P/Ice, modelo que reproduce el valor experimental de la temperatura de fusión del hielo, la primera indicación clara de la formación de una capa líquida aparece en torno a  $-100^{\circ}\text{C}$  para el plano basal, sobre  $-80^{\circ}\text{C}$  para el plano prismático primario y en torno a  $-70^{\circ}\text{C}$  para el plano prismático secundario.

---

<sup>1</sup> M. M. Conde, C. Vega y A. Patrykiewicz, *J. Chem. Phys.* **129**, 014702 (2008).

<sup>2</sup> C. Vega, M. M. Conde y A. Patrykiewicz, *Mol. Phys.* **104**, 3583 (2006).

## Estructura intrínseca de la interfase entre dos líquidos

Héctor Martínez<sup>†</sup>, Pedro Tarazona<sup>†</sup> y Enrique Chacón<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid*

<sup>‡</sup>*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC*

El objetivo de este trabajo es el de dar una descripción a nivel molecular de la interfase líquido-vapor utilizando un método que nos da la posibilidad de caracterizar de forma precisa la superficie de un líquido y de obtener información relevante de su estructura. El estudio de la estructura de la superficie de un líquido presenta un gran problema debido a la presencia de fluctuaciones térmicas, denominadas ondas capilares, que difuminan cualquier estructura posicional y orientacional, resultando en perfiles monótonos. Recientemente, se ha desarrollado un método (*Intrinsic Sampling Method* o *ISM*<sup>1,2</sup>) que permite sustraer las fluctuaciones térmicas y calcular la estructura intrínseca subyacente, introduciendo conceptos como superficie intrínseca (superficie instantánea que separa la fase líquida del vapor) y perfiles de densidad intrínsecos (perfiles de densidad referidos a la superficie intrínseca)

que son la mejor forma de caracterizar la interfase. En la presente investigación se ha aplicado el *ISM* al estudio de la interfase entre dos líquidos poco miscibles. Para ello, se ha generalizado el *ISM* para ser capaces de aplicarlo a un sistema multicomponente. En concreto, se ha estudiado como cambia el espectro de fluctuaciones de las ondas capilares, la correlación entre las superficies intrínsecas de los dos líquidos y la distancia de separación entre ambos líquidos según aumentamos la miscibilidad entre ellos y si adicionalmente disminuimos la anchura de la capa de uno de los líquidos.

---

<sup>1</sup> E. Chacón y P. Tarazona, Phys. Rev. Lett. **91**, 166103 (2003).

<sup>2</sup> P. Tarazona y E. Chacón, Phys. Rev. B **70**, 235407 (2004).

## Sedimentation of self-propelled microorganisms

Ricard Matas Navarro\* and Ignacio Pagonabarraga Mora

*Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, 08028 Barcelona*

Sedimentation is a widely studied but not fully understood process in which a suspension of particles settles due to the action of gravity. The surrounding fluid exerts a drag on each particle, leading to long range hydrodynamic interactions between them, which decay asymptotically as the inverse interparticle separation. Two characteristic phenomena in such a process are large scale velocity fluctuations and local density fluctuations<sup>1-3</sup>.

Active particles, such as self-propelled microorganisms, generate a flow in the fluid when swimming which introduces an extra long range interaction, now decreasing as the inverse of squared interparticle separation, and at the same time, tend to align in the same propagation direction due to its polarity.

We have coupled both processes, sedimentation and self-propulsion, to study the behaviour of these active particles when an external field biases its movement and to compare the results with the passive colloids sedimentation.

We perform hibrid simulations using Lattice Boltzmann for the solvent, to take into account all the hydrodynamics, and molecular dynamics for the self-propelled colloids, squirmers<sup>4</sup>, which are in a

fluidized bed with periodic boundary conditions. In a fluidized bed, the liquid is pumped upwards to counteract the force of gravity on the particles, so we only focus our study in a steady state where no wall effects are present. Hydrodynamic diffusion, large-scale collective motions and strong density fluctuations are some of the properties found in such suspensions, where the dynamics is driven by a competition between vorticity and polarity, that can bring the system into a slow dynamics regime, characterized by extremely large correlation times.

For a wide range of active parameters, gravity acts as a symmetry-breaking field and the results are independent of its magnitude when those parameters and the system observables, as in the passive case, are properly rescaled.

---

\* ricardmn@ffn.ub.es

<sup>1</sup> R. E. Caflisch and J. H. C. Luke, *Phys. Fluids* **28**, 759 (1985).

<sup>2</sup> P. N. Segrè, E. Herbolzheimer, and P. M. Chaikin, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2574 (1997).

<sup>3</sup> N.-Q. Nguyen and A. J. C. Ladd, *J. Fluid Mech.* **525**, 73 (2005).

<sup>4</sup> T. M. Ishikawa, P. Simmonds, and T. J. Pedley, *J. Fluid Mech.* **568**, 119 (2006).

## Fluctuaciones en medios granulares sujetos a la acción de un termostato

P. Maynar\*, M. I. García de Soria y E. Trizac

*Área de Física Teórica. Facultad de Física, Universidad de Sevilla, Apartado de Correos 1065, 41080 Sevilla*

Debido a la disipación que se produce en las colisiones, la energía total en un sistema granular aislado decae monótonamente en el tiempo. Sin embargo, es posible mantener un sistema granular en el régimen de flujo rápido inyectando energía de tal manera que se alcanza un estado estacionario. En esos estados, la energía inyectada por el termostato es compensada por la energía disipada en las colisiones. En este trabajo, nos centraremos en un gas granular que es calentado uniformemente, acoplado la velocidad de cada partícula a un ruido blanco, siendo éste el termostato estocástico<sup>1</sup>. Con este tipo de inyección de energía, relevante para ciertas configuraciones experimentales en dos dimensiones con un piston vibrante rugoso<sup>2</sup>, el sistema alcanza un estado homogéneo estacionario tras un régimen

transitorio.

El objetivo del presente trabajo es clarificar y cuantificar la influencia en las fluctuaciones del sistema de las correlaciones introducidas por la inelasticidad de las colisiones<sup>3,4</sup>.

---

\* maynar@us.es

<sup>1</sup> T. P. C. van Noije y M. H. Ernst, *Granular Matter* **1**, 57 (1998).

<sup>2</sup> A. Prevost, D. A. Egolf y J. S. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 084301 (2002).

<sup>3</sup> M. I. García de Soria, P. Maynar y E. Trizac, *Mol. Phys.* (aceptado).

<sup>4</sup> P. Maynar, M. I. García de Soria y E. Trizac (en preparación).

## Oscillatory instabilities in directional solidification with solutal convection. Transient regime

Esteban Meca\* and Laureano Ramírez-Piscina

*Departament de Física Aplicada, Universitat Politècnica de Catalunya, Avda. Doctor Marañón 44-50, 08028 Barcelona*

Directional solidification of alloys has long been an archetypical model system in pattern formation, and is also of capital importance in many practical and industrial applications, ranging from the casting of turbine blades to the production of solar cells. The precise control of these processes as well as the prediction of the resulting microstructure, on which the final material properties depend largely, constitute a very active field of research.

In this context, it is well-known that in the controlled setup of directional solidification, experiments give rich and interesting dynamics. In particular, for determined values of the solidification rate a flat interface will develop first a pattern of cells that will evolve into dendrites, very intricate branching structures<sup>1</sup>.

Understanding the development of such structures and in particular predicting their spacing in the solidification front is also of importance for the practical applications, and has received much attention in the past. It has been found that in fact this spacing depends on the history of the dendrite, in particular on the transient regime<sup>2</sup>.

In this work we focus on the effects of convection on directional solidification processes. It is well-known that convection is one of the main effects perturbing the growth conditions of a solidifying interface, and hence it could be of importance in the transient stages of solidification, even in the cases where it has little or no effect in the steady state growth.

In the particular setup of directional solidification of an alloy, even with an stabilizing thermal gradient,

convection can be induced by gradients in concentration, and in some cases cannot be avoided. We have studied its effects on the planar front of solidification in transient stages when coupled with the morphological instability.

We present here a complete theoretical study of the instability of the planar interface for the coupled system in the linear regime during the transient of a typical directional solidification experiment. We have studied it as a function of the diverse control parameters, and give the first unstable wavelength during the transient, with particular attention to the advent of purely transient instabilities.

As an additional result, we have found oscillatory instabilities, which had been predicted<sup>3</sup> for steady-state solidification, and unsuccessfully sought experimentally<sup>4</sup>. We give insights on the range of parameters on which these oscillations take place and study their appearance in transient stages of solidification.

---

\* esteban@fa.upc.edu

<sup>1</sup> K. Somboonsuk, J. T. Mason, and R. Trivedi, *Met. Mat. Trans. A* **15**, 967 (1984).

<sup>2</sup> J. A. Warren and J. S. Langer, *Phys. Rev. E* **47**, 2702 (1993).

<sup>3</sup> S. R. Coriell *et al.*, *J. Cryst. Growth* **49**, 13 (1980).

<sup>4</sup> R. J. Schaefer and S. R. Coriell, *Materials processing in the reduced gravity environment of space*, 479 (1982).

## Modelo mesoscópico para la invasión de plantas

Vicenç Méndez\*

*Grup de Física Estadística, Departament de Física, Universitat Autònoma de Barcelona,  
08193 Bellaterra (Cerdanyola), Barcelona*

Uno de los retos recientes de la ecología consiste en conocer el ritmo al que las especies invasoras de animales o plantas se dispersan en territorios de los cuales no son especies nativas<sup>1</sup>. La predicción del ritmo de invasión puede ayudar a conocer mejor las especies y a tomar las medidas oportunas para paliar sus efectos devastadores. En esta presentación se pretende ilustrar cómo se puede deducir un modelo mesoscópico, basado en las propiedades dinámicas del ciclo de vida de una planta para determinar de forma semianalítica el umbral de invasión y la velocidad de invasión de las plantas<sup>2</sup>. Ambas predicciones serán contrastadas con datos observacionales que nos ayudarán a poner a prueba el modelo. Para ello partimos de la existencia de semillas jóvenes (o de tipo 1) que al cabo de un tiempo se convierten en semillas maduras (o de tipo 2) y plantas adultas. En total, tres tipos de entidades. El ciclo de vida de las plantas y que nuestro modelo pretende explicar es el siguiente.

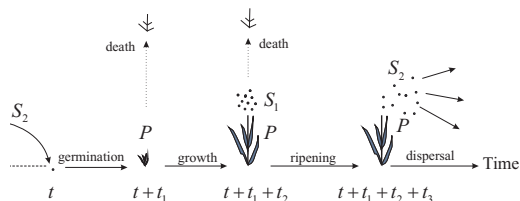


Figura 1. Ciclo de vida. Los tiempos aleatorios de germinación  $t_1$ , crecimiento  $t_2$  y maduración  $t_3$  están distribuidos de acuerdo con sus respectivas funciones de probabilidad.

Cuando una semilla madura se ha dispersado y caído en un punto, empieza la germinación. Tras un intervalo de tiempo aleatorio, distribuido de acuerdo con una

función de distribución de probabilidad, germina una planta de la semilla madura con una cierta probabilidad. Esta planta crece tras un intervalo de tiempo aleatorio, distribuido de acuerdo con una función de distribución de probabilidad, hasta que alcanza la madurez y es capaz de producir semillas, a menos que muera antes. Cuando la planta madura, produce un número  $Y$  de semillas jóvenes que supondremos fijo. Tras otro intervalo de tiempo aleatorio las semillas jóvenes se convierten en maduras y dispersan para volver a repetir nuevamente el ciclo. A partir de las densidades de plantas ( $P$ ), semillas jóvenes ( $S_1$ ) y semillas maduras ( $S_2$ ) que se hallan en un punto y de las densidades que llegan a ese mismo punto en un instante de tiempo, proponemos ecuaciones de balance para dichas densidades ( $p$ ,  $s_1$  y  $s_2$ ), inspirándonos en el movimiento aleatorio a tiempo continuo. Analizando los estados de equilibrio del sistema y su estabilidad podemos obtener la condición umbral sobre el número de semillas maduras producidas por planta, para que sea capaz de invadir un territorio, en función de las propiedades estadísticas de las funciones de probabilidad del modelo. Así mismo, podemos determinar mediante las ecuaciones de Hamilton-Jacobi la velocidad del frente de onda invasor que se propaga en un espacio homogéneo de dos dimensiones. Ambos resultados se comparan con datos observacionales para diferentes tipos de plantas que ponen de manifiesto que el modelo se adecúa razonablemente bien.

\* vicenc.mendez@uab.cat.

<sup>1</sup> J. D. Murray, *Mathematical Biology* (Springer-Berlin, 2ª Edición, 2003).

<sup>2</sup> V. Méndez, D. Campos y A. W. Sheppard, *Bull. Math. Biol.*, DOI 10.1007/s11538-009-9422-x (2009).



## Heterogeneous dynamics and internal stress distributions near dislocation jamming

Isabel Corominas<sup>†</sup>, Lasse Laurson<sup>‡</sup>, Mikko Alava<sup>‡</sup>, and M. Carmen Miguel<sup>†,\*</sup>

<sup>†</sup>*Departament de Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de Barcelona, Diagonal 647, 08028 Barcelona, Spain*

<sup>‡</sup>*Laboratory of Physics, Helsinki University of Technology, P.O. Box 1100, FIN-02015 HUT, Finland*

Dislocation assemblies in crystalline substrates represent a new example of the broad class of systems that exhibit a jamming (or yielding) transition. Experimental observations on this broad class of systems ranging from granular media to foams show that their dynamics becomes increasingly heterogeneous when approaching the jamming threshold. Likewise, experiments on crystal plasticity at various scales have recently emphasized the heterogeneous character of plastic flow. This can be understood to result from a combination of kinetic constraints on dislocation motion due to the underlying crystal structure and long range anisotropic interactions between dislocations, which together induce metastable jammed dislocation configurations. Building up upon these premises, here we explore further the analogy between simple

two-dimensional dislocation ensembles and other systems exhibiting jamming, by considering the behavior of the dynamic four point susceptibility  $\chi_4(l, \tau)$ , as well as the shear stress distributions in both jammed and moving dislocation arrangements. Our results on the behavior of  $\chi_4(l, \tau)$  point towards the existence of a growing dynamic correlation length as the jamming threshold is approached within the moving phase. Moreover, the topology of the shear stress distributions for the dislocation arrangements seem to corroborate this picture, showing increasingly broad size distributions and correlation lengths of stress clusters near dislocation jamming.

---

\* carmen.miguel@ub.edu.

## Simulación molecular de propiedades interfaciales de metano, dióxido de carbono y agua en condiciones de confinamiento

J. M. Míguez, D. González-Salgado, J. L. Legido y M. M. Piñeiro\*  
*Departamento de Física Aplicada, Universidade de Vigo, 36310 Vigo*

La caracterización de las propiedades interfaciales de fluidos reales en contacto con sustratos sólidos es necesaria en aplicaciones prácticas como por ejemplo la extracción de gas natural de depósitos porosos, donde la adsorción es muy elevada y debe inyectarse un fluido de base acuosa para forzar la extracción. La adecuada descripción de la modificación de las propiedades interfaciales debido a la inyección forzada de un fluido externo es la clave para mejorar el rendimiento de este proceso, pero los modelos teóricos usados habitualmente ofrecen resultados poco fiables en este tipo de estimación. Con el objetivo de aplicar técnicas de simulación como contribución a la caracterización del problema práctico citado, en este trabajo se ha utilizado el método de Monte Carlo aplicado a fluidos puros confinados entre dos paredes plano paralelas, sin estructura, pero interaccionantes. Se ha determinado la influencia del tipo de potencial sustrato-fluido ensayado, calculando en cada caso los perfiles de densidad y coeficiente de absorción del fluido confinado. También se han determinado las propiedades interfaciales usando el

método del Test-Área<sup>1</sup>, y se han comparado estos valores con los obtenidos a partir de las componentes de la presión, considerando el efecto de capilaridad debido a la distancia entre paredes, y el tipo de potencial confinante. El metano se ha considerado como una única esfera Lennard-Jones (LJ) aislada, para el dióxido de carbono se ha considerado un modelo que incluye un sitio LJ más una contribución multipolar isotrópica (IMP)<sup>2</sup>, y para definir el agua se ha utilizado el modelo TIP4P-2005<sup>3</sup>.

Agradecimientos: Los autores agradecen al CESGA (Santiago de Compostela) el acceso a equipos de cálculo científico.

---

\* mmpineiro@uvigo.es.

<sup>1</sup> G. J. Gloor, G. Jackson, F. J. Blas y E. de Miguel, *J. Chem. Phys.* **123**, 134703 (2005).

<sup>2</sup> G. Galliero, C. Nieto-Draghi, C. Boned, J. B. Avalos, A. D. Mackie, A. Baylaucq y F. Montel, *Ind. Eng. Chem. Res.* **46**, 5238 (2007).

<sup>3</sup> C. Vega y E. de Miguel, *J. Chem. Phys.* **126**, 154707 (2007).

## Aggregation of chemotactic organisms in an advected environment

Javier Muñoz-García<sup>†,\*</sup> and Zoltán Neufeld<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC)*

<sup>‡</sup>*School of Mathematical Sciences, University College of Dublin, Belfield, Dublin 4, Ireland*

Directed motion of microorganisms and cells in response to chemical signals - *chemotaxis* - plays an important role in a wide range of biological processes including migration of white blood cells, cancer invasion, embryonic development or in locating nutrients by bacteria, algae etc. In many cases the chemotactic cells not only detect, but also produce chemical signals that may attract other members of the population. This type of communication based on chemoattractant odors or pheromones can control group behavior, aggregation, swarming and collective decisions (quorum sensing) in bacterial colonies, slime mold or insect populations. Often the medium into which the chemical signal is released is not stationary but is a moving fluid (e.g. air or water) while the chemotactic cells or organisms may not be transported by the flow as they are bound to a solid surface (e.g. microbial biofilm communities in natural environments or bioreactors). An original continuum model of chemotaxis at the population level is the Keller-Segel (KS) model<sup>1</sup>, that describes using partial differential equations the evolution of the density of chemotactic cells and the chemoattractant concentration. Later on extensions of this model have been proposed and the mathematical modelling of chemotaxis has developed into a diverse discipline<sup>2</sup>.

In this work we study the effect of advection on the aggregation and pattern formation in KS type models. We found that, in the presence of a differential flow, an advective instability produces a pattern moving in the direction of the flow. Interestingly, although the organisms are not directly advected, the advection of the chemotactic signal induces a movement of the particle density as the organisms try to follow regions of high chemical concentrations. When the organisms mobility is weak in comparison to the advective flow (which is typically much faster), the balance between the chemotactic flux of the organism density and the advective transport of the chemical field breaks down and it is then restored by a change in the characteristic of the spatial patterns, that become strongly anisotropic with elongated stripe-like structures aligned to the direction of the flow (see Fig. 1). Furthermore, for flows larger than a certain threshold the organism can not follow the chemotaxis signal reducing their velocity and eventually preventing the formation of large aggregates. Thus, the inclusion of a linear advected term inhibit the formation

of large gradients and diminish the nonlinear effects. This stabilizing effect may completely stop the chemotactic aggregation and coarsening process in the direction of the flow. Although a simple uni-directional flow can not suppress the coarsening in the perpendicular direction, additional results with more general two-dimensional time-dependent velocity fields (such as turbulent flows) has shown that aggregation may be halted (in an similar way that the coarsening process is arrested in binary mixtures<sup>3</sup>) preventing the appearance of singularities associated to some of the KS models.

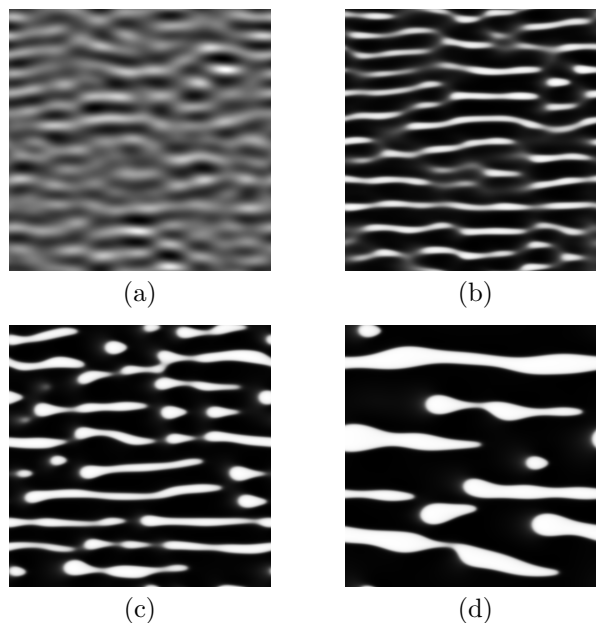


Figura 1. Temporal evolution of the cell density when the chemoattractant is advected in the horizontal axis by an uniform flow.

\* javiermunozgarcia@gmail.com,  
<http://gisc.uc3m.es/~javier>.

<sup>1</sup> E. F. Keller and L. A. Segel, *J. Theor. Biol.* **26**, 399 (1970).

<sup>2</sup> T. Hillen and K. Painter, *J. Math. Biol.* **58**, 183 (2009).

<sup>3</sup> S. Berti, G. Boffetta, M. Cencini, and A. Vulpiani, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 224501 (2005).

## Cusps, self-organization, and absorbing states

Juan A. Bonachelai<sup>†</sup>, Mikko Alava<sup>‡</sup>, and Miguel A. Muñoz<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia e Instituto de Física Teórica y Computacional Carlos I, Facultad de Ciencias, Univ. de Granada, 18071 Granada, Spain*

<sup>‡</sup>*Helsinki University of Technology, Department of Applied Physics, HUT-02105, Finland*

Elastic interfaces embedded in (quenched) random media exhibit meta-stability and stick-slip dynamics. These non-trivial dynamical features have been shown to be associated with cusp singularities of the coarse-grained disorder correlator. Here we show that *annealed* systems with many absorbing states and a conservation law but *no quenched disorder* exhibit identical cusps. On the other hand, similar non-conserved systems in the directed

percolation class, are also shown to exhibit cusps, but of a different type. These results are obtained both by a recent method to explicitly measure disorder correlators and by defining an alternative new protocol, inspired by self-organized criticality, which opens the door to easily accessible experimental realizations.

---

## Desanclaje térmico de fluxones en anillos Josephson discretos

F. Naranjo\*, J. J. Mazo y K. Segall

Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain

La dinámica de estructuras coherentes emergentes como solitones, vórtices, etc., es un tema clave dentro de la ciencia no-lineal. Surge una pregunta relevante, investigada ampliamente en la literatura; ¿cómo es el movimiento y la forma de aquellas excitaciones modificadas por la presencia de pequeñas perturbaciones? y, ¿existen tales modificaciones?. Además, cuando aplica a situaciones físicas de interés, los modelos no-lineales deben incorporar términos adicionales, tales como el amortiguamiento, constantes o fuerzas externas periódicas, o ruido, para nombrar unas pocas. Entre las perturbaciones presentes en sistemas no-lineales, las estocásticas son las de mayor interés en virtud de sus efectos nada triviales en el sistema, y el ingente trabajo dedicado al respecto. La ecuación de Sine-Gordon ha sido considerada con más detalle en el contexto de las aplicaciones a la Física, por ejemplo en la propagación de flujo magnético en uniones Josephson, crecimiento epitaxial de películas delgadas, movimiento de dislocaciones en cristales, dinámica del DNA, situaciones en las cuales el ruido de diferentes orígenes que frecuentemente juega un rol crucial.

Desde el punto de vista experimental, las uniones Josephson (JJ) son un lugar privilegiado para estudiar solitones y explorar sus posibles aplicaciones<sup>1</sup>. Los anillos de uniones Josephson se describen muy bien por la ecuación de sine-Gordon discreta y soportan solitones discretos no-lineales o kinks, usualmente llamados fluxones en este contexto. Motivados por recientes experimentos sobre el desanclaje térmico y la dinámica de fluxones (kinks) en pequeños anillos conformados de 9 uniones Josephson<sup>2</sup>, estudiamos numéricamente dichos sistemas y en las simulaciones, tenemos en cuenta el intercambio de energía entre el sistema y el ambiente, de tal forma que se consideran las fluctuaciones del sistema que afectan fuertemente el valor de la corriente de desanclaje y la forma de curva I-V. Los fluxones se pueden comparar con partículas sobre un potencial sustrato periódico, por lo tanto, mostramos el estudio del desanclaje térmico de uno, y tres fluxones en un anillo JJ y lo comparamos con la simulación numérica y las predicciones analíticas para el caso de una partícula.

El anillo de uniones Josephson consiste en una serie de uniones individuales conectadas en paralelo. Las ecuaciones para el arreglo hecho por  $N$  uniones acopladas alimentadas por la misma corriente externa está dada por<sup>3</sup>:

$$\ddot{\varphi}_j + \Gamma \dot{\varphi}_j + \sin \varphi_j + \xi_j(\tau) = \lambda(\varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1}) + i \quad (1)$$

El índice  $j$  denota diferentes uniones y corre de 1 a  $N$ . El parámetro  $\lambda$  representa el acoplamiento entre las uniones. Las condiciones de frontera están definidas por la topología del arreglo.

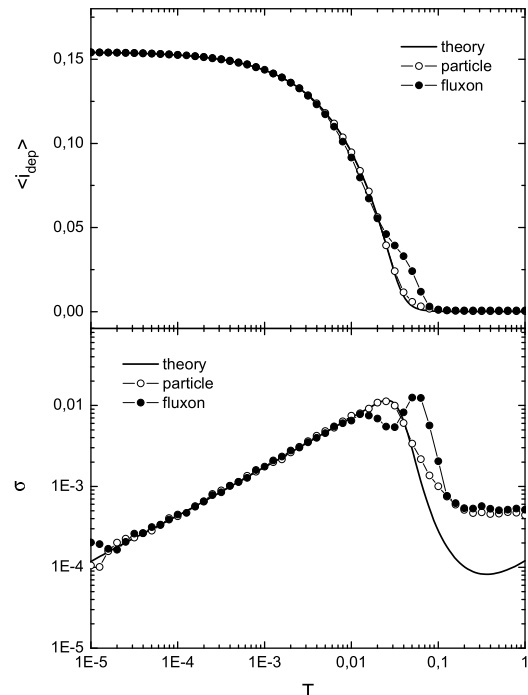


Figura 1.  $\langle i_{dep} \rangle$  y  $\sigma$  contra  $T$  a  $\Gamma = 0.01$  y  $\lambda = 0.4$  para el fluxón y una partícula en un potencial periódico y la comparación con la predicción teórica.

La figura muestra la comparación entre los resultados para el fluxón en el arreglo, las simulaciones numéricas del desanclaje de una partícula en un potencial sinusoidal y el cálculo teórico, basado en los resultados analíticos para la tasa de activación térmica de partículas en potenciales sinusoidales en el régimen de bajo amortiguamiento<sup>4</sup>.

\* fnmtunja@unizar.es.

<sup>1</sup> A. V. Ustinov, Physica D **123**, 315 (1998).

<sup>2</sup> K. Segall *et al.*, unpublished.

<sup>3</sup> S. Watanabe, S. H. Strogatz, H. S. J. van der Zant y T. P. Orlando, Phys. Rev. Lett. **74**, 379 (1995).

<sup>4</sup> J. J. Mazo, F. Naranjo y K. Segall, Phys. Rev. B. **78**, 174510 (2008).

## Escape térmico de partículas brownianas desde un pozo metaestable. Caso de barrera finita y subamortiguado

F. Naranjo\*, J. J. Mazo y D. Zueco

*Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain*

La teoría de tasa de reacción es una rama de la ciencia no-lineal relevante en la física, química y biología. En la mayoría de las aplicaciones se presenta un intercambio de energía entre la partícula y su entorno. Por esta razón se deben considerar las fluctuaciones térmicas. Aunque Kramers introdujo su teoría para describir reacciones químicas, la teoría tiene aplicabilidad en contextos de procesos de activación térmica y ha sido modificada o corregida de diferentes maneras por varios investigadores. Kramers no logró derivar una expresión para la tasa uniforme para la tasa de escape, válida para cualquier valor del coeficiente de amortiguamiento del sistema. Estudiamos por medio de simulaciones numéricas el caso del escape térmico de una partícula browniana en potencial sinusoidal inclinado en los casos donde el amortiguamiento es muy pequeño y el escape ocurre para valores de la barrera del orden de la temperatura. En este régimen las predicciones de la teoría de Kramers y sus extensiones comienzan a fallar.

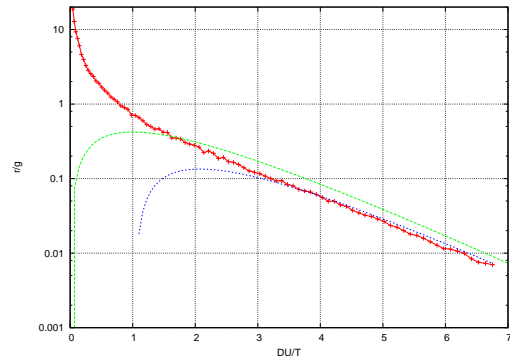


Figura 1. Tasa de escape ( $r$ ) dividida por el damping ( $\gamma$ ) frente a  $\Delta U/T$ .  $\gamma = 0.0001$ ,  $T = 0.02$ . La altura de la barrera a temperatura cero  $E_b(0) = 0.31$ , y la fuerza crítica  $F_c = 0.155$ .

\* fnmtunja@unizar.es.

<sup>1</sup> V. I. Melnikov, Phys. Rep. **209**, 1 (1991).

<sup>2</sup> P. Hänggi, P. Talkner y M. Borkovec, Rev. Mod. Phys. **62**, 251 (1990).

<sup>3</sup> V. I. Melnikov, Phys. Rev. E **48**, 3271 (1993).

## Opto-electronic devices with double feedback loop

R. M. Nguimdo, Pere Colet, and Claudio Mirasso

*Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, IFISC (CSIC-UIB), E-07122 Palma de Mallorca, Spain*

Opto-electronic oscillators (OEOs) provide a rich variety of dynamical behaviours. In particular they have been used as chaos generator for encoded optical communications. A typical OEO consists of a Mach-Zehnder (MZ) interferometer pump by a semiconductor laser (SL), a fibre delay line, a photo-detector and a gain amplifier. Chaos is induced by the delayed feedback on the refractive index of one of the arms of the MZ, while the SL itself operates in CW. However, delayed optoelectronic feedback on the injection current of SL can induce chaos by itself. Here we combine both, so that feedback affects the MZ as well as the SL injection. We consider two set-ups shown in Fig. 1.

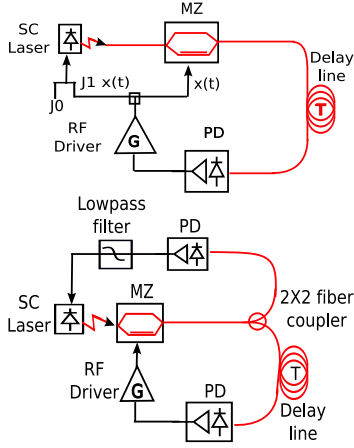


Figura 1. Setup.

The dimensionless voltage applied to the MZ modulator, the number of photons  $I$  and carriers  $N$  are given by

$$x + \tau \frac{dx}{dt} + \frac{1}{\theta} \int_{t_0}^t x(s) ds = \beta_1 I \cos^2 [x(t - T) + \phi] \quad (1)$$

$$\frac{dI}{dt} = (G - \gamma) I \quad (2)$$

$$\frac{dN}{dt} = J_0 - \gamma_e N - GI + f[x(t)] \quad (3)$$

$$G = g_m(N - N_0)/(1 + sI) \quad (4)$$

Where  $T = 2.5\text{ns}$  is the delay time,  $\theta = 5\mu\text{s}$  and  $\tau = 25\text{ps}$  are the amplifier cut-off frequencies,  $\beta' = 2.8910 - 5$  is the proportionality coefficient for the MZ,  $\phi$  is the offset phase,  $\gamma = 3.3 \times 10^{11}\text{s}^{-1}$  is the inverse photon lifetime,  $\gamma_e = 5.0 \times 10^8\text{s}^{-1}$  is the inverse carrier lifetime,  $J_0$  is the injection current,  $G = g(N - N_0)/(1 + sI)$  where  $g = 1.5 \times 10^{-8}\text{ps}^{-1}$  is the gain,  $N_0 = 1.2 \times 10^8$  the carriers at transparency and  $s = 2 \times 10^{-7}$  the nonlinear

saturation). For the setup on the top in Fig.1,  $f[x(t)] = J_1 x(t)$  where  $J_1$  is the feedback laser coefficient, while for the one on the bottom  $f[x(t)]$  obeys the equation  $df/dt = -2\pi f_c \{f - J_1 \cos^2 [x(t) + \phi]\}$  where  $f_c = 10\text{GHz}$  is the cutoff frequency of the lowpass filter. Fig. 2 shows that  $J_1$  can increase the chaos or induce chaos for parameters where it was not present. Fig. 3 shows how increasing  $J_1$  the correlation time decreases. This effect is more noticeable in the sep-up corresponding to Fig 1 bottom. We have also studied the synchronization between master and receiver systems as well as message encoding showing that this scheme provides a more chaotic carrier while synchronization is still good and message decoding can be done in a reliable manner.

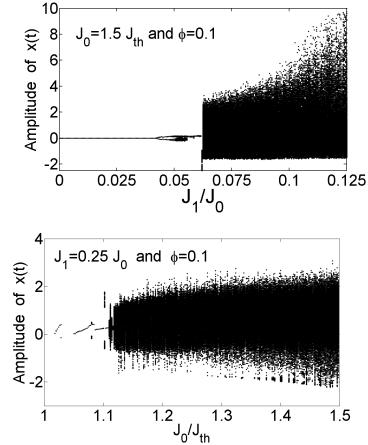


Figura 2. Bifurcation diagram as increasing  $J_1$  (top for fig. 1, top and bottom for scheme in fig. 1, bottom).

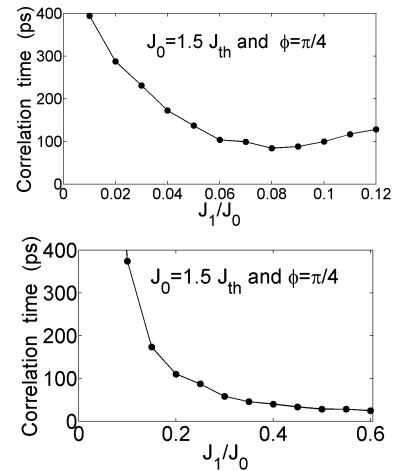


Figura 3. Correlation time as function of  $J_1$  for the two set-ups shown in Fig. 1.

## Dynamics of electro-optic delay oscillators pumped with two lasers

R. M. Nguimdo<sup>†</sup>, Pere Colet<sup>†</sup>, Yanne Chembo Kouomou<sup>‡</sup>, and Laurent Larger<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, IFISC (CSIC-UIB), E-07122 Palma de Mallorca, Spain*

<sup>‡</sup>*Institut FEMTO-ST, U. de France-Comté, 25030 Besancon, France*

Opto-electronic oscillators (OEOs) can generate a broad range of dynamical regimes from of spectrally pure microwaves to chaos for optical encoded communications. A typical OEO is composed of a Mach-Zehnder interferometer pump by a CW laser, a fibre delay line, a photo-detector and a gain amplifier. The refractive index in one of the arms of the MZ depends on the emitted light after fibre propagation. In the chaotic regime a message can be encoded on top the chaotic carrier and decoded by an appropriate receiver. To increase privacy, we consider here an OEO which is pumped by two lasers with slightly different wavelength ( $\lambda_0, \lambda_1$ ), both playing a role in the generation of the chaotic carrier, but only  $\lambda_0$  is transmitted using a demultiplier.

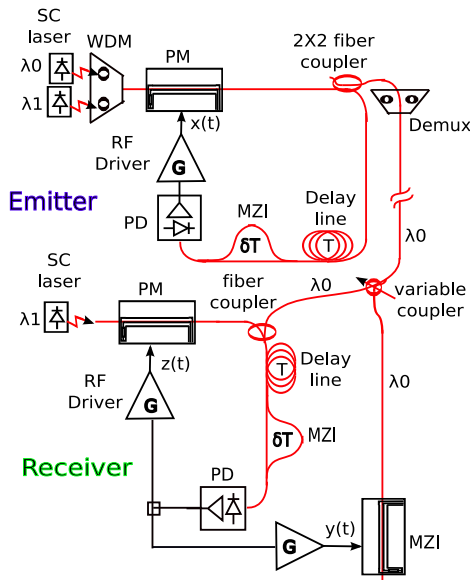


Figura 1. Setup.

The dimensionless voltage of the emitter operating in phase modulation, is governed by

$$\begin{aligned} x + \tau_1 \frac{dx}{dt} + \frac{1}{\theta_1} \int_{t_0}^t x(s) ds &= \\ &= \beta_0 \cos^2 [x(t - T_1) - x(t - T_1 - \delta T) + \phi_1] \\ &+ \beta_1 \cos^2 [x(t - T_2) - x(t - T_2 - \delta T) + \phi_2] \end{aligned} \quad (1)$$

here  $\delta T$  is the time-imbalanced interference between the arms of the MZ,  $T_1$  and  $T_2$  are the time delays for  $\lambda_0$  and  $\lambda_1$  which differ due to fibre dispersion,  $\phi$  is the delay

phase and  $\beta_0$  and  $\beta_1$  are related to the power of the lasers emitting at  $\lambda_0$  and  $\lambda_1$ . The receiver is operating in open loop for  $\lambda_0$  but in close loop for  $\lambda_1$ , which is generated locally.

$$\begin{aligned} y + \tau_2 \frac{dy}{dt} + \frac{1}{\theta_2} \int_{t_0}^t y(s) ds &= \\ &= \beta'_0 \cos^2 [x(t - T'_1) - x(t - T'_1 - \delta T) + \phi'_1] \\ &+ \beta_1 \cos^2 [z(t - T'_2) - x(t - T'_2 - \delta T) + \phi'_2] \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} z + \tau_3 \frac{dz}{dt} + \frac{1}{\theta_3} \int_{t_0}^t z(s) ds &= \\ &= \beta'_0 \cos^2 [x(t - T'_1) - x(t - T'_1 - \delta T) + \phi'_1] \\ &+ \beta_1 \cos^2 [z(t - T'_2) - x(t - T'_2 - \delta T) + \phi'_2] \end{aligned} \quad (3)$$

We have studied chaos generated in this form as well as the synchronization between emitter and receiver. For typical parameter values we find that chaos entropy increases with  $\beta_1$  as shown in (Fig.(2, top)). Despite the increase in entropy and the fact that the receiver has now to generate its own  $\beta_1$  synchronization is still good for  $\beta_1 < 1.5$  (Fig.(2, bottom)). Beyond this value, instabilities occur in the system and therefore, the synchronization is seriously degraded. The threshold for  $\beta_1$  depends slightly on the value of the main gain  $\beta_0$ , and increasing  $\beta_0$  to 5.0, synchronization occurs up to 1.75.

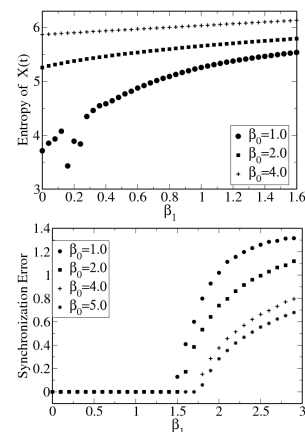


Figura 2. Entropy of the transmitter (left) and synchronization error between transmitter and receiver (right) as function of  $\beta_1$ .  $T_1 = T'_1 = 31.7\text{ns}$ ,  $T_2 = T'_2 = 32\text{ns}$ ,  $\phi_1 = \phi'_1 = 0.3$ ,  $\phi_2 = \phi'_2 = 0.35$



## Evolución y selección de replicones en ambientes cambiantes

Juan Carlos Nuño<sup>†</sup>, Javier de Vicente<sup>‡</sup>, José Olarrea<sup>‡</sup>, Pilar López<sup>§</sup> y Rafael Lahoz-Beltrá<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Departamento de Matemática Aplicada a los Recursos Naturales, Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Montes, Universidad Politécnica de Madrid, 28040 Madrid*

<sup>‡</sup>*Departamento de Matemática Aplicada y Estadística, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Aeronáuticos, Universidad Politécnica de Madrid, 28040 Madrid*

<sup>§</sup>*Departamento de Matemática Aplicada, Facultad de Ciencias Biológicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid*

La capacidad autorreplicativa precede a la vida. Es en la posibilidad de errar, esto es de obtener copias diferentes a las precursoras, donde reside la capacidad de evolucionar. Pero no solo los seres vivos se reproducen y por tanto, evolucionan. También lo pueden hacer las opiniones<sup>1</sup>, las gramáticas<sup>2</sup> o las rutas metabólicas<sup>3</sup>, por citar algunos ejemplos. El término replicón fue acuñado por R. Dawkins precisamente para denotar este concepto genérico<sup>4</sup>.

El resultado de la evolución depende de la interrelación entre las características individuales y el entorno (físico) en el que se desarrolla el proceso evolutivo. El entorno puede variar debido a factores externos y al efecto de su interacción con las propias especies del sistema. Escasos han sido los modelos evolutivos que han considerado explícitamente la interacción entre las especies y el entorno. Y esto a pesar de la constatada relevancia que esta interacción tiene sobre el comportamiento del ecosistema<sup>5,6</sup>.

En este trabajo presentamos un modelo de replicones que tienen capacidad de modificar su entorno. El modelo está basado en el Daisyworld que Watson y Lovelock presentaron a principios de los años ochenta<sup>7</sup>. La tasa de replicación de cada especie depende de un parámetro característico del entorno (su temperatura) que, a su vez, es modificado por los replicones. La mutación afecta de manera independiente a los dos parámetros que definen un replicón: su temperatura óptima de replicación y su capacidad para modificar el entorno. Se supone que la tasa de muerte no depende del entorno y permanece constante. Además, sin restricciones adicionales, la población total permanece acotada.

Para sistemas de pocos replicones con replicación fiel

se ha analizado el efecto sobre la dinámica determinista de fluctuaciones externas sobre el entorno. Para el caso de mutación no nula, se ha utilizado un modelo de dos especies (copia maestra y su cola de error) para probar la existencia de un umbral de error por encima del cual se forma una cuasiespecie, similar a la descrita por M. Eigen y colaboradores en los años setenta<sup>8,9</sup>. La simulación de un sistema con un número grande de replicones con replicación errónea ha permitido detectar una amplia variedad de comportamientos, desde la completa extinción del sistema a la alternancia de cuasiespecies, dependiendo de las tasas de mutación de los parámetros que definen la especie. La aplicación de este tipo de modelos evolutivos para estudiar el origen y evolución de la opinión pública es finalmente discutida.

<sup>1</sup> J. C. Nuño, J. Vicente, J. Olarrea, P. López y R. Lahoz-Beltrá, *Ecological Informatics*, en revisión (2009).

<sup>2</sup> M. A. Nowak, N. L. Komarova y P. Niyogi. *Science*, **291**, 114 (2001).

<sup>3</sup> A. Stephani, J. C. Nuño y R. Heinrich. *J. Theor. Biol.* **199**, 45 (1999).

<sup>4</sup> Dawkins R., *The selfish gene* (Oxford University Press, 30th Anniversary Edition, 2006).

<sup>5</sup> A. J. Wood, G. J. Ackland, J. G. Dyke, H. T. P. Williams y T. M. Lenton, *Rev. of Geophys.* **46**, RG1001 (2008).

<sup>6</sup> J. McDonald-Gibson, J. G. Dyke, E. A. Di Paolo e I. R. Harvey, *J. Theor. Biol.* **251**, 653 (2008).

<sup>7</sup> A. J. Watson y J. E. Lovelock, *Tellus* **35B**, 284 (1983).

<sup>8</sup> M. Eigen, *Die Naturwissenschaften* **58**, 465 (1971).

<sup>9</sup> M. Eigen, J. McCaskill y P. Schuster, *Adv. Chem. Phys.* **75**, 149 (1989).

## Autoorganización de polímeros vivos: filamentos de FtsZ y el anillo de división celular bacteriano

Alfonso Páez\* y Pedro Tarazona

Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid

Los filamentos de proteínas juegan un papel muy importante en muchos procesos biológicos, como por ejemplo la división celular en eucariotas y bacterias. En el momento de la división celular de la bacteria *E. Coli* la proteína FtsZ comienza a polimerizar en la cara interna de la membrana bacteriana formando el anillo septal. Esta estructura es un agregado de filamentos que se autoensambla y es capaz de generar una fuerza que constriñe la membrana de la bacteria desencadenando el proceso de división celular.

polímeros de FtsZ sobre mica. Este modelo nos permite obtener polímeros vivos con curvatura preferente e interacción lateral y comprobar la gran riqueza de formas que presentan los agregados de polímeros para pequeñas variaciones de los parámetros en nuestro modelo (Fases tipo I, C y O).

También exploramos los diferentes mecanismos de formación del anillo septal en una geometría cilíndrica que representa la membrana de la bacteria y el mecanismo generador de fuerza del anillo.

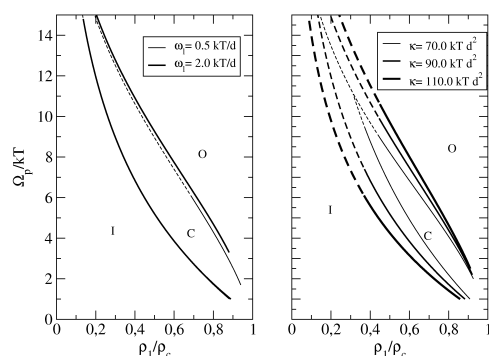


Figura 1. Diagrama de Fases de un sistema de polímeros con curvatura preferente e interacciones laterales.

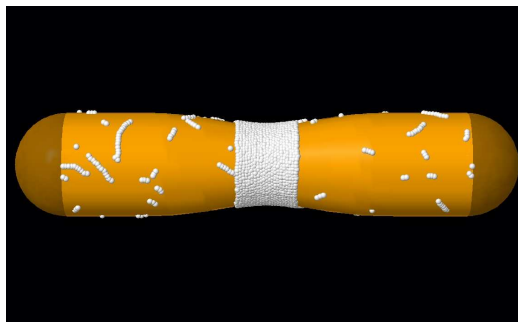


Figura 2. Anillo septal de *E. Coli*.

En este trabajo presentamos los resultados obtenidos mediante simulaciones de Monte Carlo de gran número de partículas para nuestro modelo de red de la proteína FtsZ en la membrana bacteriana. En este modelo las interacciones de FtsZ vienen descritas por solo cuatro parámetros: energía de polimerización ( $\Omega_p$ ), de interacción lateral ( $\omega_l$ ), ángulo preferente ( $\theta_0$ ) y flexibilidad ( $\kappa$ ), que pueden determinarse por comparación de los patrones emergentes en las simulaciones con imágenes de AFM de alta resolución de

\* alfonso.paez@uam.es.

<sup>1</sup> I. Hörger, E. Velasco, J. Mingorance, G. Rivas, M. Vélez y P. Tarazona, *Phys. Rev E* **76** (2007).

<sup>2</sup> A. Páez, P. Tarazona, P. Mateos-Gil y M. Velez M, *Soft Matter* (2009).

<sup>3</sup> M. Sayar y S. Stupp, *Phys. Rev. E* **72** (2005).

<sup>4</sup> J. Mingorance, M. Tadros, M. Vicente, J. M. González, G. Rivas y M. Vélez, *J. Biol. Chem.* **280**, 20909 (2005).

## WINE (Weighted-Interaction Nestedness Estimator): un estimador de anidamiento para matrices de eventos

J. M. Pastor<sup>†\*</sup>, Javier Galeano<sup>†§</sup> y José M. Iriondo<sup>‡¶</sup>

<sup>†</sup>Dpto. Ciencia y Tecnología Aplicada a la I.T. Agrícola, Universidad Politécnica de Madrid

<sup>‡</sup>Área de Biodiversidad y Conservación, Universidad Rey Juan Carlos

La ecología es un interesante campo de pruebas para los estudios de redes complejas. En este campo nos encontramos con diferentes tipos de redes, como las tróficas, las mutualistas o las biogeográficas. Las más habituales son las redes bipartitas, en las que existen dos tipos de nodos entre los que se establecen los links, quedando éstos prohibidos entre nodos del mismo tipo. En los últimos años las redes mutualistas han cobrado mucho interés entre los ecólogos debido a la implantación de métodos utilizados en redes complejas<sup>1</sup>.

Una de las propiedades de las redes mutualistas es el de *anidamiento*. Se dice que una matriz de interacción está anidada cuando los links de las especies que presentan pocas interacciones son un subconjunto de las que presentan muchas; esto se enuncia diciendo que las especies más especialistas interactúan con las generalistas. En la literatura han aparecido muchos estimadores que pretenden cuantificar este grado de anidamiento, a partir de la matriz binaria de interacción (matriz de presencias-ausencias)<sup>2</sup>.

En este trabajo presentamos un nuevo planteamiento para obtener un estimador de anidamiento que tiene en cuenta, no la matriz de presencias-ausencias, sino la matriz de eventos. Esta matriz en la que cada elemento representa el número de eventos registrados cuantifica la intensidad del link. Esta información permite ponderar la importancia relativa de cada link, y no meramente su existencia. De esta forma, pretendemos obtener un estimador pesando la interacción, en ambos sentidos, tanto respecto a las especies de las filas como respecto a las de las columnas. Para ello, trabajando con la matriz empaquetada, se calcula la contribución de cada link a partir de su distancia Manhattan pesada, al vértice del máximo empaquetamiento.

El valor de anidamiento lo obtenemos como el promedio de todos los valores de la matriz. Finalmente definimos el estimador como un parámetro que mide la diferencia relativa entre el valor de anidamiento de la matriz con el valor promedio de matrices random (generadas con la misma distribución de eventos), respecto al valor de la matriz de máximo anidamiento. De esta manera el estimador será cero cuando tenga una distribución tipo random (no hay anidamiento) y 1 cuando coincida con la de máximo anidamiento<sup>3</sup>.

Para su utilización hemos creado un interface de usuario gráfica (GUI) en Matlab que, en un entorno sencillo, permite leer la matriz de interacción y genera los valores de anidamiento y la gráfica de la matriz pesada

y la distribución de eventos.

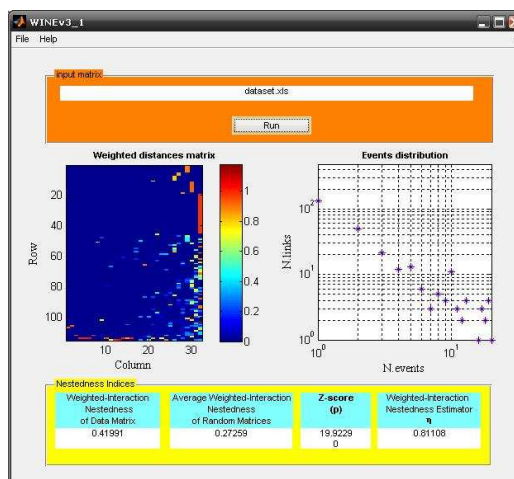


Figura 1. Imagen de la aplicación WINE en Matlab.

En la figura se muestra la pantalla del GUI de Matlab. En la figura de la izquierda se muestra la matriz de distancias pesadas y en la derecha la distribución de eventos de la matriz de datos utilizada. En la parte inferior aparecen los valores del anidamiento de la matriz de datos y el promedio de 100 realizaciones random, el estimador z y el valor p, y finalmente el estimador de anidamiento de interacción pesada (WINE).

También hemos creado la aplicación para el lenguaje R (que también ha sido incluido en el paquete *bipartite*<sup>4</sup>) y en C++. Todas estas versiones están disponibles en la página web:

<http://hypatia.agricolas.upm.es/WINE/WINE.html>

\* [juanmanuel.pastor@upm.es](mailto:juanmanuel.pastor@upm.es).

§ [javier.galeano@upm.es](mailto:javier.galeano@upm.es).

¶ [jose.iriondo@urjc.es](mailto:jose.iriondo@urjc.es).

<sup>1</sup> J. Bascompte, P. Jordano, C. J. Meliá y J. M. Olesen, *PNAS* **100**, 9383 (2003).

<sup>2</sup> W. Ulrich, M. Almeida-Neto y N. J. Gotelli, *Oikos* **118**, 3 (2009).

<sup>3</sup> J. Galeano, J. M. Pastor y J. M. Iriondo, *Env. Model. & Soft.*, en prensa (2009).

<sup>4</sup> <http://cran.r-project.org/web/packages/bipartite/index.html>.

## Effects of mobility on ordering dynamics

Andrea Baronchelli and Romualdo Pastor-Satorras

*Departament de Física i Enginyeria Nuclear, Universitat Politècnica de Catalunya, Campus Nord B4, 08034 Barcelona, Spain*

We study the effects of diffusion in ordering dynamics by considering a metapopulation framework, in which individuals are endowed with mobility and diffuse through a spatial structure represented as a graph of patches upon which interactions take place. In the case of the Voter and Moran processes, we show that diffusion can dramatically affect the time to reach the homogeneous state, independently of the underlying

network's topology, while the final consensus emerges through different local/global mechanisms, depending on the mobility strength. Our results highlight the crucial role played by mobility in ordering processes and set up general framework allows to study its effect on a large class of models, with implications in the understanding of evolutionary and social phenomena.

## Role of diversity and noise in a neuronal model of the wake-sleep cycle

Marco Patriarca<sup>\*</sup>, Emilio Hernández-García, and Raúl Toral

*IFISC, Institute for Cross-Disciplinary Physics and Complex Systems (UIB-CSIC),  
Campus Universitat de les Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain*

Orexin is a neurotransmitter produced by a group of neurons located in the lateral hypothalamus, which send excitatory projections to almost all regions of the brain. It was originally thought to regulate especially appetite and metabolism levels, but in the last years it has been shown to play a primary role also in the regulation of the wake-sleep cycle<sup>1</sup>. Some sleep disorders, such as narcolepsy, are associated either to a lack of Orexin-producing neurons or of Orexin receptors<sup>2</sup>.

We study numerically a Hodgkin-Huxley-inspired model of the interaction between Orexin-producing neurons and pre-frontal cortex neurons in the presence of the external circadian signal. We start from the two-neuron model of the wake-sleep cycle of Postnova *et al.*<sup>3</sup>, in which one representative Orexin-producing neuron interacts with one representative pre-frontal cortex neuron. We generalize the two-neuron model into an  $N$ -neuron model and add some disorder in various forms,

- as a (quenched) diversity among neurons, by diversifying some basic neuron parameters such as the ion-channel opening thresholds;
- as a heterogeneity of the ion-channels in the same neuron, changing the value of some suitable parameter;
- as time-dependent noise, adding a current noise term in the equations.

In this model a regular (i.e. healthy) wake-sleep cycle is characterized by the pre-frontal cortex neurons being silent (in the “sleep state”) when the circadian signal is OFF and, vice versa, in the spiking regime (“awake”)

when the circadian signal is ON. The quality of the system response, that is of the wake-sleep cycle produced, can be quantified by the degree of overlap in time between the active state of the circadian clock and the spiking activity of the pre-frontal cortex neurons.

We study some realizations of the  $N$ -neuron model for different levels of disorder or noise, finding different resonant phenomena due to the interplay between disorder and the nonlinear dynamics of the system. The model presents

- diversity-induced resonance<sup>4</sup> (as a function of the degree of diversity of parameters), and
- stochastic resonance<sup>5</sup> (as a function of the noise intensity).

Thus, the system response is optimal for a suitable non-zero degree of disorder. The meaning of these results is discussed in the light of the heterogeneous character observed in real neuronal systems.

---

<sup>\*</sup> marco.patriarca@ifisc.uib-csic.es,  
<http://ifisc.uib-csic.es/>.

<sup>1</sup> T. Mochizuki and T. E. Scammell, *Curr. Biol.* **13**, R563 (2003).

<sup>2</sup> T. Sakurai, *Nature Rev. Neurosci.* **8**, 171 (2007).

<sup>3</sup> S. Postnova, K. Voigt, A. Peters, and H. A. Braun, (pre-print).

<sup>4</sup> C. Tessone, C. Mirasso, R. Toral, and J. D. Gunton, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 194101 (2006).

<sup>5</sup> L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, and F. Marchesoni, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 223 (1998).

## Escalado de los vectores singulares y de los exponentes de Lyapunov de tiempo finito en sistemas con caos espaciotemporal

Diego Pazó\*, Juan M. López y Miguel A. Rodríguez

Instituto de Física de Cantabria (IFCA), CSIC-Universidad de Cantabria, 39005 Santander

Los vectores singulares (VSs) son usados actualmente en modelos operativos de predicción meteorológica, y son también útiles en otros contextos. Para un sistema dinámico dado, una perturbación infinitesimal evoluciona linealmente:  $\delta\mathbf{u}(t + \tau) = \mathbf{M}(t + \tau, t)\delta\mathbf{u}(t)$ . El VS se define como la perturbación en un tiempo  $t$  que sufrirá la mayor amplificación tras un tiempo  $\tau$ . El VS (principal) satisface el problema de autovalores  $\mathbf{M}^*(t + \tau, t)\mathbf{M}(t + \tau, t)\mathbf{s}_\tau(t) = \mu_\tau(t)\mathbf{s}_\tau(t)$ , donde  $\mu_\tau(t)$  es el mayor de los autovalores.

Hemos estudiado el VS en dos sistemas prototípicos con caos espaciotemporal<sup>1</sup>: Una *coupled-map lattice* (CML) unidimensional de mapas logísticos  $f(\varrho) = 4\varrho(1 - \varrho)$ , y el modelo Lorenz '96 (L96):

$$\frac{d}{dt}y_x = -y_x - y_{x-1}(y_{x-2} - y_{x+1}) + F. \quad (1)$$

Para el estudio teórico es conveniente definir una superficie asociada al VS mediante una transformación logarítmica:

$$h_\tau(x, t) = \ln |s_\tau(x, t)| \quad (2)$$

La fig. 1(a) muestra que, si  $\tau$  no es demasiado grande,  $h_\tau$  tiene una estructura triangular, lo cual implica una localización exponencial del VS.

Un modelo mínimo de Langevin permite entender de la forma más simple la estructura de la superficie asociada al VS. Se trata de una modificación de la ecuación de Kardar-Parisi-Zhang<sup>2</sup> con un ruido periódico en el tiempo (KPZ-RP):

$$\partial_t h_\tau(x, t) = \zeta_\tau(x, t) + [\partial_x h_\tau(x, t)]^2 + \partial_{xx} h_\tau(x, t), \quad (3)$$

donde uno asume que  $\zeta_\tau$  es un "ruido blanco" con periodo  $\tau$ . Las soluciones de la ec. (3) exhiben una estructura triangular como las superficies de los VSs, véase la fig. 1(b).

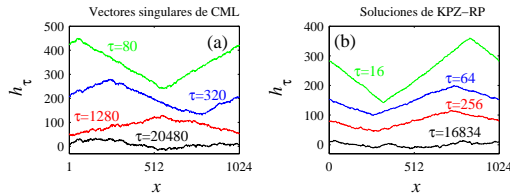


Figura 1. (a) Superficie asociada al VS de la CML para diferentes valores de  $\tau$ . (b) Solución asintótica de la ecuación KPZ-RP para diferentes valores de  $\tau$ .

Tanto en los sistemas caóticos como en la ecuación KPZ-RP, la anchura de la superficie  $W_\tau^2(L) =$

$L^{-1} \sum_x h_\tau(x, t)^2 - [L^{-1} \sum_x h_\tau(x, t)]^2$ , escala de la misma forma:

$$W_\tau^2 \sim L^{2\alpha_{QC}} \tau^{-\gamma} \quad (\tau \ll \tau_\times(L)) \quad (4)$$

$$\sim L^{2\alpha_{KPZ}} \quad (\tau \gg \tau_\times(L)) \quad (5)$$

Suponiendo que  $\tau_\times(L) \sim L^{z_{KPZ}}$ , obtenemos una fórmula para el exponente  $\gamma$ :

$$\gamma = \frac{2(\alpha_{QC} - \alpha_{KPZ})}{z_{KPZ}}. \quad (6)$$

Al insertar los exponentes en una dimensión— $\alpha_{KPZ} = 1/2$  y  $z_{KPZ} = 3/2$  de la ec. KPZ<sup>2</sup>; y  $\alpha_{QC} = 1.07 \pm 0.05$  de la ec. KPZ columnar<sup>3</sup>—obtenemos  $\gamma = 0.76 \pm 0.07$  en concordancia con nuestros resultados numéricos ( $\gamma \simeq 0.78$ ).

Es bien sabido que cuando el horizonte temporal  $\tau$  crece el VS tiende al vector de Lyapunov. Asimismo, el exponente de Lyapunov de tiempo finito—definido como  $\lambda_\tau(t) = (2\tau)^{-1} \ln \mu_\tau(t)$ —tiende al exponente de Lyapunov:  $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \lambda_\tau(t) = \lambda$ . Hemos encontrado que (véase la fig. 2):

$$(\lambda_\tau - \lambda) \sim \tau^{-\gamma} \quad (\tau \ll \tau_\times) \quad \text{nuestro resultado} \quad (7)$$

$$\sim \tau^{-1} \quad (\tau \gg \tau_\times) \quad \text{asíntota conocida} \quad (8)$$

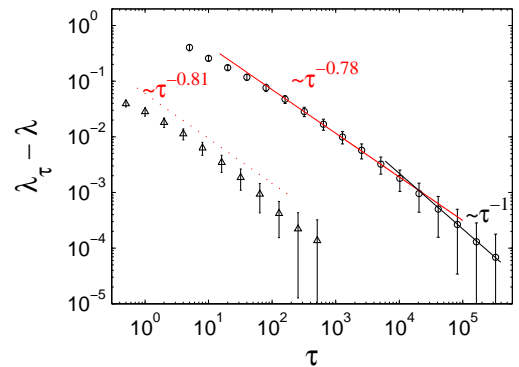


Figura 2. Convergencia del exponente de Lyapunov de tiempo finito, para la CML (o) y para el modelo L96 (Δ).

\* pazo@ifca.unican.es.

<sup>1</sup> D. Pazó, J. M. López y M. A. Rodríguez, Phys. Rev. E **79**, 036202 (2009).

<sup>2</sup> M. Kardar, G. Parisi e Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **56**, 889 (1986).

<sup>3</sup> I. G. Szendro, J. M. López y M. A. Rodríguez, Phys. Rev. E **76**, 011603 (2007).

## Reexcitation mechanisms in epicardial tissue: role of $I_{to}$ density heterogeneities and $I_{Na}$ inactivation kinetics

A. Peñaranda\*, I. R. Cantalapiedra, and B. Echebarria

*Departament de Física Aplicada, Universitat Politècnica de Catalunya, Av. Dr. Marañón 44-50, E-08028, Barcelona*

Dispersion of action potential repolarization is known to be an important arrhythmogenic factor in cardiopathies such as Brugada Syndrome<sup>1</sup>. In this type of pathology the arrhythmia is initiated by ventricular tachycardia, due to reentry, that can evolve to a ventricular fibrillation (VF), a state of turbulent electrical activity in the ventricles that impedes cardiac contraction, and underlies most cases of sudden cardiac death.

In this work, we analyze the effect of a variation in sodium current ( $I_{Na}$ ) inactivation, due to a genetic mutation present in Brugada syndrome, and a heterogeneous rise of transient outward current ( $I_{to}$ ) in the probability of reentry in epicardial tissue.

We use the Luo-Rudy model of epicardial ventricular action potential to study wave propagation in a one-dimensional fiber. Spatial dispersion in repolarization is introduced by splitting the fiber into zones with different strength of  $I_{to}$ . We then analyze the proarrhythmic effect of a variation in the relaxation time and steady-state of the sodium channel fast inactivating gate  $h$ .

We quantify the probability of reentry measuring the percentage of reexcitations that occurs in 200 beats. We find that, for high stimulation rates, this percentage is negligible, but increases notably

for pacing periods above 700 ms. Surprisingly, with decreasing  $I_{Na}$  inactivation time, the percentage of reexcitations does not grow monotonically, but presents vulnerable windows, separated by values of the  $I_{Na}$  inactivation speed-up where reexcitation does not occur. By increasing the strength of L-type calcium current conductance  $g_{CaL}$  above a certain threshold, reexcitation disappears. Finally, we show the formation of reentry in stimulated two-dimensional epicardial tissue with modified  $I_{Na}$  kinetics and  $I_{to}$  heterogeneity. Thus, we confirm that while  $I_{to}$  dispersion is necessary for phase-2 reentry, altered sodium inactivation kinetics influences the probability of reexcitation in a highly nonlinear fashion<sup>2</sup>.

To obtain further understanding on the origin of reexcitation we have also studied this mechanism in a simplified model of action potential propagation.

---

\* angelina@fa.upc.edu.

<sup>1</sup> P. Brugada and J. Brugada, *J. Am. Coll. Cardiol.* **20**, 1391 (1992).

<sup>2</sup> I. R. Cantalapiedra, A. Peñaranda, J. Brugada, L. Mont, and B. Echebarria, *J. Theor. Biology* (in press, doi:10.1016/j.jtbi.2009.04.021).

## External convective forcings on a reaction-diffusion system

Alberto P. Muñuzuri

*Group of Non Linear Physics, Fac. de Físicas, Universidade de Santiago de Compostela,  
Campus Sur, 15782 Santiago de Compostela*

Reaction-diffusion systems have been extensively studied as they can explain many mechanisms of pattern formation in nature ranging from biological waves to patterning in morphogenesis. Nevertheless, purely reaction-diffusion systems are rarely found in nature but rather convection is always found to play an important role in all these processes. Here we present results that point out the important role played by convection in determining the pattern and dynamic to appear. A typical reaction diffusion system was used, the Belousov-Zhabotinsky reaction in experiments

and the equivalent numerical model for simulations. The system spontaneously exhibited different types of patterns ranging from autowaves to Turing steady patterns. Different convective forcings were considered; a periodic modulation in the gravity that induces a specific, well-studied flow, a periodic modulation of a centrifugal force applied to the system, etc. The different results of these forcings on the different patterns and parameter ranges will be presented and understood in the framework of reaction-diffusion systems.



## External noise-induced phenomena in nonlinear surface reactions

Miguel Pineda\* and Raúl Toral

*IFISC Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos (CSIC-UIB), E-07122 Palma de Mallorca, Spain*

Stochastic fluctuations or noise in complex dynamical systems with strong nonlinearities give rise to unexpected and new ordering phenomena<sup>1</sup>. Chemical reactions on solid surfaces exhibit non-linear behavior, such as bistability, self-sustained kinetic oscillations, chaos and spatiotemporal patterns<sup>2</sup>. For this reason, understanding the influence of noise on the complex behavior of catalytic surface reactions has become a challenge in recent years<sup>3-5</sup>. In general, the effects of internal noise (due to finite-size effects) and external noise (imposed on the external control parameters) have been considered separately. In this work we present a theoretical study of external noise imposed on the catalytic CO oxidation on Ir(111) and Pt(111)<sup>6</sup>.

We have studied the influence of external noise on two simplistic models for the catalytic CO oxidation on the structurally stable and reactive Ir(111) and Pt(111) surfaces. First, deterministic surface reaction models were analyzed. Similar to recent experimental studies,<sup>4</sup> the CO oxidation on Ir(111) was studied in a fashion where the total CO+O<sub>2</sub> flux  $\phi_{total}$  is held constant and vary CO ( $Y_{CO}$ ) and O<sub>2</sub> ( $1 - Y_{CO}$ ) partial contributions. The CO oxidation on Pt(111) was also studied in this way. Those deterministic models reproduce bistability. Here, it was shown that in or near the region where bistability is observed the oxygen coverage is always low and approximately constant (because the reaction is rather rapid) and the CO coverage is often large. Thus, a time scale separation between the variation over time of the oxygen coverage and the CO coverage exists. It allows a reduction of the models by the adiabatic elimination of the fast oxygen coverage (quasi-steady state approximation). Second, an external noise is superimposed on the fraction of CO in the constant gas flow directed at the surfaces. A novel scheme is introduced in order to perform adiabatic elimination of oxygen coverage from the set of stochastic equations. The phenomena of noise-induced shift of steady states which was observed in recent experimental studies of CO oxidation on Ir(111)<sup>5</sup> and noise-induced transition from mono- to bi-stability have been theoretically and numerically reported<sup>6</sup>. The analytical results have been found to be in reasonable agreement with stochastic simulations of the full two-variable stochastic systems.

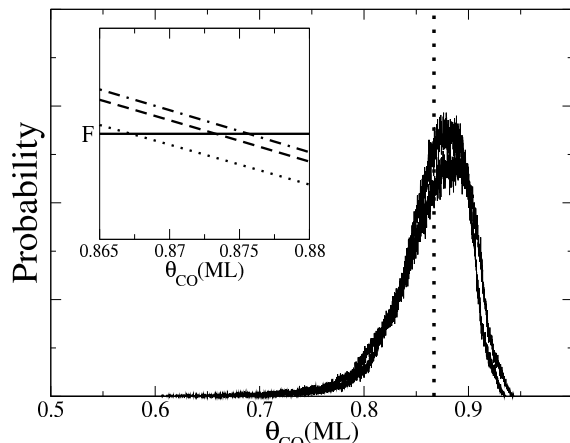


Figure 1. Noise-induced shift of steady states in CO oxidation on Ir(111) at  $Y_{CO} = 0.1$  and  $T = 500\text{K}$ , and various noise intensities  $r$ . Probability distribution function of CO coverage from simulations of two-variable Langevin equations for two values  $r = 0.08$  and  $0.095$  for noise intensity. The dotted line represents the approximated position of the deterministic steady state ( $r = 0.0$ ). Inset shows the theoretical predictions for maxima of the probability distribution function for  $r = 0.0$  (dotted line),  $0.08$  (dashed line), and  $0.095$  (dotted dashed line).

\* mpineda@ifisc.uib-csic.es.

<sup>1</sup> F. Sagués, J. M. Sancho, and J. Garcia-Ojalvo, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 829 (2007).

<sup>2</sup> R. Imbihl, *Surf. Sci.* **603**, 1671 (2009).

<sup>3</sup> V. Johánek, M. Laurin, A. W. Grant, B. Kasemo, C. R. Henry, and J. Libuda, *Science* **304**, 1639 (2004).

<sup>4</sup> S. Wehner, P. Hoffmann, S. Schmeisser, H. R. Brand, and J. Küppers, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 1907 (2005).

<sup>5</sup> Y. Hayase, S. Wehner, J. Küppers, and H. R. Brand, *Phys. Rev. E.* **69**, 021609 (2004).

<sup>6</sup> M. Pineda and R. Toral, *J. Chem. Phys.* **130**, 124704 (2009).

## Local dynamics of imbibition fronts

Ramon Planet<sup>†,\*</sup>, Jordi Ortín<sup>†</sup>, and Stéphane Santucci<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Facultat de Física, Universitat de Barcelona*

<sup>‡</sup>*Laboratoire de physique, CNRS UMR 5672, Ecole Normale Supérieure de Lyon, 69364 Lyon, France*

The dynamics of immiscible fluid-fluid displacements in disordered media has been a subject of much interest in last years, both from a fundamental point of view, as a dynamical nonequilibrium process, and from a technological point of view. When an invading fluid that wets preferentially the medium displaces a resident fluid at a constant injection rate, the process is called forced-flow imbibition<sup>1</sup>.

The dynamics of the imbibition fronts has been recently subject of numerous investigations both experimental<sup>2,3</sup> and theoretical<sup>4,5</sup>, where it has been observed that the system approaches a pinning-depinning critical point as velocity goes to 0.

In this work we use a high resolution camera with a high acquisition rate, to track the dynamics of the interface in a model disordered medium that consists on a Hele-Shaw cell with two different values of gap spacing, randomly distributed in space<sup>6</sup>. This medium resembles what is known in geology as an open fracture.

Thanks to our high spatial and temporal resolution we are able to show that the fluid interface dynamics is governed by local avalanches with a wide range of sizes and durations. In order to define avalanches we will use the spatiotemporal map of locally active sites (activity map, Fig. 1), as in recent numerical investigations<sup>4,5</sup>. Applying a velocity threshold to this map we obtain a set of clusters of velocity larger than the threshold. With this information we can go back to the experimental interfaces and define the avalanche size ( $A$ ) as the area swept by the interface in the time interval ( $D$ ) spanned by the velocity cluster in the activity map. Our results show that the pdf's of avalanche sizes and durations follow a power law with an exponential cutoff with the same exponents that we obtained using the waiting-time matrix algorithm<sup>3</sup>.

The scaling analysis in Ref.<sup>5</sup> provides a number of scaling relations between the exponents for the distributions of lengths, sizes, and durations of the avalanches close to critical pinning. We have checked that the values of the exponents measured on our data fulfill all the scaling relations satisfactorily. Specifically for  $A \sim D^x$  the relation  $x = (\alpha_{loc} + d)/z$  would render  $x = 1.79$  in good agreement with the experimental value 1.8. On the contrary, the scaling relation proposed by Rost et. al.<sup>4</sup> for systems where the correlation length is small compared to the system size,  $x = (\alpha_{loc} + d)/(\alpha_{loc} + d/2)$ , would render  $x = 1.38$ . This confirms that the range of

velocities studied in the experiments is sufficiently close to the pinning point.

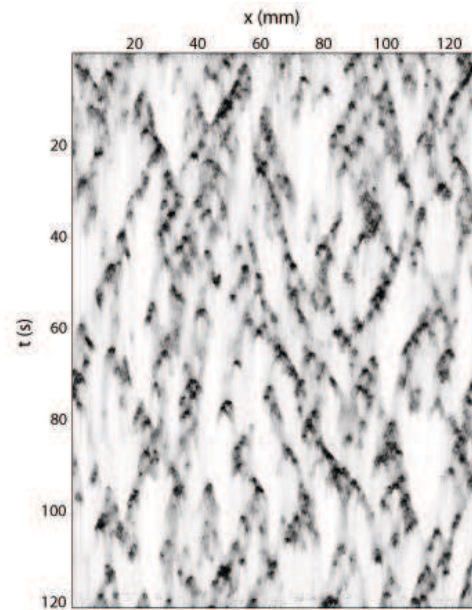


Figura 1. Activity map for an experiment driven at  $v = 0.057$  mm/s. High velocities are dark, low velocities are light, and the grey scale is nonlinear for better visibility.

\* rplanet@ecm.ub.es.

<sup>1</sup> M. Alava, M. Dubé, and M. Rost, *Adv. Phys.* **53**, 83 (2004).

<sup>2</sup> R. Planet, S. Santucci, and J. Ortín, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 094502 (2009).

<sup>3</sup> S. Santucci, R. Planet, K. J. Målø, and J. Ortín, under consideration of *Phys. Rev. Lett.* (2009).

<sup>4</sup> M. Rost, L. Laurson, M. Dubé, and M. Alava, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 054502 (2007).

<sup>5</sup> M. Pradas, J. M. López, and A. Hernández-Machado, under consideration of *Phys. Rev. Lett.* (2009).

<sup>6</sup> J. Soriano, J. Ortín, and A. Hernández-Machado, *Phys. Rev. E* **66**, 031603 (2002).

## A microcanonical cascade formalism for data inference and forecasting

Oriol Pont<sup>†</sup>, Antonio Turiel<sup>†</sup>, and Conrad Pérez-Vicente<sup>‡\*</sup>

<sup>†</sup>*Institut de Ciències del Mar CSIC, Passeig Marítim de la Barceloneta 37-49, 08003 Barcelona*

<sup>‡</sup>*Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, Diagonal 647, 08028 Barcelona*

Cascade processes describe the transfer of energy or an analogous quantity between different-scale structures of a system. This transfer is governed by independent random factors called "cascade variables". Cascade processes were first proposed to model Fully Developed Turbulence,<sup>1,2</sup> but they can be used to characterize the multifractal structure of many real-world scale-invariant systems.<sup>3</sup>

The classical approach to cascade processes is based on the *Canonical Cascade Formalism* and consists in characterizing the distribution of cascade variables, which gives a statistical description of the system. However, it is possible to take a geometrical approach, called *Microcanonical cascade formalism*,<sup>4</sup> which identifies the energy transfer of cascade variables at each point and each scale of the system. This geometrical representation maximizes the redundancy between consecutive scales and so it permits the inference of information across scales. Therefore, this formalism opens the way for advanced coding, inference of unknown data and forecasting, with algorithms that exploit the multiscale redundancy and so they are potentially more powerful than other standard techniques.<sup>5</sup>

The canonical cascade characterization is usually done by filtering the data with wavelets, where most properly-defined wavelets are useful for that purpose. However, to achieve the microcanonical cascade description we need a very specific wavelet called the "optimal wavelet"<sup>6</sup> of the system, which is the one related to the geometrical expression of the cascade. Therefore, to achieve the capabilities of the microcanonical cascade representation, it is very important to precisely determine which one is the optimal wavelet.

Obtaining the optimal wavelet is a complex task due to the nontrivial, nonlinear constraints that it must satisfy. We provide a robust measure for wavelet optimality and discuss its use to obtain the optimal wavelet, through the minimization of this measure. In addition, we derive a multiscale inference algorithm based on the microcanonical cascade. This algorithm infers the most likely distribution conditioned to the observed cascade structure.

To show the capabilities of the introduced approach, we apply the geometrical description of the cascade to the case of geophysical turbulence and, in particular, to determine the particular location of sources and sinks between the atmospheric and the ocean turbulent

cascades. We also discuss how this information can be used in weather and climate forecasting.<sup>7</sup>

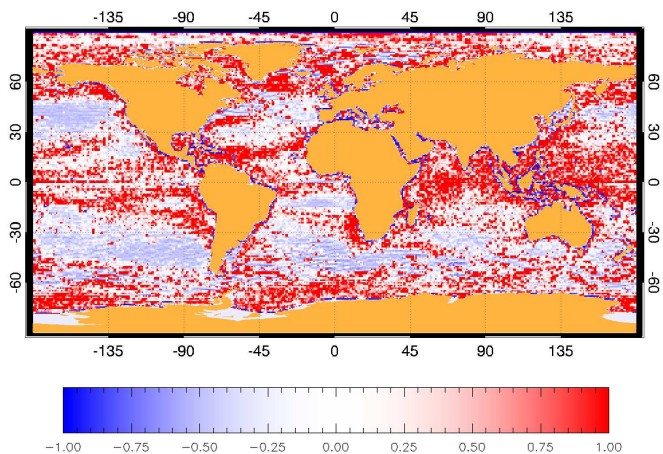


Figura 1. Ocean turbulent cascade derived from sea-surface temperature global maps. We present here the microcanonical cascade variables, which are the geometrical expression of the cascade, i.e., the particular points at which energy is transferred from larger to smaller scales. We show that the relative anomalies of the microcanonical cascade variable corresponding to the meridional (vertical) orientation at the scale of  $0.8^\circ$  (mesoscale). Points in red colour correspond to positive deviations from the average and so points of strong interscale energy transfer, and blue points correspond to negative deviations, i.e., points of low transfer. We see that energy transfer follows large currents, especially subtropical gyres, tradewind induced currents and upwelling zones.

\* pont@icm.csic.es, turriel@icm.csic.es, conrad@ffn.ub.es.

<sup>1</sup> E. A. Novikov and R. W. Stewart, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Geoffiz.* **3**, 408 (1964).

<sup>2</sup> U. Frisch, *Turbulence* (Cambridge Univ. Press, Cambridge MA, 1995).

<sup>3</sup> O. Pont, A. Turiel, and C. Perez-Vicente, *Physica A*, **388**, 2025 (2009).

<sup>4</sup> O. Pont, A. Turiel, and C. Perez-Vicente, arXiv:0805.4810 (2009).

<sup>5</sup> O. Pont, A. Turiel, and C. J. Pérez-Vicente. *J. Econ. Int. and Coord.*, **4**, 39 (2009).

<sup>6</sup> A. Turiel and N. Parga, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3325 (2000).

<sup>7</sup> O. Pont, V. Nieves, and A. Turiel, to be submitted to *J. Geophys. Res.* (2009).

## Activity statistics, avalanches, and velocity correlations in surface roughening

Marc Pradas<sup>†\*</sup>, A. Hernández-Machado<sup>†</sup>, and Juan M. López<sup>‡</sup>

<sup>†</sup> *Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de Barcelona, Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona*

<sup>‡</sup> *Instituto de Física de Cantabria (IFCA), CSIC-UC, E-39005 Santander, Spain*

In many physical systems, the response to a slow external driving usually involves *avalanches* or *bursts*. Different examples are found in granular material<sup>1</sup>, earthquakes<sup>2</sup>, fracture cracks<sup>3</sup> or during imbibition of fluids in porous media<sup>4-7</sup>.

We present here a general theoretical framework for avalanche dynamics in surface roughening. Different aspects of the interface fluctuations are studied and found to be related to each other through scaling relations. First, we define the *active sites* on the interface as those where the local interface velocity  $v(x,t)$  takes values above some fixed threshold. Avalanches are then defined as connected clusters of active sites surrounded by non-active sites (see Fig. 1). We propose a scaling theory that connects the different magnitudes characterizing the avalanches, such as size  $s$ , lateral extent  $\ell$ , duration  $T$ , and mean velocity  $v_{av}$ , to the interface morphology and velocity correlations in surface roughening.

The scaling theory is compared to numerical results from a phase field model for forced-flow imbibition<sup>4</sup>. This kind of imbibition has the particular property that the interface fluctuations are only correlated up to a typical length scale  $\xi_x$  that depends on the mean velocity of the interface  $\bar{v}$  as  $\xi_x \sim 1/\sqrt{\bar{v}}$ . We study how the scaling properties of the interface change as the mean velocity is decreased,  $\bar{v} \rightarrow 0$ , and therefore approaching the depinning transition. Our numerical results are in excellent agreement with the proposed scaling theory.

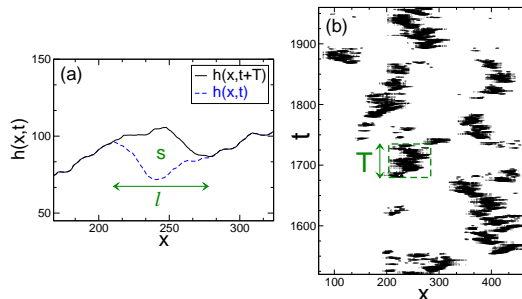


Figura 1. Numerical example of forced-flow imbibition. Typical avalanches of the interface  $h(x,t)$  in (a) are defined from the spatio-temporal activity in (b) and are characterized by a size  $s$ , lateral extent  $\ell$ , and duration  $T$ .

\* pradas@ecm.ub.es.

<sup>1</sup> A. Daerr and S. Douady, *Nature (London)* **299**, 241 (1999).

<sup>2</sup> D. S. Fisher, *Phys. Rep.* **301**, 113 (1998).

<sup>3</sup> K. J. Maloy *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 045501 (2006).

<sup>4</sup> M. Alava, M. Dubé, and M. Rost, *Adv. Phys.* **53**, 83 (2004).

<sup>5</sup> M. Rost *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 054502 (2007).

<sup>6</sup> R. Planet, S. Santucci, and J. Ortín, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 094502 (2009).

<sup>7</sup> M. Pradas, J. M. López, and A. Hernández-Machado, (submitted).

## Polarization nonlinear dynamics of vertical-cavity surface-emitting lasers subject to orthogonal optical injection

A. Quirce<sup>†‡</sup>, A. Hurtado<sup>§</sup>, A. Valle<sup>†</sup>, L. Pesquera<sup>†</sup>, and M. J. Adams<sup>§</sup>

<sup>†</sup>*Instituto de Física de Cantabria (CSIC-Univ. de Cantabria), Avda. Los Castros s/n, E39005, Santander, Spain*

<sup>‡</sup>*Departamento de Física Moderna, Fac. Ciencias, U. Cantabria, Av. Los Castros s/n, E39005, Santander, Spain*

<sup>§</sup>*School of Computer Science and Electronic Engineering, Univ. of Essex, Wivenhoe Park, Colchester CO4 3SQ, UK*

Optical injection is a method that can induce a rich variety of nonlinear dynamics in the light emitted by the vertical-cavity surface-emitting lasers (VCSELs)<sup>1</sup>. Optical injection in VCSELs is also an attractive method to improve the performance of these devices. An example of nonlinear dynamics in that system has been recently obtained with an 850 nm wavelength VCSEL subject to orthogonal optical injection<sup>2</sup>. In that experiment linearly polarized light from a tunable external laser source was injected orthogonally to the linear polarization of a free-running VCSEL. The device exhibited polarization switching (PS) between its two linear polarizations when increasing its applied current. In this work we perform an experimental and theoretical study of the nonlinear dynamics of a 1550 nm wavelength single-mode linearly polarized VCSEL when subject to orthogonal optical injection. We have measured the mapping of the polarization resolved dynamics in the plane of detuning between the frequency of the injected signal and the free-running frequency of the VCSEL versus injected power. In contrast with previous results<sup>2</sup>, our free-running VCSEL emits in a linearly-polarized fundamental transverse mode over the whole current range. This significantly affects the dynamics since our mapping shows qualitative differences with previously reported results<sup>2</sup>.

Experimentally, the orthogonal optical injection from a tunable external-cavity laser diode in a commercial VCSEL (Raycan) is achieved by using an all-fiber setup. A bias current of 4 mA (approx. 2.5 times the threshold current) was applied to the device. The optical power emitted by the dominant (parallel) polarization of the solitary VCSEL was 0.2 mW. A Side Mode Suppression Ratio (SMSR) of 35 dB was measured for the orthogonal polarization. We show in Fig. 1 (left) the mapping of the dynamics of the total power when the injected power is swept for different frequency detunings around the frequency of the orthogonal polarization of the fundamental transverse mode of the device. Fig. 1 also shows the injected power required for PS to the orthogonal polarization of the VCSEL.

Different regions corresponding to different dynamical regimes are shown in the figure. Region SL represents the stable locking range and regions P1, P2 show periodic dynamics. The P1 region is characterized by the appearance of a strong peak near the frequency detuning in the RF spectrum. In region P2 situations can be found where several peaks appear in the RF spectrum at multiples of one half the relaxation oscillation frequency of the free-running VCSEL indicating period doubling dynamics. The CH region is characterized by wide RF spectra (see Fig. 1 right) that are the signature of

irregular and possibly chaotic dynamics. In contrast with Ref.<sup>2</sup> the irregular behavior is obtained for negative values of the frequency detuning. Finally, we have performed a detailed comparison with the theoretical results obtained with a model<sup>3</sup> that takes into account the lasing transitions between the spin sublevels of the conduction and valence bands of a quantum-well semiconductor laser. We show that the reported experimental dynamics are well described by using the previous model.

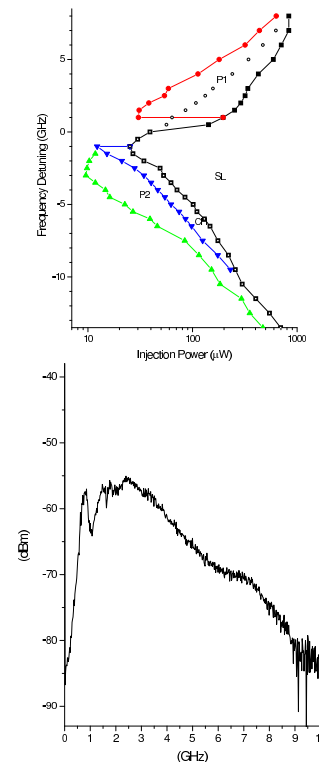


Figura 1. Left: Mapping of the dynamics of the VCSEL subject to orthogonal optical injection. SL: stable locking region, P1,P2: periodic regions, CH: irregular dynamics. PS is also shown with open circles. Right: RF spectrum in the CH region (Injected power: 50  $\mu$ W).

<sup>1</sup> I. Gatare, M. Sciamanna, M. Nizette, and K. Panajotov, *Phys. Rev A* **76**, 031803 (2007).

<sup>2</sup> J. Buesa, I. Gatare, K. Panajotov, H. Thienpont, and M. Sciamanna, *IEEE J. Quantum Electron* **42**, 198 (2006).

<sup>3</sup> A. Valle, I. Gatare, K. Panajotov, and M. Sciamanna, *IEEE J. Quantum Electron* **43**, 322 (2007).

## Kinetic reconstruction of free energy landscapes

David Reguera\* and Jan Wedekind

Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1, 08028 Barcelona, Spain

The time evolution of systems out of equilibrium is dictated by their dynamics over the free-energy landscape. In many systems, such as chemical reactions, phase transitions, conformational changes in biomolecules etc., this dynamics is controlled by the presence of a free-energy barrier that has to be surmounted. These kind of processes are called *activated* and they play a crucial role in many areas of science and technology.

There is a variety of *equilibrium* techniques available to evaluate activation barriers and free-energy landscapes from simulations, for example umbrella sampling<sup>1,2</sup> or transition path sampling<sup>3</sup>. Recently, nonequilibrium techniques, where the system is forced or biased by an external influence, have also been developed<sup>4,5</sup>. Often, however, equilibrium techniques might not be sufficient because the process of interest can occur in an out-of-equilibrium fashion. There is no guarantee *a priori* that the landscape reconstructed in an equilibrium simulation truly coincides with the landscape governing the real nonequilibrium dynamics of the process. Both the additional constraints required in an equilibrium simulation or the application of additional bias or forces in a nonequilibrium one, can significantly modify the conditions under which the process takes place and thus distort the true energy landscape. Therefore, it is highly desirable to be able to evaluate this landscape directly from the real kinetic evolution of the system without imposing any artificial external forces or constraints.

In this contribution, we will present such a method that allows the reconstruction of the free-energy landscape directly from the out-of-equilibrium kinetics of the system<sup>7</sup>. The method is very easy to implement and can be used in molecular dynamics (MD) simulations as well as in Brownian dynamics (BD), stochastic simulations, and even in direct experiments<sup>6</sup>. The technique requires only two ingredients: the steady-state probability distribution and the mean first-passage time<sup>8</sup> (see Fig.1). Both can be calculated easily in simulations and also in experiments. The connection between these ingredients and the free-energy landscape will be discussed and then applied to an illustrative case: the reconstruction of the free-energy of cluster formation in MD simulations of nucleation.

The technique can in principle be extended to more complicated situations, thus providing a very powerful framework to analyze the thermodynamics together with the dynamics of out-of-equilibrium systems in general.

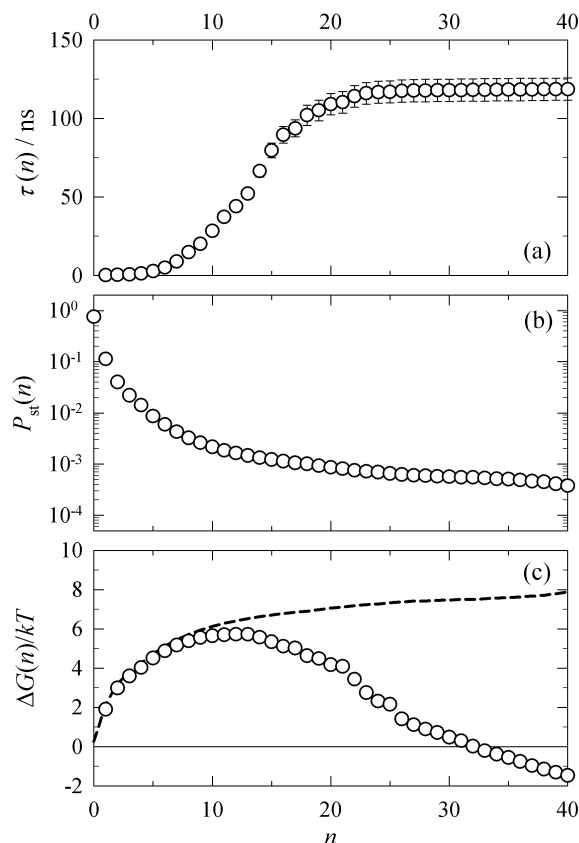


Figure 1. (a) Mean first-passage times as a function of the cluster size obtained from the MD simulations of LJ argon nucleation at 70 K. (b) Steady-state probability distribution of cluster sizes obtained for the same set of simulations. (c) Kinetic reconstruction of the free energy of cluster formation obtained from the MD simulations (symbols), compared to  $-\ln P_{st}(n)$  (dashed line).

\* dreguera@ub.edu.

<sup>1</sup> P. R. ten Wolde, M. J. Ruiz-Montero, and D. Frenkel, Phys. Rev. Lett. **75**, 2714 (1995).

<sup>2</sup> S. Auer and D. Frenkel, Nature **413**, 711 (2001).

<sup>3</sup> P. G. Bolhuis *et al.*, Annu. Rev. Phys. Chem. **53**, 291 (2002).

<sup>4</sup> G. Hummer and A. Szabo, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **98**, 3658 (2001).

<sup>5</sup> A. Laio and M. Parrinello, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **99**, 12562 (2002).

<sup>6</sup> U. Gasser *et al.*, Science **292**, 258 (2001).

<sup>7</sup> J. Wedekind and D. Reguera, J. Phys. Chem. B **112**, 11060 (2008).

<sup>8</sup> J. Wedekind, R. Strey, and D. Reguera, J. Chem. Phys. **126**, 134103 (2007).

## Transport on a dynamically disordered lattice: optimal intermittent search strategies

J. A. Revelli<sup>†\*</sup>, F. Rojo<sup>‡</sup>, C. E. Budde<sup>‡</sup>, and H. S. Wio<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*Instituto de Física de Cantabria, Santander, Spain*

<sup>‡</sup>*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Córdoba, Argentina*

The search for a desired target may be long and uncertain, targets may be sparse, hidden or difficult to detect even when found, or they may have their own lifetime and vanish before they are detected. So, determining the efficiency of a search strategy emerges as crucial problem of behavioral ecology, which has inspired numerous experimental and theoretical work. It is also relevant to broader domains such as stochastic processes theory, applied mathematics and molecular biology as well as in social sciences and ecology<sup>1,3-6</sup>.

Besides deterministic trajectories, random trajectories have proved to play a crucial role in many search processes (involving for instance a searcher with fewer abilities). In particular, it has been shown that among the class of randomly reoriented ballistic trajectories, Levy flights can optimize the encounter rate with random targets. However Levy strategies are optimal only in the particular case of non destructive search. In the case of destructive search, where each target definitely disappears after the first encounter, or in the case of single target, one can show that the trajectories optimizing the encounter rate with targets are simply linear ballistic motions, and therefore not of Levy type.

As opposed to these Levy strategies, it has been observed that numerous animal species, actually switch between two very distinct type of behavior (and motion) while foraging. In fact, many foragers like: planktivorous fish, ground foraging birds and lizards, adopt an intermittent searching behavior. These intermittent search strategies combine phases of relocation (in which the searcher may/may not capture the target), and a thorough search phase, which allow for target detection.

In a previous work<sup>2</sup> we have presented a theoretical model for the search kinetics of a hidden target, by searchers performing this last type of search strategy (intermittent motion). In this paper we revisit the so called *target problem*, in which we have a single static target and a set of diffusing searchers, initially distributed in the field and go one step forward considering several types of foraging motion. Firstly, we consider the influence of anisotropy in the displacement

of the searcher and secondly we study the effect of the jump-length on the search process proposed. We set up our scheme exploiting the *multi-state* random-walk (RW) formalism developed by Montroll and Weiss.

When dealing with the *target problem*, the survival probability, that is the probability that the target remains undetected up to the maximal search time  $t$ ; has to be optimized as a function of the transition rates among the internal states representing different types of motion. On the other hand, the search time for the *trapping problem* (where a hunter forage for food which is spatially distributed in the field) should be optimized with respect to the rates of transitions between the different types of motion.

We study the kinetics of search of a single fixed target by a large number of searchers performing an intermittent biased random-walk in an homogeneous medium. The states of motion are essentially characterized by the length of the jump and the probability to make a step in a given direction. By taking into account this framework, we have proposed a model describing the dynamics of the searchers, generalizing results of previous work<sup>2</sup>. We have obtained numerical solutions for the mean number of total distinct visited sites, and we have also studied the dependence of this quantity on the transition probability between the states and the length of jump on one state. Besides of the theoretical approach, we have implemented Monte Carlo simulations, finding excellent agreements between the numerical and simulations results.

---

\* revelli@ifca.unican.es.

<sup>1</sup> G. Oshanin, H. S. Wio, K. Lindenberg, and S. F. Burlatsky J. Phys.: Condens. Mat. **19**, 065142 (2007).

<sup>2</sup> F. Rojo, C. E. Budde, and H. S. Wio, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 125002 (2009).

<sup>3</sup> A. Reynolds, Europhys. Lett. **75**, 517 (2006).

<sup>4</sup> O. Benichou *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 198101 (2005); J. Phys.: Condens. Mat. **19**, 065141 (2007).

<sup>5</sup> F. Bartumeus *et al.*, Ecology **86**, 3078 (2005).

<sup>6</sup> E. Raposo *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 240601 (2003).

## Transición fluido-sólido en sistemas de esferas e hiperesferas duras

Cesar D. Estrada\* y Miguel Robles†

*Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Priv. Xochicalco S/N, Col. Centro, Temixco, Mor., 62580 México*

Aunque no es un problema nuevo<sup>1</sup>, el estudio de las propiedades termodinámicas de los fluidos de hiperesferas duras en dimensiones mayores a 3 ha capturado una atención creciente en el área de la teoría de líquidos principalmente a raíz de algunas publicaciones que aparecieron en los años 1999 y 2000<sup>2</sup>. Una de las razones de este renovado interés radica en que existe la necesidad real de buscar nuevas técnicas que permitan avanzar en problemas que en fluidos tridimensionales han resultado difíciles y que pueden ser comunes en sistemas con mayor dimensionalidad. Es evidente que para descubrir como son las problemáticas comunes al cambiar la dimensionalidad del sistema se requiere de la comprensión detallada de las propiedades termodinámicas en todas las dimensiones. Así, por ejemplo, se ha comenzado a estudiar analíticamente y numericamente las propiedades de sus ecuaciones de estado y las propiedades estructurales de fluidos de hiperesferas duras en diferentes dimensiones, extendiendo las teorías para líquidos en tres dimensiones de manera directa<sup>3</sup>.

Una de las preguntas que se mantienen sin respuesta en el fluido de esferas duras tridimensionales es si una aproximación a la ecuación de estado mediante la expansión del virial podría, al aumentar el orden en la densidad, eventualmente predecir la transición líquido-sólido que se observa en las simulaciones numéricas. Este es un problema que potencialmente puede tratarse estudiando los fluidos de hiperesferas, pues se ha encontrado que las series del virial son alternantes en dimensiones altas y por tanto presentan radios de convergencia finitos, que podrían estar relacionados con la transición al sólido cristalino. Sin embargo en el presente no hay suficiente información para hacer conclusiones al respecto.

En este trabajo se propone buscar técnicas numéricas que permitan de la manera más simple posible encontrar el punto de congelamiento del fluido de hiperesferas duras centrándonos, en esta etapa, en dimensiones impares donde se ha encontrado que los tratamientos analíticos parecen ser posibles tanto a nivel de ecuaciones de estado como de aproximaciones a la función de distribución radial<sup>4</sup>, lo cual permite contar con resultados de validación y comparación para las simulaciones.

El estudio toma como punto de partida el cálculo de la función de distribución radial del fluido de hiperesferas duras en 5 y 7 dimensiones, realizando simulaciones numéricas con dinámica molecular para casos de alta

densidad. A partir de estos resultados se han analizado los cambios en la función de distribución radial a distancias cortas y densidades cercanas a los puntos de congelamiento. Basándose en ideas recientemente propuestas y usadas en sistemas tridimensionales<sup>5</sup> para el análisis de la transición vítrea, se pretende definir criterios para encontrar los puntos de congelamiento de los fluidos de hiperesferas a partir de las posiciones y alturas de los máximos y mínimos de la función de distribución radial, los cuales deben presentar cambios radicales al presentarse una transición al sólido.

Resultados preliminares nos muestran que las propiedades del primer mínimo de la función de distribución radial pueden definir de manera clara los puntos de congelamiento, al menos para fluidos de hiperesferas en 5 y 7 dimensiones. Los valores en los que las simulaciones colocan estos puntos (de manera también preliminar) resultan a densidades reducidas:  $\rho_{*5D} = 1.152$  y  $\rho_{*7D} = 1.87$ . Estas observaciones coinciden con estimaciones que otros autores<sup>6</sup> han realizado al respecto.

---

\* cdea@cie.una.mx.

† mrp@cie.una.mx.

<sup>1</sup> E. Leutheusser, *Physica A* **127A**, 667 (1984).

<sup>2</sup> H. L. Frisch y J. K. Percus, *Phys. Rev. E* **60**, 2942 (1999); G. Parisi y F. Slanina, *ibid.* **62**, 6554 (2000).

<sup>3</sup> A. Santos, *J. Chem. Phys.* **112**, 10680 (2000); S. B. Yuste, A. Santos y M. López de Haro, *Europhys. Lett.* **52**, 158 (2000); M. González-Melchor, J. Alejandre y M. López de Haro, *J. Chem. Phys.* **114**, 4905 (2001); M. Bishop, A. Masters y A. Yu. Vlasov, *ibid.* **121**, 6884 (2004); N. Clisby y B. M. McCoy, *J. Stat. Phys.* **114**, 1343 (2004); **114**, 1361 (2004); **122**, 15 (2006); *Pramana* **64**, 775 (2005); I. Lyberg, *J. Stat. Phys.* **119**, 747 (2005); L. Lue, *J. Chem. Phys.* **122**, 044513 (2005); M. Bishop, A. Masters y A. Yu. Vlasov, *ibid.* **122**, 154502 (2005); M. Bishop, P. A. Whitlock y D. Klein, *ibid.* **122**, 074508 (2005); M. Bishop y P. A. Whitlock, *ibid.* **123**, 014507 (2005); A. Santos y M. López de Haro, *Phys. Rev. E* **72**, 01050(R) (2005); M. Skoge, A. Donev, F. H. Stillinger y S. Torquato, *Phys. Rev. E* **74**, 041127 (2006); M. Robles, M. López de Haro y A. Santos, *J. Chem. Phys.* **120**, 9113 (2004); **125**, 219903 (E) (2006); L. Lue y M. Bishop, *Phys. Rev. E* **74**, 021201 (2006).

<sup>4</sup> R. Rohrmann y A. Santos, *Phys. Rev. E* **76**, 051202 (2007).

<sup>5</sup> J. M. Barder, *J. Chem. Phys.* **128**, 104503 (2008).

<sup>6</sup> M. Bishop y P. A. Whitlock, *J. Stat. Phys.* **126**, 299 (2006).



## Cardiac dynamics: a simplified model for the action potential

I. R. Cantalapiedra<sup>†\*</sup>, A. Peñaranda<sup>†</sup>, J. Bragard<sup>‡</sup>, and B. Echebarria<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*Departament de Física Aplicada, Universitat Politècnica de Catalunya, Av. Dr. Marañón 44-50, E-08028, Barcelona*

<sup>‡</sup>*Departamento de Física y Matemática Aplicada, Irunlarrea s/n, 31080 Pamplona*

Models that describe the electrical events of cardiac cells that give rise to cardiac action potentials (AP) are capable of facilitating insights into the mechanisms underlying cardiac electrical dynamics. In particular, models incorporate formulations of transmembrane ionic currents along with the voltage, ionic concentrations, and ion channel kinetics responsible for the currents. AP's are produced as a result of ionic currents that pass across the cell membrane, producing a net depolarization or repolarization of the membrane as time passes and different currents are invoked in response to the voltage changes. The currents are produced by the movement of individual ions across the membrane through ion channels, which are specialized pore-forming proteins that span the membrane and form a pathway for ions to cross the membrane. Mathematical modeling has proved to be the perfect framework where to combine the quantitative data coming from experiments with a qualitative understanding in order to produce an explanatory and predictive tool. It allows to safely test multiple hypothesis without incurring in any cardiac risk for the patient, and to simulate conditions not easily reproducible in experiments. In the last years, an increasing number of cardiac models have been developed as more aspects of the underlying cardiac processes are unraveled. This rise in the number of cell models has been especially remarkable for several animal species, including rabbit, guinea pig, swine, rat, or dog and now for humans.

The aim of this work is the creation of a new cellular ionic model, computationally efficient but flexible enough as to accurately reproduce the electrical properties of

cardiac myocytes, both in human and guinea pig. In the present work, cardiac excitation and propagation are simulated using a modification of the three-variable ionic model proposed by Fenton and Karma in 1998<sup>1</sup> but formulated adding a new current representing the transient outward current and with different parameters as described below. We decompose the total membrane current into four components, i.e.,  $I_{ion} = I_{fi} + I_{si} + I_{so} + I_{to}$ , where the sum contains a fast inward current  $I_{fi}$  ( $Na^+$  current plus the fast part of the  $Ca^{++}$  current); a slow inward  $Ca^{++}$  current, ( $I_{si}$ ); a slow outward time-independent  $K^+$  current, ( $I_{so}$ ); and a fast transient outward  $K^+$  current, ( $I_{to}$ ). The latter being the newly added current with respect to the previous three variable model proposed by Fenton and Karma<sup>1</sup>. We validate the model against the available experimental data, including action potential shape for different pacing's rates, and different types of myocytes, epicardial, endocardial and midmyocardial cells.

Even though more physiologically realistic ionic models are currently available in the literature, the simplified model presented here<sup>2</sup>, has the advantage of being computationally more efficient while keeping the essential characteristics of the action potential propagation. This gain in computational efficiency is especially significant when considering three-dimensional simulations.

---

\* inma@fa.upc.edu.

<sup>1</sup> F. H. Fenton and A. Karma, *Chaos* **8**, 20 (1998).

<sup>2</sup> I. R. Cantalapiedra, A. Peñaranda, J. Bragard, and B. Echebarria, in preparation (2009).

## Efecto Casimir en sistemas fuera del equilibrio

Pablo Rodríguez-López\*, Ricardo Brito† y Rodrigo Soto‡  
 GISC y Departamento de Física Aplicada I (Termología), Facultad de CC. Físicas,  
 Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid

En 1948, Casimir demostró que, entre dos placas plano paralelas perfectamente conductoras y sin carga separadas una distancia  $L$ , por efecto de las fluctuaciones de vacío, aparece una fuerza atractiva entre las placas<sup>1</sup>. Este es un efecto puramente cuántico medido experimentalmente en el 2005.

Estas fuerzas de Casimir tienen una naturaleza cuántica, pero se han obtenido análogos clásicos de fuerzas de Casimir en sistemas en equilibrio sometidos a fluctuaciones de origen térmico.

Proponemos un método de cálculo de fuerzas de Casimir general, válido tanto para sistemas en equilibrio como para sistemas clásicos fuera del equilibrio<sup>2,3</sup>.

Las fuerzas de Casimir son ubicuas en la naturaleza. Estas aparecen en sistemas que cumplen tres propiedades:

1. El sistema se encuentra sometido a la acción de un ruido.
2. La simetría de traslación se rompe por la introducción de intrusos en el medio.
3. El sistema tiene correlaciones de largo alcance.

Usando ecuaciones de Langevin podemos simular la acción del ruido sobre el medio. Así podemos comprobar que en el caso estacionario aparecen unas fuerzas fluctuantes efectivas entre los objetos inmersos

en el medio, cuya fuente únicamente es el ruido al que se encuentra sometido el medio.

Para ilustrar el método, calculamos analíticamente la fuerza de Casimir entre dos placas plano paralelas inmersas en un medio con longitud de correlación finita sometido a distintos tipos de ruido: a ruido blanco para recuperar el caso de equilibrio térmico y a ruidos con correlación espacial o con correlación temporal como ejemplos de sistemas fuera del equilibrio. En todos los casos se obtienen fuerzas de Casimir entre las placas, cambiando su naturaleza según el ruido implicado.

Además, la naturaleza de las fuerzas de Casimir depende del ratio entre la longitud de correlación del sistema y de la distancia entre las placas, siendo la fuerza no despreciable sólo en los casos en los que la distancia entre las placas sea menor que la longitud de correlación del sistema.

---

\* pablo.rodriguez@fis.ucm.es.

† brito@fis.ucm.es.

‡ rsoto@dfi.uchile.cl.

<sup>1</sup> H. B. G. Casimir, Proc. K. Ned. Akad. Wet. **51**, 793 (1948).

<sup>2</sup> R. Brito, R. Soto y U. Marini Bettolo Marconi, Granular Matter **10**, 29 (2007).

<sup>3</sup> R. Brito, U. Marini Bettolo Marconi y R. Soto, Phys. Rev. E **76**, 011113 (2007).

## El principio de Curie en el efecto ratchet inducido por rotura de simetrías temporales

N. R. Quintero\*, R. A. Nodarse y J. Cuesta

*Departamento de Física Aplicada I, EUP, Universidad de Sevilla, Virgen de África 7, 41011 Sevilla*

El principio de simetría de Curie establece que “*Las simetrías de las causas de los fenómenos se manifiestan en sus efectos*” (Pierre Curie, 1894) (ver pág. 401 en ref.<sup>1</sup>).

En esta presentación analizaremos cómo la aplicación de este principio al transporte dirigido en partículas o sistemas extendidos cuando el promedio de fuerzas periódicas temporales que actúan en el sistema es igual a cero<sup>2</sup> (efecto ratchet), nos permite obtener información relevante acerca de la velocidad promedio,  $\langle v \rangle$ , que caracteriza este fenómeno.

En particular, demostraremos que: si el efecto ratchet es inducido por la rotura de las simetrías

$$\mathcal{T}_s : f(t) = -f(t + T/2), \quad (1)$$

$$\mathcal{T}_r : f(t) = f(-t), \quad (2)$$

a través de la fuerza periódica biarmónica

$$f(t) = \epsilon_1 \cos(q\omega t + \phi_1) + \epsilon_2 \cos(p\omega t + \phi_2), \quad (3)$$

entonces las partículas, átomos o solitones se moverán

con velocidad

$$\langle v \rangle \sim \epsilon_1^p \epsilon_2^q \cos(p\phi_1 - q\phi_2),$$

siendo  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  amplitudes pequeñas<sup>3</sup>. Comprobaremos que esta ley física describe correctamente los resultados experimentales obtenidos en las uniones Josephson y en las redes ópticas<sup>4</sup>.

La importancia del principio de simetría de Curie también será discutida cuando otras fuerzas temporales inducen el fenómeno ratchet<sup>3</sup>.

---

\* niurka@us.es, <http://euler.us.es/~niurka/>.

<sup>1</sup> P. Curie, J. Phys. Theor. et Appl. **3**, 393 (1894).

<sup>2</sup> P. Reimann, Phys. Rep. **361**, 57 (2002).

<sup>3</sup> N. R. Quintero, R. A. Nodarse y J. Cuesta, preprint (2009).

<sup>4</sup> A. V. Ustinov *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 087001 (2004); S. Ooi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 207003 (2007); M. Schiavoni *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 094101 (2003); R. Gommers *et al.*, Phys. Rev. Lett. **95**, 073003 (2005).

## Incapacidad de la prueba 0-1 para la detección del caos Hamiltoniano en el límite termodinámico

Mauricio Romero Bastida\*

SEPI-ESIME Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional, Av. Santa Ana No. 1000, Col. San Francisco Culhuacán, Delegación Coyoacán, Distrito Federal 09340 México

Recientemente ha sido propuesta una nueva prueba, conocida como prueba 0-1, para la detección de caos en series de tiempo<sup>1</sup>. Si el resultado es 0, la dinámica es regular; si es 1, es caótica. Debido a su simplicidad, el potencial rango de aplicación es muy amplio. Por lo tanto, es importante determinar si es una herramienta efectiva para sistemas de mayor complejidad que aquellos estudiados hasta ahora.

En este trabajo exploramos la posibilidad de aplicar esta prueba a la detección del caos de un sistema Hamiltoniano de muchos grados de libertad. Nuestro modelo corresponde a una cadena de osciladores anarmónicos unidimensionales, conocido en la literatura como modelo de Fermi-Pasta-Ulam (FPU). La dinámica de este modelo está controlada por la densidad de energía: para valores altos el sistema es fuertemente caótico; para valores bajos la dinámica es regular en escalas de tiempo muy grandes. Si acoplamos a este sistema un defecto pesado, tomamos la masa de éste como grande, usamos condiciones iniciales aleatorias y tomamos el límite termodinámico (numero grande de osciladores livianos), entonces tenemos un modelo unidimensional de movimiento Browniano<sup>2</sup>.

Si denotamos el resultado de la prueba por  $K$  y utilizamos las series de tiempo de la posición y/o momento de cualquiera de los osciladores de la cadena para el caso de una baja densidad de energía, la prueba 0-1 es incapaz de detectar la dinámica caótica del sistema en escalas de tiempo inferiores a  $10^7$  unidades de tiempo. Este resultado muestra que la prueba 0-1 es ineficiente en este régimen dinámico, ya que el máximo exponente de Lyapunov, que es un indicador dinámico inequívoco y fácil de calcular, para tiempos mayores que  $10^7$  tiene un valor de  $1.8 \times 10^{-6}$ , indicando que el sistema es caótico.

Para el caso del defecto pesado y un valor alto de la densidad de energía que garantice que el sistema es fuertemente caótico, hemos calculado el valor de  $K$  como función de la longitud de la serie de tiempo correspondiente a la posición para diferentes tamaños de sistema, como se muestra en la figura. Es claro que, conforme se va alcanzando el límite termodinámico, el tiempo que tarda la prueba en dar la clasificación correcta se incrementa. De hecho, para una cadena de 300 000 osciladores este tiempo es del orden de  $10^{12}$ , el cual es claramente inalcanzable. Con una serie de

tamaño modesto ( $2 \times 10^5$ ), la prueba da como resultado  $K = 0.003$ , el cual no corresponde a la dinámica caótica del sistema, ya que el máximo exponente de Lyapunov para este sistema en las condiciones estudiadas es de  $0.12^3$ . También hemos aplicado la prueba 0-1 a la serie experimental, con 145 612 datos, de una partícula coloidal suspendida en agua<sup>4</sup> y obtuvimos como resultado  $K = 0.02$ , el cual se explica por analogía con los resultados del modelo Hamiltoniano ya mencionados.

Podemos concluir que, para las dos situaciones estudiadas, la prueba 0-1 es un instrumento sumamente ineficaz para la detección del caos Hamiltoniano, y no ofrece ventaja alguna sobre los métodos de series de tiempo no lineales, los cuales ya han sido aplicados exitosamente al modelo FPU con anterioridad<sup>5</sup>.

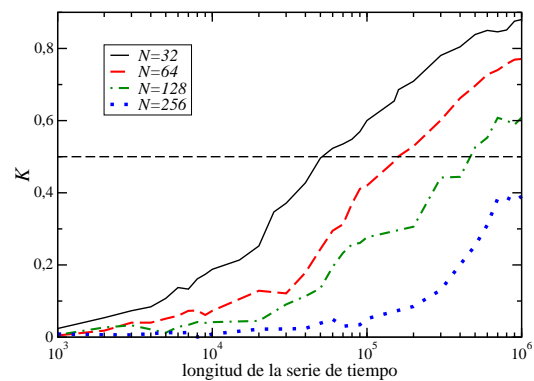


Figura 1. Resultado de la prueba 0-1 vs longitud de la serie de tiempo para distintos tamaños.

\* robm66@gmail.com.

<sup>1</sup> G. A. Gottwald e I. Melbourne, Proc. R. Soc. London, Ser. A **460**, 603 (2004).

<sup>2</sup> M. Romero-Bastida y E. Braun, Phys. Rev. E **65**, 036228 (2002).

<sup>3</sup> M. Romero-Bastida, Phys. Rev. E **69**, 056204 (2004).

<sup>4</sup> P. Gaspard, M. E. Briggs, M. K. Francis, J. V. Sengers, R. W. Gammon, J. R. Dorfman y R. V. Calabrese, Nature **394**, 865 (1998).

<sup>5</sup> M. Romero-Bastida, D. Castañeda y E. Braun, Phys. Rev. E **71**, 046207 (2005).

## Contribución elástica a la energía libre superficial de un nemático en presencia de un sustrato estructurado: ¿es siempre válida la aproximación de Berreman?

José Manuel Romero Enrique<sup>†</sup>, Chi-Tuong Pham<sup>‡</sup> y Pedro Patrício<sup>§¶</sup>

<sup>†</sup>Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Área de Física Teórica, Apartado de Correos 1065, 41080 Sevilla

<sup>‡</sup>LIMSI-CNRS, BP 133 F-91403 Orsay Cedex (France)

<sup>§</sup>Centro de Física Teórica e Computacional, Universidade de Lisboa,  
Avenida Professor Gama Pinto 2, P-1649-003 Lisboa (Portugal)

<sup>¶</sup>Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro 1, P-1949-014 Lisboa (Portugal)

El estudio del comportamiento de cristales líquidos en las cercanías de sustratos estructurados ha despertado gran interés en los últimos años debido a sus aplicaciones potenciales, tales como LCDs bistables<sup>1</sup>. La presencia de superficies microestructuradas puede frustrar la ordenación orientacional de largo alcance de la fase nemática. Asociada a la deformación del campo director del nemático podemos identificar una contribución elástica de la energía libre, que puede jugar un papel importante en el comportamiento interfacial de fases nemáticas. Si dicha deformación del campo director es suave, podemos aplicar la aproximación de Berreman<sup>2</sup> o su generalizaciones<sup>3</sup> para caracterizar la contribución elástica. En algunos casos el campo director presenta defectos topológicos. Dichos defectos (de estructura y dinámica compleja) es un nuevo ingrediente y una fuente adicional de inhomogeneidad superficial, que no se presenta en la adsorción de líquidos simples. De hecho, partículas coloidales dispersadas en un fluido nemático presentan complejas interacciones mediadas por la distorsión de la fase nemática, y en las que los defectos topológicos juegan un papel importante<sup>4</sup>. La presencia de estos defectos puede depender de la estructura del sustrato, aunque esto es un aspecto que no se ha explorado en detalle aún.

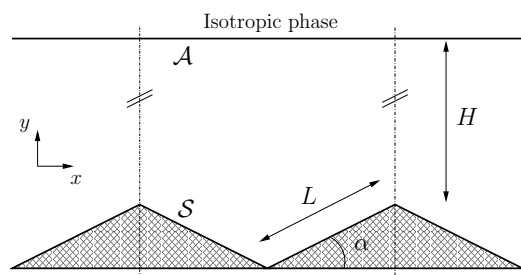


Figura 1. Geometría del problema.

En este trabajo hemos considerado una fase nemática en contacto con un sustrato estructurado en forma de sierra de periodo  $2L \cos \alpha$  (véase Fig. 1). Dicho sustrato favorece un alineamiento local homeotrópico del

nemático en la superficie. Asumimos que la energía libre de la fase nemática tiene la forma del funcional de Landau-de Gennes. Dentro de la aproximación de campo medio, el perfil de parámetro de orden se ha obtenido minimizando dicho funcional con la técnica de elementos finitos sobre mallas adaptativas<sup>5</sup>. El análisis de la energía libre del nemático y su dependencia con el periodo del sustrato muestra que para condiciones de anclaje fuerte (o  $L$  grande) la contribución elástica no es descrita por la expresión de Berreman, sino que tiene una contribución de la forma  $K(\alpha) \ln(L/\xi)$ , que depende de la geometría del sustrato. Usando una descripción del sistema con un funcional elástico de Frank-Oseen modificado, identificamos el origen de dicho término: está debido a la aparición de defectos topológicos con carga *no semientera* localizados en las cúspides del sustrato<sup>6</sup>. La existencia de esta contribución nos permite explicar las desviaciones de los valores de los parámetros del sistema en la transición de mojado respecto al comportamiento predicho por la ley de Wenzel<sup>7</sup>, y podría dar lugar a novedosas interacciones mediadas por la fase nemática entre partículas coloidales en forma de prisma<sup>8</sup>.

<sup>1</sup> C. Uche, S. J. Elston y L. A. Parry-Jones, J. Phys. D: Appl. Phys. **38**, 2283 (2005); C. Uche, S. J. Elston y L. A. Parry-Jones, Liq. Cryst. **33**, 697 (2006); L. Harnau y S. Dietrich, Europhys. Lett. **73**, 28 (2006).

<sup>2</sup> D. W. Berreman, Phys. Rev. Lett. **28**, 1683 (1972).

<sup>3</sup> S. Faetti, Phys. Rev. A **36**, 408 (1987); J. B. Fournier y P. Galatola, Phys. Rev. E **60**, 2404 (1999); J. I. Fukuda, M. Yoneya y H. Yokoyama, Phys. Rev. Lett. **98**, 187803 (2007); G. Barbero, A. S. Gliozzi, M. Scalerandi y L. R. Evangelista, Phys. Rev. E **77**, 051703 (2008).

<sup>4</sup> P. Patrício, M. Tasinkevych y M. M. Telo da Gama, Eur. Phys. J. E **7**, 117 (2002).

<sup>5</sup> P. Poulin, H. Stark, T. C. Lubensky y D. A. Weitz, Science **275**, 1770 (1997).

<sup>6</sup> J. M. Romero-Enrique, C.-T. Pham y P. Patrício, en preparación (2009).

<sup>7</sup> P. Patrício, C.-T. Pham y J. M. Romero-Enrique, Eur. Phys. J. E **26**, 97 (2008).

<sup>8</sup> F. R. Hung y S. Bale, Molec. Sim. **35**, 1029 (2009).

## Sodium halide aqueous solutions confined in graphene nanochannels: a computer simulation study of the influence of ion and water polarization

J. Sala\*, E. Guàrdia, and J. Martí

Departament de Física i Enginyeria Nuclear, Universitat Politècnica de Catalunya, Campus Nord UPC, 08034 Barcelona

Electrolyte solutions under confinement and close to hydrophobic interfaces are of great interest in many fields. In this communication we present the results of a series of computer simulation studies on sodium halide aqueous solutions confined in graphene nanochannels. We carried out molecular dynamics simulations of NaF, NaCl and NaI aqueous solutions confined into two parallel graphene plates with no defects to model two single sheets of highly oriented pyrolytic graphite (HOPG). As in similar studies on pure water<sup>1,2</sup>, we set up a simulation box in the  $x$ ,  $y$ , and  $z$  directions of 3.44 nm, 3.41 nm, and 3.1 nm, respectively. We assumed the  $z$  coordinate to be perpendicular to the graphene layers, and the usual periodic boundary conditions were considered only in the  $x$  and  $y$  directions. The simulations were performed in the NVT ensemble, and the temperature was kept at  $T=298$  K by coupling the system to a Berendsen thermostat<sup>3</sup>. The simulated systems were made up of 1000 water molecules and several ion pairs (18, 36, and 72, corresponding to concentrations  $m=1, 2$ , and  $4$  mol·kg<sup>-1</sup>, respectively).

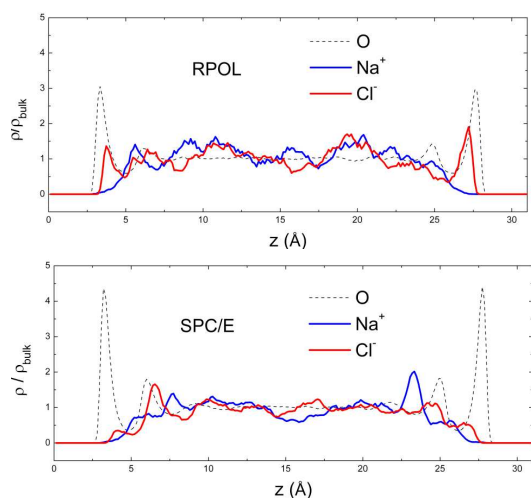


Figure 1. Water and ion density profiles corresponding to a NaCl solution at  $m=1$  mol·kg<sup>-1</sup>. Up: RPOL model, Bottom: SPC/E model.

Recently, several studies have shown the importance of the assumption of polarizable potential models to correctly simulate aqueous interfaces<sup>4,5</sup>. In order to analyse the influence of ion and water polarization in our systems, each sample was simulated using polarizable and non polarizable interaction potentials. To this end, we assumed the RPOL<sup>6</sup> and SPCE water models<sup>7</sup> and the corresponding ion-water parameters and ion polarizabilities derived by Dang and co-workers<sup>8,9</sup>. As

can be seen from figs. 1, 2, and 3, the inclusion of polarization highly affects the presence of anions in the vicinity of the graphene sheets. Finally, a separate analysis of the properties of bulk and interfacial species was performed.

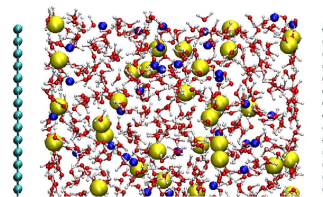


Figure 2. Snapshot of a typical MD configuration corresponding to a NaCl solution at  $m=1$  mol·kg<sup>-1</sup> for the RPOL model.

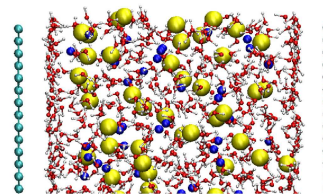


Figure 3. Snapshot of a typical MD configuration corresponding to a NaCl solution at  $m=1$  mol·kg<sup>-1</sup> for the SPC/E model.

\* jonas.sala@upc.edu.

<sup>1</sup> G. Nagy, M. C. Gordillo, E. Guàrdia, and J. Martí, *J. Phys. Chem. B* **111**, 12524 (2007).

<sup>2</sup> J. Martí, J. Sala, E. Guàrdia, and M. C. Gordillo, *Phys. Rev. E* **79**, 031606 (2009).

<sup>3</sup> H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola, and J. R. Haak, *J. Chem. Phys.* **81**, 3684 (1984).

<sup>4</sup> P. Jungwirth and D. J. Tobias, *Chem. Rev.* **106**, 1259 (2006).

<sup>5</sup> C. D. Wick, I.-F. W. Kuo, C. J. Mundy, and L. X. Dang, *J. Chem. Theor. Comput.* **3**, 2002 (2007).

<sup>6</sup> L. X. Dang, *J. Chem. Phys.* **97**, 2659 (1992).

<sup>7</sup> H. J. C. Berendsen, J. R. Grigera, and T. P. Straatsma, *J. Phys. Chem.* **91**, 6269 (1987).

<sup>8</sup> L. X. Dang and B. C. Garrett, *J. Chem. Phys.* **99**, 2972 (1993).

<sup>9</sup> S. Koneshan, J. C. Rasaiah, and L. X. Dang, *J. Chem. Phys.* **114**, 7544 (2001).

<sup>10</sup> <http://recerca.upc.edu/simcon>.

## Universal fluctuations in correlated systems

M. S. de la Lama\* and J. M. López

*Instituto de Física de Cantabria (CSIC-UC), 39005 Santander, Spain*

Global measures of highly correlated systems do not satisfy the central limit theorem. Such quantities have been found to exhibit non-Gaussian fluctuations about the mean value. Even more, the probability density function (PDF) of the fluctuations seems to have a universal character. Bramwell, Holdsworth and Pinton (BHP)<sup>1</sup> empirically demonstrated that the energy fluctuations in a turbulent flow experiment and that of the order parameter in a finite-size critical XY model share the same non-gaussian PDF. Similar behavior was later observed for numerically simulated PDF of global quantities in several correlated equilibrium and non-equilibrium systems. It was also identified the analytical form of the BHP distribution for the order parameter in the low temperature phase of the 2D XY model<sup>2</sup>.

Here we analyze this super-universal behavior in the context of critical systems. The PDF for the order parameter takes on an approximately Gaussian form as long as the Landau approximation is valid. Close to the critical point the correlation length diverges, the Landau approximation breaks down and the PDF of the order parameter becomes non-gaussian. We employ a discrete automaton model that reproduces the zero-temperature dynamics of an elastic forced string in a disordered medium. Due to the competition between elasticity and quenched disorder the system undergoes a critical transition at a threshold driving force,  $f = f_c$ , from a moving ( $f > f_c$ ) to a pinned phase ( $f < f_c$ ). We study the behavior of the order parameter, i.e. the global velocity of the interface, in the proximities of the critical point. We analyze, by means of Kolmogorov-Smirnov test, how the fitness of its PDF to this super-universal BHP accurates as the critical point approaches. We observe that the goodness of the fit exhibits its maximal value not at the critical point but in a range of values

immediately above the critical region.

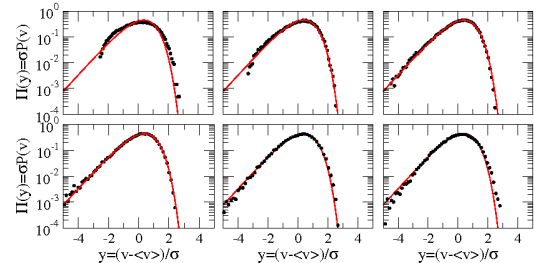


Figure 1. Stationary PDF of the interface global velocity for different values of the driving force around  $f_c \approx [14.7, 14.8]$ . From left to right and top to bottom  $f = 14.7, 14.8, 14.9, 15.0, 15.3, 15.9$ . The solid line corresponds to the analytical form of the BHP distribution provided in Ref.<sup>2</sup>.

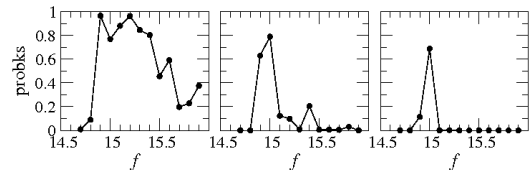


Figure 2. The goodness of the fit, measured by the significance level *probks*, depends upon statistics. As the number of realizations increases, the significance region of the test is reduced to a small range of values of the driving force.

---

\* msanchez@ifca.unican.es.

<sup>1</sup> S. T. Bramwell, P. C. Holdsworth, and J.-F. Pinton, *Nature* **396**, 552 (1998).

<sup>2</sup> S. T. Bramwell *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3744 (2000).

**Two dimensional glassy water: searching for minimal models of LDA-HDA transitions**

Pedro A. Sánchez\*, Valery Ilyin, Tomás Sintes<sup>†</sup>, Oreste Piro, Itamar Procaccia, and 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*

We explore by means of computer simulations the phase diagram of a simple two-dimensional model which qualitatively reproduces the properties of water molecules interactions. The model includes competing anisotropic hydrogen bonds and isotropic Lennard-Jones interactions. From this competition, distinct crystalline and amorphous solid phases arise, in some cases with

very different densities and morphologies.

We discuss the plausability of existence of an hypothetical transition line between two amorphous solid phases of high and low density.

---

\* pedro@ifisc.uib-csic.es.

† tomas@ifisc.uib-csic.es.



## Adsorption of semiflexible magnetic filaments on flat surfaces

Pedro A. Sánchez\*, Joan J. Cerdá†, Tomás Sintés‡, V. Ballenegger, Christian Holm, and Oreste Piro  
*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*

Despite magnetic filaments have been used by nature since long time ago in magnetostatic bacteria<sup>1</sup>, Humankind has just begun to caress its potential for novel applications<sup>2</sup>. The continuous improvements on the synthesis of artificial magnetic filaments, reducing the size of the magnetic particles and improving the grafting between particles, has set the onset in the creation of particles which resemble magnetic polymers but in the scale of tenths of nanometers. In difference to the magnetic polymers<sup>3</sup>, the magnetic filaments can exhibit non-zero magnetization at room temperature. The study of the physical properties of such systems via numerical simulations can help to elucidate the potential of the magnetic filaments for practical applications.

In the present work we focus on the study of the adsorption process and phase transitions of such

magnetic filaments near attractive surfaces. Extensive Molecular Dynamics simulations in 2+1 dimensions using a coarse bead-spring chain model have been performed. The effects of the temperature, dipolar coupling parameter of the magnetic particles, stiffness, chain length, fraction of magnetic particles, and concentration of chains on the adsorption and phase transitions near magnetic and non-magnetic surfaces are reviewed.

---

\* pedro@ifisc.uib-csic.es.

† jcerda@icp.uni-stuttgart.de.

‡ tomas@ifisc.uib-csic.es.

<sup>1</sup> A. Komeili *et al.*, *Science* **311**, 242 (2006).

<sup>2</sup> S. J. Blundell *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, R771 (2004).

<sup>3</sup> M. Kamachi, *J. Macromol. Sci.* **C42**, S41 (2002).

## Savanna-Fire Model: Combined effects of tree-tree establishment competition and spatially explicit fire on the spatial pattern of trees in savannas

Flora S. Bacelar<sup>†</sup>, Justin M. Calabrese<sup>‡</sup>, Volker Grimm<sup>‡</sup>, and Emilio Hernández-García<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*IFISC(CSIC-UIB) Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos,  
Campus Universitat Illes Balears, E-07122 Palma de Mallorca, Spain*

<sup>‡</sup>*Dept. of Ecological Modelling, Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ), Leipzig, Germany*

Savannas are characterized by discontinuous tree layer superimposed on a continuous grass layer. Savannas occur across a wide range of climatic, edaphic, and ecological conditions covering approximately one fifth of the earth's land area. In some countries these grass-dominated ecosystems are a principal biotic resource playing important roles in both the configuration of natural landscapes and in local economies. Identifying the mechanisms that facilitate tree-grass coexistence in savannas has remained a persistent challenge in ecology and is known as the "savanna problem"<sup>1</sup>.



Figure 1. Fire in the savanna grasslands of Kruger National Park, South Africa. Photograph by J. S. Levine, NASA.

Recent empirical work suggests that both tree-tree competition and fire are key factors in semi-arid to mesic savannas. Fire is a natural feature of many savannas and is also frequently used by humans as a management tool<sup>2</sup>. Fire primarily affects juvenile tree mortality rates, with adults being largely fire resistant. In a previous paper<sup>3</sup> a minimalistic stochastic cellular automata was developed to study the individual and combined effects of competition and fire on savannas. The model was implemented on a square lattice with periodic boundary conditions. Each site on the lattice could be in one of two states: grass-occupied or tree-occupied. The model showed the relevance of the combined effects of nearby

competing adults trees, stochastic fire, and grazing on tree density and pattern formation in savannas. However, fire was modeled in spatially implicit and uncorrelated way and tree development was modeled as an instantaneous transition from seed to adult tree. In the present work, a model is proposed to combine the previous savanna model<sup>3</sup> with the Drossel-Schwabl forest fire model<sup>4</sup>, therefore representing fire in a spatially explicit manner. We use the model to explore how the pattern of fire spread, coupled with an explicit, fire-vulnerable tree life stage, affects tree density and spatial pattern.

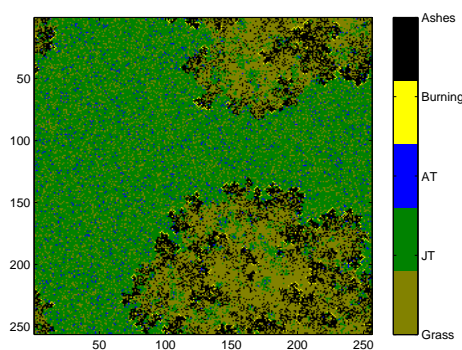


Figure 2. Fire fronts in Savanna Fire Model.

Tree density depended strongly on both fire frequency and fire front patterns. Furthermore, the relationship between the post-fire grass recovery rate and the tree growth rate was a key factor in mediating tree-grass coexistence. Forest state is also a feasible state in the model when reducing both mortality of trees and grass recovery. For no tree aging structure, when tree growth became infinity, the savanna transitions to a grassland above a critical value of grass recovery. When the tree growth rate is finite this transition point reduces.

<sup>1</sup> G. Sarmiento, *The ecology of neotropical savannas* (Harvard University Press, Cambridge, MA, 1984).

<sup>2</sup> M. E. Hochberg, J. C. Menaut, and J. Gignoux, *J. Ecology*, **82**, 217 (1994).

<sup>3</sup> J. M. Calabrese, F. Vázquez, C. López, M. San Miguel, and V. Grimm, submitted (2009).

<sup>4</sup> B. Drossel and F. Schwabl, *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 1629 (1992).

## Role of noise in a continuous opinion model

Raúl Toral\*, Miguel Pineda, and Emilio Hernández-García

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

The application of techniques and tools from nonlinear and statistical physics to understand the dynamics of opinion changes in a society has become a topic of interest in recent years. A society can be thought of as a complex system composed by a large number of interacting individuals with diverse opinions. These opinions are not necessarily static, but they evolve due to a variety of internal as well as external factors, such as the influence of advertising and acquaintances, amongst others. As a result of this evolution, a consensus opinion could emerge (a vast majority on individuals adopting a similar opinion), or the population could fragment into a number of groups. To analyze the process of opinion formation, several models inspired from statistical mechanics models have been developed. Models can be divided in two broad categories: *discrete models* where the opinion can only adopt a finite set of values, and *continuous models* where the opinion of an individual is expressed as a real number in a finite interval. Discrete models are useful when analyzing cases in which individuals are confronted with a well limited number of options: a political election, for example, where one is forced to choose amongst a finite set of parties. Continuous models are more suitable to analyze cases in which a single issue (legalizing abortion, for example) is being considered and opinions can vary continuously from “completely against” to “in complete agreement”.

A continuous model introduced by Deffuant and collaborators<sup>1,2</sup> has received much attention recently. Deffuant *et al.* model implements the *bounded confidence* mechanism by which two individuals only influence the opinion of each other if their respective opinions differ less than some given amount. In other words, people holding too distant opinions on an issue will simply ignore each other and will, hence, keep their original opinions. It is only through the interaction of not too distant people that we manage to modify our opinion. This model was in turn inspired by the Axelrod model for the dissemination of culture<sup>3</sup> and has in turn inspired a large number of extensions and modifications.

In the Deffuant *et al.* model individuals meet in random pairwise encounters in a given connectivity network, but the subsequent evolution is completely deterministic. This leads to final states in which either *perfect* consensus has been reached or the population splits in a finite number of groups such that all individuals in one group have *exactly* the same opinion. We believe that such uniform states are not very realistic

and some degree of discrepancy must appear within otherwise well defined groups. In this paper, we introduce an additional element of randomness in the dynamics. It aims to represent, certainly in a caricaturist manner, the element of *free will* present in all human decisions by which we do not follow exactly the opinion dictated by our relationships. Our aim is to analyze how the interplay between this *free will* and the interactions amongst individuals affects group formation in opinion dynamics. In the language of statistical mechanics, what we are doing is to add noise to the deterministic dynamics and analyze which aspects of the model are robust against the introduction of noise. Noise is introduced by allowing an individual opinion to change to another randomly chosen value in the whole opinion space.

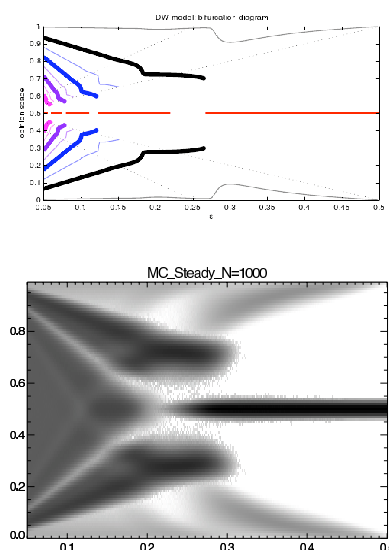


Figura 1. Bifurcation diagram of the Deffuant *et al.* model without (top panel) and with (bottom panel) noise.

\* <http://ifisc.uib-csic.es>.

<sup>1</sup> G. Deffuant, D. Neu, F. Amblard, and G. Weisbuch, *Adv. Compl. Syst* **3**, 87 (2000).

<sup>2</sup> E. Ben-Naim, P. L. Krapivsky, and S. Redner, *Physica D* **183**, 190 (2003).

<sup>3</sup> R. Axelrod, *J. Conflict Res.* **41**, 203 (1997).

## From micro to macro in systems with two symmetric absorbing states

Federico Vázquez\* and Cristobal López†

*IFISC, Instituto de Física Interdisciplinar y Sistemas Complejos, Campus Universitat de les Illes Balears, E-07122, Palma de Mallorca*

We propose a general approach to study spin models with two symmetric absorbing states<sup>1</sup>. Starting from the microscopic dynamics on a square lattice, we derive a Langevin equation for the time evolution of the magnetization field, that successfully explains coarsening properties of a wide range of nonlinear voter models and systems with intermediate states. We find that the macroscopic behavior only depends on the first derivatives of the spin-flip probabilities. Moreover, an analysis of the mean-field term reveals

the three types of transitions commonly observed in these systems -generalized voter, Ising and directed percolation-. Monte Carlo simulations of the spin dynamics qualitatively agree with theoretical predictions.

---

\* federico@ifisc.uib-csic.es.

† clopez@ifisc.uib-csic.es.

<sup>1</sup> F. Vazquez and C. López, Phys. Rev. E **78**, 061127 (2008).

## Fase esméctica estable en una dispersión de discos polidispersos en diámetro y de anchura constante

Y. Martínez-Ratón<sup>†</sup>, E. Velasco<sup>‡</sup>, D. Sun<sup>§</sup>, H.-J. Sue<sup>§</sup> y Z. Cheng<sup>§</sup>

<sup>†</sup>Universidad Carlos III de Madrid

<sup>‡</sup>Universidad Autónoma de Madrid

<sup>§</sup>Texas A & M University

En este trabajo presentamos el diagrama de fases experimental de una dispersión coloidal de discos polidispersos en diámetro pero de grosor constante. La fase esméctica de discos ha sido una fase muy elusiva desde el punto de vista experimental. Con este trabajo, en el que asimismo presentamos un modelo basado en el funcional de la densidad para partículas duras con objeto de explicar el comportamiento experimental, demostramos una posible vía para estabilizar la fase esméctica.

Los discos se han sintetizado a través de la exfoliación en agua del mineral  $\alpha$ -Zirconio Fosfato (ZrP). Dicha exfoliación produce monocapas de ZrP de geometría aproximadamente cilíndrica pero de diámetro polidisperso con un valor promedio de  $2 \mu\text{m}$  y una desviación típica alrededor del 32%. El grosor de dichos discos es constante e igual a  $2.68 \text{ nm}$ , por lo que la relación de aspecto media está en torno a  $\sim 750$ , de ahí que una denominación más adecuada de su geometría sea la discoidal. La interacción entre los discos es predominantemente repulsiva. Hemos observado que a medida que incrementamos la fracción de volumen de las partículas,  $\phi$ , obtenemos una fase isotrópica (I) para  $\phi < 0.01$ , seguida de una transición a una fase nemática (N) que comienza en  $\phi \approx 0.01$  y se completa en  $\phi \approx 0.03$ . La fase nemática es estable desde este valor hasta  $\phi \approx 0.06$ . La identificación de ambas fases se ha realizado con la ayuda de imágenes ópticas de las suspensiones obtenidas a través de polarizadores cruzados (ver figura).

La fase esméctica (Sm) aparece por vez primera a una fracción de volumen igual a  $0.059$  como picos en la intensidad de los rayos X difractados por la muestra y medidos bajo diferentes ángulos. Dichos picos son relativamente difusos a esta fracción de volumen pero se hacen más nítidos a densidades más altas. Esto a su vez nos permite medir el periodo de la fase esméctica y su evolución con la densidad. Para obtener una estimación de la fracción de volumen de la fase esméctica hemos elaborado un modelo de discos duros polidispersos basado en la Teoría de Medidas Fundamentales de cilindros duros paralelos<sup>1</sup>, donde el grosor efectivo de los discos se fija igual a la relación entre el periodo del esméctico y el grosor real de las

partículas. Hemos encontrado que la transición N-Sm es de segundo orden, compatible con los resultados experimentales. A través de la minimización del funcional de medidas fundamentales hemos obtenido los perfiles de densidad del esméctico observando un acentuado micro-fraccionamiento: la fracción relativa de discos grandes y pequeños tiene un desfase igual a la mitad de un periodo, mientras que la de los discos de diámetro intermedio es relativamente constante, llegando incluso a tener varios picos secundarios. Hemos aplicado además un modelo de Onsager en la aproximación de orientaciones restringidas para describir la transición I-N y su evolución con la polidispersidad.

No hemos observado presencia alguna de la fase columnar para fracciones de volumen de hasta  $0.2$ , lo que nos hace concluir que discos muy polidispersos en diámetro pero de anchura constante hacen inestable dicha fase, mientras que la fase esméctica sí es estable. Estos resultados son diferentes a los presentados en la Ref.<sup>2</sup> donde se demuestra que discos polidispersos en diámetro y en grosor estabilizan una fase columnar en un rango de densidades bastante grande.

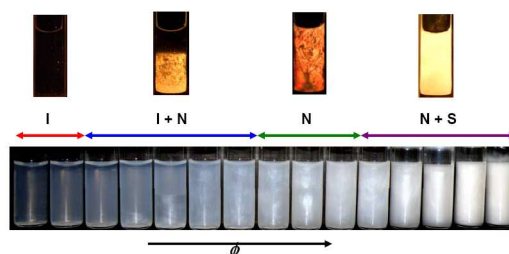


Figura 1. Imágenes ópticas de las diferentes muestras a través de polarizadores cruzados. Hemos marcado los intervalos de estabilidad de las diferentes fases.

<sup>1</sup> Y. Martínez-Ratón, J. A. Capitán y J. A. Cuesta, Phys. Rev. E **77**, 051205 (2008); J. A. Capitán, Y. Martínez-Ratón y J. A. Cuesta, J. Chem. Phys. **128**, 194901 (2008).

<sup>2</sup> F. M. van der Kooij, K. Kassapidou y H. N. W. Lekkerkerker, Nature **406**, 868 (2000).

## Aplicación de un modelo hipercaótico a la criptografía

Gerard Vidal\* y Héctor Mancini

*Departamento de Física y Matemática Aplicada, Universidad de Navarra, 31080 Pamplona*

En esta contribución se propone un modelo matemático usado en convección de fluidos como método de cifrado caótico. La mayor novedad es que el método incluye una parte privada, consistente en los parámetros del sistema —compartida por emisor y receptor— y otra aleatoria, fijada por cada extremo de la comunicación.

El sistema de ecuaciones que se presenta se ha usado en sistemas termoconvectivos, donde se desarrollan estados dinámicos muy interesantes y complejos. Algunos de esos casos se han estudiado experimentalmente<sup>1-3</sup>. Este trabajo se centra en situaciones de Codimensión-2 —donde dos modos bifurcan simultáneamente— con unas condiciones de contorno cuadradas<sup>4</sup>.

Diversas simulaciones numéricas sobre el modelo que se analiza muestran que posee ciertas particularidades<sup>5</sup>, una de ellas es que se trata de un conjunto no atractor donde las trayectorias están confinadas. Otra característica destacable es que el sistema de ecuaciones es hipercaótico<sup>6</sup>, es decir, que posee más de un exponente de Lyapunov positivo. Este hecho hace que un error en la estimación en alguno de los parámetros —como el que puede cometer un espía al intentar descubrir la clave— tenga más importancia que si se usa un sistema caótico con un único exponente positivo.

Sin embargo, la propiedad que lo hace más interesante es que una parte de la clave puede elegirse al azar en

cada uno de los extremos de comunicación y ésta no es necesaria que se dé a conocer al otro lado. De manera que nadie, excepto el propio comunicador puede saber cual es su clave. Estas características hacen que, con oportunas modificaciones, sea un sistema a considerar para cifrar información<sup>7</sup>.

Por otro lado, el hecho de ser un sistema continuo lo hace útil para aplicaciones de cifrado de flujo<sup>8</sup>, donde los datos se cifran a medida que son generados. Algunos ejemplos donde representa una gran ventaja son: llamadas telefónicas, servicios de mensajería instantánea y videoconferencias, en las que se precisa un gran ancho de banda para su cifrado y para ello normalmente es necesario un canal de comunicación dedicado.

---

\* gvidal@alumni.unav.es.

<sup>1</sup> G.B. Mindlin *et al.*, *Int. J. Bifurcation and Chaos*, **4**, 1121 (1994).

<sup>2</sup> T. Ondarçuhu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3892 (1993).

<sup>3</sup> H. Mancini y D. Maza, *Phys. Rev. E* **55**, 2757 (1997).

<sup>4</sup> G. Vidal y H. Mancini, *Int. J. Bifurcation and Chaos Special Issue: New trends and tools in complex networks* (to be published).

<sup>5</sup> G. Vidal y H. Mancini, *Int. J. Bifurcation and Chaos* (to be published).

<sup>6</sup> O. Röessler, *Phys. Rev. A*, **71**, 155 (1979).

<sup>7</sup> L. Kocarev, *IEEE Circ. Syst. Mag.* **1**, 6 (2001).

<sup>8</sup> P. Li *et al.*, *Chaos, Solitons and Fractals* **32**, 1867 (2007).

## Phase and interface behavior of pure compounds and binary mixtures with soft-SAFT coupled with density gradient theory

Oriol Vilaseca<sup>†‡</sup>, Rosa M. Marcos<sup>§</sup>, and Lourdes F. Vega<sup>†‡¶\*</sup>

<sup>†</sup>*MATGAS Research Center, Campus UAB, 08193 Bellaterra, Barcelona*

<sup>‡</sup>*Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (ICMAB-CSIC), Campus UAB, 08193 Bellaterra, Barcelona*

<sup>§</sup>*Departament d'Enginyeria Mecànica, ETSE, Universitat Rovira i Virgili, Campus Sescelades, 43007 Tarragona.*

<sup>¶</sup>*Carburos Metálicos - Air Products Group, Campus UAB, 08193 Bellaterra, Barcelona*

Although essential to the design of several processes, thermodynamics experimental data is not always available, and, in some cases, is difficult or expensive to achieve. Consequently great efforts have been made in the development of prediction tools to obtain these properties. In fact, the design, scale up and optimization of chemical processes, such as unit operations (e.g. distillation or extraction), need the knowledge of the phase and interfacial properties, among other essential properties.

Most equations of state are able to accurately provide densities and solubilities, while calculating the surface tension is not a straightforward task and it still remains a challenge from a modeling perspective. The surface tension is a macroscopic thermodynamic property that is intimately associated to the microscopic structuring of molecules in the vapour-liquid interface. It is related to the difference between the intermolecular interaction in the bulk and at the surface as well as to molecular ordering and structuring. The surface tension is responsible for several properties essential for adhesion, adsorption, for recovery of compounds, etc.

Different methods/models can be used to correlate and/or predict the surface tension of heterogeneous fluids, such as the parachor method<sup>1,2</sup>, the corresponding states principle<sup>3</sup>, the perturbation theory<sup>4</sup>, the density functional theory<sup>5-8</sup> and the density gradient theory<sup>9,10</sup>. The density gradient theory (DGT), based on van der Waals work<sup>11</sup>, and widespread by Cahn and Hilliard<sup>12</sup>, relates an equation of state to interfacial properties. The theory explicitly considers the local free energy density within the interface, hence providing a route to obtain density profiles across the interface and the interfacial thickness, which cannot be calculated by empirical methods<sup>13</sup>. The theory results from a truncation of a general Landau expansion of the free energy in terms of the density profile where the free energy of a homogeneous theory is evaluated for every local density value, and extended by means of a term with a squared gradient of the density profile.

This is the approach we have followed in this work, where we combined the van der Waals Density Gradient Theory with a molecular-based Equation of State (soft-SAFT<sup>14</sup>) in order to simultaneously predict the liquid-vapor phase behavior, interfacial tensions and interfacial profiles of some pure compounds and binary mixtures. Results are presented here for experimental systems, including alkanes, alkanols, CO<sub>2</sub>, water and

other industrial relevant fluids. The obtained predictions have been tested against the available experimental data. Correlations of the influence parameter as a function of the carbon number of the compounds have been proposed for the n-alkanes and 1-alkanols families. This empowers the method with predictive power, as the correlations allow the calculations of phase and interfacial properties of compounds belonging to these families for which no experimental data is available, in a confident manner.

Results show the accuracy of the theory for predicting both, phase and interfacial properties, including surface tensions and density profiles.

This work has been financed by the Spanish government under project CTQ2008-05370/PPQ as well NANOSELECT and CEN2008-01027, a Consolider and a CENIT project, respectively, both belonging to the Programa Ingenio 2010. Computational time from the Supercomputer Center of Catalonia, CESCA, is also acknowledged.

---

\* vegal@matgas.com.

<sup>1</sup> D. B. Macleod, *Trans. Faraday Soc.* **19**, 38 (1923).

<sup>2</sup> C. F. Weinaug and D. L. Katz, *Ind. Eng. Chem.* **35**, 239 (1943).

<sup>3</sup> C. Miqueu, D. Broseta, J. Satherley, B. Mendiboure, J. Lachaise, and A. Gracia, *Fluid Phase Equilib.* **172**, 169 (2000).

<sup>4</sup> J. M. Haile, C. G. Gray, and K. E. Gubbins, *J. Chem. Phys.* **64**, 2569 (1976).

<sup>5</sup> J. Winkelmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **98**, 1308 (1994).

<sup>6</sup> F. J. Blas, E. M. del Rio, E. de Miguel, and G. Jackson, *Mol. Phys.* **99**, 1851 (2001).

<sup>7</sup> J. F. Lu, D. Fu, J. C. Liu, and Y. G. Li, *Fluid Phase Equilib.* **194-197**, 755 (2002).

<sup>8</sup> S. Tripathi and W. G. Chapman, *J. Chem. Phys.* **119**, 12611 (2003).

<sup>9</sup> D. Duque, J. C. Pàmies, and L. F. Vega, *J. Chem. Phys.* **121**, 11395 (2004).

<sup>10</sup> A. J. Queimada, C. Miqueu, I. M. Marrucho, G. M. Kontogeorgis, and J. A. P. Coutinho, *Fluid Phase Equilib.* **228-229**, 479 (2005).

<sup>11</sup> J. D. van der Waals, *J. Stat. Phys.* **20**, 197 (1976).

<sup>12</sup> J. W. Cahn and J. E. Hilliard, *J. Chem. Phys.* **28**, 258 (1958).

<sup>13</sup> J. C. Pàmies, *Bulk and Interfacial Properties of Chain Fluids, a molecular modelling approach* (PhD thesis, University Rovira i Virgili, Tarragona, Spain, 2003).

<sup>14</sup> F. J. Blas and L. F. Vega, *Mol. Phys.* **92**, 135 (1997).

## Periodically modulated centrifugal forcing of a reaction-diffusion system

Alexandra von Kameke and Alberto P. Munuzuri\*

*Group of Non Linear Physics, Facultad de Fisicas, Univ. de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain*

Active media has the astonishing ability to organize itself into patterns of different types. We chose a laboratory friendly medium, the BZ-Reaction, to study the alteration of the organization processes and timescales when a external forcing is applied. The work to be presented is divided in a numerical and an experimental part. It was shown by Pérez-Villar, Porteiro and Muñozuri<sup>1</sup> that a constant rotation influences the increase the period of active oscillating medium most probably owed to a centrifugal-force-induced increase in inhibitor dispersion that delays the appearance of the activator. In the actual study the effects of a modulated rotation on pattern development are studied. The forcing considered

here is weak so that convection and diffusion effects are comparable. As an analytic model we chose the Oregonator to secure correct representation of the oscillatory and the excitable regimes of the BZ-Reaction. The results show an alteration of the spiral tip movement depending on the modulation frequency and strength. This suggests that the forcing changes reaction dynamics dramatically.

---

\* alejandra@fmares.usc.es.

<sup>1</sup> V. Perez-Villar, J. L. F Porteiro, and A. P. Munuzuri, Phys. Rev. E **74**, 046203 (2006).



## Stochastic effects in the precision of the quorum sensing switch in *Vibrio fischeri*

Marc Weber\* and Javier Buceta

*Computer Simulation and Modeling (CoSMo) Lab & IQTC-UB, Parc Científic de Barcelona, Spain*

Bacteria like the *Vibrio fischeri* are able to sense their own cell density by means of a gene regulatory mechanism combined with chemical communication. The main regulatory pathway includes an autoinducer that diffuses out of the cell and plays the role of the chemical signal. Above a threshold value of concentration for the autoinducer in the medium, the regulatory network activates the production of the luminescent molecule Luciferase. The bacteria can monitor the cell density through the autoinducer concentration and alter their behavior. This process, called quorum sensing (QS), is achieved through an appropriate gene network architecture including two main regulatory proteins, LuxI and LuxR. We propose a model of the QS network of *Vibrio fischeri* that takes into account the minimal elements of the LuxR-LuxI network, the diffusion of the autoinducer and the cell growth/division. Such

a model exhibits the most important features of the quorum sensing mechanism, i.e. a switch behavior between two stable steady-states, corresponding to the low and high levels of autoinducer -or cell density- observed experimentally. In addition, the model exhibits hysteresis which can improve the robustness of the switch to fluctuations.

Next, we generalize the model to a population of  $N$  cells where each cell gets a copy of the regulatory network. By the mean of exact stochastic simulations we generate trajectories of the  $N$ -cells system and analyze the effects of the fluctuations on the precision of the quorum sensing activation in terms of critical cell density and critical concentration of autoinducer.

---

\* mweber@pcb.ub.cat.

## Size selectivity of binary mixtures in cylindrical pores

A. González<sup>†</sup>, J. A. White,<sup>†,‡,\*</sup> F. L. Román<sup>†,§</sup>, and S. Velasco<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca*

<sup>‡</sup>*IUFFyM, Universidad de Salamanca*

<sup>§</sup>*Departamento de Física Aplicada, Escuela Politécnica Superior de Zamora, Universidad de Salamanca, 49022 Zamora*

A few years ago, Gouling and coworkers<sup>1</sup> examined the size selectivity of narrow pores within the framework of density functional theory (DFT). In particular they considered a ternary hard-sphere mixture in an infinite cylindrical pore, showing that purely steric (excluded volume) effects can lead to strong size selectivity. This simple model has direct application to the physics of biological ion channels<sup>2</sup> where selectivity arises from the balance of electrostatics and steric effects. In this context, Roth and Gillespie<sup>3</sup> have also considered different entropic mechanisms that lead to size selectivity in ion channels.

In the present work we show that a simple model consisting of a hard-sphere binary mixture in a hard cylindrical nanopore can also lead to strong size selectivity by considering different radii  $R_{\text{pore},i}$  of the cylinder for each species. This implies that the external potential depends on the species  $i$ , namely,  $V_{\text{ext},i} = 0$  if  $r < R_{\text{pore},i} - \sigma_i$  and  $V_{\text{ext},i} = \infty$  if  $r > R_{\text{pore},i} - \sigma_i$  where  $r$  is the distance from the center of the hard-sphere to the axis of the cylinder and  $\sigma_i$  is the diameter of the hard-sphere. A DFT analysis of the model is made by using the original version of the Fundamental Measures Theory (FMT) of Rosenfeld<sup>4</sup> although more elaborated versions of the FMT<sup>5</sup> have been shown to give similar results. We work in the grand-canonical ensemble by assuming that the cylinder can exchange particles with a reservoir characterized by the bulk packing fractions  $\eta_{b,i}$ 's.

In order to determine which species is preferentially absorbed in the pore we define the absorbance of species  $i$  to be the ratio  $\xi_i = \bar{\eta}_i/\eta_{b,i}$  where  $\bar{\eta}_i$  is the average packing fraction of species  $i$  within a pore of radius  $R_{\text{pore},i}$ .

In Fig. 1 we present our DFT results for the selectivity of species 1 over species 2, defined as  $\xi_{12} = \xi_1/\xi_2$ . With this definition, species 1 is selected preferentially over species 2 if  $\xi_{12} > 1$ . Species 1 consists of big particles of diameter  $\sigma_1$  and species 2 consists of small particles of diameter  $\sigma_2 = \sigma_1/2$ . In Fig. 1a we consider a situation where  $R_{\text{pore},1} = 0.80\sigma_1$  and  $R_{\text{pore},2} = 0.55\sigma_1$  and we observe how the big particles (species 1) are preferentially absorbed over the smaller ones. The opposite happens in Fig. 1c where the small particles are selected over the large ones. In Fig. 1b we see that a situation with equal radii lead to similar absorbances for both species. Clearly, this behavior is related to the fact that the species with more free-volume available is preferentially selected by the pore.

We are grateful for financial support from the Ministerio de Educación y Ciencia of Spain under grant FIS2006-03764/FEDER.

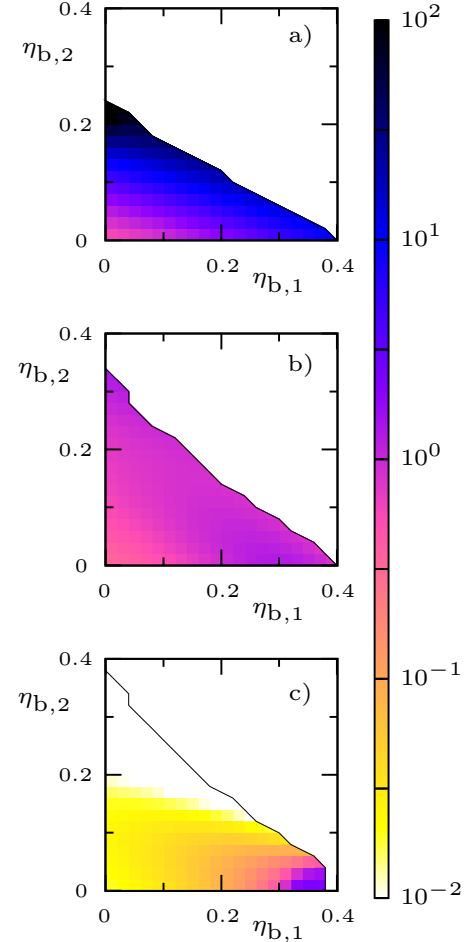


Figura 1. Selectivity  $\xi_{12} = \xi_1/\xi_2$  for a hard-sphere mixture in a cylindrical pore.  $\sigma_2 = \sigma_1/2$ . a)  $R_{\text{pore},1} = 0.80\sigma_1$ ,  $R_{\text{pore},2} = 0.55\sigma_1$ . b)  $R_{\text{pore},1} = 0.80\sigma_1$ ,  $R_{\text{pore},2} = 0.80\sigma_1$ . c)  $R_{\text{pore},1} = 0.55\sigma_1$ ,  $R_{\text{pore},2} = 0.80\sigma_1$ .

\* white@usal.es.

<sup>1</sup> D. Gouling, J.-P. Hansen, and S. Melchionna, Phys. Rev. Lett. **85**, 1132 (2000).

<sup>2</sup> D. Boda, *et al.*, Biophys. J. **93**, 1960 (2007); B. Eisenberg, PNAS **105**, 6211 (2008).

<sup>3</sup> R. Roth and D. Gillespie, Phys. Rev. Lett. **95**, 247801 (2005).

<sup>4</sup> Y. Rosenfeld, Phys. Rev. Lett. **63**, 980 (1989).

<sup>5</sup> J. A. Cuesta, Y. Martínez-Ratón, and P. Tarazona, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 11965 (2002).

## Chaotic transient dynamics in a semiconductor laser with optical feedback

J. Zamora-Munt\*, C. Masoller, and J. Garcia-Ojalvo

*Departament de Física i Enginyeria Nuclear, Universitat Politècnica de Catalunya, Colom 11, E-08222 Terrassa, Barcelona*

We study numerically the dynamical behaviour of a semiconductor laser with optical feedback, using the well known Lang-Kobayashi model<sup>1</sup>. This model is a set of delay-differential equations with a rich variety of dynamics. In particular, the system shows a chaotic dynamical regime called low frequency fluctuations (LFF), which consists of sudden intensity dropouts at irregular times. Interestingly, this regime is transitory for a large range of realistic parameters<sup>2,3</sup> (Fig. 1). In order to characterize this feature, we define the transient time as the time taken by the total intensity fluctuations to decrease below a chosen threshold (2% of the total intensity in our case), which occurs when the system leaves the chaotic attractor and falls into a stable fixed point.

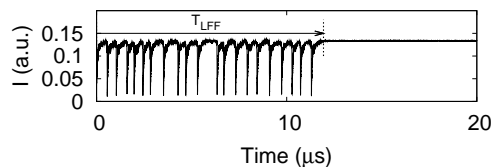


Figure 1. Time trace of the chaotic transient dynamics with noise. The laser intensity stabilizes in the stationary state after 11.9  $\mu\text{s}$ . The arrow shows the transient time.

The transient time is very sensitive to the initial conditions and its probability distribution function has an exponential tail for large enough transient times, as shows Fig. 2. We find that noise does not affect the average transient time or its distribution.

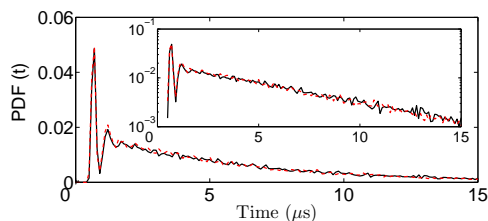


Figure 2. Probability distribution function of the transient time for 30000 realizations without noise (solid line) and with noise (dashed line). Normalized injection current is 1.02 (i.e. above the current threshold of the solitary laser) and the feedback strength is  $30 \text{ ns}^{-1}$ .

We present an in-depth numerical analysis of this regime, by investigating the influence of different parameters such as the feedback strength, gain saturation and noise (Fig. 3) in the statistical properties of this transient dynamics. Also, we conclude that for realistic values of noise the probability to reach the stationary state does not change, while for large enough noise levels the system can escape from this state. On the other hand, gain saturation increases the average transient time, i.e. it extends the LFF regime, while the feedback strength reduces this transient time.

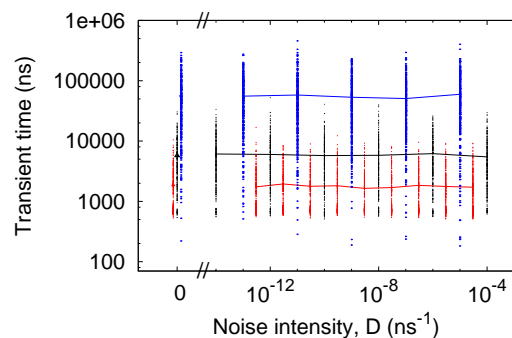


Figure 3. Transient time (dots) for 300 realizations as a function of the noise intensity for different current intensity and feedback strength ( $J; \kappa_{fb}$ ). From top to bottom:  $(1.02; 15 \text{ ns}^{-1})$ ,  $(1.02; 30 \text{ ns}^{-1})$  and  $(0.98; 30 \text{ ns}^{-1})$ . Solid line is for the average transient time for each noise intensity.

\* jordi.zamora.munt@upc.edu.

<sup>1</sup> R. Lang and K. Kobayashi, IEEE J. Quantum Electron. **16**, 347 (1980).

<sup>2</sup> R. L. Davidchack, Y. Lai, A. Gavrielides, and V. Kovanis, Physica D **145**, 130 (2000).

<sup>3</sup> A. Torcini, S. Barland, G. Giacomelli, and F. Marin, Phys. Rev. A. **74**, 063801 (2006).

## Studying delays propagations in aeronautical networks through PageRank

Massimiliano Zanin\*, Miguel Cea, and Samuel Cristóbal

Innaxis Foundation & Research Institute, Velázquez 157, 28002 Madrid

As long as transportation networks - be them physical or informational - are becoming an essential part of our societies, the study of the behavior of such systems is attracting more and more interest, with the aim of finding more efficient and secure operations. A clear example is the air transportation network, for which the European Union forecasts a growth of a 220% before year 2030<sup>1</sup>. In this contribution we analyze how a specific kind of delay propagates through the network, i.e. the *reactionary delays*: that is when a flight arrives late at the destination airport, and that delay is propagated to the following flight, due to the limited time available on the ground to execute the required operations.

For that purpose we are going to use a modified version of the well known PageRank algorithm<sup>2</sup>. Initially developed to calculate the importance of web pages in a search engine, it has demonstrate its usefulness in different applications<sup>3,4</sup>. This algorithm is constructed upon agents, which at each iteration move to a node connected with the actual one (a neighbor) with a probability defined as a function of the weight structure of the network; with a certain fixed probability, they can also be moved to a new random node. The number of time a node is visited by an agent is proportional to its significance in the network (i.e. its centrality), and can be obtained by mean of the following equation:

$$PR_i = \frac{d}{N} + (1-d) \sum_t \frac{PR_t}{k_t} \quad (1)$$

where  $PR_i$  is the centrality of node  $i$  (or its PageRank number),  $d$  is the probability to place the agent in a new random node,  $N$  is the number of nodes in the network, and  $k_t$  is the degree of node  $t$ .

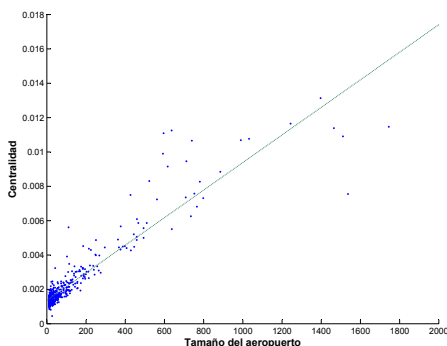


Figura 1. Centrality values for the 464 European airports, as a function of its size (number of daily operations).

In our application, the parameter  $d$  has been tuned to obtain movement sequences with a mean length of 4 flights: we estimate this value by studying the real operation of airlines, obtained via airport web pages.

We consider that an airport  $B$  is sensitive to another airport  $A$  proportionally to the number of agents covering the route  $A \rightarrow B$ : that sensitivity is in turn representative of the probability of reactionary delays propagation. Using real traffic data of the 464 main commercial European airports we have obtained the results of Fig. 1 and 2. Clearly the biggest airports are the most critical part of the system: nevertheless, it is interesting to note as also many medium-sized airports contribute to the dynamics of the network, and therefore in the dynamics of delays propagation.

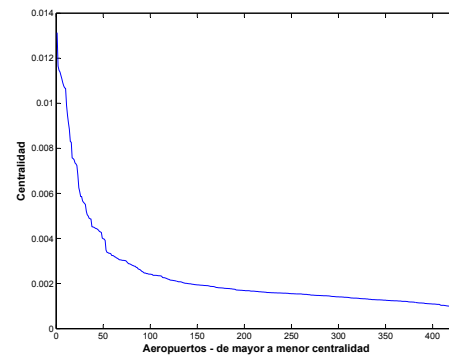


Figura 2. Centrality of airports, in a descending order.

This kind of information is of utmost importance for strategic decision taking, as it allows a more rational resources allocation to certain nodes of the system that are acting as bottle necks. At the same time, this is an interesting example of interdisciplinary research, where a physical-mathematical algorithm is applied to a real system, with the aim to improve its efficiency.

\* mzanin@innaxis.org.

<sup>1</sup> The EUROCONTROL Statistics and Forecast Service, Flight Movements 2008 - 2030 (STATFOR, 2008).

<sup>2</sup> S. Brin and L. Page, Computer Networks and ISDN Systems **30**, 107 (1998).

<sup>3</sup> P. Chen, H. Xie, S. Maslov, and S. Redner, Journal of Informetrics **1**, 1 (2007).

<sup>4</sup> N. Perra, V. Zlatic, A. Chessa, C. Conti, D. Donato, and G. Caldarelli, arXiv 0807.4325 (2008).

## Embedding time in complex networks

Massimiliano Zanin\*, Miguel Cea, and Samuel Cristóbal  
*Innaxis Foundation & Research Institute, Velázquez 157, 28002 Madrid*

The understanding of the topology and dynamics of complex networks has been a cornerstone in the study of many real and virtual systems which exhibit complex interactions between their elements<sup>1,2</sup>.

At the same time, less efforts have been focused in how to embed time inside a complex network. If data about the evolution of the network was available, the solution has usually been to track the evolution of some topological metric in consecutive time windows; on the other side, other authors have studied how the internal dynamics of the system can affect the structure: what is called an adaptive complex network<sup>3</sup>.

Here we want to propose a different approach which is especially useful when analyzing transportation networks. In such systems, time can be found in two forms: (i) a *scheduling*, which defines when a given link is activated, and (ii) a travel time, as long as movements inside the network are not instantaneous. To handle such situations, we developed an extension of complex Networks which includes the previous characteristics inside the adjacency matrix: what we call a scheduled Network<sup>4</sup>. Besides the *main nodes*, which are the classical nodes of the system, a certain number of *secondary nodes* are created for each link, to account for the travel time. At the same time, a part of the whole adjacency matrix is defined as time-dependent, to dynamically activate or deactivate connections. An example can be seen in Fig. 1. In the left image is shown a (static) complex Network with two links, each one defined with a length; in the center, the corresponding scheduled Network is constructed: note the 5 *secondary nodes* added to represent the travel time; in the right, the same network is plotted, but with all links deactivated.

A wide set of measures can be defined based on such network structure: and many of them are the result of a transformation from a distance-based to a time-based domain. Moreover, some dynamical aspects of the system can be described with ad-hoc calculations: for example, the number of alternative paths available connecting two

nodes in a given time window, the mean cost (expressed in time) to go from one node to another, or the centrality of a node, measured as the increase of the mean travel cost if such node is deleted from the network. Of special interest in transportation networks is the study of uncertainty: by varying the scheduling information it is possible to simulate delays or jams, and see how those events affect the travel cost.

While we have focused in transportation networks as a guide example, the formalism we propose can indeed be applied to many other contexts. For example, biological networks, where some interactions can occur only in fixed sequences; financial networks, resulting from tracking interactions between different firms in time; or business planning, where projects can be seen as a collections of operations, each one with a time duration and initial conditions, linked in some logical (and complex) sequences.

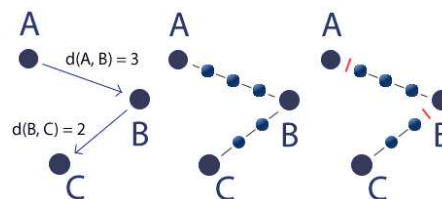


Figura 1. Example of the construction of a scheduled networks.

\* mzanin@innaxis.org

<sup>1</sup> S. Boccaletti, V. Latora, Y. Moreno, M. Chavez and D.-U. Hwang, Phys. Rep. **424**, 175 (2006).

<sup>2</sup> arXiv:0711.3199v2 [physics.soc-ph] (2007).

<sup>3</sup> T. Gross and B. Blasius, J. Royal Soc. - Interf. **5**, 259 (2008).

<sup>4</sup> M. Zanin, L. Lacasa, and M. Cea, Chaos **19**, 023111 (2009).

## Efecto de la vibración en la formación de atascos en la descarga de un silo

Cristian Mankoc<sup>†</sup>, Angel Garcimartín<sup>†</sup>, Iker Zuriguel<sup>†\*</sup>, Luis A. Pugnaloni<sup>†‡</sup> y Diego Maza<sup>†</sup>

<sup>†</sup>Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra, E-31080 Pamplona

<sup>‡</sup>Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, (CONICET La Plata-UNLP),  
Casilla de correo 565, 1900 La Plata, Argentina

Los medios granulares presentan comportamientos antiintuitivos que hacen que su estudio resulte interesante<sup>1</sup>. Así, para mantener un estado dinámico como un flujo granular, es necesario un aporte continuo de energía ya que las colisiones entre los granos son disipativas. De lo contrario el elevado número de colisiones causa una rápida disipación de la energía que detiene el movimiento de las partículas. En ocasiones, esta naturaleza disipativa de los medios granulares provoca que incluso con un suministro constante de energía se puedan producir atascos.

Un ejemplo clásico de un sistema que tiende a atascarse es un silo descargado por gravedad. Aunque las partículas pueden fluir a través del orificio de salida, si el tamaño de éste no es significativamente mayor que el de las partículas, la formación de un arco puede detener el flujo definitivamente<sup>2,3</sup>.

En los últimos años se ha producido un debate sobre si existe o no un tamaño crítico de orificio por encima del cual el atasco no es posible. Aunque en silos bidimensionales la respuesta no es clara, en tres dimensiones y para el caso de partículas esféricas, parece que para orificios mayores que 5 veces el tamaño de la partícula, no se producen atascos<sup>3</sup>. Para orificios menores, los atascos aumentan su frecuencia a medida que se disminuye el tamaño del orificio.

Los atascos se pueden estudiar a partir de los tamaños de las avalanchas definidos como el número de partículas que fluyen a través del orificio entre dos atascos consecutivos. La distribución de estos tamaños revela una caída exponencial que puede ser entendida mediante un modelo de percolación unidimensional si cada grano pasa por el orificio (sin atascarlo) con una probabilidad  $p$ . Esta probabilidad  $p$  debe ser constante durante toda la avalancha y para diferentes avalanchas obtenidas con

la misma relación de aspecto entre tamaños de orificio y partículas<sup>2,3</sup>.

En los silos industriales es común la aplicación de vibraciones (locales o globales) para eliminar los atascos que se dan durante la descarga<sup>4</sup>. Aunque en general este sistema funciona bastante bien, en ocasiones no es del todo eficaz ya que el flujo continua deteniéndose; eso sí, con menor frecuencia que en silos sin vibraciones. En principio se podría especular que la reducción en la formación de atascos en silos vibrados se puede deber a dos mecanismos: (i) un descenso en el número de arcos que se forman encima del orificio y (ii) la pérdida de estabilidad de esos arcos que, aunque se forman, no son lo suficientemente robustos como para soportar la vibración y se rompen. En este trabajo presentamos resultados experimentales de la distribución de avalanchas para silos vibrados y no vibrados. Estos resultados se interpretarán mediante un modelo basado en la introducción de un nuevo parámetro relacionado con la estabilidad de los arcos. Este modelo nos permitirá descubrir que el segundo mecanismo mencionado anteriormente es el principal responsable de la disminución de la probabilidad de encontrar atascos completamente estables.

---

\* iker@fisica.unav.es.

<sup>1</sup> J. Duran, *Sands, powders and grains* (Springer-Verlag, New York, 1999).

<sup>2</sup> I. Zuriguel, L. A. Pugnaloni, A. Garcimartín y D. Maza, *Phys. Rev. E* **68**, 030301(R) (2003).

<sup>3</sup> I. Zuriguel, A. Garcimartín, D. Maza, L. A. Pugnaloni y J. M. Pastor, *Phys. Rev. E* **71**, 051303 (2005).

<sup>4</sup> P. Evesque y W. Meftah, *Int. J. Mod. Phys. B* **7**, 1799 (1993).

## Compactación de un medio granular vibrado verticalmente

Iván Sánchez<sup>†‡</sup>, Iker Zuriguel<sup>†</sup>, Diego Maza<sup>†</sup>, Paula Gago<sup>§</sup> y Luis Pughaloni<sup>§</sup>

<sup>†</sup>Departamento de Física y Matemática Aplicada, Universidad de Navarra, 31008 Pamplona

<sup>‡</sup>Centro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, Apartado Postal 21827, Caracas 1020-A, Venezuela

<sup>§</sup>Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CC 67, 1900 La Plata, Argentina

Muchos procesos industriales donde se manejan granos ven afectado su funcionamiento por el grado de compactación que tenga el conjunto granular. Además de por su importancia desde un punto de vista aplicado, poder predecir el estado de compactación final de un conjunto de granos es un reto que persigue la física de los medios granulares por el papel que juega este parámetro en la descripción de un medio granular desde la mecánica estadística.

Se presenta un estudio experimental de la compactación de un conjunto de granos, sometidos a perturbaciones verticales periódicas (batidos). Los granos son colocados en un recipiente de acrílico de modo que se forme una capa quasi-bidimensional de esferas monodispersas. Un vibrador electromagnético genera los batidos verticales, cada uno de los cuales consiste en un ciclo de seno completo, cuya máxima aceleración es monitorizada con un acelerómetro. El grado de compactación de los granos se mide a través de la fracción de empaquetamiento  $\phi$ , definida como el área ocupada por los granos entre el área aparente. Para determinar  $\phi$  se realizan fotografías de alta resolución del recipiente y, aplicando técnicas estándar de análisis de imágenes, se determinan los centros de todas las partículas. La fracción de empaquetamiento se mide tras realizar suficientes batidos como para que se alcance un valor estacionario. Para caracterizar la intensidad de la vibración usamos un parámetro  $A$  que es la elevación máxima relativa del centro de masas del conjunto de granos durante un batido respecto a su altura en reposo.

Encontramos que la fracción de empaquetamiento muestra un comportamiento no monótono con la intensidad de batido (ver Fig. 1). Ese comportamiento no monótono se ve afectado por las características disipativas del medio granular estudiado. Nuestros

resultados confirman las predicciones de simulaciones numéricas recientemente publicadas<sup>1</sup>.

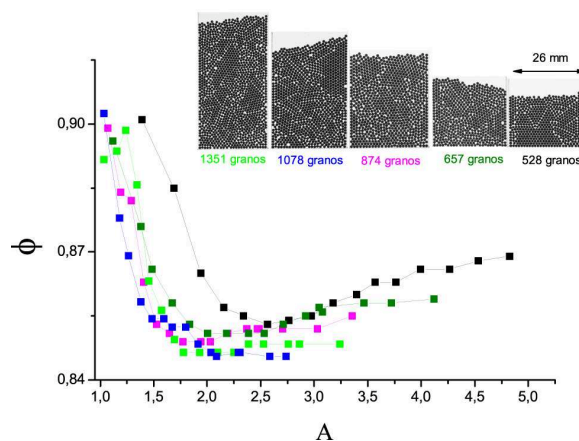


Figura 1. Dependencia de la fracción de empaquetamiento estacionaria  $\phi$  de un medio granular sometido a batidos verticales, con la intensidad de vibración medida a través del parámetro  $A$  descrito en el texto. Se observa un comportamiento no monótono de  $\phi$  especialmente notorio para una altura de columna pequeña, asociada a una baja disipación de energía.

<sup>1</sup> L. A. Pughaloni, M. Mizrahi, C. M. Carlevaro y F. Vericat, Phys. Rev. E **78**, 051305 (2008).





Parte IV  
**Índice de Autores**



## Índice de Autores

- Abad, E., 51, 66  
Abascal, J. L. F., 47, 52  
Acevedo Escalante, M. F., 53  
Adams, M. J., 141  
Aguilella-Arzo, M., 84  
Aguirre, J., 68, 69  
Alava, M., 42, 121, 124  
Almarza, N. G., 87, 88, 109, 114  
Almenar, L., 54, 55  
Álvarez-Lacalle, E., 56, 57, 63  
Andreu, J. S., 58  
Aragonés, J. L., 47, 59  
Arrayás, M., 60
- Bacelar, F. S., 154  
Balboa Usabiaga, F., 61, 81  
Ballenegger, V., 153  
Baronchelli, A., 132  
Barriga, M., 63  
Bascompte, J., 29  
Becerra Alonso, D., 62  
Benítez, R., 63  
Bitlloch, P., 64  
Blanch, C., 65, 92, 93  
Blas, F. J., 36, 108  
Bonachela, J. A., 41, 124  
Borrego Marín, R., 51, 66  
Bragard, J., 145  
Bravo Yuste, S., 66, 110  
Brey, J. J., 15, 89  
Brito, R., 146  
Brugués, J., 92, 93  
Buceta, J., 28, 161  
Budde, C. E., 143  
Builes, S., 67  
Buldú, J. M., 68
- Calabrese, J. M., 46, 154  
Calero, C., 84  
Calvo Hernández, A., 40  
Campelo, F., 18  
Campos, D., 27  
Canela-Xandri, O., 28  
Cantalapiedra, I. R., 57, 135, 145  
Capitán, J. A., 29, 69  
Carballido-Landeira, J., 70, 96  
Cartwright, J. H. E., 33, 152  
Casademunt, J., 28, 64, 65, 92, 93  
Casanellas, L., 71  
Castro, M., 75  
Cea, M., 164, 165  
Cerdá, J. J., 153  
Chacón, E., 34, 79, 116  
Checa, A. G., 33  
Chembo Kouomou, Y., 128  
Cheng, Z., 157
- China Manrique de Lara, A., 72  
Christian Holm., 153  
Clément, E., 103  
Colet, P., 73, 74, 102, 127, 128  
Conde, M. M., 47, 115  
Copelli, M., 112  
Córdoba, A., 107  
Corominas, I., 121  
Cosenza, M. G., 94  
Cristóbal, S., 164, 165  
Cruz Hidalgo, R., 30, 104  
Cuerno, R., 75  
Cuesta, J. A., 29, 69, 147  
Cuetos, A., 20, 76  
Cugliandolo, L. F., 16  
Cuiñas, D., 77  
Curto Risso, P. L., 40
- de Gregorio, R., 36  
de la Lama, M. S., 151  
de la Torre, J. A., 107  
de las Heras, D., 78  
de Miguel, E., 80  
de Soto, F., 31  
de Vicente, J., 129  
Delgado-Buscalioni, R., 61, 79  
Dietrich, S., 54, 55  
Domínguez, A., 32  
Dopazo-Paz, A., 91  
Duque, D., 81
- Echebarría, B., 56, 57, 135, 145  
Echenique, P., 43  
Eguíluz, V. M., 94  
Escribano, B., 33  
Estrada, C. D., 144
- Fajardo, O. Y., 82  
Falo, F., 43, 83  
Faraudo, J., 84  
Fernández, E. M., 34  
Fischer, I., 73  
Fraga, P., 86
- Gago, P., 167  
Galeano, J., 86, 131  
Galindo, A., 20, 108  
Gallardo, A., 87  
García de Soria, M. I., 89, 118  
García-Ojalvo, J., 163  
Garcimartín, A., 103, 166  
Garçon, V., 39  
Giuliani, M., 35  
Goethe, M., 90  
Gollo, L. L., 112  
Gómez-Álvarez, P., 91  
Gómez-Gardeñes, J., 43

Gomila, D., 102  
González, A., 162  
González, M. A., 52  
González-Avella, J. C., 94  
González-Salgado, D., 91, 122  
González-Viñas, W., 35  
Gordillo, M. C., 31  
Grassberger, P., 17  
Grimm, V., 46, 154  
Guàrdia, E., 150  
Guiu Souto, J., 96

Hallerberg, S., 97  
Heinsalu, E., 98  
Hernández-Carrasco, I., 99  
Hernández-García, E., 39, 98, 99, 105, 133, 154, 155  
Hernández-Machado, A., 18, 106, 140  
Hidalgo-Álvarez, R., 19  
Hörger, I., 100  
Hurtado, A., 141

Ilyin, V., 152  
Iriondo, J. M., 86, 131  
Isern, N., 101

Jackson, G., 20, 108  
Jacobo, A., 102  
Janda, A., 103  
Juan Cinca, J., 63

Kanzaki Cabrera, T., 104  
Kinouchi, O., 112  
Kolb, E., 103  
Komin, N., 105

Lacasa, L., 37  
Lafuerza, L. F., 85  
Lahoz-Beltrá, R., 129  
Lanuza, J., 103  
Larger, L., 128  
Laurson, L., 121  
Ledesma-Aguilar, R., 106  
Legido, J. L., 122  
Leif Hove-Madsen, L., 63  
Lemos, M. C., 107  
Llach, A., 63  
Llovel, F., 108  
Lomba, E., 87, 109  
López de Haro, M., 38, 110  
López, C., 39, 46, 98, 99, 156  
López, J. M., 42, 97, 134, 140, 151  
López, P., 129  
Luque, A., 111  
Luque, B., 37

MacDowell, L. G., 36, 47  
Malgaretti, P., 113  
Mancini, H., 158  
Mankoc, C., 166  
Manrubia, S. C., 68, 69  
Marcos, R. M., 159

Marguta, R. G., 114  
Martí, J., 150  
Martín, C., 87, 109  
Martín-Molina, A., 19  
Martínez, H., 116  
Martínez-Haya, B., 76  
Martínez-Ratón, Y., 78, 157  
Masoller, C., 163  
Matas Navarro, R., 117  
Matías, M. A., 102  
Maynar, P., 89, 118  
Maza, D., 30, 53, 103, 104, 166, 167  
Mazo, J. J., 82, 83, 125, 126  
McBride, C., 47  
McGraw, P., 77  
Meca, E., 119  
Medina, A., 40  
Méndez, V., 120  
Menzinger, M., 77  
Miguel, M. C., 121  
Míguez, J. M., 122  
Mirasso, C. R., 73, 74, 127  
Muñoz, M. A., 41, 46, 124  
Muñoz-García, J., 123  
Muñuzuri, A. P., 70, 77, 96, 136, 160  
Murza, A., 105

Naranjo, F., 125, 126  
Neufeld, Z., 123  
Nguindo, R. M., 127, 128  
Nicoli, M., 75  
Nodarse, R. A., 147  
Noya, E. G., 47, 95  
Nuño, J. C., 129

Olarrea, J., 129  
Olivet, A., 67  
Oreste Piro, 153  
Orlandi, J. G., 65, 92, 93  
Ortín, J., 71, 138

Páez, A., 130  
Pagonabarraga, I., 30, 104, 106, 113, 117  
Palassini, M., 90  
Parrondo, J. M. R., 21  
Pastor, J. M., 86, 131  
Pastor-Satorras, R., 132  
Patriarca, M., 133  
Patricio, P., 149  
Petrykiewicz, A., 115  
Pazó, D., 97, 134  
Peñaranda, A., 57, 135, 145  
Pérez-Vicente, C., 139  
Pérez-Villar, V., 96  
Pesquera, L., 141  
Pham, C.-T., 149  
Picallo, C. B., 42  
Pineda, M., 137, 155  
Piñeiro, M. M., 122  
Piro, O., 152  
Planet, R., 138

Pont, O., 139  
Prada-Gracia, D., 43  
Pradas, M., 140  
Procaccia, I., 152  
Pugnali, L. A., 166, 167

Quesada-Pérez, M., 19  
Quintero, N. R., 147  
Quirce, A., 141

Ramírez, R., 95  
Ramírez-Piscina, L., 64, 119  
Rauscher, M., 54, 55  
Reguera, D., 111, 142  
Revelli, J. A., 143  
Ritort, F., 22  
Robles, M., 144  
Rodríguez, M. A., 97, 134  
Rodríguez-López, P., 146  
Rojo, F., 143  
Román, F. L., 162  
Romaní, L., 91  
Romero Bastida, M., 148  
Romero Enrique, J. M., 149  
Rossi, V., 39  
Roussel, T., 44  
Rubí, M., 23  
Ruiz, X., 64

Sagués, F., 28  
Sainz-Díaz, C. I., 33  
Sala, J., 150  
San Miguel, M., 46, 94  
Sánchez, I., 167  
Sánchez, P. A., 152, 153  
Santos, A., 38, 110  
Santucci, S., 138  
Segall, K., 125  
Sesé, L. M., 95  
Sintes, T., 45, 152, 153  
Soriano, M. C., 73, 74  
Soto, R., 146  
Stich, M., 68  
Sudre, J., 39  
Sue, H.-J., 157  
Sun, D., 157

Taboada, P., 70  
Tapia-Rojo, R., 83  
Tarazona, P., 34, 79, 100, 116, 130  
Tavares, J. M., 24  
Teixeira, P. I. C., 24  
Telo da Gama, M. M., 24  
Tew Kai, E., 39  
Torral, R., 85, 105, 133, 137, 155  
Trizac, E., 118  
Trueba, J. L., 60  
Turiel, A., 99, 139

Valle, A., 141  
van der Sande, G., 73

Vázquez, F., 46, 156  
Vega, C., 47, 59, 80, 95, 115  
Vega, L. F., 44, 58, 67, 159  
Velasco, E., 78, 114, 157  
Velasco, S., 162  
Vidal, G., 158  
Vilaseca, O., 159  
von Kameke, A., 160

Weber, M., 161  
Wedekind, J., 142  
Weimerskirch, H., 39  
White, J. A., 162  
Wio, H. S., 143

Yethiraj, A., 35  
Yuste, S. B., 51

Zamora-Munt, J., 163  
Zandi, R., 111  
Zanin, M., 164, 165  
Zapperi, S., 42  
Zueco, D., 126  
Zuriguél, I., 30, 53, 166, 167



Parte V  
**Asistentes al Congreso**





1. Abad Jarillo , Enrique
  - Universidad de Extremadura
  - E-mail: eabad@unex.es
2. Acevedo Escalante, Manuel
  - Universidad de Navarra
  - E-mail: macevedo@alumni.unav.es
3. Almenar Egea, Laura
  - Max-Planck-Institute
  - E-mail: almenar@mf.mpg.de
4. Álvarez Lacalle, Enrique
  - Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: enrical@fa.upc.edu
5. Aragonés Gómez, Juan Luis
  - Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: juan@ender.quim.ucm.es
6. Arenas, Alex
  - Universitat Rovira i Virgili
  - E-mail: alexandre.arenas@urv.cat
7. Arrayás Chazeta, Manuel
  - Universidad Rey Juan Carlos
  - E-mail: manuel.arraya@urjc.es
8. Balboa Usabiaga, Florencio
  - Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: florencio.balboa@uam.es
9. Becerra Alonso, David
  - University of the West of Scotland
  - E-mail: davidba25@hotmail.com
10. Benítez Iglesias, Raúl
  - Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: raul.benitez@upc.edu
11. Bitlloch Puigvert, Pau
  - Universitat de Barcelona
  - E-mail: bitlloch@ecm.ub.es
12. Blanch Mercader, Carles
  - Universidad de Barcelona
  - E-mail: blanch@ecm.ub.es
13. Borge, Javier
  - ETSE - Universitat Rovira i Virgili
  - E-mail: javier.borge@urv.cat
14. Borrego Marín, Rafael
  - Universidad de Extremadura
  - E-mail: rafaborrego@unex.es
15. Brey Abalo, J. Javier
  - Universidad de Sevilla
  - E-mail: brey@us.es
16. Brito López, Ricardo
  - Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: brito@fis.ucm.es
17. Builes, Santiago
  - CSIC
  - E-mail: sbuiles@icmab.es
18. C. Manrubia, Susanna
  - INTA-CSIC
  - E-mail: cuevasms@inta.es
19. Cabrillo García, Carlos
  - CSIC
  - E-mail: ccabrilo@foton0.iem.csic.es
20. Campos Moreno, Daniel
  - Universidad Autónoma de Barcelona
  - E-mail: daniel.campos@uab.es
21. Canela-Xandri, Oriol
  - Co.S.Mo. LAB
  - E-mail: ocanela@pcb.ub.es
22. Cao García, Francisco Javier
  - Universidad Complutense de Madrid.
  - E-mail: francoa@fis.ucm.es
23. Capitán Gómez, José Ángel
  - Universidad Carlos III de Madrid
  - E-mail: jcapitan@math.uc3m.es
24. Carballido Landeira, Jorge
  - Universidad de Santiago de Compostela
  - E-mail: jorge.carballido@gmail.com
25. Casanellas Vilageliu, Laura
  - Universitat de Barcelona
  - E-mail: lauracasanellasvilageliu@gmail.com
26. Chacón Fuertes, Enrique
  - CSIC

- E-mail: echacon@icmm.csic.es
27. China Manrique de Lara, Alejandro
- UNED
  - E-mail: achinea6@alumno.uned.es
28. Colet Rafecas, Pere
- CSIC
  - E-mail: pere@ifisc.uib-csic.es
29. Cornelles Soriano, Miguel
- Universidad de las Islas Baleares
  - E-mail: miguel@ifisc.uib-csic.es
30. Cristóbal Centenera, Samuel
- Innaxis
  - E-mail: scristobal@innaxis.org
31. Cruz Hidalgo, Raúl
- Universidad de Gerona
  - E-mail: raul.cruz@udg.edu
32. Cuerno Rejado, Rodolfo
- Universidad Carlos III de Madrid
  - E-mail: cuerno@math.uc3m.es
33. Cuetos Menéndez, Alejandro
- Universidad de Almería
  - E-mail: acuetos@ual.es
34. Cugliandolo, Leticia F.
- Université Pierre et Marie Curie Paris VI
  - E-mail: leticia@lpthe.jussieu.fr
35. Cuiñas Vázquez, Daniel
- Universidad de Santiago de Compostela
  - E-mail: daniel.cuinas@hotmail.com
36. de las Heras Díaz-Plaza, Daniel
- Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: daniel.delasheras@uam.es
37. de Soto Borrero, Feliciano
- Universidad Pablo de Olavide
  - E-mail: fsotbor@upo.es
38. Delgado Buscalioni, Rafael
- Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: rafael.delgado@uam.es
39. de Miguel, Enrique
- Universidad de Huelva
- E-mail: demiguel@uhu.es
40. Domínguez Álvarez, Álvaro
- Universidad de Sevilla
  - E-mail: dominguez@us.es
41. Duque, Daniel
- Universidad Politécnica de Madrid
  - E-mail: daniel.duque@upm.es
42. Escribano Salazar, Bruno
- CSIC–Universidad de Granada
  - E-mail: bruno@lec.csic.es
43. Fajardo, Oscar Yovany
- Universidad de Zaragoza
  - E-mail: yovany@unizar.es
44. Falo Forniés, Fernando
- Universidad de Zaragoza
  - E-mail: fff@unizar.es
45. Faraudo Gener, Jordi
- CSIC
  - E-mail: jordi.faraudo@gmail.com
46. Fernández Abascal, José Luis
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: abascal@quim.ucm.es
47. Fernández Lafuerza, Luis
- CSIC-Universidad de las Islas Baleares
  - E-mail: luis@ifisc.uib-csic.es
48. Fernández Sánchez, Eva María
- CSIC
  - E-mail: efernand@icmm.csic.es
49. Galeano Prieto, Javier
- Universidad Politécnica de Madrid
  - E-mail: javier.galeano@upm.es
50. Gallardo Sanz, Alberto
- CSIC
  - E-mail: a.gallardo@iqfr.csic.es
51. García Almarza, Noé
- CSIC
  - E-mail: noe@iqfr.csic.es
52. García de Soria Lucena, María Isabel
- Universidad de Sevilla

- E-mail: gsoria@us.es
53. Garrido, Pedro L.
- Universidad de Granada
  - E-mail: garrido@onsager.ugr.es
54. Giuliani, Maximiliano Andrés
- Universidad de Navarra
  - E-mail: mgiuliani@alumni.unav.es
55. Goethe, Martin Johannes
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: martingoethe@gmx.de
56. Gómez Álvarez, Paula
- Universidad de Vigo
  - E-mail: ga\_paula@uvigo.es
57. Gómez Gardeñes, Jesús
- Universidad Rey Juan Carlos
  - E-mail: gardenes@gmail.com
58. Gómez Jiménez, Sergio
- Universitat Rovira i Virgili
  - E-mail: sergio.gomez@urv.cat
59. Gómez Orlandi, Javier
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: dherkova@gmail.com
60. González Avella, Juan Carlos
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: juancarlos@ifisc.uib-csic.es
61. González González, Miguel Ángel
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: miguelangel.gonz20@gmail.com
62. González MacDowell, Luis
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: luis@ender.quim.ucm.es
63. González Noya, Eva
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: eva.noya@gmail.com
64. Gordillo Bargueño, María Carmen
- Universidad Pablo de Olavide
  - E-mail: cgorbar@upo.es
65. Grassberger, Peter
- Forschungszentrum Juelich
- E-mail: p.grassberger@fz-juelich.de
66. Guàrdia, Elvira
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: elvira.guardia@upc.es
67. Guiu Souto, Jacobo
- Universidad de Santiago de Compostela
  - E-mail: xakogs@hotmail.com
68. Hallerberg, Sarah
- CSIC-Universidad de Cantabria
  - E-mail: sarah@ifca.unican.es
69. Heinsalu, Els
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: els@ifisc.uib-csic.es
70. Hernández Machado, Aurora
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: a.hernandezmachado@gmail.com
71. Hidalgo Álvarez, Roque
- Facultad de Ciencias, Universidad de Granada
  - E-mail: rhidalgo@ugr.es
72. Hörger, Inés
- Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: ines.horger@uam.es
73. Isern Sardó, Neus
- Universitat de Girona
  - E-mail: neus.isern@udg.edu
74. Jackson, George
- Imperial College London
  - E-mail: g.jackson@imperial.ac.uk
75. Jacobo, Adrián
- CSIC–Universitat de les Illes Balear
  - E-mail: ajacobo@ifisc.uib-csic.es
76. Janda Galán, Álvaro
- Universidad de Navarra
  - E-mail: ajandaga@alumni.unav.es
77. Jiménez Blas, Felipe
- Universidad de Huelva
  - E-mail: felipe@uhu.es
78. Kanzaki Cabrera, Takeichi
- Universitat de Girona

- E-mail: tkanzakic@gmail.com
79. Komin, Niko
- CSIC–Universitat de les Illes Balear
  - E-mail: niko@ifisc.uib-csic.es
80. Lacasa Saiz de Arce, Lucas
- Universidad Politécnica de Madrid
  - E-mail: lucas\_lacasa@yahoo.es
81. Ledesma Aguilar, Rodrigo
- Universidad de Barcelona
  - E-mail: ra.ledesma@gmail.com
82. Lemos Fernández, María del Carmen
- Universidad de Sevilla
  - E-mail: lemos@us.es
83. Llovell, Fèlix
- Imperial College London
  - E-mail: f.llovell@imperial.ac.uk
84. Lomba García, Enrique
- CSIC
  - E-mail: E.Lomba@iqfr.csic.es
85. López de Haro, Mariano
- Universidad de Extremadura
  - E-mail: malopez@servidor.unam.mx
86. López Martín, Juan Manuel
- CSIC–Universidad de Cantabria
  - E-mail: lopez@ifca.unican.es
87. López Sánchez, Cristóbal
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: clopez@ifisc.uib-csic.es
88. Luque Santolaria, Antoni
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: luque@ffn.ub.es
89. Luque Serrano, Bartolo
- Universidad Politécnica de Madrid
  - E-mail: bartolome.luque@upm.es
90. Luque Serrano, Jordi
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: luque@tsc.upc.edu
91. Lyra Gollo, Leonardo
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
- E-mail: leonardo@ifisc.uib-csic.es
92. Margaretti, Paolo
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: paolomargaretti@correu.ffn.ub.es
93. Marcos, Rosa M.
- Universitat Rovira i Virgili
  - E-mail: rosa.marcos@urv.cat
94. Marguta, Ramona Georgeta
- Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: rmarguta@iqfr.csic.es
95. Martín Álvarez, Claudio
- CSIC
  - E-mail: cma@iqfr.csic.es
96. Martín Conde, María
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: maria@ender.quim.ucm.es
97. Martín del Río, Elvira
- Universidad de Huelva
  - E-mail: elvira@uhu.es
98. Martínez Bennassar, Héctor
- Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: hector.martinez@uam.es
99. Martínez Ratón, Yuri
- Universidad Carlos III de Madrid
  - E-mail: yuri@math.uc3m.es
100. Matas Navarro, Ricard
- Universidad de Barcelona
  - E-mail: ricardmn@ffn.ub.es
101. Maynar Blanco, Pablo
- Universidad de Sevilla
  - E-mail: maynar@us.es
102. Maza, Diego
- Universidad de Navarra
  - E-mail: dmaza@unav.es
103. Meca Álvarez, Esteban
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: esteban@fa.upc.edu
104. Medina Domínguez, Alejandro
- Universidad de Salamanca

- E-mail: amd385@usal.es
105. Méndez, Vicenç
- Universidad Autónoma de Barcelona
  - E-mail: vicenc.mendez@uab.es
106. Miguel, M. Carmen
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: carmen.miguel@ub.edu
107. Míguez Díaz, José Manuel
- Universidad de Vigo
  - E-mail: miguezjm@uvigo.es
108. Muñoz García, Javier
- University College Dublin
  - E-mail: javiermunozgarcia@gmail.com
109. Muñoz Martínez, Miguel Ángel
- Universidad de Granada
  - E-mail: mamunoz@onsager.ugr.es
110. Naranjo Mayorga, Fernando
- Universidad de Zaragoza
  - E-mail: fnmtunja@unizar.es
111. Nguimdo, Romain Modeste
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: modeste1981@yahoo.fr
112. Nuño, Juan Carlos
- Universidad Politécnica de Madrid
  - E-mail: juancarlos.nuno@upm.es
113. Olarrea Busto, José
- Universidad Politécnica de Madrid
  - E-mail: jose.olarrea@upm.es
114. Ortega Cejas, Vicente
- Universitat Autònoma de Barcelona
  - E-mail: vicente.ortega@uab.cat
115. Páez Jiménez, Alfonso
- Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: alfonso.paez@uam.es
116. Pagonabarraga, Ignacio
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: ipagonabarraga@ub.edu
117. Parrondo, Juan M. R.
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: parrondo@fis.ucm.es
118. Pastor Ruiz, Juan Manuel
- Universidad Politécnica de Madrid
  - E-mail: juanmanuel.pastor@upm.es
119. Pastor Satorras, Romualdo
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: romualdo.pastor@upc.edu
120. Patriarca, Marco
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: marco.patriarca@ifisc.uib-csic.es
121. Patti, Alessandro
- Universidad de Utrecht
  - E-mail: a.patti@uu.nl
122. Pazó Bueno, Diego
- CSIC-Universidad de Cantabria
  - E-mail: pazo@ifca.unican.es
123. Peñaranda Ayllon, Angelina
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: angelina@fa.upc.edu
124. Pérez Muñuzuri, Alberto
- Universidad de Santiago de Compostela
  - E-mail: uscfmapm@cesga.es
125. Pérez Vicente, Conrad J.
- Universidad de Barcelona
  - E-mail: conrad@fn.ub.es
126. Picallo González, Clara
- Universidad de Cantabria
  - E-mail: picallo@ifca.unican.es
127. Pineda Rodríguez, Miguel Arnaldo
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: mpineda@ifisc.uib-csic.es
128. Piñeiro, Manuel M.
- Universidade de Vigo
  - E-mail: mmpineiro@uvigo.es
129. Planet Latorre, Ramón
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: rplanet@ecm.ub.es
130. Prada Gracia, Diego
- Universidad de Zaragoza

- E-mail: dprada@unizar.es
131. Pradas Gené, Marc
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: marc.pradas@gmail.com
132. Prados Montaña, Antonio
- Universidad de Sevilla
  - E-mail: majose@us.es
133. Quirce Teja, Ana
- CSIC–Universidad de Cantabria
  - E-mail: quirce@ifca.unican.es
134. Ramírez de la Piscina Millán, Laureano
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: laure@fa.upc.edu
135. Reguera López, David
- Universidad de Barcelona
  - E-mail: dreguera@ub.edu
136. Ritort Farrán, Fèlix
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: fritort@gmail.com
137. Robles, Miguel
- Universidad Nacional Autónoma de México
  - E-mail: mrp@cie.unam.mx
138. Rodríguez Cantalapiedra, Inmaculada
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: inma@fa.upc.edu
139. Rodríguez Díaz, Miguel Ángel
- CSIC–Universidad de Cantabria
  - E-mail: rodrigma@ifca.unican.es
140. Rodríguez López, Pablo
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: pablo.rodriguez@fis.ucm.es
141. Rodríguez Quintero, Niurka
- Universidad de Sevilla
  - E-mail: niurka@us.es
142. Roldán Estébanez, Edgar
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: edgar.roldan@fis.ucm.es
143. Romero Bastida, Mauricio
- Instituto Politécnico Nacional - México
- E-mail: robm66@gmail.com
144. Romero Enrique, José Manuel
- Universidad de Sevilla
  - E-mail: enorme@us.es
145. Roussel, Thomas
- CSIC
  - E-mail: thomas.j.roussel@gmail.com
146. Rubí, Miguel
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: mrubi@ub.edu
147. Ruiz Montero, María José
- Universidad de Sevilla
  - E-mail: majose@us.es
148. Sagués Mestre, Francesc
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: f.sagues@ub.edu
149. Sala Viñas, Jonas
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: jonas.sala@upc.edu
150. Sánchez de la Lama, Marta
- CSIC–Universidad de Cantabria
  - E-mail: msanchez@ifca.unican.es
151. Sintés Olives, Tomas
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: tomas@ifisc.uib-csic.es
152. Souza Bacelar, Flora
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: florabacelar@ifisc.uib-csic.es
153. Tarazona Lafarga, Pedro
- Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: pedro.tarazona@uam.es
154. Telo da Gama, Margarida M.
- Universidade de Lisboa
  - E-mail: margarid@cii.fc.ul.pt
155. Toral Garcés, Raúl
- CSIC–Universitat de les Illes Balears
  - E-mail: raul@ifisc.uib-csic.es
156. Vázquez, Federico
- CSIC–Universitat de les Illes Balears

- E-mail: federico@ifisc.uib-csic.es
157. Vega de las Heras, Carlos
- Universidad Complutense de Madrid
  - E-mail: cvega@quim.ucm.es
158. Vega, Lourdes F.
- CSIC
  - E-mail: vegal@matgas.com
159. Velasco Caravaca, Enrique
- Universidad Autónoma de Madrid
  - E-mail: enrique.velasco@uam.es
160. Vidal Cassanya, Gerard
- Universidad de Navarra
  - E-mail: gvidal@alumni.unav.es
161. Vilaseca, Oriol
- CSIC
  - E-mail: ovilaseca@gmail.com
162. von Kameke, Alexandra
- Universidad de Santiago de Compostela
  - E-mail: alexandravonkameke@yahoo.de
163. Weber, Marc
- Universitat de Barcelona
  - E-mail: marcweber0@gmail.com
164. White Sánchez, Juan Antonio
- Universidad de Salamanca
  - E-mail: white@usal.es
165. Wio, Horacio S.
- Universidad de Cantabria
  - E-mail: wio@ifca.unican.es
166. Zamora Munt, Jordi
- Universitat Politècnica de Catalunya
  - E-mail: jordi.zamora.munt@upc.edu
167. Zanin, Massimiliano
- Innaxis Foundation & Research Institute
  - E-mail: mzanin@innaxis.org
168. Zuriguel Ballaz, Iker
- Universidad de Navarra
  - E-mail: iker@fisica.unav.es