

# Experimentos numéricos en el aula sobre fenómenos difusivos: difusión anómala en sistemas físicos y biológicos

J.F. Rojas y M.A. Morales  
Fac. de Ciencias Físico Matemáticas,  
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

Recibido el 4 de junio de 2009; aceptado el 11 de enero de 2010

El fenómeno de la difusión es un tema poco revisado durante la vida estudiantil de casi cualquier físico, del mismo modo que se tocan pocas ecuaciones diferenciales parciales. Todo esto a pesar de que la gran mayoría de las ecuaciones de la física pertenecen a este conjunto. Parte del objetivo del presente trabajo es la motivación al tema mostrando, por un lado, ideas centrales y conceptos relacionados con el fenómeno de la difusión. El otro aspecto consiste en la construcción de un *experimento numérico* muy simple que permite ver la limitación de la ecuación de difusión de Einstein. El aspecto «anómalo» de la difusión aparece en sistemas que no son cerrados en general, por ejemplo, los animales en la actividad de forrajeo o la difusión de partículas en medios porosos. El experimento numérico propuesto muestra los aspectos súper y subdifusivos que se observan en estos y muchos otros sistemas.

*Descriptores:* Difusión; difusión anómala; física computacional; python; movimiento Browniano.

The diffusion phenomena and the Partial Differential Equations are topics barely reviewed in the undergraduate level of Physics. The main goal of the present work is, precisely, motivate students to study the ubiquitous diffusion phenomena showing the Einstein's model. In the other hand, we propose a very simple numerical experiment that enables us to see the original diffusion equation limitations. The character of the anomalous diffusion showed in the examples appears, in general, in open systems such as foraging walks in animals or inanimated particles moving in a porous media. The proposed numerical experiment shows the superdiffusive and subdiffusive phenomena.

*Keywords:* Anomalous diffusion; computational physics; python; Brownian motion.

PACS: 05.40.Fb, 05.40.-a, 01.50.H-, 01.50.ht

## 1. Introducción

Suele ocurrir que en la licenciatura en física, tópicos tales como la difusión, entre otros, se tocan, si acaso, de manera tangencial y, por esta razón, nos queremos referir a dos aspectos fundamentalmente en esta discusión: el primero es la posibilidad de abrir el tema y, conceptualmente, asociarlo con otros fenómenos y nuevas áreas de estudio en las que un físico podría participar. Muchos ejemplos pueden ser considerados dado el hecho de que, finalmente, se trata de una ecuación diferencial parcial que es caso particular de muchas otras. De hecho aquí discutiremos algunos aspectos del tema que lo llevan más allá: a otras áreas del conocimiento y, por lo mismo, a otro tipo de aplicaciones. El otro aspecto que nos interesa discutir aquí tiene que ver con la aplicación de software libre y la posibilidad de implementar, con algoritmos simples, programas que permitan al estudiante el acceso visual y numérico a conceptos y fenómenos que, además de ser de actualidad, son difíciles de explicar en una clase de pizarrón. De manera particular nos interesan los lenguajes estilo *script*, que son mucho menos restrictivos y elaborados para el programador, además de ser mucho más simples en su estructura y con mayores posibilidades<sup>i</sup>. Esta idea se encuentra aunada a la posibilidad del uso y reuso de software que haya sido iniciado por otras personas y que, de manera libre, circule entre usuarios que finalmente lo van enriqueciendo cada día sin más interés que el de aportar su tiempo y sus conocimientos en una construcción colectiva útil y flexible.

En este caso se trata de unir estos aspectos mediante la construcción de un *experimento numérico* que, aunado a un lenguaje sencillo de programación estilo *script*, python [1], y módulos numéricos [2] y gráficos propios del lenguaje [3], permiten hacer un programa que modele la dinámica del movimiento browniano en tres dimensiones [4]. A partir de este modelo se hacen modificaciones o agregados que permiten visualizar los otros aspectos de la difusión: en esto consiste nuestro experimento numérico.

Tanto en el mundo natural como en el de la ciencia y en la técnica el fenómeno de la difusión está presente en una gran cantidad de eventos. Las fotocopiadoras e impresoras láser presentan transporte de electrones o «huecos»<sup>ii</sup> en materiales semiconductores amorfos impulsados por un campo eléctrico. En 1975 se demostró que los electrones que se desplazan en medios porosos tienden a ser atrapados por las imperfecciones locales y luego liberados por las fluctuaciones térmicas<sup>iii</sup>. De hecho presentaban una distribución asimétrica que no coincide con las típicas gaussianas. Un mecanismo similar provoca que los contaminantes viajen mucho más lentamente que lo predicho por la difusión clásica en flujos de agua subterránea debido a las imperfecciones de las paredes. Una modificación a la ecuación de difusión podría permitir la determinación del tiempo que los contaminantes en los ríos tardan en llegar a los lagos o mares, o el tiempo que tarda una epidemia en expandirse a partir de un foco de infección<sup>iv</sup>. Otro mecanismo es el que ocurre cuando las proteínas se difunden por las membranas celulares. Este meca-

nismo permite la transmisión de información hacia dentro de las células y, como se ha demostrado experimentalmente, las proteínas pasan mucho tiempo atrapadas en el citoesqueleto. Esto «retraso» en la dinámica de la difusión producen un fenómeno de difusión «lenta», o *subdifusión* [5].

Un caso opuesto puede ser el vuelo del albatros sobre el mar, que se caracteriza por vuelos en línea recta, largos, interrumpidos por movimientos aparentemente aleatorios localizados [6]. Esta dinámica provoca difusión más «rápida» que la predicha clásicamente y se le llama *superdifusión* [5]. A diferencia de lo que ocurriría en una dinámica de difusión «simple», estas trayectorias pueden pensarse como estrategias óptimas de búsqueda que llevan a las aves a nuevas áreas, en lugar de permanecer cercanas a un mismo sitio. Las trayectorias de los monos araña de la selva de Yucatán, en el proceso de forrajeo, son del mismo tipo que las del albatros: pasos muy largos seguidos de muchos pequeños desplazamientos, de nuevo un paso largo, etc. [7,8].

En otros casos más complejos (donde hay términos relacionados con reacción y/o fuentes o sumideros de sustancia) este término difusivo da origen a patrones como las manchas de la piel de los animales [9] o las formadas por la vegetación en diferentes zonas [10].

## 2. Difusión

A diferencia de las acuarelas, las pinturas en general no se difunden sobre la superficie donde se colocan. Por lo menos no es evidente ahí el fenómeno, que podría pasar en dimensiones espaciales muy pequeñas como para ser percibidas a primera vista. El agua se difunde entre la tierra cuando llueve o cuando regamos una maceta, las sustancias de nuestros alimentos se difunden por todo el cuerpo a través de diferentes etapas, medios y escalas, el café en la leche o viceversa, los iones de sodio y cloro si se separa la sal al entrar en contacto con el agua, las partículas ideales de un gas cuando se retira la pared que divide al recipiente.

En un trabajo más o menos extenso Einstein demuestra la constitución corpuscular de la materia construyendo una ecuación que describe el movimiento browniano: la ecuación de difusión [11]. Al parecer la forma más famosa o más conocida es la de la ecuación de difusión del calor,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \mathcal{D}\nabla^2 T, \quad (1)$$

clásica cuando se enseña la técnica de la transformada de Fourier. En la Ec. (1)  $T$  es la temperatura y la letra  $\mathcal{D}$  es un coeficiente de proporcionalidad llamado *coeficiente de difusión*. Esta ecuación describe la forma en la que la temperatura varía espacial y temporalmente en un punto: cómo se difunde a partir de él.

Una forma genérica de la ecuación de difusión sería la siguiente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{D}\nabla^2 u. \quad (2)$$

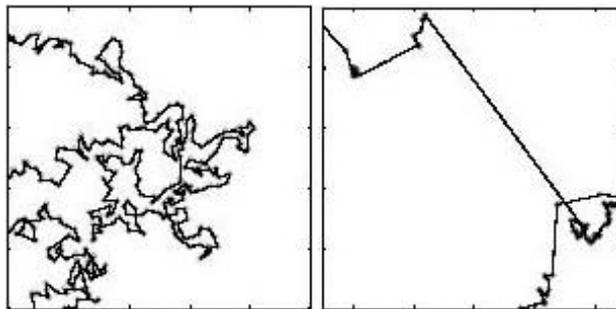


FIGURA 1. Caminata Browniana (izquierda) y trayectorias típicas de los albatros y de los monos araña (derecha, llamadas *vuelos de Lévy*).

La parte de las derivadas parciales tiene un significado físico de conservación: si pensamos que  $u = u(\mathbf{r}, t)$  es la concentración local de «algo»<sup>v</sup>, esta ecuación nos dice que si disminuye (o aumenta) esa concentración muy cerca de la posición  $\mathbf{r}$ , esto se debe a que hay un fenómeno de difusión que corresponde a la variación local (espacial) de la concentración hacia «fuera» del sitio observado. Hay que recordar que el símbolo del operador de Laplace  $\nabla^2$  es la «abreviatura» de  $\nabla \cdot \nabla$ , que es la divergencia del gradiente, es decir,  $\nabla^2 u = (\nabla \cdot \nabla)u$  nos dice cuánto diverge<sup>vi</sup> el campo vectorial<sup>vii</sup> que representa los cambios espaciales de  $u$  en el punto donde se evalúa. Uno se puede imaginar una gota de tinta puesta en papel o en agua. La gota al inicio será un punto grande, digamos que azul, pero a medida que pasa el tiempo una mancha azul cada vez «menos azul» se va incrementando en tamaño y va cubriendo un área mayor. Este azul representa la concentración  $u$ .

Existe una relación fenomenológica que establece una relación para el gradiente de concentración local ( $u$  en este caso, o  $T$  para el caso (1) y la tendencia observada de los flujos (de masa, energía, etc.). Esta relación define una densidad de corriente  $\vec{J}$  asociada con el hecho de que el movimiento siempre ocurre en la dirección de mínima concentración:

$$\vec{J} = -\mathcal{D}\nabla u. \quad (3)$$

De este modo se establece la ecuación de difusión como una ecuación de conservación: en una región infinitesimal, la concentración  $u$  disminuye (en el tiempo) si y solamente si parte de la «sustancia» sale de la región. Esta relación genérica se conoce como ley de Fick [5] (en el caso de la difusión de calor la relación (3) se llama ley de Fourier).

### 2.1. El modelo de Einstein

Aunque en su trabajo original la intención era otra -de hecho, por ejemplo, establece un criterio para calcular el tamaño de los átomos- veamos un poco de lo que hizo Einstein respecto a la difusión [11]:

*Vayamos a una consideración más cercana a los movimientos irregulares que resultan del movimiento molecular térmico, y da lugar a la difusión investigada en el párrafo anterior<sup>viii</sup>.*

Evidentemente debe suponerse que cada partícula ejecuta un movimiento que es independiente de todas las demás partículas; los movimientos de una y la misma partícula después de diferentes intervalos de tiempo deben ser considerados como procesos mutuamente independientes, tanto como pensemos que esos intervalos de tiempo han sido elegidos no muy pequeños.

Introduciremos un intervalo de tiempo  $\tau$  en nuestra discusión, el cual es muy pequeño comparado con el tiempo total de observación, pero, sin embargo, de tal magnitud que los movimientos ejecutados por una partícula en dos intervalos de tiempo  $\tau$  consecutivos sean considerados como fenómenos mutuamente independientes.

Suponga que hay  $n$  partículas juntas suspendidas en un líquido. En un intervalo de tiempo  $\tau$  las coordenadas  $x$  de las partículas se incrementarán en  $\Delta$ , donde  $\Delta$  tiene un valor diferente (positivo o negativo) para cada partícula. Para el valor de  $\Delta$  se cumplirá una cierta ley de probabilidad; el número  $dn$  de partículas que experimentan en el intervalo  $\tau$  un desplazamiento que se encuentra entre  $\Delta$  y  $\Delta + d\Delta$ , será expresada por una ecuación de la forma

$$dn = n\phi(\Delta)d\Delta,$$

donde

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\Delta)d\Delta = 1$$

y  $\phi$  solamente difiere de cero por valores muy pequeños de  $\Delta$  y satisface la condición

$$\phi(\Delta) = \phi(-\Delta).$$

Investigaremos cómo el coeficiente de difusión depende de  $\phi$ , confinándonos de nuevo al caso donde el número  $\nu$  de partículas por unidad de volumen depende solamente de  $x$  y de  $t$ .

Poniendo el número de partículas por unidad de volumen  $\nu = f(x, t)$ , calcularemos la distribución de partículas en el instante  $t + \tau$  a partir de la distribución en el tiempo  $t$ . De la definición de función  $i^x + (A)$ , es fácilmente obtenido el número de partículas localizadas en el tiempo  $t + \tau$  entre dos planos perpendiculares al eje  $x$ , con abscisas  $x$  y  $x + dx$ . Obtenemos

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

Ahora, como  $\tau$  es muy pequeño, podemos poner

$$f(x, t + \tau) = f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t}.$$

Además podemos expandir  $f(x + \Delta, t)$  en potencias de  $\Delta$ :

$$f(x + \Delta, t) = f(x, t) + \Delta \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} + \Delta^2 \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} + \dots \text{ad ínf.}$$

Podemos llevar esta expansión bajo el signo de integral, dado que solamente muy pequeños valores de  $\Delta$  contribuyen algo a la última. Obtenemos

$$f + \frac{\partial f}{\partial t}\tau = f \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\Delta)d\Delta + \frac{\partial f}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta\phi(\Delta)d\Delta + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2}\phi(\Delta)d\Delta \dots$$

En el lado derecho el segundo, cuarto, etc. términos se anulan dado que  $\phi(\Delta) = \phi(-\Delta)$ ; al contrario que los primero, tercero, quinto, etc. términos. Cada término sucesor de otro es muy pequeño comparado su predecesor. Teniendo en mente que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\Delta)d\Delta = 1$$

y poniendo

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

y tomando en cuenta solamente el primer y tercer términos del lado derecho, obtenemos, de esa ecuación

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}.$$

Esta es la bien conocida ecuación diferencial para la difusión, y reconocemos que  $D$  es el coeficiente de difusión...

Después de un comentario sobre el sistema de coordenadas continúa:

Nos referiremos a un sistema de coordenadas cuyo origen coincide en el instante  $t = 0$  con la posición del centro de gravedad de las partículas en cuestión; con esta diferencia, lo que  $f(x, t)dx$  da es ahora el número de partículas cuya coordenada  $x$  se ha incrementado entre  $t=0$  y  $t = t$ , por una cantidad que está entre  $x$  y  $x + dx$ . En este caso también la función  $f$  debe satisfacer  $(I)^x$ . Además, debemos tener evidentemente que para  $x < 0$  o  $x > 0$  y  $t = 0$ ,

$$f(x, t) = 0 \text{ y } \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, t)dx = n$$

El problema, que coincide con el problema de la difusión hacia fuera de un punto (ignorando posibilidades de intercambio entre las partículas que se difunden), está ahora completamente definido matemáticamente; la solución es

$$f(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{t}}$$

La distribución de probabilidad de los desplazamientos resultantes en un tiempo  $t$  es entonces la misma que la del error fortuito, lo cual era de esperarse...

Calcularemos ahora con la ayuda de esta ecuación en desplazamiento  $\lambda_x$  en la dirección del eje  $x$  que experimenta una partícula en promedio, o -más precisamente expresado- la raíz cuadrada de la media aritmética de los cuadrados de los desplazamientos en la dirección del eje  $x$ , esto es

$$\lambda_x = \sqrt{x^2} = \sqrt{2Dt}. \quad (4)$$

El desplazamiento medio es entonces proporcional a la raíz cuadrada del tiempo.

En el artículo Einstein obtiene una solución para la ecuación

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \quad (5)$$

donde  $f$  es una función de distribución o densidad de probabilidad.

## 2.2. Comportamientos difusivos $t^\alpha$

Como dijimos, hay una gran cantidad de ejemplos de fenómenos difusivos en los cuales no se da lo que podríamos llamar difusión «normal», es decir, en estos fenómenos la relación (4) no se cumple. Esto equivale a decir que la desviación cuadrática media de las posiciones de las partículas ya no es lineal con el tiempo transcurrido, esto es, elevando al cuadrado ambos lados de la relación (4) se tiene para tres dimensiones, sustituyendo el desplazamiento  $x$  por  $|\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(t_0)|$ , que

$$\langle |\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(t_0)|^2 \rangle = 2Dt. \quad (6)$$

Sin embargo, en estos fenómenos la relación genérica que prevalece es una ley de potencias de la forma

$$\langle |\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(t_0)|^2 \rangle \sim t^\alpha. \quad (7)$$

En esta relación  $\mathbf{R}(t)$  representa la posición de una partícula en el instante  $t$ . El exponente  $\alpha$  suele tener valores diferentes de la unidad y, como suele decirse en el ámbito de los sistemas complejos, hace que la relación sea libre de escala. Esto es, la gráfica log-log de una relación del tipo (7) es una recta que, si cambiamos los coeficientes de cualquiera de las variables (lo cual implicaría un cambio en la escala usada), la gráfica seguirá siendo una recta con la misma pendiente  $\alpha$ : simplemente será desplazada a lo largo de alguno de los ejes. Es decir, cuando aquí hablamos de difusión «rápida» o «lenta», no nos referimos al coeficiente  $D$  de difusión cuyo valor hará cambiar la pendiente de la relación (6), sino al exponente y a la relación experimental (7) que, cualitativamente, representa un comportamiento diferente: no lineal. Hablaremos así de *subdifusión* si  $0 < \alpha < 1$  y de *superdifusión* si  $\alpha > 1$ .

## 2.3. Otras leyes de potencias

Una distribución de probabilidad ubicua en la naturaleza y también en fenómenos creados por el hombre (economía, literatura, etc.) es la llamada distribución de Pareto o de Lèvy-Pareto [12,13]. Básicamente se trata de una distribución asimétrica, picuda, cuya curva está dada por una ley de potencias de la forma  $y = x^{-\alpha}$  (ver Fig. 3), y que tiene una desviación media cuadrática infinita [14].

A diferencia del movimiento browniano, como mencionamos arriba, las «caminatas» de los albatros y de los monos araña, entre otras especies [7,8], no ocurren de manera uniforme. En realidad -como suele pasar en muchísimos otros fenómenos de la naturaleza- también presentan una ley de potencias: la frecuencia en el tamaño de los desplazamientos satisface una relación como

$$P(\lambda) \sim \lambda^{-\beta} \quad (8)$$

donde  $P(\lambda)$  es la probabilidad de que uno de los desplazamientos sea de longitud  $\lambda$ , y  $\beta$  es una cantidad que caracteriza la distribución<sup>xi</sup>.

Hay que remarcar aquí que las caminatas de los albatros y los monos araña, a diferencia del movimiento browniano, no pueden considerarse como caminatas aleatorias por el hecho de que, por un lado, no son partículas inanimadas y, por el otro, sus caminatas están condicionadas por la búsqueda de alimento.

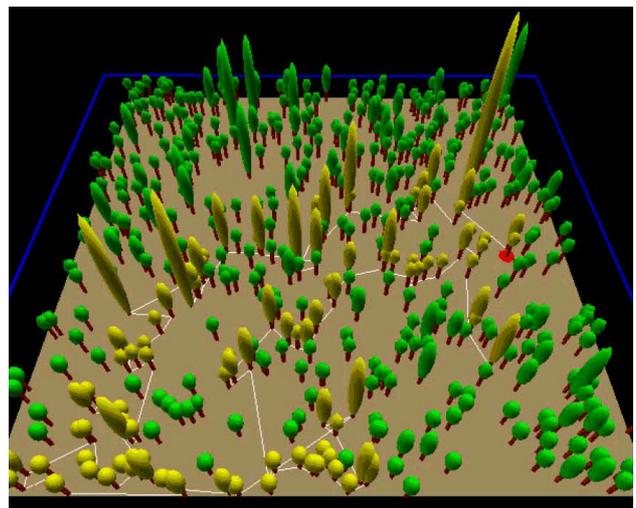


FIGURA 2. Modelo 3D de las caminatas de los monos araña [8]. Los árboles amarillos son los que han sido visitados. Inicia en la mancha roja.

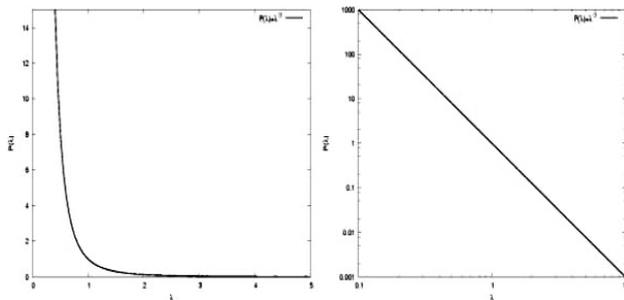


FIGURA 3. Una ley de potencia típica en escalas isométrica y log-log.

### 3. Difusión anómala

En esta sección desarrollamos dos algoritmos (con sus programas) relacionados con el fenómeno de la difusión. El primero, en la siguiente sección, se refiere al modelo del movimiento browniano y a un resultado importante que coincide con la solución analítica de Einstein en cuanto al «ancho» de la distribución  $f$ . El segundo algoritmo consiste en un experimento numérico en el que agregamos al movimiento browniano elementos que lo acercan al comportamiento de los fenómenos de subdifusión y superdifusión.

#### 3.1. Movimiento browniano: difusión

El movimiento browniano «normal» corresponde con lo descrito por la ecuación de difusión: un conjunto de partículas (polen originalmente) colocadas en agua se mueven de manera desordenada y sin una razón aparente: de manera

«azarosa»<sup>xii</sup>. Si observamos una sola de ellas veremos una trayectoria con la forma de una madeja enredada. Si esta partícula parte del origen, por ejemplo, puede observarse que, después de muchos pasos, el promedio de sus posiciones sucesivas es cero debido a que no hay una dirección preferencial para cada paso<sup>xiii</sup> aleatorio, es decir, aproximadamente da el mismo número de pasos para un lado que para el opuesto de manera que la suma de los desplazamientos da algo cercano a cero y la mancha (la «madeja») tendrá un ancho finito. Un detalle curioso resulta si superponemos muchas partículas brownianas (lo cual implica que no interactúan entre sí): el promedio de sus posiciones, es decir, de sus distancias relativas a una posición inicial, con respecto al tiempo es la relación lineal<sup>xiv</sup> (6) donde  $\mathbf{R}(t)$  es la posición de cada una de las partículas superpuestas: esto coincide con lo que predice el modelo de Einstein.

En el lado izquierdo de (6) se evalúa el promedio de las distancias de todas las partículas con respecto a un punto de referencia  $\mathbf{R}(t_0)$  que, por simplicidad, consideramos igual a cero. Este promedio corresponde a la desviación cuadrática media (4) de la que habla Einstein (puede revisarse un experimento simple que permite la medición de esta relación, a partir de la que se obtiene el coeficiente de difusión en la Ref. 15).

La parte central del algoritmo computacional de movimiento browniano consiste en hacer desplazamientos, con dirección arbitraria y de longitud uno, para cada una de las partículas. En el programa se asume que todas parten del origen y que (obviamente) no interactúan [4,11]. Una discusión detallada del algoritmo y el siguiente programa se encuentra en la Ref. 4:

```
#!/usr/bin/env python
#-*- coding: utf-8 -*-
from random import *
from visual import *
### par\`ametros:
np=500
L=50
radio=1
tvp=50      ## velocidad de despliegue
bolas=[]
rlist=[]
Lb= (L/2.) ## LONGITUD EJES DE REFERENCIA
win=600     ## ANCHO DE LA VENTANA
angulo=1.5 ## RANGO VISUALIZACION CAMARA
### elementos gr\`aficos, ejes
scene = display(title='`Difusi\`on Browniana`', width=win, height=win, x=1000, \
                y=0, center=(0,0,0), background=(0,0,0))
axisX = arrow(pos=(0,0,0), axis=(Lb,0,0), shaftwidth=0.2, color = color.red)
axisY = arrow(pos=(0,0,0), axis=(0,Lb,0), shaftwidth=0.2, color = color.blue)
axisZ = arrow(pos=(0,0,0), axis=(0,0,Lb), shaftwidth=0.2, color = color.green)
label(pos=(Lb,0,0), text='x')
label(pos=(0,Lb,0), text='y')
label(pos=(0,0,Lb), text='z')
### lista de part{\`i}culas
```

```

for i in arange(np):
    bola = sphere(color = color.red, radius=radio)
    posicion=[0,0,0]      ## posici\on inicial de las part\iculas
    bola.r=vector(posicion) ## posici\on de cada part\icula
    rlist.append(posicion) ## lista de posiciones auxiliar
    bolas.append(bola)
bolas[0].color = color.yellow ## trazadora
r=array(rlist)           ## conversi\on a 'array' (conviene)

### funci\on que genera los desplazamientos
def dr():
    dr1 = array([[uniform(-1,1), uniform(-1,1), uniform(-1,1)] for i in range(np)])
    for i in range(np):
        dr1[i] = dr1[i]/mag(dr1[i])
    return dr1

### ciclo principal
t=0
while t<10000: #ciclo sobre el tiempo
    rate(tvp)
    t = t+1
    rant = r[0] # posici\on trazador
    r = r + dr() # agregar desplazamientos a posici\on actual
    for i in arange(len(bolas)): # actualizar posiciones
        bolas[i].pos=r[i]
    curve(pos=[rant,r[0]],color=color.yellow, radius = .1) # traza

```

Una imagen de la dinámica lograda por este programa y la respectiva gráfica correspondiente a la expresión (6) se encuentra en la Fig. 4.

### 3.2. Trampas y temperatura: un modelo para la difusión anómala

Hemos mencionado algunas características relacionadas con el fenómeno de la difusión. Entre ellas algunas han sido propuestas por el modelo de Einstein (tal como aparece en las Secs. 2.1 y 3.1). Ahora vamos a implementar la idea del movimiento browniano, pero en un medio poroso: pensemos que las moléculas que lo forman se agrupan de tal modo que dejan algunos intersticios o huecos. Es decir, si fuésemos una de estas partículas dando pasos uniformes y de dirección arbitraria dentro de este medio entraríamos, eventualmente, en regiones intersticiales que nos atrapan por un tiempo que pensamos proporcional al tamaño del hueco. Cada partícula atrapada permanecerá ahí hasta que alguna otra molécula del medio, por agitación térmica, la alcance y la saque del sitio. En el modelo suponemos que los huecos son esféricos y en la simulación aparecen en color azul.

```

1 #-*- coding: utf-8 -*-
2 from random import *
3 from visual import *
4 ## par\ametros f\{i}ticos del modelo
5 np=200      ## n\umero de part\{i}culas
6 nh=200     ## n\umero de pozos
7 T = 1.0    ## temperatura inicial del sistema
8 dT = 0.000 ## incremento de paso de la temperatura
9 mu = 25.   ## coeficiente de viscosidad
10 tesp=mu   ## tiempo de espera para una part\{i}cula atrapada en un pozo

11 ## par\ametros gr\aficos de la simulaci\on
12 Tiempo = 10000 ## tiempo de evoluci\on del sistema
13 radiol=1.      ## radio de una part\{i}cula browniana
14 tvp=50         ## n\umero de calculos por segundo
15 L=50          ## longitud unitaria
16 Lb= 2.*(L/3.) ## longitud de ejes de referencia

```

```

17 win=600          ## ancho de la ventana
18 angulo=.8       ## rango de visualizaci\on de camara

19 ## inicializaci\on de listas de variables
20 bolas=[]
21 rlist=[]
22 hoyos=[]
23 listhoyo=[]
24 trespL=[0 for i in range(np)] # part\'\{i}culas atrapadas

25 ## parte gr\afica de la simulaci\on
26 scene = display(title="Movimiento Browniano",width=win,height=win,x=1000, \
    y=0,center=(0,0,0),background=(0,0,0))
27 axisX = arrow(pos=(0,0,0),axis=(Lb,0,0),shaftwidth=0.01,color=color.red)
28 axisY = arrow(pos=(0,0,0),axis=(0,Lb,0),shaftwidth=0.01,color=color.blue)
29 axisZ = arrow(pos=(0,0,0),axis=(0,0,Lb),shaftwidth=0.01,color=color.green)
30 label(pos=(Lb,0,0),text='x')
31 label(pos=(0,Lb,0),text='y')
32 label(pos=(0,0,Lb),text='z')

33 ## se crean las listas de particulas y de ``hoyos``
34 for i in arange(np):
35     bola = sphere(color = color.red, radius=radiol)
36     posicion = [0,0,0]
37     rlist.append(posicion)
38     bola.r = vector(posicion)
39     bolas.append(bola)
40 bolas[0].color = color.yellow
41 r=array(rlist)
42 for i in arange(nh):
43     hoyo = sphere(color = color.blue, radius = int(paretovariate(mu)))
44     poshoyo = vector(uniform(-Lb,Lb), uniform(-Lb,Lb), uniform(-Lb,Lb))
45     hoyo.pos = poshoyo
46     listhoyo.append(poshoyo)
47     hoyos.append(hoyo)
48 ocup = [-1 for i in range(nh)]
49 h=array(listhoyo)

50 def atrapada():
51     ## atrapada!
52     for i in range(np):
53         for j in range(nh):
54             if mag(r[i]-h[j])< hoyos[j].radius and ocup[j] == -1:
55                 trespL[i] = int(tesp*hoyos[j].radius) # t espera
56                 ocup[j] = i # part\'\{i}cula i atrapada en hoyo j
57     return 1

58 def dr():
59     atrapada()
60     dri = array([[uniform(-1,1), uniform(-1,1), uniform(-1,1)] \
        for i in range(np)])
61     for i in range(np):
62         if trespL[i] == 0: # no hay tiempo de espera => avance
63             dri[i] = T*uniform(0,1)*dri[i]/mag(dri[i])
64         else: # tiempo de espera no nulo:
65             dri[i] = [0,0,0] # no hay avance

```

```

66     tespL[i] = tespL[i]-1 # decreenta tiempo de espera
67     if tespL[i] == 0:     # desmarca part\{'i\}cula atrapada
68         j = 0
69         while ocup[j] != i and j !=
70             j += 1
71             ocup[j] = -1      # NO atrapada
72     return dri

73 seed() # semilla para random
74 ## apertura de archivo para escritura de datos
75 ff = open("Brown_nh"+str(nh)+"mu"+str(mu)+"_T"+str(T)+ \
            "_dT"+str(dT)+".dat", "w")

76 t=0     # inicializaci\on del tiempo
77 while t<Tiempo: # ciclo sobre el tiempo
78     rate(tvp)
79     T += dT
80     t = t+1
81     rant = r[0] # posici\on actual del trazador
82     r = r + dr()
83     for i in range(np):
84         bolas[i].pos=r[i]
85     curve(pos = [rant,r[0]], color = color.yellow, radius = .1) # traza
86     # promedio de cuadrados de distancias al origen
87     S = sum( [mag(bolas[i].pos)**2 for i in range(np)] )/np
88     if t%100==0:
89         print >> ff, t, S
90 ff.close()

```

En este programa se ha agregado un bloque para generar las trampas intersticiales o «huecos» y una lista en la que se guarda la etiqueta de cada partícula que ha sido atrapada. Hasta la línea 32 del listado solamente hay declaración de parámetros y ambiente gráfico. De la línea 33 a la 49 se crean las listas de las partículas y «huecos», que se transforman en el objeto array que permite hacer operaciones aritméticas «colectivas». Las líneas 50-57 contienen la definición de la función `atrapada()` que define qué partículas están suficientemente cerca de alguno de los «pozos» y quedarán atrapadas. En cada paso, dentro del ciclo de tiempo entre 76 y 89, si hay una partícula atrapada, se reduce en uno su «tiempo de espera» (el tiempo que permanece atrapada) hasta que por fin es liberada cuando ese tiempo es cero. Esto se lleva a cabo en la función `dr()`: si la partícula no está atrapada dará un paso proporcional a un parámetro de temperatura  $T$ . En caso contrario se reduce su tiempo de espera en uno y su avance es cero.

En la Fig. 5 se aprecia la «madeja» correspondiente a la trayectoria de una de las partículas brownianas. La partícula trazadora (en color amarillo) se encuentra cerca del origen de coordenadas. Las partículas rojas pueden quedar atrapadas en los pozos que modelamos como esferas azules. En este modelo simple, por tanto, compiten las trampas (en número y exponente de su distribución de tamaños) con las variaciones de temperatura  $\propto dT$ . La Fig. 6 muestra los casos en que predomina el incremento de la temperatura (curva alta, con

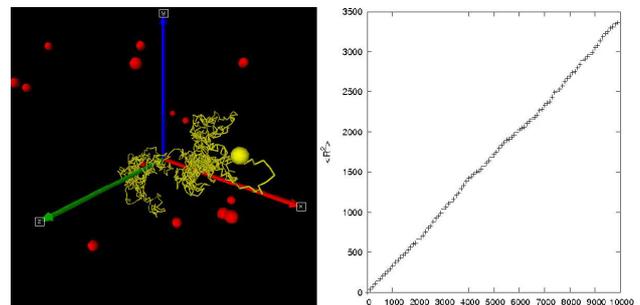


FIGURA 4. Imagen de movimiento browniano con una partícula trazadora. La gráfica del lado derecho corresponde a la relación (6) para 500 partículas y  $10^4$  pasos.

$\alpha = 1.415$ ,  $dT = 0.05$ ,  $\mu = 0$ ), la viscosidad (curva inferior,  $\alpha = 0.639$ ,  $\mu = 4$ ,  $dT = 0$ ) y el caso de difusión browniana (curva en el centro  $\alpha = 0.999$ ,  $\mu = 0$ ,  $dT = 0$ ).

La línea 79 del programa implica un proceso fuera de equilibrio: la temperatura se incrementa en cada paso en  $dT$  (a menos que  $dT=0$ ). Este efecto puede competir con el parámetro de viscosidad  $\mu$ .

Dado que las leyes de potencias aparecen en tantos eventos y fenómenos, en el modelo asumimos que los tamaños de las trampas o pozos (y, por tanto, los tiempos de espera) tienen una distribución de Pareto: `radius = int(paretovariate(mu))` en la línea 43 (ver relación (8)).

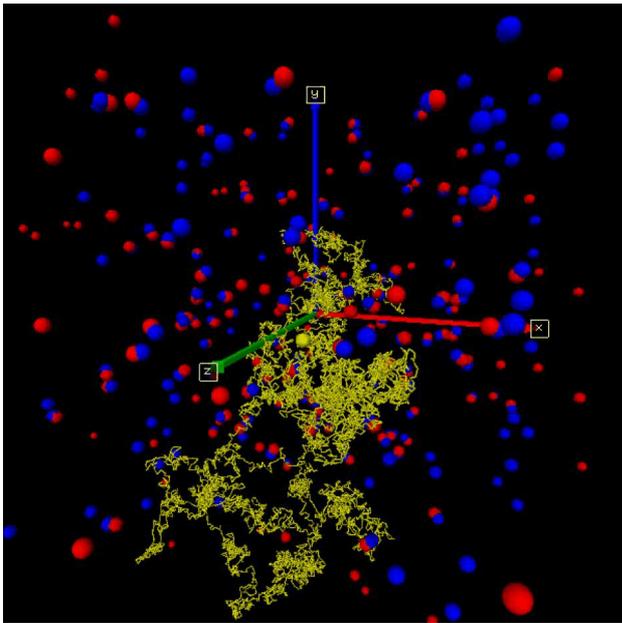


FIGURA 5. Las partículas unidas a otra están atrapadas. La traza está cerca del origen.

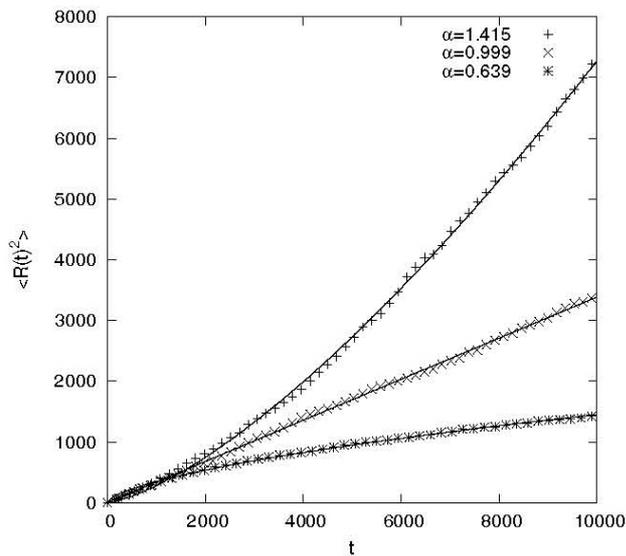


FIGURA 6.  $\langle R(t)^2 \rangle$  contra  $t$ . Pueden observarse diferentes comportamientos. Superdifusión (arriba), difusión (centro) y subdifusión (abajo).

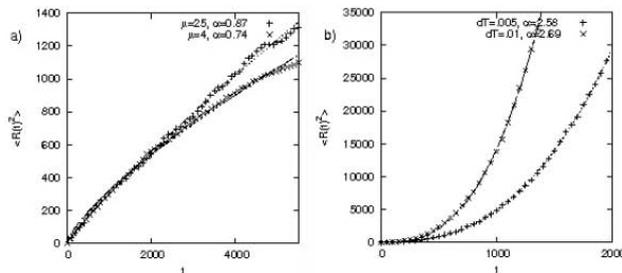


FIGURA 7. Dos casos de subdifusión para  $\mu = 25, 4$ ; b) dos casos de superdifusión con  $dT = 0.005, 0.01$ .

El número de partículas y de pozos empleado en las gráficas de la Fig. 7 fue de 500 en un rango de  $10^4$  iteraciones.

#### 4. Comentarios y posibilidades

En nuestro modelo, el efecto de difusión anómala se presenta para ciertos valores de  $\mu$  y de  $dT$ . Esto representa físicamente una competencia entre viscosidad (o fricción) dentro de un medio poroso y el incremento lineal de la temperatura con el tiempo. Esto implica mayor energía de las partículas y, por lo mismo, el crecimiento de las longitudes de paso en su «caminata».

Los experimentos numéricos pueden motivar a los estudiantes de física u otras áreas a construir sus propios experimentos o modelar sistemas de su interés. Una forma general de construir simulaciones o modelos consiste en partir de una idea muy simple que, a medida que va mostrando resultados, puede irse modificando ya sea en complejidad de los comportamientos o incrementando los elementos participantes o las relaciones entre ellos. Algunas cuestiones que podrían ser investigadas a partir de este modelo podrían ser:

- ¿Qué ocurre si las partículas brownianas interactúan<sup>xvi</sup>?
- ¿Si los poros o trampas fuesen del mismo tamaño?, ¿o si tuviesen otra distribución?
- ¿Si hubiese muchos más poros que partículas (o viceversa)?, ¿hay una relación crítica entre estas cantidades?
- ¿Hay alguna relación entre  $\mu$  y  $dT$  que logre difusión «normal»?
- ¿Existe relación entre los exponentes de las curvas y los parámetros?

Todas estas y tal vez muchas otras preguntas pueden motivar a los estudiantes a experimentar con este modelo y programa, pero también a la búsqueda: a ver cómo hay que modificarlo para obtener cierta información del modelo, cómo evitar la influencia de un parámetro u otro, etc. A la larga tendrá que modificar, experimentar con este u otros modelos o crear los propios. Finalmente, esperamos, serán parte de su formación como futuros investigadores.

- i.* Aquí nos referimos a las posibilidades que ofrece un lenguaje de programación en el que no se tiene que implementar, por ejemplo, los métodos de Newton o la regla de cuadratura de Simpson. Más aún: no requiere que uno programe e implemente módulos o funciones que permitan visualizar, en tiempo real o no, de manera rápida y eficiente, los resultados.
- ii.* La carga eléctrica que se desplaza en un medio puede ser descrita por la carga de los electrones, pero hay una convención que describe esta corriente por medio de carga positiva. Esta carga se asocia a los «huecos» que los electrones van dejando cuando salen de una posición, de modo que, en términos de carga, puede verse un flujo de carga neta positiva en sentido opuesto al de los electrones.
- iii.* Esta idea simple dio lugar a nuestro experimento numérico.
- iv.* Una modificación formal consiste en la introducción del concepto de derivada fraccionaria, pero el tema sale de las intenciones de este trabajo.
- v.* Este «algo» puede ser carga eléctrica, masa, componente de una mezcla reactiva (en cuyo caso se requieren más ecuaciones), etc.
- vi.* Esto responde a la pregunta ¿cuántas líneas de campo salen de una superficie cerrada, muy pequeña, que rodea al punto donde evalúas?
- vii.* Si  $u$  es una función del tiempo y de las coordenadas, entonces  $\nabla u$  será un campo vectorial que a cada punto del espacio asocia el vector gradiente cuyas componentes nos dicen cuánto crece  $u$  si nos desplazamos una unidad espacial en la dirección elegida.
- viii.* Realmente es la traducción del párrafo 4 de la Ref. 11, así que se refiere al párrafo 3.
- ix.* No sabemos a qué se refiere aquí Einstein, pero no es necesario para entender el planteamiento.
- x.* La ecuación de difusión.
- xi.* La función  $P(\lambda)$  tiene las propiedades de cualquier función densidad de probabilidad.
- xii.* «Azaroso» se entiende aquí como impredecible. La naturaleza es causal.
- xiii.* «Aleatorio». Se está pensando en un modelo (el que se plantea) que reproduzca el comportamiento de muchas partículas brownianas, entonces por *aleatorio* se va a entender un mecanismo que nos da direcciones impredecibles, pero todas con la misma probabilidad de ocurrir.
- xiv.* Esto lo demostró Einstein (ver Sec. 2.1).
- xv.* Obviamente si  $nh$ , el número de trampas o de pozos, es cero, y además la temperatura del sistemas no cambia ( $dT=0$ ), entonces no habrá difusión anómala: las partículas brownianas continuarán con su dinámica.
- xvi.* En esta parte hay un mundo de posibles resultados que dependen del tipo de interacción sugerida para las partículas brownianas: desde esfera dura hasta interacción coulombiana, magnética, etc.
- xvii.* Esto puede llevar a la discusión del fenómeno de percolación, por ejemplo.
1. Página de python, <http://www.python.org>.
  2. Numpy, Scipy: <http://numpy.scipy.org/>.
  3. Visual python, <http://www.vpython.org/>.
  4. J.F. Rojas, M.A. Morales, A. Rangel, and I. Torres. *Rev. Mex. Fís.* **55** (2009) 97.
  5. J. Klafter and I.M. Sokolov. *Physics World* (2005) 29.
  6. A.M. Edwards *et al.* *Nature* **449** (2007) 1044.
  7. G.R. Fernández, J.L. Mateos, *Behav. Ecol. Sociol.* **55** (2004) 223.
  8. D. Boyer *et al.*, *Proceedings of the Royal Society B* **273** (2006) 1743.
  9. A. Witkin and M. Kass. *Computer Graphics* **25** (1991) 299.
  10. J. von Hardenberg, E. Meron, M. Shachak, and Y. Zarmi. *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001).
  11. A. Einstein, *Investigations on the theory of the brownian movement* (Dover, 1956).
  12. M. Levy and S. Solomon. *Power Laws are Logarithmic Boltzmann Laws*. arXiv:adap-org 9607001v1, (July 1996).
  13. G. Cardarelli, M. Marsili, and Y. Zhang. *Europhys. Lett.* **40** (1997).
  14. M.E.J. Newman. *Power laws, Pareto distributions and Zipf's law*. arXiv:cond-mat/0412004 (2004).
  15. C. Booth, Tom Beer, and J.D. Penrose. *Am. J. Phys.* **46** (1978) 525.