



TREFEMAC 2011

9° Taller Regional de Física Estadística
y Aplicaciones a la Materia Condensada
Villa de Merlo, San Luis, 4 al 6 de mayo de 2011



Facultad de Ciencias Físico
Matemáticas y Naturales

DEPARTAMENTO DE FÍSICA
Universidad Nacional de San Luis

CENTRO
LATINOAMERICANO
DE ESTUDIOS ILYA
PRIGOGINE



TREFEMAC 2011

9° Taller Regional de Física Estadística
y Aplicaciones a la Materia Condensada
Villa de Merlo, San Luis, 4 al 6 de mayo de 2011

Comité organizador (UNSL)

Dr. Antonio J. Ramirez Pastor
Dr. Jorge Zgrablich
Dr. Félix Daniel Nieto
Dr. Federico José Romá
Dr. Fernando Bulnes
Dr. Pedro Marcelo Pasinetti
Dra. Valeria Cornette
Dra. Mara Dávila
Dr. Paulo Marcelo Centres

Comité científico

Dr. Guillermo Abramson, CAB, San Carlos de Bariloche
Dr. Ezequiel Albano, INIFTA, La Plata
Dr. Celso Aldao, INTEMA-UNMDP, Mar del Plata
Dr. Gustavo A. Appignanesi, UNS, Bahía Blanca
Dr. Miguel Arizmendi, FI-UNMDP, Mar del Plata
Dr. Jorge Bertolotto, UNLPam, Santa Rosa
Dr. Manuel Cáceres, CAB, San Carlos de Bariloche
Dr. Sergio A. Cannas, UNC, Córdoba
Dr. Carlos Condat, UNC, Córdoba
Dra. Alejandra Figliola, UGS, General Sarmiento
Dr. Jorge Finochietto, UCAECE, Mar del Plata
Dra. Marisa Frechero, UNS, Bahía Blanca
Dra. Susana Hernández, UBA, Ciudad de Buenos Aires
Dr. Héctor Martín, IFIMAR-UNMDP, Mar del Plata
Dr. Félix D. Nieto, UNSL, San Luis
Dr. Angel Plastino, IFLP - UNLP, La Plata
Dra. Mariela Portesi, IFLP- UNLP, La Plata
Dr. Antonio José Ramirez Pastor, UNSL, San Luis
Dr. Daniel A. Vega, UNS, Bahía Blanca
Dr. Fernando Vericat, IFLYSIB, La Plata
Dr. Damián H. Zanette, CAB, San Carlos de Bariloche
Dr. Jorge Zgrablich, UNSL, San Luis
Dr. Sebastián Bustingorry, CAB, San Carlos de Bariloche
Dr. Daniel Domínguez, CAB, San Carlos de Bariloche
Dr. Alejandro Kolton, CAB, San Carlos de Bariloche
Dr. Sebastián Risau, CAB, San Carlos de Bariloche

Auspiciantes

Agencia de Promoción Científica y Tecnológica
Universidad Nacional de San Luis
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)
Instituto de Física Aplicada de San Luis (INFAP)
Centro Latinoamericano de Estudios Ilya Prigogine

TREFEMAC 2011 es el noveno de una serie periódica de reuniones que se iniciara el año 2003 en San Luis, y que regresa a tierras puntanas después de haber transitado las ciudades de Córdoba (2004), La Plata (2005), Bahía Blanca (2006), San Rafael Mendoza (2007), Bariloche (2008), Santa Rosa La Pampa (2009) y Mar del Plata (2010).

Como en anteriores ediciones, esperamos un encuentro caracterizado por la integración y el intercambio de ideas entre investigadores y estudiantes de diferentes grupos del país y la región, con el consecuente fortalecimiento de nuestra área de trabajo.

Agradecemos a todas las instituciones que nos han apoyado, haciendo posible de esta manera la realización del taller. Finalmente, deseamos a todos los participantes una exitosa y placentera estadía en San Luis, y esperamos que la belleza de Merlo y la calidez de su gente puedan compensar nuestros defectos de organización.

El Comité Organizador

Programa

Horario	Miércoles	Jueves	Viernes
8:00	Inscripción		
	Apertura		
9:00	E. Albano	E. Bringa	E. Jagla
10:00	A. De Virgiliis	C. Gimenez	A. Plastino
11:00	Café	Café	Café
	D. Vega	S. J. Alas	J. Revelli
	J. L. Iguain	C. Narambuena	P. Arias-Garcia
12:00	M. Despósito	L. Szybisz	P. Gago
13:00	Almuerzo	Almuerzo	Almuerzo
14:00			
15:00	L. Braunstein	S. Manzi	
	C. Condat	D. Hansmann	
	F. Laguna	S. Cannas	
16:00	S. Risau Gusmán	O. Billoni	
	Café	Café	
17:00	F. Tamarit	I. Caridi	
		A. Pastore y Piontti	
18:00	G. Abramson	WIP	
	P. Gleiser	C. Lagorio	
19:00	Posters	Posters	
20:00	Charla de divulgación 1 O. Riveros	Charla de divulgación 2 A. Plastino	
21:00			

Índice general

Índice general	7
Presentaciones orales	9
Miércoles 4	10
Jueves 5	17
Viernes 6	24
Presentaciones murales	27
Primera sesión - Miércoles 4	28
Segunda sesión - Jueves 5	44
Índice alfabético	61

Presentaciones orales

Miércoles 4

Charla especial

9.00 hs

Estudio de transiciones de fase y fenómenos críticos en geometrías confinadas mediante simulaciones Monte Carlo

Ezequiel Vicente Albano

Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos. (IFLYSIB). UNLP, CONICET CCT-La Plata. Calle 59 Nro. 789. (1900) La Plata. ARGENTINA

Se presentan y discuten estudios sistemáticos de los efectos de confinamiento sobre transiciones de fase y fenómenos críticos en $d = 2$ dimensiones. Los estudios se basan en simulaciones computacionales de los modelos de Ising y de Blume-Capel, empleando muestras confinadas en una geometría rectangular de tamaño $L \times M$ ($L \ll M$), de tal manera que sobre las paredes de confinamiento actúan campos magnéticos superficiales competitivos $h_{1S} = -h_{2S}$. En estas condiciones se desarrolla una interfaz, entre dominios magnéticos de diferente orientación, que transcurre paralela a la dirección de las paredes de confinamiento.

En muestras de tamaño finito, dicha interfaz sufre una transición entre estados localizados o ligados a las paredes de confinamiento y estados deslocalizados en los que fluctúa libremente ubicándose, en promedio, en el centro de la muestra. Esta transición de localización - deslocalización es la precursora de una verdadera transición termodinámica de mojado (wetting transition) que tiene lugar solamente en muestras de tamaño infinito y es de segundo orden.

En el caso del modelo de Ising, la inclusión de impurezas no-magnéticas a lo largo del centro de la muestra estabiliza la interfaz y, para una concentración umbral de impurezas, la transición de mojado pasa a ser de primer orden, dando lugar a la existencia de un punto multicrítico. Por otra parte, considerando campos superficiales de la misma orientación ($h_{1S} = h_{2S}$) y en presencia de un campo de bulk, se observa y caracteriza el fenómeno de condensación capilar.

En el modelo de Blume-Capel con tres estados (Spin $S = \pm 1$ para el material magnético, y Spin $S = 0$ para las impurezas o vacancias móviles), se consideran interacciones entre spines $S = \pm 1$ mediante una constante de acoplamiento (J). Asimismo, dichos spines interactúan con el campo magnético (H), mientras que el spin $S = 0$ lo hace con el campo cristalino (D) que actúa como potencial químico regulando la concentración de vacancias. Considerando campos superficiales competitivos, la transición de mojado se ve enriquecida por un fenómeno de incremento en la concentración de vacancias en la zona de la interfaz.

10.00 hs

Propiedades estructurales y dinámicas de una interfase sólido-polímero

A. De Virgiliis(1,2), A. Milchev(2), V. G. Rostianshili(2), T. A. Vilgis(2)

(1) Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, CONICET/UNLP), Diag. 113 y 64, 1900 La Plata (Argentina). (2) Max Planck Institute for Polymer Research, Ackermannweg 10, 55128 Mainz (Germany)

En la ciencia de materiales moderna, los materiales compuestos (“composite”) formados por polímeros y sólidos tienen cada día un mayor interés, ya que permiten nuevas aplicaciones tecnológicas (adhesión, recubrimientos, mojado, nanofluidica, elastómeros reforzados, etc.) que no están disponibles en materiales tradicionales de un solo componente. En buena medida, las propiedades de un composite están determinadas por lo que ocurre en la intercara, la región más inmediata entre el sólido y el polímero, y también en la interfase del polímero en la vecindad de la superficie. De ahí que resulte importante el estudiar con mayor detalle tanto la intercara como la interfase sólido-polímero, apuntando a conocer los fundamentos

de la relación estructura-propiedad en estos sistemas [1].

Presentamos entonces un estudio por simulación de dinámica molecular de un sistema modelo consistente en un líquido polimérico denso en contacto con un sustrato sólido. Las cadenas lineales se representan por un modelo de grano grueso del tipo bola-resorte [2], mientras que la pared sólida está hecha de una capa de átomos que ocupan los sitios de una red triangular. Esta pared ejerce un potencial de corto alcance sobre cada monómero, que regula la afinidad del polímero por el sustrato.

Describimos la influencia del sustrato sobre las propiedades estructurales y dinámicas del polímero mediante diversas cantidades en función de la distancia a la pared (densidad, radio de giro, orientación de enlaces, movibilidades, etc). Por ejemplo, observamos que el aumento en la cantidad adsorbida depende linealmente con la longitud de las cadenas. También estudiamos la conformación estadística de las cadenas adsorbidas, pudiendo comprobar algunas predicciones teóricas [3]. Por último discutiremos la relajación estructural de la capa adsorbida a diferentes escalas de longitud, tanto de segmento como de la cadena en sí, en donde encontramos una dinámica lenta inducida por la atracción sólido-líquido.

[1] R. A. L. Jones, R. W. Richards, "Polymers at Surfaces and Interfaces", Cambridge University Press, Cambridge (1999).

[2] G. Grest, K. Kremer, Phys. Rev. A 33, 3628 (1986).

[3] J. M. H. M. Scheutjens, G. J. Fleer, J. Phys. Chem. 84, 178 (1980).

11:00 hs

Dinámica de defectos en membranas con simetría esmética

A. D. Pezzutti, M. A. Villar, D. A. Vega
Universidad Nacional del Sur, CONICET

En sistemas con simetría esmética, los defectos topológicos juegan un rol preponderante en el proceso de ordenamiento. A través de la interacción de defectos el sistema evoluciona, hacia configuraciones de mayor orden. La topología del sustrato afecta la dinámica de coarsening, a través de la interacción de un potencial geométrico que interactúa con los defectos topológicos del sistema. En sistemas de membranas con orden esmético, el sistema relaja la energía mediante un proceso llamado buckling. Dada la libertad presente en la membrana, los defectos topológicos deforman la superficie como mecanismo de relajación de la energía elástica o de deformación. En este trabajo se estudia mediante simulación numérica la dinámica de coarsening de membranas con simetría esmética, determinando las configuraciones de buckling para diferentes configuraciones de tensión superficial y bending.

11:30 hs

Difusión modulada por oscilaciones log periódicas

L. Padilla (1), J. L. Iguain (1), H. Martín (1), M. Frechero (2)

(1) *IFIMAR y Departamento de Física FCEyN, Universidad Nacional de Mar del Plata*, (2) *INQUISUR, Universidad Nacional del Sur*

Sobre ciertos sustratos autosimilares, la evolución temporal de un caminante aleatorio resulta modulada por oscilaciones log periódicas. En este trabajo, vemos cómo este comportamiento puede ser explicado sobre la base de una estructura jerárquica de coeficientes de difusión, asociada a las escalas de longitud típicas del sustrato. Mostramos la manera de calcular el exponente de RW y el período de las oscilaciones, estudiamos los efectos del desorden y discutimos la aplicación de nuestro análisis a la caracterización de materiales con escalas de longitud bien marcadas.

12:00 hs

Difusión anómala de una partícula inmersa en un entorno complejo y bajo la influencia de un ruido externo

Marcelo A. Despósito

Departamento de Física e IFIBA-CONICET. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires (1428) Ciudad de Buenos Aires, Argentina.

En este trabajo analizamos la dinámica irreversible de una partícula inmersa en un entorno complejo o un fluido viscoelástico y simultáneamente sometida a la acción de un ruido externo originado en la transducción de cierta energía en trabajo mecánico. Partiendo de una ecuación de Langevin generalizada y haciendo uso del método de Laplace derivamos expresiones analíticas para la dinámica de correlaciones a dos tiempos, el desplazamiento cuadrático medio y la función de autocorrelación de la velocidad. Suponiendo que la correlación del ruido externo es una ley de potencias, investigamos los distintos regímenes de transporte presentes, caracterizando los comportamientos subdifusivos y superdifusivos relacionados con la competencia entre el ruido interno (transporte pasivo) y el externo (transporte activo). Analizamos las transiciones entre estos regímenes e investigamos en particular las condiciones para obtener un comportamiento superdifusivo inducido por el ruido externo. A fin de caracterizar el apartamiento del sistema de la situación de equilibrio, analizamos la tasa de disipación de energía, la potencia inyectada por el ruido externo y la presencia de una temperatura efectiva. Finalmente, mostramos la aplicación de este modelo a resultados experimentales de transporte de organelas pigmentarias en células melanóforas de *Xenopus Laevis* mediado por motores moleculares.

14:30

Effect of skeptics in minority groups in a opinion model

L. A. Braunstein,^{1,2} Qian Li², S. Havlin,³ and H. E. Stanley²

¹Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (IFIMAR)-Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata-CONICET, Funes 3350, (7600) Mar del Plata, Argentina, ²Center for Polymer Studies, Physics Department, Boston University, Boston, Massachusetts 02215, USA, ³Minerva Center, Department of Physics, Bar Ilan University, Ramat Gan, Israel.

We study a opinion model in the presence of a fraction of f_l of skeptics in the minority group (SOM), which hold opposite opinion than the minority group. In our model, at the initial stage, we have both minority and majority clusters. Skeptics interact with the minority clusters and, as a consequence they are able to decrease the size of the minority cluster and even collapse it, depending on the value of f_l . We study the SOM model on both Erdős-Rényi and Scale Free networks, using two different strategies. In the first strategy, the skeptics are selected at random, while in the second strategy the selection is targeted (in descending order of their degree). We find the size of the largest minority cluster decreases as f_l increases, and the system undergoes a second order phase transition similar to percolation. Moreover, the second strategy is significantly more efficient in decreasing the minority cluster, where even with a small value of f_l , the largest minority cluster will collapse.

15:00 hs

Interacción entre dinámica y energía almacenada en la motilidad bacteriana

C. A. Condat, Mario E. Di Salvo

IFEG (CONICET), FaMAF - Universidad Nacional de Córdoba (5000 Córdoba, Argentina)

En este trabajo estudiamos cómo administran los organismos autopropulsados sus recursos energéticos de manera de optimizar la exploración espacial. Luego de identificar dos escalas de tiempo muy diferentes, usamos una aproximación cuasi-estacionaria para analizar la relación entre la dinámica bacteriana y los cambios en la energía almacenada por la bacteria. Encontramos entonces soluciones de estado estacionario y dependientes del tiempo para la velocidad bacteriana y para la cantidad de energía almacenada. El modelo también predice el tamaño de la región que una bacteria puede visitar en un medio desprovisto de nutrientes.

15:30 hs

¡Ojo al piojo! Un modelo detallado de colonias de *pediculus humanus capitis*, su propagación y control

M. F. Laguna, S. Risau-Gusman

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Centro Atómico Bariloche (CNEA), Bariloche

Si bien los piojos de la cabeza no son vectores de ninguna enfermedad, la incomodidad física y social que causan, junto a su altísima prevalencia en todo el mundo, han convertido a la pediculosis en un serio problema de salud pública. El uso de insecticidas como el DDT en las décadas del 40 y 50 causó una disminución significativa de su prevalencia, con el consiguiente decaimiento en el interés científico por este ectoparásito. Sin embargo, la resistencia desarrollada por los piojos de la cabeza contra los diversos insecticidas dio lugar a que la prevalencia actual haya vuelto a tener valores preocupantes. Pero nos encontramos con que hay una brecha en la literatura científica, y los pocos trabajos detallados sobre la biología de *pediculus humanus capitis* son, o muy recientes, o de la década del 40. Por otra parte, si bien las publicaciones sobre epidemiología matemática de una gran cantidad de enfermedades han crecido exponencialmente en los últimos años, una búsqueda en la literatura arroja sólo un ejemplo de modelo matemático para la propagación de la pediculosis. Y es modelada como una enfermedad clásica, es decir que los individuos se dividen simplemente en susceptibles e 'infectados' (es decir, no se toma en cuenta la cantidad de piojos ni su biología). Nosotros hemos apuntado a un modelo matemático detallado que tome en cuenta todo lo que se conoce actualmente sobre la biología de este ectoparásito. Esto nos ha permitido modelar el crecimiento de una colonia de piojos y las posibles estrategias de control, tanto conscientes (diversos tratamientos) como inconscientes (acicalamiento). Hemos también extendido nuestro modelo para incluir la interacción entre colonias de piojos, lo cual nos permite hacer predicciones sobre la efectividad de los diversos tratamientos, y proponer posibles estrategias colectivas para la eliminación de la pediculosis en grupos humanos.

16:00 hs

Umbral epidémico en redes usando la aproximación de pares

D. Hernandez Lahme, S. Risau-Gusman

CONICET, Centro Atómico Bariloche

En los modelos clásicos de epidemias se considera que las poblaciones consisten en agentes que pueden tener dos estados: S (susceptibles) e I (infectados) para los modelos tipo SIS, y tres estados, S, I y R (removido) en el caso de los modelos SIR. Es fácil mostrar analíticamente que estos modelos poseen un *umbral epidémico*, o sea un valor crítico de infectividad que debe ser superado para que se produzca una epidemia. Para agregar realismo, se desarrollaron los modelos de epidemias en redes, en los que se considera que cada agente solo puede interactuar con un subconjunto pequeño de toda la población. Si bien las simulaciones muestran que también en estos modelos aparece un umbral epidémico, cuyo valor depende de la red que se este usando, la complejidad adicional hace que sólo en unos pocos casos se conozcan resultados exactos. Sin embargo, algunas aproximaciones muy usadas en la física parecen funcionar muy bien para algunos modelos. Un ejemplo de esto son los modelos SIR en los que la analogía con los modelos de percolación permite obtener muy buenas estimaciones de algunas variables. Para los modelos SIS la aproximación mas usada es la de campo medio. Pero para algunas redes los resultados que se obtienen son poco satisfactorios no solo cuantitativa sino también cualitativamente. Muy recientemente algunos resultados exactos han hecho esto aún más evidente. Por ejemplo, si bien la aproximación de campo medio predice que el umbral epidémico sólo se anula para redes libres de escala con exponentes menores que 3, los resultados exactos dicen que esto ocurre para *todo* valor del exponente. Una forma de mejorar la aproximación de campo medio es usar la aproximación de pares. En esta charla mostraremos que esta aproximación mejora muchas de las predicciones de campo medio, no solo cuantitativamente sino también cualitativamente.

Charla especial

17:00 hs

Un modelo para la formación de patrones de preferencia orientacional en la corteza visual

Carolina B. Tauro, Francisco A. Tamarit, Pablo M. Gleiser

Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro

En este trabajo presentamos un modelo para la formación de patrones de preferencia orientacional observados en la corteza visual del cerebro de mamíferos. Estos patrones están compuestos por grupos de neuronas que tienen el mismo ángulo de orientación preferencial, esto es, por grupos de neuronas que se activan bajo el estímulo de una orientación dada. Así, por ejemplo, en la corteza visual un grupo de neuronas se activará al presentarse como estímulo una barra orientada en sentido horizontal, mientras que un grupo diferente lo hará si la barra presenta un sentido vertical. Utilizando diferentes técnicas experimentales, tales como colorantes sensibles al voltaje, o midiendo diferencias inherentes a la dispersión de la luz en las células activas e inactivas, es posible visualizar directamente estos patrones en la corteza cerebral viva. Estos experimentos han revelado la tendencia a la formación de patrones con fajas. El objetivo de nuestro trabajo es presentar un modelo que permita reproducir este tipo de patrones.

El modelo está formado por osciladores de Kuramoto, que interactúan en una red compleja embebida en un sustrato bidimensional. En particular utilizamos el algoritmo propuesto por Rozenfeld *et al.* (Phys. Rev. Lett. **89**, 218701 (2002)) para el embebido de una red con distribución de grado libre de escala en un sustrato regular bidimensional. La intensidad de la interacción entre los osciladores está dada por una función del tipo *sombrero mexicano*, que presenta interacciones atractivas a corto alcance y repulsivas a largo alcance. Mediante simulaciones numéricas mostramos que el modelo es capaz de generar

patrones como los observados en la corteza visual de gatos y macacos. También analizamos el rango de valores de los parámetros del modelo donde se observan patrones estacionarios con relevancia biológica. Finalmente, realizamos un estudio sobre los efectos de diferentes condiciones iniciales sobre la formación de los patrones.

18:00 hs

Efecto de la destrucción del hábitat en redes mutualistas

Guillermo Abramson, Claudia Trejo Soto, Leonardo Oña Bubach

Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro, Max Planck Institute for Evolutionary Anthropology (Leipzig)

Estudiamos la influencia de la topología de las conexiones de un sistema de mutualistas, en la dinámica de extinciones por deterioro del ambiente. Las redes de mutualistas, en particular las formadas por plantas de flor y sus polinizadores, son altamente heterogéneas y han sido extensamente estudiadas en comunidades naturales. Nuestro análisis provee un marco teórico para apoyar la observación de campo de que la susceptibilidad a la destrucción del hábitat es similar en plantas generalistas y especialistas. La principal razón de este fenómeno parece ser la desasortatividad de las redes de interacción que caracterizan el mutualismo.

18:30 hs

Ciclos circadianos en *Drosophila Melanogaster*: un modelo simple de fosforilación con represión diferenciada.

Sebastián Risau Gusman, Pablo M. Gleiser

Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro

Muchos procesos biológicos presentan un patrón oscilatorio correlacionado con la sucesión del día y la noche. Dichos procesos son controlados por mecanismos endógenos, que en ausencia de estímulos externos son capaces de mantener una oscilación con un período cercano a las 24 horas. Por esta razón estos ciclos se denominan circadianos.

Avances en las técnicas de análisis genético han llevado al estudio de los ciclos circadianos de varias especies animales a un nivel de detalle sin precedentes. Por ejemplo, se sabe que en un gran número de especies las neuronas que controlan los ritmos circadianos de actividad poseen un reloj interno dado por la interacción de varios ciclos retro-alimentados (feedback loops) en la expresión y represión de una serie de proteínas.

En este trabajo mostramos modelos matemáticos para las oscilaciones circadianas observadas en la proteína PER de la mosca *Drosophila Melanogaster*. Recientemente el estudio de los ciclos circadianos de moscas mutantes, a mostrado que los procesos post-translacionales son también muy importantes para comprender el funcionamiento del reloj circadiano. En particular, el proceso más estudiado es el de fosforilación de diversas proteínas. Este modelo tiene en cuenta los efectos opuestos que produce la fosforilación en diferentes sitios de la proteína PER, haciendo que el reloj circadiano de la mosca adelante o atrase.

Partiendo desde un modelo básico, mostramos que al reemplazar términos lineales, correspondientes a procesos de degradación de las proteínas, por términos no-lineales del tipo Michaelis-Menten, logramos obtener oscilaciones circadianas con valores de los parámetros más realistas.

Charla de divulgación

20:00 hs

Otra Visión de los Colores

Oscar Riveros

Universidad Nacional de San Juan

La vista nos proporciona información sobre las formas por un lado y sobre los colores por otro. Pero, ¿qué sabemos sobre los colores? Algunas experiencias y algo de “física sin fórmulas” nos permitirán descubrir ciertos preconceptos falsos que generalmente tenemos sobre ellos.

Jueves 5

Charla especial

9:00 hs

Termodinámica bajo condiciones extremas

Eduardo Bringa

CONICET, Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza

Muchos de los conocimientos que se adquieren sobre termodinámica están basados en sistemas en equilibrio donde los promedios temporales y espaciales se realizan a niveles “macroscópicos”, bajo condiciones “normales” de temperatura y presión. En esta charla se discutirán simulaciones atomísticas de sistemas lejos del equilibrio, incluyendo grandes gradientes en las variables de estado, y a veces consistentes de solamente unos pocos átomos. Se discutirán ejemplos como:

- (a) ¿Cuándo puedo calcular variables termodinámicas como temperatura o presión en sistemas a escala nanoscópica?
- (b) ¿Es válida la ley de transporte de Fourier cuando tengo gradientes de temperatura del orden de 103 K/nm?
- (c) ¿A qué velocidad de producción de calor puedo considerar que la evolución de un sistema es todavía casi isentrópica?

Las respuestas a estas preguntas desde las simulaciones computacionales muestran que un enfoque termodinámico simple es sorprendentemente robusto, a pesar de contar con sistemas pequeños, con posibles transiciones espaciales o temporales bruscas en las variables de estado, y de que no exista equilibrio termodinámico global en el sistema. Se discutirán conexiones de este tipo de simulaciones con resultados experimentales recientes.

10:00 hs

Simulación Monte Carlo de nanoalambres de diferentes metales y aleaciones.

M. Cecilia Gimenez, Wolfgang Schmickler

IFEG (CONICET) - FaMAF (U.N.C.) - Córdoba - Argentina, Institut für Theoretische Chemie - Universität Ulm - Ulm - Deutschland.

Se estudiaron nanoalambres de diferentes metales y aleaciones por medio de simulaciones de Monte Carlo canónico continuo y el empleo del Método del Atomo Embebido para el cálculo de los potenciales interatómicos. Para el caso de nanoalambres de oro puro se observó una interesante estructura de aproximadamente tres átomos de espesor y una cierta estabilidad que no fue observada en otros casos. Se estudió la posibilidad de formación de LACs (cadenas atómicas lineales), pero sólo en algunos casos se observaron estas estructuras en una pequeña porción del sistema (de uno o dos átomos de largo) justo antes de la ruptura del alambre. Para nanoalambres de aleaciones bimetálicas, se observó una tendencia general. Si bien en todos los casos los átomos se mezclan entre sí, el metal con mayor energía de superficie tiende a desplazarse hacia la región central del alambre.

11:00 hs

Estudio TPD de NO sobre Rh(111) por simulación de Monte Carlo dinámico

S. J. Alas

Departamento de Ciencias Naturales, Universidad Autónoma Metropolitana, Cuajimalpa, México.

En el presente trabajo se hace un estudio cinético de la descomposición de NO sobre una superficie de Rh(111) utilizando un método de Monte Carlo dinámico. En las simulaciones, la superficie de Rh(111) se imita como una red triangular y la descomposición del NO se realiza a condiciones de Ultra Alto Vacío (UHV) en un intervalo de temperatura de 120 a 1000 K. Este análisis incorpora recientes evidencias experimentales que muestran que la producción de $N_{2(g)}$ ocurre a través de dos vías: (1) por la clásica recombinación $N_{(ads)} + N_{(ads)}$ y (2) por la formación de una especie intermediaria (N-NO)*. Debido a las diferentes interacciones que tienen las especies, entre ellas sobre la superficie, las velocidades aumentan para la desorción de $NO_{(ads)}$ y para la recombinación $N_{(ads)} + N_{(ads)}$, mientras que, la velocidad disminuye para la disociación de $NO_{(ads)}$. Los resultados presentados son acordes a los resultados experimentales reportados en espectros de Desorción Térmica Programada (TPD) y explican la formación de dos picos máximos, δ - N_2 y β - N_2 , como una consecuencia natural del mecanismo de reacción propuesto aquí.

Agradecimientos: al proyecto 47310210 del Programa de Mejoramiento al Profesorado (PROMEP- SEP) 2010-2011.

11:30 hs

SIMULACION COMPUTACIONAL DE LA PROTEASA HIV-1

C. F. Narambuena, S. J. Alas

Departamento de Ciencias Naturales. Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Cuajimalpa. Distrito Federal. México.

En este trabajo presentamos resultados preliminares del estudio por simulaciones computacionales con el método de Monte Carlo de la proteasa HIV-1. Utilizamos un modelo de grano grueso del tipo HP para representar la cadena de aminoácidos, dividiéndolos en tres grandes grupos: hidrofóbicos (H), polares (P), electrostáticos (E). Los residuos E pueden sufrir ionización y adquirir carga dependiendo del pH de trabajo. Hemos estudiado la estructura de la proteasa, como así también su carga eléctrica total en función del pH, obteniendo un valor de punto isoeléctrico cercano al experimental. También hemos estudiado las condiciones para la estabilidad del monómero, formación del dímero y la coagulación de proteína en función de los parámetros de la simulación.

C.F.N. agradece la asistencia financiera para realizar una estancia postdoctoral en el marco del PROGRAMA DE INTERCAMBIO, FORMACIÓN Y CAPACITACIÓN DE RECURSOS HUMANOS LATINOAMERICANOS del ICyTDF/CLAF.

12:00 hs

Líneas de pre-mojado y llenado asimétrico de ranuras planas en la adsorción del Xe

Salvador A. Sartarelli¹, Leszek Szybisz^{2,3,4}

¹Instituto de Desarrollo Humano, Universidad Nacional de General Sarmiento, Gutierrez 1150, RA-1663 San Miguel, Argentina (asartare@ungs.edu.ar). ²Laboratorio TANDAR, Dpto. de Física, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. del Libertador 8250, RA-1429 Buenos Aires. ³Dpto. de Física, Facultad

de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, RA-1428 Buenos Aires. ⁴Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Av. Rivadavia 1917, RA-1033 Buenos Aires (szybisz@tandar.cnea.gov.ar)

En este trabajo se analizó teóricamente la respuesta del gas noble Xe en dos situaciones: (i) cuando es adsorbido sobre superficies planas inertes y (ii) cuando es confinado en una ranura de paredes paralelas iguales también inertes. Se consideró sustratos de metales alcalinos. Este estudio se realizó en el marco de un funcional de la densidad que ya había sido utilizado para examinar las repuestas del Ne y del Ar [1-4]. En el caso presente hubo que resolver las ecuaciones para temperaturas comprendidas entre el punto triple, T_t , y el crítico, T_c . Se estudiaron relaciones entre fenómenos de simetría y transiciones de mojado ligadas a la adsorción de fluidos sobre sustratos sólidos. Se encontró que en el caso de ranuras aparecen soluciones en donde el perfil de densidad rompe la simetría del potencial fluido-sustrato. Este caso se obtienen perfiles de densidad asimétricos debajo de una temperatura crítica, T_{sb} , que coincide con la temperatura de pre-mojado de una sola pared, T_{cpw} , confirmando el hallazgo reportado por primera vez en la Ref. [2]. Para ciertos sustratos se observaron efectos reentrantes.

Referencias:

- [1] S.A. Sartarelli, L. Szybisz, and I. Urrutia, Phys. Rev. E **79**, 011603 (2009).
- [2] S.A. Sartarelli and L. Szybisz, Papers in Phys. **1**, 010001 (2009).
- [3] S.A. Sartarelli and L. Szybisz, Phys. Rev. E **80**, 052602 (2009).
- [4] S.A. Sartarelli and L. Szybisz, J. Chem. Phys. **132**, 064701 (2010).

14:30 hs

Mecanismo de desorción de dímeros en presencia de transiciones de fase

S. J. Manzi¹, Anibal J. A. Boscoboinik² y V. D. Pereyra¹

¹ Departamento de Física, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, Argentina, ² Department of Chemistry and Biochemistry, University of Wisconsin Milwaukee, USA.

En este trabajo mostramos el mecanismo para transiciones de fase durante el proceso de desorción, el cual involucra la formación de estados intermedios dependientes del tamaño de la red. Este peculiar proceso se presenta en los experimentos de desorción térmica programada (DTP) de partículas con múltiple ocupación de sitios y alta movilidad. En particular, analizamos la desorción de dímeros homonucleares desde redes cuadradas mediante simulación por Monte Carlo. Utilizando el modelo de gas de red cinético con interacciones repulsivas a primeros vecinos entre partículas estudiamos los casos tanto para desorción móvil como inmóvil. Mientras que el número de picos en el DTP para el caso inmóvil está relacionado con la conectividad de la especie adsorbida, en el DTP móvil se encuentra información acerca del mecanismo de desorción cuando las partículas adsorbidas ocupan más de un sitio de la red. Para el caso de dímeros en redes cuadradas la aparición de diferentes picos en el DTP, mientras el sistema pasa de la fase ordenada zig-zag a la fase ordenada $c(4 \times 2)$, se explica mediante un particular mecanismo.

15:00 hs

Deposición Balística revisitada

R. C. Buceta, D. Hansmann

Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (UNMdP - CONICET) y Departamento de Física - FCEyN - UNMdP

Es conocido que los Modelos de Deposición Balística (BD) pertenecen a la misma clase de universalidad de la ecuación de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ). Bajo pequeñas transformaciones de inclinación s de la su-

perficie los modelos BD y la ecuación KPZ muestran que la velocidad de propagación es $v(s) = v(0) + \frac{\lambda}{2}s^2$, siendo $\lambda/2$ el coeficiente de la no linealidad $|\nabla h|^2$ de la KPZ. Esta es una prueba -entre otras- que el BD model está en la clase de universalidad KPZ, satisfaciendo la rugosidad relaciones de escala de Family-Vicsek con idénticos exponentes de rugosidad y crecimiento. En este trabajo introducimos modelos de Deposición Balística Suaves (SBD) a primeros vecinos (NN) obtenidos extendiendo las reglas de evolución superficial usuales del modelo BD. Mostramos que, bajo pequeñas transformaciones de la inclinación s , los modelos SBD revelan nuevas no linealidades, aunque siguen perteneciendo a la clase de universalidad KPZ. Usando técnicas de regularización y granulado grueso podemos obtener ecuaciones diferenciales continuas estocásticas. Finalmente, discutimos porque diferentes ecuaciones diferenciales pertenecen a la clase de universalidad KPZ.

15:30 hs

Transición inversa en ferromagnetos bidimensionales con interacciones dipolares

S. A. Cannas, M. Carubelli, O. V. Billoni, D. A. Stariolo

Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba e Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG-CONICET), Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina, Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul y National Institute of Science and Technology for Complex Systems, CP 15051, 91501-970 Porto Alegre, RS, Brasil

Calculamos el diagrama de fases de campo medio para un ferromagneto bidimensional con interacciones dipolares, mostrando que el mismo presenta una transición inversa en el plano temperatura-campo externo. La presencia de este tipo de transición ha sido recientemente observada experimentalmente en películas ultradelgadas de Fe/Cu(100). Nuestro estudio se basa en un modelo efectivo (coarse-grained) en dos dimensiones. Este modelo admite tres fases magnéticas de equilibrio diferentes: fajas, burbujas y uniforme (paramagnética). Contrario a lo esperado, aún en la aproximación de modo único, el modelo predice una secuencia uniforme-burbujas-fajas-uniforme de transiciones de fase al disminuir la temperatura a campo externo constante. La inclusión de mas modos en la solución de campo medio restringe la fase de burbujas a una pequeña región en torno de la temperatura crítica a campo nulo, pero mantiene la transición inversa. El resultado mas notable de este estudio es la ausencia de fase de burbujas a bajas temperaturas. Simulaciones de Monte Carlo en un modelo microscópico (modelo de Heisenberg con interacciones dipolares) arrojan resultados consistentes con los de campo medio.

16:00 hs

Efecto de la extensión de paredes de dominio en cadenas de espines

O. Billoni, V. Pianet, D. Pescia, A. Vindigni

IFEG-FaMAF Universidad Nacional de Córdoba, Centre de recherche Paul Pascal - Bordeaux, Laboratorium für Festkörperphysik ETH-Zürich

Se mostrarán resultados de simulaciones numéricas de Monte Carlo en un algoritmo de tiempo cuantificado aplicado a una cadena de espines clásicos con anisotropía uniaxial. Estos estudios se muestran en relación con cálculos de equilibrio termodinámico realizados a tal fin. Dependiendo del ancho de las paredes de dominio, que está controlada por el cociente entre la anisotropía y las interacciones de intercambio, encontramos dos regímenes en los cuales tanto las propiedades estáticas como dinámicas cambian. En particular, en el régimen de pared extendida las interacciones entre paredes y ondas de espines son importantes a temperatura finita. En consecuencia, dependiendo de la extensión de las paredes de dominio

es necesario emplear protocolos diferentes en la caracterización experimental de cadenas de espines con relajación lenta.

17:00 hs

El Juego de la Minoría cuando juegan todos

G. Acosta, I. Caridi, S. Guala, J. Marengo

Departamento de Matemática FCEyN UBA, Instituto de Cálculo FCEyN UBA, Instituto de Ciencias Universidad de General Sarmiento, Instituto de Ciencias Universidad de General Sarmiento

El Juego de la Minoría (MG) [1] es un modelo que se inspira en algunas situaciones de la vida real en las que es más ventajoso estar en la minoría. El juego consiste en que en cada paso, los “N” agentes (jugadores) que participan del juego, deben elegir una entre dos alternativas (elegir un camino u otro, comprar ó vender, etc.), luego se cuentan cuántos agentes eligieron cada alternativa, y resultan ganadores aquellos que eligieron la opción minoritaria. Los agentes juegan independientemente, pero comparten una información que es conocida por todos: la sucesión de las opciones que fueron minoritarias en los últimos “m” pasos. Cada agente tiene un conjunto de estrategias (de tamaño “s”) y en cada paso juega con la mejor que tiene hasta ese momento. Dependiendo de los parámetros del juego (m, N, s) la dinámica es muy diferente: hay una región de comportamientos en muchedumbre en la que a los jugadores les va muy mal; otra región donde ocurre lo mismo que si jugaran al azar; y otra, en la que a la población en conjunto le va mejor que si tomara sus decisiones al azar. Esto último despertó muchísimo interés en el modelo. En esta charla vamos a contar cómo una representación del MG, en la que todos los posibles agentes y todas las posibles estrategias están presentes en el juego, nos ha sido útil para obtener resultados analíticos de una de las variables típicas que se observan en la simulación del MG y para entender aspectos de la dinámica del MG.

[1] D. Challet, Z. C. Zhang, “Emergence of cooperation and organization in an evolutionary game”, *Physica A* 246 (1997) 407

17:30 hs

Efecto de las correlaciones de grado sobre la congestión en redes complejas.

Ana L. Pastore y Piontti, Lidia A. Braunstein, Pablo A. Macri

Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (IFIMAR). Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata - CONICET, Funes 3350, 7600 Mar del Plata, Argentina, Center for polymer studies, Boston University, Boston, MA 02215, USA

Las redes de transporte, tales como las de computadoras, rutas aéreas, transporte de energía, etc., están entre los componentes más vitales de las infraestructuras modernas de hoy en día. Estas grandes redes no han sido diseñadas globalmente sino que han sido el resultado de procesos locales. Existen mecanismos propuestos en la forma de modelos de crecimiento que producen redes SF pero que no conectan explícitamente la dinámica de transporte con la topología de la red. En general esto es difícil de hacer ya que las escalas de tiempo para el flujo en la red y la evolución misma de la red son muy distintos.

En este trabajo vamos a analizar como el transporte a un paso de relajación se ve afectado por la correlación de grado, propiedad topológica de la red que tiene en cuenta la tendencia de los nodos a conectarse con otros de igual o diferente conectividad, y a través de la cual se pueden separar en dos categorías las redes reales: redes sociales y redes de transporte. Para esto implementamos un algoritmo que aisle los efectos de las correlaciones de grado, para luego medir la presión de congestión en redes descorrelacionadas y correlacionadas, en función del coeficiente de Pearson r . Finalmente encontramos que la congestión para redes disortativas (asortativas) es menor (mayor) que la de una red descorrelacionada, lo que nos permite afirmar que las redes disortativas optimizan el transporte a través de ellas, categoría a la que pertenecen la mayoría de las redes reales de transporte.

Charla especial (Woman in Physics)

18:00 hs

Construyendo nuevos caminos para las mujeres en Física

C. Lagorio, L. A. Braunstein

Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (INFIMAR), Universidad Nacional de Mar del Plata, CONICET

Pocas mujeres deciden estudiar física y son aun menos las que llegan a ocupar cargos de alto rango. La maternidad, los límites de edad para acceder a las diferentes etapas de la Carrera de Investigador, y la desigualdad de oportunidades hace que el camino del desarrollo profesional sea demasiado intrincado y dificultoso para las mujeres. Es por esto que se deben desarrollar políticas que favorezcan la inserción de las mujeres en la física y que aseguren la continuidad de las mismas a lo largo de todas las etapas: desde la carrera de Grado hasta los puestos jerárquicos. Siguiendo esta idea la presente charla pretende avanzar sobre la discusión de temas como: la licencia de maternidad, los límites de edad para la obtención de becas e ingreso a la Carrera de Investigador, las proyecciones reales que hoy tiene la mujer en el ámbito de la investigación, la creación de centros para el cuidado de los niños, etc. Estos temas se han comenzado a discutir a fin del año pasado en una reunión Ad-Hoc en la Universidad Nacional de Buenos Aires y se espera que continúe su tratamiento en las reuniones anuales de las diferentes áreas de la física. El objetivo de estas discusiones es construir un documento elaborado y consensuado para poder ser presentado desde la AFA a los organismos correspondientes (Ministerio CyT, Conicet, Agencia, Universidades). Así mismo, se expondrán los resultados obtenidos por la delegación Argentina en la 4th IUPAP International Conference on Woman in Physics de este año realizada en Sudáfrica. Finalmente, esta charla espera generar un espacio para fomentar las visitas de mujeres para dar cursos, charlas o generar colaboraciones, armar lazos y generar intercambios científicos a nivel nacional. Existe un foro de discusión desde donde ya podemos empezar a trabajar: mujeres-en-fisica@googlegroups.com. Los cambios en las políticas son procesos lentos y trabajosos, es por esto que nos parece muy importante que estos temas se traten en forma sostenida a lo largo de las múltiples reuniones de Física que se llevan a cabo en el país, como así también fomentar desde nuestras instituciones espacios para incrementar la participación de las mujeres en el ámbito de la física.

Charla de divulgación

20:00 hs

Is it conceivable a world without Physics?

A. Plastino

IFLP-CCT-Conicet-UNSLP

Current orthodoxies of New Age romanticism, political correctness and multiculturalism assert that the core of scientific thinking is a natural development latent in all evolving civilizations. Most people believe that science arose as a natural end-product of our innate intelligence and curiosity, as an inevitable stage in human intellectual development. On the contrary, we argue that far from being natural, scientific thinking goes so far against the grain of conventional human thought that if it had not been discovered in Greece 2700 years ago, it might not have been discovered at all.

Viernes 6

Charla especial

9:00 hs

Modelado estadístico de secuencias de terremotos. Historia y avances recientes.

E. A. Jagla

Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro

El interés de los físicos estadísticos en los terremotos está íntimamente ligado a la observación experimental de que la cantidad de terremotos de un dado tamaño obedece una ley de potencias (ley de Gutenberg-Richter). Los primeros modelos de sistemas de masas y resortes para describir la dinámica de dos placas tectónicas (consideradas como sólidos elásticos semi-infinitos) con un plano de contacto en el que se produce el deslizamiento (la falla), datan de los años 60. En los 80, el concepto de criticalidad auto-organizada dio un nuevo empuje a estas ideas, aunque los resultados que se obtenían con los modelos disponibles eran poco realistas en varios sentidos. Por ejemplo, el exponente observado experimentalmente en la ley de Gutenberg-Richter no aparece naturalmente en los modelos, y éstos no describen satisfactoriamente el fenómeno de agrupamiento temporal y espacial de los terremotos (p.ej. las réplicas).

Algún tiempo atrás hicimos una modificación sobre este tipo de modelos, introduciendo la posibilidad de una relajación interna en los elementos que modelan las placas. Mostramos que este ingrediente adicional es capaz de corregir varios de los resultados irrealistas que los modelos anteriormente usados presentaban.

Mi intención es entonces hacer primero un breve resumen de la motivación para usar este tipo de modelos, y de sus éxitos y fracasos. Luego daré las motivaciones físicas para incluir las modificaciones que hemos incorporado, mostrando como éstas aumentan cualitativa y cuantitativamente la semejanza de los resultados numéricos con los reales. Finalmente, describiré cuáles son las líneas en las que estamos trabajando actualmente, y qué problemas aun nos quedan por entender.

10:00 hs

Legendre structure in quantum mechanics

A. Plastino

IFLP-CCT-Conicet-UNSLP

Thermodynamics relationships can be expressed in different fashion, choosing as independent variables different collections of intensive-extensive variables' combinations. For instance, the natural variables of the internal energy E are S, V, N , all of them extensive. For the Helmholtz free energy F one has, instead, T, V, N . However, F and E contain exactly the same amount of information. This is due to the fact that thermodynamic potentials are interconnected via Legendre transforms. We show in this communication that a similar Legendre transform structure underlies the celebrated Schrödinger equation.

11:00 hs

Efectos del ruido en sistemas caóticos extendidos: estudio sobre el modelo de Lorenz '96

Jorge A. Revelli, Horacio S. Wio, Miguel Angel Rodriguez

IFEG (CONICET) - FaMAF (U.N.C.) - Córdoba - Argentina, Insitituto de Física de Cantabria - Santander - España.

En el presente trabajo investigamos los efectos del ruido sobre un sistema caótico extendido. El modelo elegido es el Lorenz '96, un simple modelo usado para estudios en climatología. El sistema está sujeto a perturbaciones de tipo espacial y espacio-temporal. A través del análisis de la evolución temporal del sistema y su función de correlación, hemos obtenido evidencia numérica para dos comportamientos del tipo de resonancia estocástica. Tal comportamiento se observa cuando una relación señal ruido generalizada se describe como una función de la intensidad de ruido externo o como una función del tamaño del sistema. El mecanismo subyacente parece estar asociado a una reducción del caos debido a la inducción de ruido. La posible relevancia de estos hallazgos para optimizar la predicción climatológica es discutida, usando un análisis de los efectos del ruido en la evolución de perturbaciones finitas y los errores.

11:30 hs

Rolling: importancia en la simulación de materiales granularesP. A. Arias-García¹, W. Oquendo², A. Lizcano³, R. Uñac¹, A. Vidales¹¹Universidad Nacional de San Luis, Argentina. ²Universidad Nacional de Colombia. ³Universidad de los Andes, Colombia.

La simulación juega un papel crucial en el estudio de los materiales granulares. Mientras que la experiencia ofrece información sobre el conjunto, la simulación ofrece información sobre las interacciones de las partículas. Es aceptado que todo fenómeno macroscópico observado en un sistema obedece a la física de las interacciones entre sus elementos. En el caso del material granular, estas interacciones aparecen cuando dos partículas entran en contacto. En el contacto se producen fuerzas y torques relacionados con grados de libertad de traslación y rotación. Actualmente, cuatro grados de libertad locales son reconocidos: traslación normal, traslación tangencial, rotación y torsión. El objetivo más claro es proponer modelos de resistencia que se oponen a cada grado de libertad. La calidad de los modelos es verificada cuando las simulaciones de fenómenos macroscópicos corresponden a la experiencia. En este trabajo se estudia la importancia de la resistencia a la rodadura (rolling) en la formación de ángulos de estabilidad, profundizando en las consecuencias de la elección del modelo. Los aspectos más relevantes del método de simulación son discutidos.

12:00 hs

Flujo granular y evacuación de peatones en situaciones de pánico. Verificación experimental del efecto "Faster is slower"

Gago Paula A.(1), Parisi Daniel R.(2), Pugnalmi Luis A.(1)

(1) Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (CONICET La Plata, UNLP), Calle 59 Nro 789, 1900 La Plata, Argentina, (2) Instituto Tecnológico de Buenos Aires, 25 de Mayo 444, 1002 C. A. de Buenos Aires, Argentina and Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina.

Explotando las numerosas analogías existentes entre el flujo de medios granulares y el tránsito peatonal, nos proponemos estudiar, experimentalmente, el fenómeno llamado "faster is slower", encontrado, utilizando simulaciones numéricas, en situaciones de evacuación de peatones en condiciones de pánico. El

efecto mencionado muestra un comportamiento no monótono de los tiempos de evacuación totales de una habitación como función de la velocidad con que los ocupantes intentan dirigirse a la salida. En nuestro trabajo representamos la habitación con una tolva cuasi bidimensional y los peatones son partículas esféricas. La velocidad con la que los “peatones” intentan alcanzar la salida es controlada cambiando la inclinación del plano de la tolva, esto varía la componente de la gravedad en el plano de movimiento de las partículas. Un efecto conocido en descarga de medios granulares es la obstrucción de la salida por la formación de arcos, que producen atascos que bloquean el flujo. Cuando se trata de evacuación de peatones, ellos mismos al ser autopropulsados, logran “desatascarse”. En este experimento aplicamos una vibración al conjunto del sistema, entregando así energía que permita a las partículas romper los arcos que bloquean la salida. Como resultado, encontramos el tiempo total de descarga de la tolva en función del ángulo de inclinación, presenta el efecto estudiado: hay una inclinación óptima que permite la minimización del tiempo de evacuación del sistema más allá de la cual los tiempos vuelven a incrementarse. La explicación de esto la atribuimos a la competencia de dos efectos que se dan al aumentar la “fuerza de deseo”: por un lado la mayor velocidad con que las partículas abandonan el sistema cuando están fluyendo y por el otro la mayor estabilidad de los arcos (duración del atasco) cuando el sistema está atascado. Presentamos además una discusión sobre la importancia de estos resultados para el análisis del flujo peatonal.

Presentaciones murales

Primera sesión - Miércoles 4

1. Comparación entre estudios de simulación y experimental de la adsorción de la mezcla CO_2 - CH_4 en carbones activados

J. C. A. de Oliveira², D. A. S. Maia², R. B. Rios¹, H. R. Peixoto¹, R. H. López², A. E. B. Torres¹, C. L. Cavalcante Jr.¹, D. C. S. Azevedo¹, G. Zgrablich²

¹Grupo de Pesquisa em Separações por Adsorção (GPSA), Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Brazil; ²Instituto de Física Aplicada (INFAP), CONICET - Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina

La separación de CO_2 a partir de la mezcla de CO_2 - CH_4 es un aspecto importante en el almacenamiento del gas natural y en la purificación de biogás para las aplicaciones de generación de energía. El diseño adecuado de estos procesos depende del conocimiento del comportamiento de la adsorción de los varios componentes del gas natural, en particular de la mezcla de CO_2 - CH_4 . En el presente trabajo, presentamos una comparación entre los datos experimentales (obtenidos a partir de mediciones de isothermas de componentes puros, así como de las mezclas con diferentes composiciones de la fase de gas) y los estudios de simulación que se obtiene de la simulación de Monte Carlo en el Gran Canónico (GCMC) para la adsorción de la mezcla de CO_2 - CH_4 en un carbón activado (CA) a temperatura 293 K.

2. Verificación experimental del movimiento democrático en un sistema coloidal

J. A. Rodríguez Fris[†], G. A. Appignanesi[†], Eric R. Weeks[‡]

[†]Área Físicoquímica, INQUISUR-UNS-CONICET y Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina.

[‡]Physics Department, Emory University, Atlanta, GA 30322

Analizamos el desplazamiento de varios miles de partículas coloidales, a fracciones en volumen que emulan un líquido sobreenfriado, con un espectroscópio confocal en 3D y resolución temporal. Confirmamos la existencia de esporádicos eventos rápidos responsables de la relajación estructural en varias regiones del sistema en escalas de tiempo humanas. Esta observación es cualitativamente similar y complementa las obtenidas por simulaciones en sistemas tan diversos como Lennard-Jones, agua sobreenfriada, dióxido de silicio líquido y un polímero, lo cual presupone que este comportamiento puede ser general en el contexto de los líquidos sobreenfriados. La aparición de clusters de movilidad relativamente compactos permiten a la dinámica de estos sistemas la transición entre largos periodos de confinamiento local en la superficie de energía potencial, en acuerdo con lo predicho por Adam y Gibbs hace ya más de 40 años, y Goldstein.

3. Replicación precisa de estructuras químicas sostenidas por ruido

Sánchez A. D., Izús G. G., Deza R. R.

IFIMAR (UNMdP-CONICET), Argentina

El mecanismo DIFICI (differential-flow-induced chemical instability), predicho y experimentalmente observado en la reacción de Belousov-Zhabotinsky en 1993, abrió un nuevo camino al estudio de la formación de estructuras en sistemas químicos autocatalíticos. Su naturaleza convectiva se reconoció

rápida mediante simulaciones numéricas, y luego se confirmó y estableció definitivamente mediante modelos teóricos.

Para elucidar los mecanismos subyacentes en la formación de estructuras disipativas en sistemas de reacción-difusión con deriva se debe distinguir entre inestabilidades convectiva y absoluta. En un régimen absolutamente inestable las perturbaciones locales del estado estacionario (en una descripción Euleriana) crecen y se propagan a todo el sistema. En un régimen convectivamente inestable las perturbaciones son arrastradas por la corriente más rápidamente que su ritmo de dispersión. Estructuras macroscópicas llamadas estructuras sostenidas por ruido (NSS) aparecen en este último régimen si se presenta ruido o alguna fuerza externa y desaparecen a través de los bordes cuando el ruido o la fuerza cesan, volviendo al estado homogéneo. Hace algún tiempo se reportó la aparición de NSS en un sistema con cinética de Gray-Scott en un reactor tipo packed-bed (el cual se sabe tiene una DIFICI hacia un régimen convectivamente inestable)[1].

En este trabajo dos copias idénticas de dicho sistema se acoplan linealmente en una configuración maestro-esclavo y se someten a ruidos espaciotemporales Gaussianos y blancos independientes. Las simulaciones numéricas en reactores bidimensionales con flujos uniformes y de Poiseuille muestran que el sistema esclavo copia al maestro con un alto grado de precisión y que las estructuras convectivas aparecen en este último debido a la presencia de ruido. La calidad de esta sincronización se evalúa mediante varias medidas. Se produce una inestabilidad convectiva en la variedad de sincronización, la cual se predice en forma teórica y se confirma numéricamente [2].

[1] B. von Haften y G.G. Izús, Phys. Rev. E **67**, 056207 (2003).

[2] G. G. Izús, R.R. Deza y A.D. Sánchez, J. Chem. Phys. **132**, 234112 (2010).

4. Dinámica de dewetting en films delgados de poli-estireno sobre sustratos de Si < 100 >

L. Freije, N. A. García, A. D. Pezzutti, D. A. Vega
Universidad Nacional del Sur, CONICET

La estabilidad térmica de films delgados de polímeros es de gran importancia tecnológica para diversas aplicaciones como recubrimientos, capas dieléctricas, adhesivos, lubricantes, nanofluidica y microelectrónica [Müller et al., J. of Chem. Physics 115,21 (2001)]. Cuando estos films son calentados por encima de la temperatura de transición vítrea del polímero suelen inestabilizarse mediante un proceso denominado “dewetting”, alterando las propiedades del film y exponiendo el sustrato [Srolovitz and Safran, J. Appl. Phys. 60,247 (1986); Gau et al., Science 283, 46 (1999)]. En este trabajo, se estudió el proceso de dewetting en films delgados de poli-estireno obtenidos mediante la técnica de spin-coating. Utilizando microscopía óptica y microscopía de fuerza atómica en modo contacto (AFM-tapping) se caracterizaron las distintas etapas del fenómeno: ruptura del film con aparición de huecos, coalescencia de los huecos y formación de un patrón de gotas poliméricas sobre el sustrato. Se analizó la dinámica de las distintas etapas del proceso en función del espesor del film y de la masa molecular del polímero, que afectan tanto la temperatura de transición vítrea del polímero como su respuesta dinámica. Mediante las medidas de Minkowski se contrastaron los resultados experimentales con los resultados numéricos obtenidos a partir de simulaciones basadas en la ecuación de lubricación [Becker et al., Nat. Mat. 63, Vol 2 (2003)].

5. Transiciones orden-orden y orden-desorden en copolímeros de poli-butadieno-co-poli-dimetilsiloxano

N. Álvarez, J. Ressa, M. D. Ninago, A. E. Ciolino, M. A. Villar, E. M. Vallés, L. R. Gómez, D. A. Vega

Universidad Nacional del Sur, CONICET

La respuesta viscoelástica y termodinámica de copolímeros dibloque ha sido extensivamente estudiada durante las últimas décadas. Un copolímero dibloque es una macromolécula lineal formada por dos subcadenas poliméricas unidas químicamente entre sí a través de un enlace covalente. Tanto sistemas experimentales como modelos de campo medio indican que debajo una temperatura crítica, aún una débil repulsión entre las subcadenas puede causar segregación de fases donde los dominios mesoscópicos pueden dar lugar a estructuras periódicas altamente regulares. Cuando las interacciones entre bloques son modificadas a través de la temperatura, los copolímeros pueden sufrir transiciones al estado desordenado o transformaciones entre estados ordenados. En este trabajo se estudió mediante reología rotacional y dispersión de R_x a bajo ángulo (SAXS) la relación estructura-propiedades en copolímeros dibloque de poli (butadieno 1,3)-block-poli(dimetilsiloxano) de diferentes composiciones y masas moleculares, obtenidos mediante síntesis aniónica secuencial. La respuesta dinámica de los copolímeros se correlacionó con la información de la estructura y se identificaron tanto transiciones al estado desordenado como transiciones termoreversibles entre estados ordenados.

6. Estudio teórico sobre el efecto orientacional en la adsorción con múltiple ocupación de sitios

D. A. Matoz-Fernandez, D. H. Linares, A. J. Ramirez Pastor

Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis-CONICET, Chacabuco 917, D5700BWS San Luis, Argentina

En este trabajo se estudia el efecto orientacional en la adsorción de especies con múltiple ocupación de sitios. Para ello se propone una nueva teoría basada en una generalización de la aproximación clásica Guggenheim-DiMarzio. En este esquema, la energía libre de Helmholtz y las restantes funciones termodinámicas se escriben en función de un parámetro de orden δ , el cual caracteriza una fase adsorbida nemática de una isotópica permitiéndonos tener un control sobre la orientación de las especies adsorbidas.

7. Interacción entre nanocilindros magnéticos ordenados en arreglos triangulares

E. Cisternas, Y. Vásquez, E. E. Vogel

Departamento de Ciencias Físicas, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

Las propiedades de nanohilos y nanotubos magnéticos, en general nanocilindros magnéticos, sugieren potenciales aplicaciones tecnológicas y, en consecuencia, han atraído considerable interés. Debido al proceso de sintetización, los nanocilindros resultan prácticamente las mismas dimensiones geométricas, encontrándose paralelos y ordenados en arreglos triangulares dentro la membrana (Alumina o Silicio) utilizada como matriz para obtenerlos. La interacción entre dos cilindros magnéticos se ha estudiado tanto desde el punto de vista energético como de la fuerza entre ellos, y en este trabajo avanzamos hacia el estudio de la interacción resultante entre los nanocilindros atrapados en la

membrana en la que son crecidos. Con este propósito partimos por estudiar la energía y fuerza de repulsión resultante entre dos nanocilindros paralelos, y luego ampliamos el análisis a la interacción de ellos ordenados según el arreglo impuesto por la membrana. La consideración de sistemas discretos (pocos cilindros individuales) como de sistemas continuos (grandes cantidades de cilindros) nos permiten extender el análisis a una membrana macroscópica, que corresponde a la configuración obtenida experimentalmente. Además, la interacción resultante se analiza bajo los diferentes regímenes que corresponden a la modificación de las características geométricas de los cilindros y del arreglo: radios interno y externo, largo, y separación entre primeros vecinos. Por último mostramos que la aplicación de un campo magnético externo sobre una configuración de nanocilindros posible de obtener en laboratorio, es capaz de producir una deformación en la membrana que los contiene y discutimos la posibilidad de observar este efecto experimentalmente.

8. Estudio sobre metaestabilidad en el modelo de Potts de q estados utilizando un algoritmo de Monte Carlo basado en GPGPU

Ezequiel E. Ferrero, Juan Pablo De Francesco, Nicolás Wolovick, Sergio A. Cannas
CAB, FaMAF-UNC

Implementamos un código en paralelo que corre en GPUs para realizar simulaciones de Monte Carlo del modelo de Potts de q estados bidimensional. El algoritmo se basa en un esquema de actualización tipo “tablero de ajedrez” y asigna generadores independientes de números aleatorios a cada hilo (un hilo por spin). La implementación permite simular sistemas del orden de 10^9 spins con un tiempo promedio de fliepo por spin de 0,147ns en la tarjeta gráfica más rápida entre las testeadas, representando una aceleración de 155x comparada con un código serial optimizado corriendo en una CPU standard.

La posibilidad de realizar simulaciones de alta velocidad para sistemas suficientemente grandes nos permitió brindar una evidencia numérica positiva a cerca de la existencia de metaestabilidad en sistemas muy grandes, basados en el criterio de Binder, a saber, en la existencia o no de singularidades del calor específico en temperaturas spinodales distintas de la temperatura de transición.

9. Modelado del sistema complejo de calificación de películas Netflix utilizando redes bipartitas

E. F. Lavia, A. Chernomoretz, P. Balenzuela

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

En este trabajo se analiza y modela un sistema complejo construido a partir de la base de datos del sistema online de alquiler de películas Netflix pensado en términos de redes bipartitas de calificación usuario-película. Los resultados del modelo presentado muestran que las principales propiedades estadísticas de estas redes están basadas en dos características relevantes: un mecanismo de “attachment preferencial” para la selección de películas por parte de los usuarios, y un patrón de comportamiento en los mismos caracterizado por ráfagas de actividad separadas por largos períodos de pasividad.

10. Transformaciones martensíticas: comparación numérica y experimental de ciclos pseudoelásticos

M. F. Laguna, E. A. Jagla

Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro

Una transformación martensítica es una transformación de estado sólido, de primer orden, entre una fase de mayor simetría denominada austenita y otra de menor simetría y menor temperatura llamada martensita. Los materiales que sufren esta transformación poseen propiedades que dan lugar a una gran cantidad de aplicaciones prácticas y que resultan muy interesantes desde el punto de vista teórico. Uno de los efectos más fascinantes relacionados con esta transformación es la pseudoelasticidad. Se refiere a la propiedad de estos materiales de regresar a su forma original luego de haber sufrido una deformación muy superior a la del límite elástico, sin evidenciar daño por deformación plástica. Hemos desarrollado un potencial isotrópico de dos cuerpos para un conjunto de partículas clásicas idénticas que nos permite modelar transformaciones martensíticas y estudiar en detalle los procesos que se asocian habitualmente a dichas transformaciones. Por medio de simulaciones numéricas atomísticas, estudiamos el comportamiento del sistema al ser sometido a deformaciones de diferente magnitud y analizamos su dependencia con la temperatura. Comparamos los ciclos pseudoelásticos obtenidos con los que se observan experimentalmente.

11. Comportamiento de la estructura de vórtices en $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ ante la presencia de potenciales de anclaje superficiales débiles

L. Tosi, M. F. Laguna, Y. Fasano

Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro

En este trabajo se estudia teórica y experimentalmente la interacción de la materia de vórtices nucleada en el superconductor de alta temperatura crítica $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ con potenciales superficiales de anclaje cuasiperiódicos. Experimentalmente se utilizó la técnica de decoración magnética, tanto para generar los potenciales de anclaje superficiales con simetría hexagonal y orden cuasicristalino, como para visualizar las posiciones de los vórtices con resolución de vórtices individuales en áreas de estudio extendidas (del orden de mil vórtices). El estudio teórico consiste en realizar simulaciones numéricas de Dinámica de Langevin en dos dimensiones para modelar el comportamiento de un sistema de vórtices interactuantes que obedecen una dinámica disipativa amortiguada. Mediante ambos enfoques se discute el efecto de la condición de conmensurabilidad de los potenciales de anclaje sobre la estructura de vórtices nucleada con diferentes propiedades elásticas. Particularmente, se investiga la mejora del orden orientacional y posicional de la estructura.

12. Autoensamble químico de especies monoatómicas con número de coordinación variable

Lucas Ismael Candia, Guillermo Daniel García, Fabricio Orlando Sanchez-Varretti, Félix Nieto

FRSR UTN, FCFMN UNSL, CONICET

En numerosos trabajos actuales se manifiesta la importancia del fenómeno de autoensamble. Esta importancia deviene de varios factores, entre ellos se encuentra la ubicuidad de los fenómenos de autoensamble en procesos naturales de todas las escalas de tamaño. Su comprensión y análisis cuantitativo nos permite predecir el comportamiento de magnitudes relevantes en estas estructuras.

Este comportamiento está relacionado íntimamente con las estructuras fractales emergentes en las más diversas situaciones de la naturaleza.

En el presente trabajo se ha implementado un modelo estadístico que consiste en una variación del modelo tradicional de la generación de estructuras fractales DLA. Dicha variación consiste en modificar el número de coordinación de las entidades que intervienen en la formación de estas estructuras y la proporción de las mismas. El modelo tradicional consiste en la agregación de partículas con cuatro enlaces (aquellos a primeros vecinos), en este trabajo se presentan estructuras generadas con mezclas de partículas de cuatro y dos enlaces (en distintas proporciones). Esta metodología está inspirado en los mecanismos de unión atómica en el que los átomos que intervienen comparten sus electrones de valencia. De manera análoga, las partículas que se analizan poseen un número de uniones posibles (número de coordinación).

En el trabajo se miden tres parámetros de gran importancia para determinar las características del objeto estadístico logrado: dimensión fractal del caminante (d_w), dimensión fractal (d_f) y dimensión espectral (d_s).

Estos parámetros son estudiados con el fin de analizar la transición entre los dos extremos de coordinación puramente bivalentes ($d_f = 1$) y puramente tetravalentes ($d_f = 2$). Los resultados obtenidos permiten vislumbrar estructuras distintas de las tradicionales.

13. Gas de electrones en 3D: algoritmo genético para la función de distribución

C.O. Soico¹, C.M. Carlevaro^{2,3}, D.G. Renzi⁴, F. Vericat^{2,5}

¹Area Física Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas UNR, ²IFLYSIB - CONICET La Plata, ³UDB Física - UTN FRBA, ⁴Facultad de Ciencias Veterinarias UNR, ⁵GAMEFI Facultad de Ingeniería UNLP

En este trabajo consideramos la aplicación de un algoritmo genético, como herramienta de optimización, al cálculo de la función de distribución de pares del gas de electrones para la cual proponemos una generalización de la aproximación hipercadena cuántica. La expresión propuesta contiene ciertos parámetros que se determinan minimizando, mediante el algoritmo genético mencionado, la energía del sistema. Comparamos las funciones así obtenidas con las correspondientes calculadas mediante simulaciones Monte Carlo realizadas por otros autores tanto en la versión variacional como difusional. La comparación muestra un muy buen acuerdo especialmente con los resultados de Monte Carlo difusional.

14. Estudio de Monte Carlo de la adsorción multicomponente en monocapa sobre una red cuadrada.

Guillermo Daniel García, Fabricio Orlando Sanchez-Varretti, Fernando Bulnes, Antonio José Ramirez Pastor

FRSR UTN, FCFMN UNSL, CONICET

Mediante simulación de Monte Carlo se ha estudiado la adsorción de mezclas binarias interactuantes sobre sustratos de geometría cuadrada en la asamblea gran canónica y en el marco del modelo de gas de red. Este método de trabajo ha demostrado ser una herramienta poderosa y adecuada para estudiar y analizar adsorbatos que poseen múltiples componentes con interacciones laterales.

Las energías implicadas en el proceso de adsorción son cuatro: energía de interacción entre una partícula monomérica (tipo A o B) y un sitio de la red; energía de interacción entre dos partículas A vecinas; energía de interacción entre una partícula A y una partícula B vecina y energía de interacción entre dos partículas B vecinas. El proceso se analiza a través de las isothermas parciales y totales, del calor diferencial de adsorción (q_A y q_B) y la energía del sistema.

En este estudio nos enfocamos en el caso de interacciones laterales repulsivas, donde una variedad de estructuras ordenadas se observan en las capas depositadas, dependiendo del valor de los parámetros de interacción. Se observa una dependencia entre el cubrimiento superficial parcial de ambas especies. Los resultados pueden ser, en principio, aplicados para el estudio de redes de cualquier topología y parecen ser muy útiles para la interpretación de resultados experimentales.

15. Efectos de las fluctuaciones de la longitud de las cadenas en la viscosidad

G. R. Terranova, C. M. Aldao, H. O. Martín

Universidad Nacional de Mar del Plata, IFIMAR, INTEMA (CONICET)

Comúnmente se acepta el hecho de que las fluctuaciones de la longitud de las cadenas aumentan el exponente de la viscosidad para cadenas que difunden por reptación. Se encuentra que, en el modelo discreto del collar, esas fluctuaciones cumplen un rol inesperado ya que pueden hacer que dicho exponente disminuya. En este trabajo se presenta un análisis detallado de la relación que hay entre el carácter discreto del modelo y en cómo se producen las fluctuaciones. Básicamente, se encuentra que cuando las fluctuaciones son simétricas sus influencias son las esperadas, pero aparecen nuevos efectos cuando no son simétricas.

16. Reacciones sobre partículas metálicas soportadas

J. L. Sales, M. V. Gargiulo, G. Zgrablich

Dpto. de Geofísica y Astronomía FCEFyN - IEE - U. N. de San Juan, INFAP - CONICET U.N. de San Luis

Se propone un modelo general, mediante la simulación cinética de Monte Carlo, para describir la cinética de reacciones moleculares que ocurren sobre partículas metálicas soportadas que se deforman por efecto de la temperatura. El modelo se aplica al estudio de la reacción de oxidación del CO. Se determinan los efectos de las interacciones adsorbato-adsorbato y metal-adsorbato y de la difusión del CO y de los átomos metálicos sobre la ventana de reacción y sobre la velocidad de reacción

17. Influencia del mecanismo de salto en el coeficiente de difusión superficial

J. J. Torrez Herrera, G. A. Ranzuglia, S. J. Manzi, V. D. Pereyra

Departamento de Física, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, Argentina.

Diferentes mecanismos de saltos han sido introducidos para analizar el coeficiente de difusión superficial para partículas adsorbidas en una y dos dimensiones. El método de expansión del gradiente y simulaciones numéricas mediante el método de Monte Carlo cinético han sido implementados para calcular el coeficiente de difusión traza (D^T) y de saltos (D^J), en el marco del gas de red,

con interacciones a primeros vecinos. La cinética de estado inicial (CEI), la cinética de estado final (CEI) y diferentes cinéticas de estado inicial-final (CEIF) son implementadas para analizar el comportamiento de D^T y D^J en función del cubrimiento superficial y la temperatura. En particular se observa que en el caso de las CEIF restricciones adicionales al principio de balance detallado son necesarias para obtener un comportamiento físicamente consistente de ambos coeficientes. Se ha analizado también la influencia de saltos a vecinos próximos cercanos y la consecuencia sobre el comportamiento de ambos coeficientes.

18. Comportamiento del agua confinada en cavidades hidrofóbicas modelo, túneles y nanotubos de carbono

E. P. Schulz, L. M. Alarcón, G. A. Appignanesi

Area Fisicoquímica, Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, INQUISUR, CONICET

En este trabajo se exploró, por medio de simulaciones de dinámica molecular, el comportamiento del agua en contacto con cavidades nanométricas hidrofóbicas modelos y túneles construidos en monocapas de alcanos. El objetivo es analizar las restricciones geométricas, evitando la especificidad química y las heterogeneidades presentes en sistemas más realistas. Los resultados son comparados con los obtenidos para nanotubos de pared simple de tamaños similares. Se muestra el comportamiento de llenado en función del tamaño de las cavidades. Mientras que las cavidades de tamaño subnanométrico permanecen vacías la mayor parte del tiempo, ponemos en manifiesto que el llenado de pequeñas cavidades nanométricas es un proceso de naturaleza dinámica, con alternancia de estados llenos y secos. Respecto de los túneles construidos a través de las monocapas, determinamos el diámetro mínimo de llenado, el cual es aproximadamente el doble del correspondiente a los nanotubos, evidenciando un comportamiento más hidrofóbico. Se analizó el rol de los puentes de hidrógeno, mostrándose que los mismos tienen una clara preferencia por orientarse de acuerdo con la dirección del túnel.

19. Estructuración y orientación de las moléculas de agua en superficies hidrofóbicas modelo: placa de grafeno, nanotubos de carbono y fullerenos

L. M. Alarcón, D. C. Malaspina, E. P. Schulz, M. A. Frechero, G. A. Appignanesi

Area Fisicoquímica, Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, INQUISUR, CONICET

Estudiamos la estructuración y la orientación de las moléculas de agua en superficies hidrofóbicas modelo, por medio de simulaciones de dinámica molecular. Nos centramos en el rol de la geometría en el agua de hidratación comparando superficies planas (placa de grafeno) con superficies convexas con diferentes curvaturas, tales como la superficie exterior de nanotubos de carbono y fullerenos de diferentes radios. En todos los casos, nos encontramos con que la primera capa de agua de hidratación tiende a ser más estructurada que el agua bulk, donde se observa una orientación de estas moléculas respecto de la normal a la superficie de forma semejante a la interfase agua-aire pero con las orientaciones invertidas. Además observamos que cuando la curvatura de la superficie se vuelve más pronunciada las moléculas de agua están menos estructuradas y orientadas. Esta pérdida de estructura local del agua superficial debida a la curvatura representa una tendencia suave en superficies extensas (nanotubos), perdiendo más rápidamente su estructura y

orientación en superficies menos extensas (fullerenos), siempre dentro del régimen sub-nanométrico

20. Dime qué ensamble usas y te diré qué universalidad obtienes

L. G. López, D. H. Linares, A. J. Ramirez Pastor

Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, Instituto de Física Aplicada, CONICET, 5700 San Luis, Argentina

Mediante simulación de Monte Carlo y escaleo de tamaño finito, estudiamos la universalidad de la transición de fase orientacional que experimenta un modelo de cadenas lineales rígidas, autoensambladas sobre redes cuadradas y triangulares. El sistema está compuesto por monómeros, con dos polos atractivos, que polimerizan reversiblemente en cadenas polidispersas. Los diagramas de fases muestran que la fase nemática es estable a cubrimientos altos y a bajas temperaturas. En este trabajo discutimos la discrepancia en los resultados obtenidos, a cubrimientos intermedios, al usar diferentes ensambles. En el ensamble canónico, la determinación de los exponentes críticos indica que la clase de universalidad de la transición es la de Potts 2D con $q = 1$ (percolación ordinaria); independientemente de la geometría de la red. Sin embargo, las simulaciones en el ensamble grand canónico señalan que la universalidad es la de Potts 2D con $q=2$ en la red cuadrada y Potts 2D con $q = 3$ en la red triangular.

21. Aproximación cuasi-química: estudio del comportamiento crítico de k -meros atractivos

M. Dávila, P. Longone, A. J. Ramirez Pastor

Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis. INFAP, CCT-San Luis, CONICET.

En un trabajo anterior [1] se extendió la aproximación cuasi-química de partículas adsorbidas en redes bidimensionales con interacciones laterales a primeros vecinos, a partículas que ocupan k sitios consecutivos en la red (k -meros lineales). En el presente trabajo se observó mediante esta aproximación, el comportamiento crítico de k -meros con interacciones laterales atractivas. Se halló que, para temperaturas debajo de la crítica, el sistema sufre un cambio de fase de primer orden. La transición se estudió en detalle calculando el diagrama de fase (temperatura-cubrimiento), cubrimiento crítico vs. k e interacción crítica vs. k .

[1] M. Dávila, F. Romá, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, Surf. Sci. 600 (2006) 2011-2025.

22. Transiciones de fase de primer orden de k -meros repulsivos sobre la red cuadrada

P. M. Pasinetti, F. Romá, M. Rodríguez, A. J. Ramirez Pastor

Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis - CONICET. Chacabuco 917, D5700BWS San Luis, Argentina.

Simulaciones de Monte Carlo han sido usadas para estudiar el comportamiento crítico de k -meros lineales sobre la red cuadrada a cubrimiento $1/2$. Se observa, a temperatura crítica finita, una transición de fase entre el estado desordenado y una fase ordenada, caracterizada por filas de k -meros

separadas por k sitios vacíos adyacentes. Trabajos previos sugieren la ocurrencia de una transición de fase continua, aunque no perteneciente a ninguna universalidad conocida. Presentamos ahora un nuevo estudio exhaustivo, realizado con el más eficiente algoritmo de exchange Monte Carlo, en el cual se muestra para este sistema, una fuerte indicación de la ocurrencia de transiciones de fase de primer orden.

23. Relajación de escalones superficiales ante cambios bruscos de temperatura

P. M. Centres, S. Bustingorry

(1) *Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis-CONICET, Chacabuco 917, D5700HHW, San Luis, Argentina,* (2) *CONICET y Centro Atómico Bariloche, Av Bustillo 9500, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina.*

El estudio de las propiedades dinámicas de sistemas de escalones en superficies es fundamental en ciencia de superficies. Las propiedades geométricas globales de este sistema se pueden describir a partir de su rugosidad, W^2 . Cuando el sistema está fluctuando en determinadas condiciones y se le cambia bruscamente la temperatura, su rugosidad muestra una relajación hacia el estado de equilibrio final. En este trabajo estudiaremos la relajación del sistema de escalones en superficie utilizando simulaciones numéricas del modelo *terrace-step-kink* (TSK). Mostraremos cómo la relajación puede describirse con una ley de potencias, $W^2 \sim \Delta t^{-\gamma}$, con Δt el tiempo desde que se perturbó el sistema y γ el exponente característico de relajación. Tanto para escalones independientes como interactuantes se obtiene $\gamma \approx 1/2$, en acuerdo con lo que se encuentra en la ecuación de Edwards-Wilkinson (EW) unidimensional. Para los parámetros utilizados no se observa el régimen con $\gamma = 3/2$, también presente en la ecuación de EW. Tampoco se observan valores del exponente de relajación correspondientes a la ecuación de EW bidimensional, lo cual sugiere que las fluctuaciones a corta escala son fundamentales en la relajación del sistema.

24. Fideos en las estrellas (de neutrones)

P. A. Giménez Molinelli, C. O. Dorso

LAFEC, Depto. de Física - FCEyN - UBA

A densidades subnucleares, cuando los núcleos atómicos están cerca de fundirse para formar materia nuclear uniforme, se espera que haya configuraciones energéticamente favorables con estructuras espaciales exóticas. En orden de densidad creciente habría: estructuras compactas (llamadas ‘Gnocci’), cilíndricas (o ‘Spaghetti’) y laminares (o ‘Lasagna’). Estas estructuras son de suma importancia para entender el mecanismo de formación de supernovas producidas por el colapso de estrellas masivas y se hallarían presentes en la corteza interior de estrellas de neutrones. Colectivamente reciben el nombre de “Nuclear pasta” y subyacen a una transición de fase morfológica de la materia nuclear a bajas temperaturas. Su existencia se debe a un balance sutil (frustración) entre la interacción de Coulomb y la energía nuclear de superficie.

En este trabajo estudiamos la formación dinámica de estas estructuras usando un modelo clásico de interacción nucleón-nucleón y técnicas de dinámica molecular.

25. Patrones estáticos exactos en un sistema reacción-difusión fraccionario

J. I. Deza, R. R. Deza, H. S. Wio

IFIMAR (UNMdP-CONICET), IFCA (UC-CSIC)

Los sistemas reacción-difusión son un paradigma en la investigación sobre fenómenos de no equilibrio. Además de sus aplicaciones en química y física, este enfoque ha sido útil para la comprensión de la morfogénesis, la dinámica poblacional, la fisiología del tejido cardíaco y la transmisión de señales nerviosas.

Desde la teoría de procesos estocásticos, la difusión se caracteriza por una dependencia temporal lineal de la varianza. A menudo sin embargo, se encuentran ejemplos de difusión anómala en los que la varianza crece como una potencia α del tiempo: en sustratos fractales hay “subdifusión” ($\alpha < 1$), y en sistemas caóticos y procesos de búsqueda con paseos de Lévy hay “superdifusión” ($\alpha > 1$). Mientras en la teoría de procesos estocásticos, la difusión está adecuadamente descrita por paseos aleatorios, la difusión anómala necesita ser descrita en términos de paseos aleatorios de tiempo continuo, que consideran una distribución de tiempos de espera no deltiforme. Ahora bien, la descripción de la difusión anómala mediante paseos aleatorios de tiempo continuo es equivalente (desde el punto de vista macroscópico) a una PDE con derivada fraccionaria respecto del tiempo [1].

Informamos el hallazgo analítico de patrones de no equilibrio estáticos exactos en una ecuación modelo de reacción-difusión fraccionaria en un dominio acotado. La ecuación original se convierte en una ecuación de reacción-difusión espacialmente fraccionaria. El hecho de que el dominio sea acotado permite usar el método de la transformada de Laplace cuando las derivadas fraccionarias (espaciales) se definen en el sentido de Caputo.

[1] R. Hilfer (ed.), *Applications of Fractional Calculus in Physics*, World Scientific, Singapore, 1999.

[2] H.S. Wio, *An Introduction to Stochastic Processes and Nonequilibrium Statistical Physics*, World Scientific, Singapore, 1994.

26. Estabilización de nanoestructuras transitorias en catálisis heterogénea

S. E. Mangioni, R. R. Deza

IFIMAR (UNMdP-CONICET)

El desarrollo de nuevas técnicas experimentales que permiten resolución atómica en tiempo real ha revolucionado el campo de la formación de estructuras de no equilibrio en catálisis heterogénea, mostrando que los procesos con cinética rápida normalmente dan lugar a patrones de escala nanométrica.

Ertl y Mikhailov demostraron teóricamente que la presencia simultánea de reacción e *interacciones potenciales atractivas* entre las moléculas de adsorbato puede generar nanoestructuras *transitorias*. Hallaron una ecuación cinética mesoscópica *no local* que describe apropiadamente el comportamiento de partículas adsorbidas con interacciones laterales atractivas, y que se puede escribir como una ecuación de reacción-difusión *con coeficientes dependientes del campo*. Cuando se incorpora una reacción química fuera de equilibrio, estos patrones se estabilizan y crecen.

Recientemente, ese objetivo se ha logrado mediante un ruido multiplicativo particular [1]. Sin embargo, la complejidad de las ecuaciones cinéticas no locales oscurece el mecanismo físico subyacente que conduce a la formación de patrones a nanoescala. Para aclarar la cuestión, recurrimos a un modelo simplificado que reproduce cualitativamente los resultados de los estudios realizados sobre

el modelo completo [2]. Nuestras hipótesis principales son: 1) los patrones son aproximadamente armónicos, 2) la dinámica cualitativa puede ser estudiada concentrándose en los *extremos* y el *cero* del patrón.

Así catalogamos los sutiles efectos que subyacen a la formación de patrones por fuerzas atractivas sub-dominantes, aclaramos la relación entre el dominio de fuerzas atractivas y el atractor dominante de la dinámica, señalamos la crucial dependencia del fenómeno en un solo parámetro p , y encontramos que la alinealidad no es necesaria para producir un patrón basado en el equilibrio entre *difusión y fuerzas atractivas*.

[1] S.E. Mangioni, *Physica A* **389**, 1799 (2010). [2] S.E. Mangioni y R. R. Deza, *Phys. Rev. E* **82**, 042101 (2010).

27. Análisis cuantitativo de un modelo de doble estado para agua, en el régimen de líquido normal y sobreenfriado

Sebastián R. Accordino¹, J. Ariel Rodríguez Fris¹, Francesco Sciortino², Gustavo A. Appignanesi¹

¹*Sección Físicoquímica - INQUISUR y Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Avenida Alem 1253, 8000-Bahía Blanca, Argentina.*

²*Dipartimento di Fisica and CNR-ISC, Università di Roma La Sapienza, Piazzale A. Moro 2, 00185 Roma, Italy.*

Diversas evidencias han ayudado a establecer la naturaleza de un doble estado estructural para el agua líquida. Así tanto en el régimen de líquido normal como sobreenfriado se ha demostrado que el agua consiste en una mezcla de moléculas bien estructuradas (baja densidad local) y desestructuradas (alta densidad local). Sin embargo los análisis cuantitativos efectuados no logran determinar de manera concluyente la fracción de ambos tipos de moléculas. Un enfoque reciente nos permitió abordar esta dificultad combinando un índice de estructura local con minimizaciones de energía potencial. Así en el presente trabajo determinamos cuantitativamente la fracción de moléculas estructuradas en función de la temperatura para diferentes densidades. Esto nos permite convalidar las predicciones de modelos de doble estado.

28. Dependencia con la temperatura de la estructura del agua de hidratación de superficies hidrofóbicas y proteínas, y la transición líquido-líquido del agua.

D. C. Malaspina, S. R. Accordino, J. A. Rodríguez Fris, G. A. Appignanesi

Área Físicoquímica, Departamento de Química Universidad Nacional del Sur, INQUISUR, CONICET

Estudiamos la estructura y orientación de la primer capa de hidratación de una placa de grafeno y de la proteína lisozima mostrando que en ambos casos esta capa esta significativamente mejor estructurada que el agua bulk. La restricción geométrica que impone la interfase produce que las moléculas de agua adyacentes a la superficie pierdan un puente de hidrógeno y desplacen al cuarto vecino lejos de la superficie, disminuyendo así la densidad local y favoreciendo una estructuración local de tipo hielo hexagonal (de forma similar a la interfase agua-aire pero orientada de modo opuesto a lo largo del eje perpendicular al plano de la placa). A medida que disminuimos la tempe-

ratura se observa una mejora en el ordenamiento de las moléculas de agua de la capa de hidratación preservando el efecto antes mencionado producido por la interfase. Adicionalmente, mostramos la existencia de evidencia de una transición líquido-líquido (cruce de la línea de Widom) a través de diferentes parámetros estructurales y mostramos que esta transición dinámica del agua corresponde a la incorrectamente llamada “transición vítrea de proteínas hidratadas”.

29. Simulación de Monte Carlo para el fenómeno de enantioseparación por medio de electroforesis capilar

V. A. Bustos¹, M. G. Acosta², M. R. Gómez², V. D. Pereyra¹

¹ *Departamento de Física, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, Argentina,* ² *Departamento de Farmacia, IQUISAL-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, Argentina.*

En esta presentación se estudia la separación de dos moléculas quirales por medio de electroforesis capilar. El proceso de enantioseparación fue analizado por medio de simulación de Monte Carlo dinámica. Se ha considerado para ello un sistema simplificado que consiste en dos enantiómeros S (R) y un selector quiral C, que reacciona con ambos enantiómeros para formar complejos de RC (SC). La dependencia de la enantioseparación (diferencia entre la movilidad de las especies complejadas) con la concentración del selector quiral y con la temperatura se han analizado mediante el uso de la simulación. El efecto de la de carga constante de unión y el de los complejos son también analizados. Los resultados son cualitativamente satisfactorios, a pesar de la simplicidad del modelo.

30. Efecto de la deformación del adsorbente durante el proceso de adsorción sobre las características termodinámicas de un fluido en materiales nanoporosos

V. Cornette, J. C. A. de Oliveira, R. H. López, G. Zgrablich

Instituto de Física Aplicada (INFAP), Universidad Nacional de San Luis, CONICET

Se reconoce desde hace tiempo que la adsorción en materiales porosos está acompañada por una deformación. Cambios en el volumen del adsorbente han sido investigados experimentalmente para la adsorción en zeolitas, vidrios porosos, carbones, MOFs y polímeros. Estos materiales tienen numerosas aplicaciones como adsorbentes selectivos, catalizadores y sustratos de biosensores.

A medida que la cantidad adsorbida aumenta, la deformación es observada como un hinchamiento del adsorbente. Esta es la razón por la que estudios previos han atribuido este fenómeno a la presión de *spreading*. Sin embargo, tal aproximación no explica la contracción del adsorbente, la cual es observada a baja adsorción para diferentes vapores y gases.

Las características específicas de la deformación en la adsorción, la cual depende fuertemente de la naturaleza química y propiedades físicas del sólido, son cruciales para entender y mejorar la estabilidad e integridad mecánica del material en los ciclos de contracción y expansión.

En ese trabajo analizamos cómo se ven modificadas las isotermas, calor de adsorción y distribución de tamaños de poros en materiales nanoporosos, cuando la deformación en la adsorción es considerada, por medio de simulación de Monte Carlo.

31. ¿Cómo fabricar dispositivos rectificadores dobles que presenten efecto ratchet cruzado?

V. I. Marconi¹, A. B. Kolton², J. I. Martín³, M. Vélez³, J. M. R. Parrondo⁴

¹Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba and IFEG-CONICET, X5000HUA Córdoba, Argentina. ²CONICET, Centro Atómico Bariloche, 8400 S.C. de Bariloche, Argentina. ³ Dept. Física, Universidad de Oviedo-CINN, 33007 Oviedo, Spain. ⁴Dept. Física Atómica, Molecular y Nuclear and GISC, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain.

Estudiamos el movimiento de una pared de dominio en un medio bidimensional teniendo en cuenta los grados de libertad elásticos de la pared, y el anclaje geométrico producido tanto por los bordes de la muestra como por los huecos de la misma. Este análisis exhaustivo es usado para analizar las condiciones geométricas necesarias para optimizar efectos ratchet cruzados recientemente observados en experimentos con películas ferromagnéticas nanodiseñadas[†].

Cálculos exactos como función de la geometría y simulaciones numéricas han sido utilizadas para obtener los campos críticos anisotrópicos de desanclaje de paredes chatas y paredes con kinks en arreglos rectangulares de triángulos. El fin es mostrar con un modelo elástico genérico para interfaces *cómo* construir un rectificador capaz de presentar efectos ratchet cruzados o perfiles de potenciales efectivos para “controlar” el movimiento de interfaces o frentes invasivos[‡].

[†]A. Pérez-Junquera et al. *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 037203 (2008).

[‡]V.I. Marconi, A.B. Kolton, J.A. Capitán, J.A. Cuesta, A. Pérez-Junquera, M. Vélez, J.I. Martín, J.M.R. Parrondo, *cond-mat/arXiv:1012.5471*, PRB 2011.

32. ¿Cómo permanecer “seco” en el agua sin sacrificar reactividad?

Erica Schulz, Marisa Frechero, Gustavo Appignanesi, Ariel Fernández
INQUISUR. CONICET. Universidad Nacional del Sur.

Este trabajo explora la paradójica situación de que las proteínas solubles mantienen sus regiones expuestas vulnerables y/o reactivas protegidas del ataque del agua. Abordamos una pregunta central de la biología estructural: ¿el diseño natural aprovecha el costo termodinámico de resignar la esfera de coordinación del agua para “sella” regiones expuestas al solvente?. Es decir, mostramos que las proteínas solubles pueden permanecer secas en el agua sin sacrificar reactividad porque pueden reconciliar la estabilidad con la interactividad. La distancias mínimas entre los puentes de H intramoleculares de la proteína y las moléculas de agua es típicamente de unos 3 Angstroms pero se distancia mucho más de los puentes de H mal protegidos o dehidrones (alrededor de unos 5 Angstroms), lo cual resulta a priori inesperado, pero es obviamente necesario para la subsistencia de la estructura local de la proteína. Mostramos que un sello eficiente para estas estructuras des-arropadas se obtiene mediante la modulación de la rugosidad local de la superficie de la proteína que debe estar finamente sintonizada de modo de aprovechar la reticencia propia del agua a perder

a su esfera de coordinación (y por consiguiente los puentes de H agua-agua). Es precisamente esta protección geométrica la que permite la existencia de dehidrones en la superficie, los que de otro modo serían vulnerables y atentarían contra la estabilidad estructural local de la proteína. Dicho nivel de rugosidad local para permanecer “seco” en el agua representa evidentemente un costo adicional para la proteína, pues no se verifica en regiones carentes de dehidrones donde el contenido hidrofóbico local es suficiente para mantener “seca” la interacción intramolecular sin necesidad de recurrir a la geometría local. La estadística del estudio de la rugosidad superficial de proteínas se generó sobre una base de 2661 proteínas.

33. “Efecto de las interacciones laterales repulsivas sobre la transición de fase isotrópico-nemática en sistemas de k -meros lineales adsorbidos en sustratos bidimensionales”

P. Longone, M. Dávila, D. H. Linares, A. J. Ramirez Pastor

Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis-CONICET, Chacabuco 917 (5700) San Luis, Argentina.

Mediante Simulación de Monte Carlo y análisis de escaleo de tamaño finito, se estudió la transición de fase isotrópico-nemática en un sistema de k -meros lineales adsorbidos sobre redes cuadradas con interacciones laterales repulsivas. Este estudio permitió determinar que existe una transición de fase continua y que pertenece a la universalidad de Ising 2D.

34. Influencia de la interacción lateral en reacciones superficiales explosivas

P. A. Velasco, M. Rivera Rodríguez, S. J. Manzi, V. D. Pereyra

Departamento de Física, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, Argentina.

La llamada “explosión superficial”, observada a través de experimentos de Reacción Térmica Programada, en la reducción catalítica de NO por CO sobre Pt, ha sido discutida en numerosos trabajos en la literatura. En esta presentación se da una explicación basada en la competencia entre las energías de interacción lateral para la partícula en el estado adsorbido y en el estado activado. Diferentes reacciones y mecanismos de reacción son estudiados en forma analítica exacta para el caso unidimensional y mediante simulación numérica usando el método de Monte Carlo dinámico y aproximaciones teóricas, en el caso bidimensional.

35. Dinámica de Colisión de Nanogranos de Carbono

D. S. Bertoldi¹, E. M. Bringa^{1,2}

Instituto de Ciencias Básicas-UNCuyo¹, CONICET²

Se estudió, con Dinámica Molecular, el fenómeno de colisión de dos nanogranos de diamante, con una interacción atómica descrita por el potencial de Brenner. Dicho estudio se centró en el análisis de la dinámica de colisión bajo distintas velocidades de choque y parámetros de impacto y su acción sobre la configuración atómica de los clusters. A altas velocidades de choque se apreciaron cambios de hibridación de estructura sp^3 a estructura sp^2 , alterando substancialmente las propiedades del

sistema. Las colisiones simuladas suceden naturalmente en nubes de polvo interestelar pudiendo generar efectos observables.

Segunda sesión - Jueves 5

1. Estudio de la dinámica de una epidemia mediada por un vector

A. Babino, A. D. Medus, C. O. Dorso
Departamento de Física, FCEN, UBA

La comprensión de la dinámica de la propagación de las enfermedades ha sido de gran importancia en la historia de la salud pública. Aún persisten, en zonas tropicales y subtropicales, epidemias de enfermedades como el dengue y la fiebre amarilla, las cuales están mediadas por un vector como el *aedes aegypti*. Con el objetivo de comprender las condiciones que dan lugar al desarrollo de éste tipo de epidemias proponemos un modelo computacional que simula la evolución de una enfermedad en una ciudad. El algoritmo consta con dos tipos de agentes, humanos y vectores, distribuidos inicialmente en una cuadrícula de 100×100 celdas con 100 agentes de cada tipo en cada sitio. En la simulación los vectores mantienen sus posiciones en la ciudad y pueden picar a las personas habitando su misma celda. Por otro lado las personas pueden realizar dos tipos de movimientos dentro de la ciudad: paseos al azar y saltos largos hacia sitios arbitrariamente lejanos. Utilizando un modelo SEIR para las personas y uno RSEI para los vectores estudiamos la dinámica epidemiológica en función de los patrones de movimiento de las personas y de la probabilidad de que los vectores piquen a los humanos. Concluimos que la dinámica de las personas afecta principalmente la duración de la epidemia y que la probabilidad de que piquen los vectores afecta el tamaño de la misma.

2. Modelos epidemiológicos con movilidad de humanos y redes complejas

A. D. Medus, C. O. Dorso
Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires, IFIBA-CONICET

Los modelos basados en el individuo (IB) son ampliamente utilizados al momento de abordar problemas de propagación de enfermedades infecciosas en humanos. Una de sus principales ventajas consiste en que permiten abandonar la poco realista hipótesis de “mezcla uniforme” que domina la mecánica de transmisión en los modelos compartimentales originales, sustituyéndola por una aproximación más fidedigna del patrón de contactos entre individuos. Entre los modelos IB más extendidos se encuentran los que utilizan redes complejas a modo de sustrato con nodos y enlaces representando respectivamente a los individuos y sus vínculos, y los modelos de agentes móviles con interacción por contacto o proximidad. En este trabajo estudiamos la propagación de una enfermedad infecciosa por proximidad con dinámica SIR sobre una población humana. Para ello introducimos un modelo de agentes móviles que incorpora recientes hallazgos relativos al patrón de movimiento de los seres humanos (M.C. Gonzalez, C.A. Hidalgo and A.-L. Barabasi, *Nature* **453**, 479-482 (2008)). Posteriormente desarrollamos una técnica que permite construir una red de contactos pesada y mostramos que los resultados en cuanto a la dinámica de propagación de la enfermedad se corresponden con los del modelo anterior. Mostramos además que la característica de Mundo Pequeño, frecuente en las redes sociales, se encuentra íntimamente vinculada con el patrón de movimiento humano. Finalmente, analizamos la robustez de la equivalencia entre los modelos propuestos ante distintas variantes, tales como la introducción de movimientos periódicos y aperiódicos para los agentes y la adopción de un patrón de movimiento totalmente al azar para toda la población.

3. Estudio de la dinámica de transporte de nutrientes del hongo *Phanerochaete velutina*

Ana L. Pastore y Piontti, Cristian E. La Rocca, Pablo A. Macri, Lidia A. Braunstein
Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (IFIMAR). Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata - CONICET, Funes 3350, 7600 Mar del Plata, Argentina, Center for polymer studies, Boston University, Boston, MA 02215, USA

En este trabajo estudiamos el comportamiento y la formación de la estructura del hongo *Phanerochaete velutina* a través del cual se produce el transporte de nutrientes, necesarios para su crecimiento. Para su estudio consideramos la estructura del hongo crecido como una red compleja. A partir de esto analizamos sus propiedades topológicas, tales como la distribución y la correlación en las conexiones y además la dinámica del flujo de nutrientes conociendo la resistencia entre conexiones. Haciendo la analogía con un circuito eléctrico, para tiempos en que el transporte ocurre pero el hongo no crece, resolvemos las ecuaciones de Kirchhoff y calculamos la corriente sobre de cada enlace. Como resultado encontramos que la corriente en las conexiones es proporcional a la concentración de nutrientes. Este resultado junto con otras propiedades geométricas del hongo nos permite afirmar que el flujo de nutrientes se comporta como un fluido incompresible. Con este análisis macroscópico modelamos la dinámica de un proceso complejo como puede ser el crecimiento del hongo y el transporte de nutrientes de un hongo utilizando conceptos conocidos de la física.

4. Modelos de opinión sujetos a moda y temperatura social

M. Cecilia Gimenez, Jorge A. Revelli, Horacio S. Wio
IFEG (CONICET) - FaMAF (U.N.C.) - Córdoba - Argentina, IFEG (CONICET) - FaMAF (U.N.C.) - Córdoba - Argentina, Insitituto de Física de Cantabria - Santander - España.

Los años recientes han sido testigos de un importante desarrollo de actividades de la física estadística en el área de las ciencias sociales, motivado por el hecho que la física estadística es el campo natural para estudiar cómo las propiedades complejas globales tienen lugar a partir de reglas puramente locales.

Los modelos y herramientas de la física estadística han sido aplicados al entendimiento de tópicos relacionados a la caracterización del comportamiento colectivo de los individuos. En varios de estos modelos, los individuos son denominados agentes y cada uno de ellos está caracterizado por el valor de una variable que representa su opinión respecto a algún tema en particular (puede ser intención de voto a algún candidato o respuesta a alguna encuesta sobre un determinado tema). En este caso, dicha variable puede adoptar dos valores posibles (+1 ó -1). En una primera aproximación, la opinión de cada agente supuso su evolución en base a su interacción con otros agentes, mediante reglas sencillas y a un proceso más general que se dio en llamar 'temperatura social'. En una segunda aproximación (objeto del presente estudio) se estudia la influencia de la "moda", que representaría el efecto de propagandas tendientes a influir en la opinión pública en una u otra dirección. En la práctica ésta se introduce como una función periódica que actúa como un campo externo en analogía al modelo de Ising.

En este trabajo mostramos la evolución temporal de la 'respuesta social' como función de la cantidad de agentes presentes, de los ciclos de la moda, como también de la temperatura social, encontrando una rica fenomenología que incluye ciclos y fenómenos de resonancia estocástica.

5. Epidemia de Dengue y movilidad humana.

D. H. Barmak, C. O. Dorso, M. Otero, H. G. Solari

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Pabellón I

En este trabajo se exploran los efectos de la movilidad de los humanos en la dispersión de una enfermedad vectorial. Se combinaron un modelo estocástico de dengue ya presentado (en el cual el movimiento de los mismos es difusivo), con una simple representación del movimiento diario de las personas en una ciudad rectangular de 20x20 manzanas con 100 habitantes en cada una.

El patrón de movimiento de dichas personas esta descripto en términos de una red compleja en la cual los nodos representan las manzanas y los links entre ellas los viajes que realizan los individuos. Se consideraron que 50 personas por manzana realizan un viaje durante el día (hacia su lugar de trabajo por 8hs y siempre la misma locación) y luego vuelven a sus casas (los 50 restantes permanecen en su hogar todo el tiempo). En concordancia con recientes estudios sobre movilidad humana, las longitudes de los links siguen un patrón dado por una distribución de Levy-Flight truncada, donde cada individuo se encuentra asignado a un solo link.

Por medio de simulaciones numéricas se analizaron los efectos sobre propiedades como el tiempo y tamaño de las epidemias en función de distintas redes de movimiento humano subyacentes. Puede observarse que la movilidad humana juega un rol primordial en la dispersión de la enfermedad y creemos que los esfuerzos destinados a controlar dichas epidemias deben focalizarse en este hecho.

6. Transición de fase variando alcance de interacción en juego evolucionario

D. G. Hernández

Grupo de Física Estadística e Interdisciplinaria, Centro Atómico Bariloche

En este trabajo se analizó un juego evolucionario de dos estrategias en una red unidimensional que presenta una transición de fase al variar el tamaño del vecindario, o alcance de la interacción, de forma continua. La transición pertenece a la clase de universalidad DP (percolación dirigida) en 1+1 dimensiones, produciéndose entre un estado puro absorbente, donde todos los individuos poseen igual estrategia, y un estado mixto.

7. An Information Theoretical Approach to evaluate the internal dynamic of large neuronal ensembles

Fernando Montani

IFLYSIB, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina.

Recent advances in large-scale ensemble recordings allow monitoring and recording of activity patterns from multiple neural units, making possible to investigate the activity of very large neural ensembles. To understand how large ensembles of neurons process information it is necessary to develop suitable statistical models describing the response variability of the recorded responses. We investigate the internal dynamic of LFPs and action potential signals obtained from multisite extracellular microelectrode recordings of rat cortex (and GP) recordings using an Information

Theoretical Approach. Our formalism allows us to quantify the internal dynamics, by evaluating the degree of noise correlation, of the activity patterns of large neuronal ensembles.

8. When Schelling Met Michael Jackson

Francisco Nemiña, Juan P. Pinasco, Pablo Schiaffino

Dto. de Física-FCEyN-UBA, Dto de Matemática,FCEyN-UBA, U. di Tella

In the early 70s, T. Schelling proposed the first model of segregation [1], and several variants appeared since then. In these models the unhappy agents migrate in a world lattice until a stationary stage is reached where no agent is unhappy. By varying the maximum tolerance and the empty space density σ in the lattice different stages of segregation are reached while always maintaining the total number of agents of each species. The dynamics of language competition was later introduced by Abrams and Strogatz [2], and the extinction of the competing languages with less status was predicted. However, the coexistence of languages is observed in the real world (Canada, Spain). Patriarca and Leppanenn explained it by introducing disjoint zones, each language has greater status in one of them. Then, Pinasco and Romanelli [3] considered a Lotka-Volterra model, where the status of a given language has an impact on the resources available to their speakers. Those models are based on mean field approximations, but there are several agent-based models too, and similar conclusions are derived from them. By joining these two models together and introducing a new variable ρ , interpreted as the desire to migrate inside the lattice, we are able to reproduce not only the previous results (been the case $\rho = 1$ the Schelling one, while the case $\rho = 0$ gives us the Abrams and Strogatz one) but to naturally introduce coexistence of languages without the need of forcing disjoint zones. We found the phase diagram of this model in the $\sigma - \rho$ space. Here we have 3 different zones: one of segregation in the Schelling sense where the two competing languages both survive; one of extinction in the Abrams and Strogatz sense where we have extinction of one of the languages and finally a segregation phase where one of the languages dominates over the other and we observe ghetto formation.

[1] T. Schelling, *J. Math Sociol* 1 (1971) 143-186.

[2] D. M. Abrams, S. H. Strogatz, *Nature* 424 (2003) 900.

[3] J. P. Pinasco, L. Romanelli, *Physica A.* 361, 1 (2006) 355-360.

9. Una generalización de backbone para modelos de vidrios de espín tipo Ising

F. Romá¹, S. Risau-Gusman²

¹*Departamento de Física, UNSL. INFAP, CONICET.* ²*CONICET, Centro Atómico Bariloche.*

En los modelos de vidrio de espín tipo Ising que poseen un nivel fundamental (GS) degenerado, es posible definir una estructura denominada **backbone**. Tal es el caso del modelo de Edwards-Anderson con una distribución bimodal de enlaces $\pm J$, cuyo backbone puede caracterizarse mediante su red rígida (formada por aquellos enlaces que no cambian su estado, satisfecho o frustrado, en todas las configuraciones del GS) o sus espines solidarios (los espines que mantienen una determinada orientación relativa en todas las configuraciones del GS). La importancia de esta estructura, reside en que permite caracterizar las heterogeneidades espaciales que se observan tanto en el comportamiento dinámico como estático del modelo de Edwards-Anderson $\pm J$. En otras palabras, el comportamiento

físico de una región del sistema luce muy diferente si esta región se encuentra dentro o fuera del backbone.

En este trabajo estudiamos las propiedades topológicas de la denominada **rigidez**, una estructura que permite caracterizar las heterogeneidades espaciales de modelos tipo Ising con GS degenerado o no degenerado. En especial, calculamos la rigidez de una gran cantidad de muestras de diferentes tamaños del modelo de Edwards-Anderson 2D y 3D, tanto para una distribución de enlaces bimodal (GS degenerado) como Gaussiana (GS no degenerado). El análisis detallado muestra que la rigidez podría comportarse como una generalización de backbone para todos los modelos desordenados tipo Ising (incluyendo los vidrios de espín).

10. Efectos inducidos por ruido en redes de FitzHugh-Nagumo con acoplamiento antifase extendido

Guadalupe Cascallares, Gonzalo Izús, Alejandro D. Sánchez
UNMdP, IFIMAR (UNMdP-CONICET), Argentina

En este trabajo estudiamos la sincronización inducida por ruidos blancos Gaussianos en redes de neuronas excitables del tipo FitzHugh-Nagumo, con acoplamiento espacial antifase y forzado externo armónico subumbral. Se consideran los casos de acoplamientos antifase locales y extendidos, así como la competencia entre acoplamientos extendidos “antifase” y “en fase”. Para cada caso calculamos el potencial de no-equilibrio (NEP) del sistema y obtenemos teóricamente los umbrales de ruido para activación y sincronización. Las estructuras observadas, así como el comportamiento de los indicadores globales de activación y comportamiento coherente son también interpretados en términos del NEP del sistema.

11. Evacuación de personas en estado de pánico

G. A. Frank, C. O. Dorso
LAFEC, Depto. Física - FCEN - UBA

Los procesos de evacuación de personas en estado de pánico involucran fenómenos estadísticos complejos. El efecto “faster is slower” es crucial en situaciones de escape a través de una única salida. Cada individuo compite por salir lo más rápidamente posible, provocando una congestión cerca de la puerta con sus consecuentes demoras. En la literatura se propone usar obstáculos delante de la salida para reducir la presión entre individuos y facilitar la evacuación. Sin embargo, nuestra investigación con partículas auto-impulsadas mostró que esta solución depende de la habilidad de los individuos para evitar el obstáculo (Frank & Dorso, 2011). Llamamos a este fenómeno “clever is not always better”.

Una situación aparentemente más desfavorable ocurre cuando el ambiente está lleno de humo. Los individuos no pueden hallar la salida y tienden a moverse en manada (“herding”) de un lado a otro del recinto. Contrariamente a lo esperado, nuestros últimos resultados muestran que este fenómeno resta presión sobre los individuos cercanos a la puerta, facilitando el flujo saliente. Este hallazgo aún debe ponerse a prueba en situaciones con individuos caídos o inconscientes.

12. Manipulación del Movimiento de Bacterias con Sustratos Asimétricos

I. Berdakin¹, L. Venken², S. Dierckx², Y. Jeyaram³, V. V. Moshchalkov³, A. Silhanek³, J. Vanderleyden², V. I. Marconi¹, C. A. Condat¹

¹*Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Univ. Nac. de Córdoba e IFEG-CONICET, X5000HUA Córdoba, Argentina.* ²*Faculty of Bioscience Engineering - Department of Microbial and Molecular Systems, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium.* ³*Institute of Nanoscale Physics and Chemistry - Department of Physics and Astronomy, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium.*

Este trabajo está motivado por una serie de experimentos recientes en los que se logró direccionar el movimiento de células y bacterias y separar especies en sistemas mixtos por medio de microestructuras asimétricas, resultados que abren la puerta al desarrollo de interesantes aplicaciones tecnológicas. Presentamos aquí un modelo fenomenológico para estudiar numéricamente cómo influye la geometría del sustrato en el direccionamiento de microorganismos autopropulsados. Contribuimos con estos resultados teóricos a la optimización de la geometría de los microsustratos utilizados para la rectificación y separación de bacterias. El diseño de las muestras forma parte de la fase inicial de un proyecto de colaboración interdisciplinario con físicos experimentales y microbiólogos centrado en aspectos biofísicos y genéticos de la movilidad de bacterias en condiciones de confinamiento.

13. Signos de Complejidad en la Marcha Humana Normal

J. Mazzeo, G. Campiglio

Instituto de Ingeniería Biomédica-Universidad de Buenos Aires

La marcha humana es un proceso complejo que involucra aspectos mecánicos y neurológicos, información sensorial y control neuromuscular. Desde la biomecánica se la estudia en base a registros de la cinemática y dinámica de los segmentos corporales puestos en juego. Sus variables son usualmente analizadas en función de un tiempo que evoluciona acotado entre cero y cien por ciento de un único “ciclo de marcha”, bajo un supuesto de periodicidad. Una característica notable de la marcha humana es su alto número de grados de libertad. La mecánica del movimiento posee muchos grados de libertad. Su control neuromuscular posee muchos grados de libertad. Una dada acción motora admite un sinnúmero de soluciones igualmente eficientes; es así razonable esperar que la periodicidad propuesta desde el enfoque clásico sea difícilmente encontrada, al menos en forma estricta. De hecho, los registros biomecánicos reflejan pequeñas fluctuaciones rápidas ciclo a ciclo que son usualmente descartadas. En los últimos años, algunos autores están destacando la necesidad de complementar la perspectiva clásica llevando estos cambios rápidos al centro de la escena. Para ello toman provecho del marco conceptual y metodológico que ofrece la mecánica estadística. Se han reportado características fractales en series temporales conformadas por tiempos de paso. Su índice de scaling cambia durante la maduración indicando que el patrón de marcha del adulto sería recién alcanzado a los catorce años y no a los siete como se consideraba anteriormente. Otros autores remarcan que la variabilidad de una acción motora está estrechamente vinculada a la destreza para realizarla. Estos estudios apoyan la idea de que la función locomotora puede ser vista como un sistema complejo con múltiples grados de libertad cuyo comportamiento colectivo es en parte gobernado por el principio de autoorganización. El análisis clásico, ampliamente utilizado, y los más nuevos recién referidos ofrecen visiones complementarias. Sin embargo, no contamos actualmente con un vínculo cuantitativo claro entre ambos enfoques. Proponemos en este trabajo un modelo que apunta en la dirección de llenar este vacío.

14. Interacciones anticorrelacionadas, topología y dinámica en redes biológicas

J. I. Perotti, O. V. Billoni, F. A. Tamarit, S. A. Cannas
IFEG - FaMAF - UNC

Las redes biológicas de agentes interactuantes exhiben propiedades topológicas similares para un amplio rango de escalas, desde los niveles celulares hasta las redes ecológicas, sugiriendo la existencia de un ubicuo mecanismo evolutivo de ensamblado común a todas ellas [1]. Recientemente, se ha mostrado a través de un modelo que dichas propiedades topológicas pueden ser explicadas como el resultado de la acción de un mecanismo evolutivo de carácter muy general en donde la estabilidad actúa como presión selectiva [1,2]. Teniendo en cuenta que la presencia/ausencia de interacciones anticorrelacionadas afecta la estabilidad en los sistemas biológicos [3], en éste trabajo estudiamos el efecto que tiene la presencia/ausencia de anticorrelaciones en las interacciones sobre las propiedades topológicas predichas por el mencionado modelo. Encontramos que el grado de anticorrelación afecta significativamente tales propiedades topológicas, así como algunas de las propiedades dinámicas que pueden predecirse a partir del modelo.

- [1] J.I. Perotti, O.V. Billoni, F.A. Tamarit, S.A. Cannas, *Papers in Physics* 2, 020005 (2010)
- [2] J.I. Perotti, O.V. Billoni, F.A. Tamarit, D.R. Chialvo, S.A. Cannas, *PRL* 103, 108701 (2009)
- [3] S. Allesina, M. Pascual, *Theoretical Ecology*, 1, 1, (2008)

15. Predictibilidad en un modelo estadístico de terremotos

L. Aragón, E. A. Jagla
Centro Atómico Bariloche (CNEA) e Instituto Balseiro (UNCuyo), 8400 Bariloche, Argentina

La compleja dinámica de las placas tectónicas puede modelarse mediante un sistema de bloques y resortes sobre un substrato rugoso. Se utiliza un modelo que considera como variables fundamentales a los desplazamientos de los bloques y a las fuerzas de fricción entre los bloques y el substrato y cuya dinámica presenta dos escalas de tiempo muy diferentes.

Por un lado, se tiene en cuenta que los bloques se encuentran bajo la acción de una carga externa que los desplaza a una velocidad constante y bajo la acción de un mecanismo interno de relajación sobre las fuerzas de fricción (conocido como “aging”). Esta evolución cuasiestática marca una escala de tiempo lenta. Por otro lado, el sistema presenta numerosas configuraciones de equilibrio mecánico metaestable. Cuando un estado metaestable se desestabiliza, se produce una evolución rápida hasta encontrar un nuevo equilibrio, dando lugar a un evento o terremoto. Esta evolución rápida se describe mediante un modelo de autómatas celulares.

De esta manera, se cuenta con un modelo que reproduce varias de las regularidades observadas en los fenómenos sísmicos. Una es la distribución de los eventos según su tamaño conocida como ley de Gutenberg-Richter. El modelo describe esta ley, la cual es una ley de potencia; más aún, su exponente coincide con los obtenidos experimentalmente. Otra regularidad observada en la realidad y en el modelo es la existencia de réplicas en la distribución temporal y espacial de los eventos.

Teniendo un modelo razonablemente realista, se buscaron indicadores de correlaciones con el objetivo de estudiar la posibilidad de hacer predicciones de eventos futuros en el modelo, lo cual representaría un aporte al problema de la predictibilidad o no de los terremotos. Se encuentra que en ciertas circunstancias, algunos eventos de gran magnitud pueden ser sistemáticamente anticipados.

16. Efecto de las correlaciones de grado–grado sobre procesos en redes complejas

L. Valdez, L. Braunstein, P. Macri

Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (IFIMAR). Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata - CONICET, Funes 3350, 7600 Mar del Plata, Argentina, Center for polymer studies, Boston University, Boston, MA 02215, USA

Una red compleja es un conjunto de nodos y enlaces entre ellos en donde el número de enlaces por nodo está dada por una distribución. Existen distintas características topológicas en estas redes, siendo la correlación de grado–grado una de ellas. Las mediciones muestran que muchas redes reales adoptan una estructura correlacionada, por lo que es necesario incorporar esta propiedad en los modelos para construir redes. Una medida muy usada para conocer la correlación de una red es el coeficiente de Pearson r . Las redes con correlación positiva (características de las redes sociales) son llamadas asortativas, mientras que las redes con correlación negativa (características de las redes tecnológicas, como por ejemplo Internet) se llaman disasortativas. En este trabajo estudiamos el efecto que tienen las correlaciones de grado–grado sobre los procesos de percolación y propagación de enfermedades. Mediante simulaciones de percolación de enlaces en redes complejas correlacionadas, observamos que el coeficiente de correlación de Pearson no es una buena medida para caracterizar a las redes asortativas, ya que redes con el mismo r positivo pero generados con distintos algoritmos de correlación tienen distintos exponentes críticos en la criticalidad del proceso de percolación. Estudiamos también el efecto de las correlaciones en el modelo Susceptible–Infectado–Recuperado (SIR). Encontramos que las magnitudes estáticas relevantes de este modelo escalan con exponentes compatibles a los encontrados en percolación de enlaces. Por último introducimos una medida para caracterizar las ramas de infección sobre un proceso de propagación de enfermedades. Observamos que, en la criticalidad de este proceso, la longitud de las ramas de infección en redes asortativas es menor respecto de las redes disasortativas y descorrelacionadas. Esto representa una ventaja para las redes sociales (asortativas) ya que es más fácil intentar rastrear en ellas a la primera persona infectada (paciente cero).

17. Caracterización dinámica y estructural de canales iónicos en Li_2SiO_3

C. Balbuena, R. A. Montani, M. A. Frechero

Universidad Nacional del Sur- Departamento de Química INQUISUR

El método isoconfiguracional introducido por Widmer-Cooper, P. Harrowell, and H. Fynewever se presenta como una herramienta útil para encontrar los canales de conducción en un vidrio paradigmático como el Li_2SiO_3 . El sistema se ha modelado mediante el potencial de Coulomb-Buckingham utilizando el programa LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>). Los canales de conducción han sido definidos por clusters de alta propensión al movimiento de los iones litio, que tienen una disposición tridimensional particular y representan regiones dinámicamente activas para estos iones. En este trabajo caracterizamos estas regiones dinámicamente activas del sistema utilizando, además, la direccionalidad de los desplazamientos, la cual nos permite obtener información sobre el comportamiento dinámico de las partículas formadoras del canal de conducción. Esta metodología nos permitió realizar, además, una descripción estructural de esta región, la cual se encuentra en buen acuerdo con los resultados propuestos por otros autores.

Por lo tanto, la identificación de los canales de conducción mediante esta herramienta computacio-

nal permite relacionar la dinámica de los iones con la estructura vítrea.

18. Transport properties and current inversion by white Gaussian noise in a coupled ratchet model

A. J. Fendrik, M. Reale, L. Romanelli

Instituto de Ciencias - UNGS, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica

We have found, by varying two parameters, several stationary trajectories in a system consisting in many elastically coupled particles that are placed in a periodic ratchet potential on a ring. The system is assumed to be over-damped and driven by an external potential that is periodic both in space and time. The transport properties of these orbits are quite different and their values are quantified. The symmetries allows to study the orbits with and without the presence of thermal fluctuations and it is found current inversions due to the addition of white Gaussian noise. The same analysis was perform with colored noise and both results were compared.

19. Hiperinflaciones severas: Exponente crítico para la evolución de la tasa de crecimiento del nivel de precios

Martín A. Szybisz¹, Leszek Szybisz^{2,3,4}

¹*Dpto. de Economía, Facultad de Ciencias Económicas, Universidad de Buenos Aires, Av. Córdoba 2122, RA-1120 Buenos Aires (mszybisz@econ.uba.ar)*, ²*Laboratorio TANDAR, Dpto. de Física, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. del Libertador 8250, RA-1429 Buenos Aires*, ³*Dpto. de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, RA-1428 Buenos Aires*, ⁴*Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Av. Rivadavia 1917, RA-1033 Buenos Aires (szybisz@tandar.cnea.gov.ar)*

Las series temporales de la tasa de inflación y del nivel de precios acumulado durante el período final de hiperinflaciones severas son analizadas dentro del marco de un formalismo publicado recientemente [1,2]. En este modelo teórico se supone que la tasa de crecimiento $r(t)$ del logaritmo de los precios $p(t)$ está determinada por una “espectativa inflacionaria adaptativa” con retroalimentación positiva expresada como una ley de potencias. La solución de la ecuación diferencial emergente presenta una singularidad a tiempo finito t_c , que interpreta como el instante del derrumbe (“crash”) del sistema económico que se está analizando. En este trabajo mostramos que el tramo final de los episodios hiperinflacionarios ocurridos en Alemania, Grecia, Hungría, Yugoslavia, y Zimbabwe muestran un exponente común en la ley de potencias para $r(t)$. A partir de este resultado inferimos la existencia de un exponente crítico común para el proceso hiperinflacionario. El trabajo se completa con el análisis de otros indicadores económicos relevantes.

Referencias:

[1] M.A. Szybisz and L. Szybisz, Phys. Rev. E **80**, 023116 (2009).

[2] L. Szybisz and M.A. Szybisz, Advances Applic. Stat. Sciences **2**, 315 (2010).

20. Redes funcionales del cerebro humano en diferentes etapas del sueño

Pablo M. Gleiser

Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro

El cerebro humano puede ser estudiado como una red compleja, donde los vértices representan diferentes regiones anatómicas y las conexiones relaciones entre estas regiones. Así, por ejemplo, es posible definir una red anatómica, donde las conexiones entre nodos representan conexiones físicas. Por otra parte, gracias a nuevas técnicas experimentales como la resonancia magnética funcional por imágenes, es posible obtener medidas temporales de la actividad del cerebro. Al establecer correlaciones entre la actividad de las diferentes regiones es posible construir una red funcional del cerebro, donde dos regiones están conectadas si presentan una actividad correlacionada (aunque no necesariamente exista una conexión física directa).

En este trabajo mostraré como pueden construirse estas redes funcionales en general [1,2] y analizaré en particular datos experimentales obtenidos en sujetos a los que se les midió la actividad cerebral en diferentes etapas del sueño [3]. Analizaré las principales características de estas redes, incluyendo estructura de mundo pequeño, distribuciones de grado, presencia de módulos y estructura jerárquica. Finalmente discutiré la relevancia de estas medidas sobre los procesos que tienen lugar en las diferentes etapas del sueño.

[1] *An Adaptive Complex Network Model for Brain Functional Networks*

Ignacio J. Gomez Portillo, Pablo M. Gleiser

PLoS ONE 4(9):e6863 (2009).

[2] *Modelling hierarchical structure in functional brain networks*

Pablo M. Gleiser and Victor I. Spormaker

Phil. Trans. R. Soc. A **368**, 5633-5644 (2010).

[3] *Development of a Large-Scale Functional Brain Network During Human Non-Rapid Eye Movement Sleep*

V. I. Spormaker, M. S. Schröter, P. M. Gleiser, K. C. Andrade, M. Dresler, R. Wehrle, P. G. Sämann, M. Czisch.

The Journal of Neuroscience **30**, 11379-11387 (2010).

21. Modelado de Ruido Barkhausen y dinámica de magnetización mediante reglas de evolución local

D. Muraca, R. C. Buceta

Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (UNMdP - CONICET)

El presente trabajo aborda el problema de la dinámica de magnetización en películas delgadas a partir de formalismo discreto utilizando reglas de evolución local que permiten simular el movimiento de la pared de dominio magnético en un medio desordenado. En particular, se estudia el fenómeno de ruido Barkhausen en sistemas de baja dimensionalidad. En el modelo se proponen reglas de evolución local determinadas por interacciones de corto alcance (exchange) a partir de las cuales se obtienen las distribuciones de saltos y duraciones con el comportamiento crítico tipo ley de potencias típicamente observado en estos sistemas. Simulando las reglas de evolución con Monte Carlo se obtuvieron exponentes críticos próximos a los experimentales, característicos de sistemas tipo películas delgadas de materiales ferromagnéticos.

22. Algoritmo Q-Learning en Reconocimiento Automático de Potenciales Evocados relacionados a Eventos de Origen Semántico en Redes

R. Cardo, A. Corvalán

Universidad Nacional de General Sarmiento, Instituto del Desarrollo Humano

El trabajo de reconocer cuándo un evento observable a partir del comportamiento global de una red está relacionado con otro evento que involucra una subred (pequeña, pero bien conectada con la red completa) es una tarea bastante general que ocurre en muchos contextos. Un ejemplo interesante ocurre cuando una red inteligente (incluyendo redes neuronales tanto biológicas como artificiales) de propósito general interactúa con cierta subred que tiene la asignación de detectar la aparición de una incoherencia en una línea argumental que la red recibe y procesa en forma de un tren de unidades de significación. Una instancia importante ocurre cuando los médicos tratan de detectar el procesamiento semántico en el cerebro por medio de la actividad eléctrica en la corteza. Por supuesto, podrían mencionarse muchas aplicaciones análogas en redes computacionales. En este trabajo exponemos una aplicación de una implementación en Matlab de un algoritmo Q-Learning con un pre-procesamiento previo de las señales con filtros tipo Kalman para enseñar a las rutinas de software a abstraer, a partir de la difusa información global, datos más relevantes acerca de qué está discerniendo la subred de reconocimiento semántico, a pesar de que la observación directa de ello no está disponible. También presentamos algunos casos en el contexto orgánico como electrónico.

REFERENCIAS:

- [1] Cardo, R. y Corvalán, A., (2010) Identification of the responses of brain and artificial neural networks in the presence of usual and unusual stimuli by means of Kalman-type filters, *Revista de Matemática: Teoría y Aplicaciones*, Publicación del Centro de Investigaciones en Matemática Pura y Aplicada (CIMPA) y la Escuela de Matemática de la Universidad de Costa Rica. ISSN 1409-2433, Vol 18, 1ro, Pag 49-62.
- [2] Kaelbling, Leslie Pack, Littman, Michael L., Moore, Andrew W. ; Reinforcement Learning: A Survey, *Journal of Artificial Intelligence Research* 4 (1996) pages 237-285.

23. Optimización automática de experimentos con salida digital

M. F. Calabria, J. I. Deza, R. R. Deza
UNMdP, IFIMAR (UNMdP-CONICET)

La transmisión de señales intensificada por ruido se basa en la cooperación entre ruido y acoplamiento. Los parámetros del sistema deben ajustarse para maximizar su respuesta a una señal de baja frecuencia. Emulando la transmisión sináptica entre neuronas hemos considerado hace un tiempo una cadena de osciladores biestables sobreamortiguados, acoplados unidireccionalmente [1]. Una señal de baja frecuencia alimenta la entrada de la primera unidad, su salida alimenta con intensidad de acoplamiento ϵ' a la siguiente unidad, y así sucesivamente. Además se inyectan en cada elemento ruidos blancos Gaussianos aditivos independientes con intensidad D , y se mide la relación señal-ruido (SNR) en la salida de la última unidad. Se encuentra numéricamente en el plano (ϵ', D) una región tal que la SNR de salida (en dB) es máxima.

Habiendo desarrollado recientemente un hardware de control y adquisición de datos personalizado [2] y como un paso en nuestro programa experimental, decidimos comprobar esta predicción y encontrar una región equivalente que maximice la respuesta de la salida de una cadena de disparadores de Schmitt a una señal de baja frecuencia. Optimizamos automáticamente los parámetros de entrada

de las unidades para lograr máxima coherencia entre la respuesta del último oscilador y la señal de entrada. La optimización se lleva a cabo por medio de un algoritmo genético, utilizando como medidas de coherencia entrada-salida ya sea la distancia de Hamming o la información mutua, y como parámetros de entrada la relación señal-ruido y el umbral de interrupción de cada oscilador. En el caso uniforme, la configuración óptima es independiente de la medida de coherencia.

[1] R. Perazzo, L. Romanelli y R.R. Deza. *Phys. Rev. E* **61**, R3287 (2000). [2] M.F. Calabria y R.R. Deza. *Rev. Sci. Instr.* **81**, 114702 (2010).

24. Sincronización de osciladores de ráfaga por una fuente de ruido común

G. V. Savino, C. M. Formigli, J. I. Deza, R. R. Deza
FCEyT-UNT, IFIMAR (UNMdP-CONICET)

La sincronización neuronal tiene un papel fundamental en muchas funciones cerebrales complejas. Estudios teóricos han demostrado que el ruido puede mejorar la sincronización neuronal. A nuestro saber, este paradójico efecto del ruido aún no se ha reportado en ninguno de los muy pocos dispositivos físicos reales que emulan la actividad eléctrica neuronal de espigas y ráfagas. Nuestro circuito electrónico analógico [1,2] se basa en los mismos principios de funcionamiento que las neuronas y presenta los mismos escenarios de bifurcación que el modelo de Hodgkin–Huxley. A través de un único parámetro puede ser establecido en los distintos regímenes de auto-oscilación. El retrato de fase muestra un ciclo límite estable y un punto de silla, que originan las variedades estable e inestable necesarias para conseguir sincronización de fase inducida por el ruido de acuerdo con modelos teóricos previos.

Aquí presentamos evidencias experimentales de sincronización de fase y sintonización inducidos por el ruido en dos análogos electrónicos de la neurona biológica, no idénticos y débilmente acoplados. Aplicando un ruido común de intensidad creciente, sus frecuencias instantáneas inicialmente muy diferentes aumentan y se sintonizan, y la auto-oscilación del sistema se hace periódica. Mostramos que este efecto es mediado por el ruido. Los histogramas, espectros de frecuencia, diagramas de correlación y de recurrencia muestran los tiempos de activación y excursión medidos mientras las frecuencias de ambos osciladores se igualan para una determinada intensidad del ruido.

[1] G.V. Savino y C.M. Formigli, *BioSystems* **97**, 9 (2009); G.V. Savino, C.M. Formigli y R.R. Deza, *Actas RPIC 2007*, documento 341. [2] C. Zhou y J. Kurths, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 230602 (2002); C. Zhou, J. Kurths y B. Hu, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 014101 (2002).

25. Análisis fraccionario de la reología de eritrocitos humanos

A. M. Korol, J. I. Deza, R. R. Deza
IFIR (UNR-CONICET), IFIMAR (UNMdP-CONICET)

La práctica clínica usualmente relaciona la sintomatología con la inspección visual al microscopio de los glóbulos rojos. Los eritrocitos de donantes sanos son discos bicóncavos con un diámetro medio de alrededor de $7,8 \mu\text{m}$ en ausencia de esfuerzos de corte, y son capaces de pasar a través de capilares con diámetros de hasta $3 \mu\text{m}$, cambiando notablemente su forma. Los aglutinados y agregados que se ven en muestras de pacientes diabéticos deben entonces exhibir diferentes propiedades viscoelásticas. Probar esta hipótesis requiere una evaluación cuantitativa independiente de las propiedades viscoelásticas en sí mismas.

Se puede aplicar difracción de luz en condiciones de Fraunhofer para obtener información cuantitativa de partículas difractantes como los eritrocitos en suspensión. Bajo tensión de corte, las células en suspensión diluida tienen una forma elipsoidal triaxial, con el eje mayor orientado en la dirección del campo de corte. El haz láser atraviesa perpendicularmente una capa delgada de la suspensión de eritrocitos y se difracta produciendo un patrón de difracción Fraunhofer que es o bien circular (cuando las membranas de eritrocitos de mamíferos sanos están en reposo) o elíptico (cuando son deformadas por un campo de esfuerzos de corte).

Cuando se aplica luz láser en un proceso *fluencia-recuperación*, la intensidad de la luz cambia dinámicamente a lo largo del eje mayor del patrón de difracción elíptico. Este cambio se ha determinado fotométricamente, con un dispositivo casero llamado “eritrodefómetro”. La abrupta subida en las curvas de fluencia no puede ser explicada por una combinación finita de modelos clásicos de viscoelasticidad. En el presente trabajo, este comportamiento es cualitativamente reproducido por un modelo lineal que contiene una derivada *fraccionaria* en el tiempo de la deformación de corte, para parámetros típicos de la materia viva.

26. Resonancia estocástica entre atractores extensos móviles

M. G. Dell’Erba, G. G. Izús, R. R. Deza, H. S. Wio
IFIMAR (UNMdP-CONICET), IFCA (UC-CSIC)

Mostramos la posibilidad de resonancia estocástica en las transiciones entre frentes viajeros estables contrapropagantes. En particular, consideramos sistemas que sufren una bifurcación de frentes de no equilibrio Ising–Bloch, una bifurcación tridente en la que una pared de Ising intercambia estabilidad con un par de paredes de Bloch contrapropagantes y de quiralidades opuestas. Éste es un mecanismo importante de formación de estructuras de no equilibrio.

La bifurcación Ising–Bloch del modelo de Fitzhugh–Nagumo con inhibidor no-difusivo ofrece un bello ejemplo de un sistema biestable extenso formado por frentes viajeros (o de Bloch). Por otra parte, estos frentes son quirales y relacionados por paridad, y la barrera entre ellos es precisamente un frente estático (o de Ising).

Aquí demostramos, en la vecindad de la bifurcación Ising–Bloch y mediante simulación numérica, la presencia de resonancia estocástica en la transición entre frentes de Bloch de quiralidades opuestas cuando se incluye un ruido aditivo. Observamos numéricamente una ley de escala de la relación señal-ruido con la distancia al punto crítico y la caracterizamos teóricamente en términos de un potencial de no equilibrio efectivo [1,2].

[1] H.S. Wio, J.A. Revelli, M. A. Rodríguez, R. R. Deza y G.G. Izús, Eur. Phys. J. B 69, 71 (2009). [2] M.G. Dell’Erba, G.G. Izús, R. R. Deza y H.S. Wio, Eur. Phys. J. D (2011) DOI: 10.1140/epjd/e2010-00269-2

27. Formulación variacional de la ecuación KPZ

H. S. Wio, J. A. Revelli, R. R. Deza
IFCA (UC-CSIC), IFEG (UNC-CONICET), IFIMAR (UNMdP-CONICET)

Se presenta una formulación variacional para la ecuación de crecimiento de interfaces de Kardar–Parisi–Zhang (KPZ), que conduce a un potencial de tipo termodinámico cuyo conocimiento permite probar propiedades de invariancia ante desplazamientos globales previamente conjeturadas por otros

autores [1,2]. También se muestran algunos resultados sobre la forma de la función de distribución de probabilidad en dimensiones arbitrarias. El procedimiento utilizado para KPZ se puede extender a derivar formas más generales, adecuadas para otras ecuaciones cinéticas no lineales, y casos con tensión superficial dependiente de la densidad.

[1] H.S. Wio, *Int. Bif J. Chaos* **19**, 2813 (2009). [2] H.S. Wio, J.A. Revelli, R.R. Deza, C. Escudero y M.S. de la Lama, *Europhys. Lett.* **89**, 40008 (2010); *ibid*, *Phys. Rev. E* **81**, 066706 (2010); *ibid*, *Phil. Trans. Roy. Soc. A* **369**, 396 (2011).

28. Discretización espacial consistente de la ecuación KPZ

H. S. Wio, J. A. Revelli, R. R. Deza, C. Escudero

IFCA (UC-CSIC), IFEG (UNC-CONICET), IFIMAR (UNMdP-CONICET), UAM

La opción de discretización habitual en esquemas de diferencias finitas para la ecuación KPZ es Laplaciano y gradiente centrados, que respeta una forma discreta de invariancia de Galileo. Ésta está relacionada a la invariancia ante inclinación del flujo de partículas en los modelos microscópicos de crecimiento y se considera el fundamento de las relaciones de escala exactas en una dimensión espacial. Otras opciones respetan en cambio un teorema fluctuación–disipación, también peculiar de 1D. Mostramos que todas esas opciones son inconsistentes y además, que ni la invariancia de Galileo ni el teorema fluctuación–disipación son realmente un problema. Incluso proponemos un esquema de discretización espacial de alta precisión, que acelera el establecimiento del régimen de escala asintótico.

[1] H.S. Wio, J.A. Revelli, R.R. Deza, C. Escudero y M.S. de la Lama, *Europhys. Lett.* **89**, 40008 (2010); *ibid*, *Phys. Rev. E* **81**, 066706 (2010); *ibid*, *Phil. Trans. Roy. Soc. A* **369**, 396 (2011).

29. Modelos neuronales en presencia de ruido: el efecto sobre la frecuencia de disparo

S. Gonzalo Cogno, I. Samengo

Instituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche

Las neuronas generan disparos con una frecuencia que depende de la corriente de entrada. Para corrientes de entrada constantes, cada neurona tiene una curva característica que describe cómo varía su frecuencia en función de la corriente. Esta curva se ve modificada cuando la corriente de entrada posee componentes estocásticas. En estudios previos, diversos autores propusieron un formalismo que sirve para predecir cómo se modifica la curva para modelos neuronales de tipo Poissoniano, donde la probabilidad de disparo es una función no lineal de una transformación lineal del estímulo. En este trabajo, simulando un modelo neuronal basado en conductancias, mostramos que el formalismo propuesto reproduce cualitativamente los datos simulados para valores pequeños del ruido inyectado, pero que se aparta significativamente para ruido grande. En este límite, la frecuencia de disparo aumenta linealmente con el ruido, como predicen modelos simplificados basados en el tiempo de primer pasaje de la ecuación diferencial estocástica que describe la evolución del potencial de membrana. Nuestro trabajo, por lo tanto, compara y unifica distintos formalismos teóricos existentes, especificando el rango de validez de cada uno de ellos, y describiendo el comportamiento en los rangos que aún no pueden ser explicados por teorías precedentes.

30. Dinámica de un motor browniano con pulsado dicotómico y ruido de Lévy

S. A. Ibáñez, A. B. Kolton, S. Risau-Gusman, S. Bouzat

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Centro Atómico Bariloche (CNEA)

Se analiza la dinámica de un motor browniano pulsado o “flashing ratchet” sometido un ruido de Lévy aditivo. El trabajo generaliza y amplía resultados recientes para ratchets de Lévy no pulsados. El estudio se lleva a cabo mediante los formalismos de Langevin y Fokker-Planck. Se analiza la corriente en función de los parámetros que caracterizan al ruido de Lévy, y de las tasas de transición entre el estado encendido y apagado del ratchet.

Entre otros resultados, mostramos que, para intensidades de ruido bajas, la inclusión del mecanismo de flashing puede mejorar la performance del sistema independientemente del parámetro de estabilidad de Lévy. Por el contrario, para intensidades de ruido altas, la corriente óptima se obtiene con el ratchet constantemente encendido.

Mediante el formalismo de Fokker-Planck se estudian analíticamente diferentes situaciones límite, incluyendo las de pulsado rápido, pulsado lento, y ratchets con ruido Gausiano.

31. Efecto del Distanciamiento Social en la duración de las epidemias

C. Buono¹, C. Lagorio¹, P. A. Macri¹, L. A. Braunstein^{1,2}

¹*Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (IFIMAR)-Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata-CONICET, Funes 3350, (7600) Mar del Plata, Argentina.*

²*Center for Polymer Studies, Physics Department, Boston University, Boston, Massachusetts 02215, USA.*

Estudiamos el efecto del distanciamiento social en la propagación de enfermedades en una red compleja. La cercanía en los contactos entre individuos se define como distancia social, la cual puede ser regulada a través de campañas informativas, como se observó en la reciente epidemia de H_1N_1 . Para modelar el distanciamiento social, proponemos un modelo del tipo Susceptible-Infectado-Recuperado sobre una red con pesos. Cada enlace tiene un peso que representa la probabilidad que tiene un nodo de infectar a su vecino a través de ese enlace. Los pesos presentan una distribución exponencial de la forma, $\exp(-ax_{ij})$, donde a es el parámetro que controla el ancho de la distribución y x_{ij} es un número al azar en el intervalo (0,1). Hallamos que para un dado valor de transmisibilidad el valor medio del tiempo final de la infección (tiempo desde la primera infección hasta que no hay más individuos infectados) crece exponencialmente al aumentar el distanciamiento social. Es decir, se disminuye el número de infectados por unidad de tiempo (ya que el número total de infectados permanece constante), lo cual reduce el colapso de las estructuras sanitarias.

32. Transición de fase generada por cuarentena en una propagación de enfermedad

Lagorio, C.; Dickison, M.; Vazquez, F.; Braunstein, L. A.; Macri, P. A.; Migueles, M. V.; Havlin, S.; Stanley, H. E.

Instituto de Investigaciones Físicas de Mar del Plata (IFIMAR)-Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata-CONICET, Funes 3350,

(7600) *Mar del Plata, Argentina. Center for Polymer Studies, Physics Department, Boston University, Boston, Massachusetts 02215, USA. Max-Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Nothnitzer Strasse 38, 01187 Dresden, Germany. Minerva Center, Department of Physics, Bar Ilan University, Ramat Gan, Israel.*

Estudiamos cual es el efecto (criticalidad) de la cuarentena en la propagación de epidemias sobre una red social adaptativa. Para este propósito, analizamos el modelo susceptible-infectado-recuperado en presencia de cuarentena, donde los individuos susceptibles se protegen así mismos desconectando sus enlaces con los vecinos infectados con probabilidad w y reconectando esos enlaces con otros individuos susceptibles elegidos al azar. Partiendo de un único infectado, mostramos a través de aproximaciones analíticas y simulaciones que existe una transición de fase para un umbral de reconexión (cuarentena) w_c que separa la fase ($w < w_c$) donde la enfermedad alcanza a una fracción grande de la población de la fase ($w \geq w_c$) donde la enfermedad no se propaga. Encontramos que en nuestro modelo la topología de la red afecta fuertemente el tamaño de la propagación y que w_c se incrementa con el valor medio del grado y la heterogeneidad de la red. También encontramos que w_c se reduce si realizamos una reconexión preferencial, en la cual la probabilidad de reconexión es proporcional al grado del nodo infectado.

33. Dinámica neuronal y sus consecuencias computacionales

C. Daza, I. Samengo

Instituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche

Las neuronas pueden estudiarse como sistemas dinámicos. Cuando una neurona es estimulada por una corriente constante suficientemente fuerte, el sistema dinámico subyacente cae en un ciclo límite, correspondiente al estado en el que la célula dispara de forma sostenida. Sin embargo, en el sistema nervioso real, las neuronas raramente son estimuladas por corrientes constantes. Típicamente, las corrientes que llegan a una célula por sus aferentes dendríticos son estímulos fluctuantes, caracterizados por un valor medio y una varianza. En este trabajo, estudiamos las propiedades estadísticas de las corrientes ruidosas que son particularmente efectivas en excitar a la célula. Simulamos una neurona Hodgkin-Huxley y demostramos que cuando el estímulo medio supera el umbral de la célula, la neurona dispara preferentemente cuando la corriente de entrada resuena con la frecuencia natural del ciclo límite. Concluimos que la presencia de un ciclo límite hace que el código neuronal funciona como un detector de frecuencias. Este estudio permite vincular las propiedades dinámicas de una célula con sus propiedades computacionales.

34. Patrones de distribución en ecosistemas con recursos limitados. Simulación Monte Carlo en el conjunto gran canónico

Ariel G. Meyra, Guillermo J. Zarragoicochea, Victor A. Kuz

Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (UNLP, CONICET), Comisión de Investigaciones Científicas de la Prov. de Buenos Aires

En ecosistemas con escasos recursos, la vegetación adquiere diferentes patrones estructurales: franjas, laberintos, clusters cuasi circulares, etc. Los modelos que explican esta auto-organización concuerdan en que existen dos tipos de interacción: cooperativo a corto alcance y competitivo a largo alcance. La zona de cooperación está dada por la copa del árbol, debido a que la sombra proyectada disminuiría la evapotranspiración, siendo además una zona del terreno menos hostil para el

germinado de las semillas. La zona competitiva se debe a las raíces. En el marco de la teoría de la información, la maximización de la entropía de Shannon para estos sistemas permite hacer una analogía con la termodinámica y la mecánica estadística. En este contexto, proponemos una función potencial que puede representar la cooperación y la competencia de las especies que habitan en los sistemas áridos y semiáridos. Postulando además que estos individuos se organizan para optimizar los recursos disponibles, y que realizan todas sus funciones metabólicas minimizando los recursos usados, hemos realizado simulaciones Monte Carlo con un interesante acuerdo con los patrones ecológicos observados. Las simulaciones se realizan en el gran canónico, conjunto estadístico más representativo del nacimiento y muerte de los individuos.

35. Geometría subyacente en la medición de distancias en la Teoría de la Información

T. M. Osán, P. W. Lamberti

Facultad de Matemática, Astronomía y Física. Universidad Nacional de Córdoba-CONICET. Medina Allende s/n, Ciudad Universitaria, X5000HUA, Córdoba, Argentina

La geometría de la información es el resultado de aplicar la geometría no Euclídeana a la teoría de la probabilidad. En este contexto, trata al conjunto de las distribuciones de probabilidad que constituyen un modelo estadístico, como una variedad, analizando las relaciones entre la estructura geométrica de esta variedad y la estimación estadística del modelo. Desde el punto de vista de los modelos estadísticos, la métrica Riemanniana más significativa es la de Fisher. La distancia geodésica asociada a esta métrica es la denominada distancia de Wootters, la cual tiene una interpretación directa en mecánica cuántica. Por otra parte, la divergencia Jensen-Shannon es una versión suave y simétrica de la divergencia Kullback-Leibler y tiene una interpretación en mecánica estadística, habiéndose demostrado que puede utilizarse como medida de la flecha del tiempo. Además, se ha demostrado que la raíz cuadrada de la divergencia Jensen-Shannon es una distancia (métrica) para el espacio de las distribuciones de probabilidad. Mientras que la divergencia Jensen-Shannon tiene su origen en la teoría de la información y la distancia de Wootters tiene sus raíces en los modelos estadísticos, notablemente, existe una estrecha relación formal entre ambas. En este trabajo efectuamos un análisis de la estructura geométrica asociada a ambas distancias. De este análisis se desprende como resultado que la geometría de Riemann resulta insuficiente para explicar las diferencias en las estructuras de ambas medidas de distancia. Finalmente, un análisis de la geometría de Finsler, la cual incorpora a la geometría de Riemann como un caso particular, nos conduce a proponerla como herramienta para una caracterización más adecuada de la geometría subyacente en la divergencia Jensen-Shannon.

Índice alfabético

- Álvarez, N., 30
- Abramson, G., 15
Accordino, S. R., 39
Acosta, G., 22
Acosta, M. G., 40
Alarcón, L. M., 35
Alas, S. J., 18
Albano, E. V., 10
Aldao, C. M., 34
Appignanesi, G. A., 28, 35, 39, 41
Aragón, L., 50
Arias-García, P. A., 25
Azevedo, D. C. S., 28
- Babino, A., 44
Balbuena, C., 51
Balenzuela, P., 31
Barmak, D. H., 46
Berdakin, I., 49
Bertoldi, D. S., 42
Billoni, O. V., 20, 50
Boscoboinik, A. J. A., 19
Bouzat, S., 58
Braunstein, L. A., 12, 22, 23, 45, 51, 58
Bringa, E., 17, 42
Bubach, L. O., 15
Buceta, R. C., 19, 53
Bulnes, F., 33
Buono, C., 58
Bustingorry, S., 37
Bustos, V. A., 40
- Calabria, M. F., 54
Campiglio, G., 49
Candia, L. I., 32
Cannas, S. A., 20, 31, 50
Cardo, R., 54
Caridi, I., 22
- Carlevaro, C. M., 33
Carubelli, M., 20
Cascallares, G., 48
Cavalcante Jr., C. L., 28
Centres, P. M., 37
Chernomoretz, A., 31
Ciolino, A. E., 30
Cisternas, E., 30
Condat, C. A., 13, 49
Cornette, V., 40
Corvalán, A., 54
- Daza, C., 59
De Francesco, J. P., 31
De Virgiliis, A., 10
Dell'Erba, M. G., 56
Despósito, M. A., 12
Deza, J. I., 38, 54, 55
Deza, R. R., 28, 38, 54–57
Di Salvo, M. E., 13
Dickison, M., 58
Dierckx, S., 49
Dorso, C. O., 37, 44, 46, 48
Dávila, M., 36, 42
- Escudero, C., 57
- Fasano, Y., 32
Fendrik, A. J., 52
Fernández, A., 41
Ferrero, E. E., 31
Formigli, C. M., 55
Frank, G. A., 48
Frechero, M. A., 11, 35, 41, 51
Freije, L., 29
- Gómez, M. R., 40
Gago, P., 25
García, G. D., 32, 33

- García, N. A., 29
Gargiulo, M. V., 34
Giménez Molinelli, P. A., 37
Gimenez, M. C., 17, 45
Gleiser, P. M., 14, 15, 53
Gonzalo Cogno, S., 57
Gonzalo Izús, G., 48
Guala, S., 22
Gómez, L. R., 30
- Hansmann, D., 19
Havlin, S., 12, 58
Hernandez Lahme, D., 14
Hernández, D. G., 46
- Ibáñez, S. A., 58
Iguain, J. L., 11
Izús, G. G., 28, 56
- Jagla, E. A., 24, 32, 50
Jeyaram, Y., 49
- Kolton, A. B., 41, 58
Korol, A. M., 55
Kuz, V. A., 59
- López, L. G., 36
La Rocca, C. E., 45
Lagorio, C., 23, 58
Laguna, M. F., 13, 32
Lamberti, P. W., 60
Lavia, E. F., 31
Linares, D. H., 30, 36, 42
Lizcano, A., 25
Longone, P., 36, 42
López, R. H., 28, 40
- Macri, P. A., 22, 45, 51, 58
Maia, D. A. S., 28
Malaspina, D. C., 35, 39
Mangioni, S. E., 38
Manzi, S. J., 19, 34, 42
Marconi, V. I., 41, 49
Marenco, J., 22
Martín, J. I., 41
Matos-Fernandez, D. A., 30
Mazzeo, J., 49
Medus, A. D., 44
Meyra, A. G., 59
Migueles, M. V., 58
Milchev, A., 10
- Montani, F., 46
Montani, R. A., 51
Moshchalkov, V. V., 49
Muraca, D., 53
Mártin, H. O., 11, 34
- Narambuena, C. F., 18
Nemiña, F., 47
Nieto, F., 32
Ninago, M. D., 30
- Oliveira, J. C. A., 28, 40
Oquendo, W., 25
Osán, T. M., 60
Otero, M., 46
- Padilla, L., 11
Parisi, D., 25
Parrondo, J. M. R., 41
Pasinetti, P. M., 36
Pastore y Piontti, A. L., 22, 45
Peixoto, H. R., 28
Pereyra, V. D., 19, 34, 40, 42
Perotti, J. I., 50
Pescia, D., 20
Pezutti, A. D., 11, 29
Pianet, V., 20
Pinasco, J. P., 47
Plastino, A., 23, 24
Pugnaroni, L. A., 25
- Qian Li, 12
- Ramirez Pastor, A. J., 30, 33, 36, 42
Ranzuglia, G. A., 34
Reale, M., 52
Renzi, D. G., 33
Ressia, J., 30
Revelli, J. A., 25, 45, 56, 57
Rios, R. B., 28
Risau-Gusman, S., 13–15, 47, 58
Rivera Rodríguez, M., 42
Riveros, O., 16
Rodríguez Fris, J. A., 39
Rodríguez, M. A., 25
Rodríguez Fris, J. A., 28, 39
Rodríguez, M., 36
Romanelli, L., 52
Romá, F., 36, 47
Rostiashvili, V. G., 10

Sales, J. L., 34
Samengo, I., 57, 59
Sanchez-Varretti, F. O., 32, 33
Sartarelli, S. A., 18
Savino, G. V., 55
Schiaffino, P., 47
Schmickler, W., 17
Schulz, E. P., 35, 41
Sciortino, F., 39
Silhanek, A., 49
Soico, C. O., 33
Solari, H. G., 46
Soto, C. T., 15
Stanley, H. E., 12, 58
Stariolo, D. A., 20
Szybisz, L., 18, 52
Szybisz, M. A., 52
Sánchez, A. D., 28, 48

Tamarit, F. A., 14, 50
Tauro, C. B., 14
Terranova, G. R., 34
Torres, A. E. B., 28
Torrez Herrera, J. J., 34
Tosi, L., 32

Uñac, R., 25

Vásquez, Y., 30
Vélez, M., 41
Valdez, L., 51
Vallés, E. M., 30
Vanderleyden, J., 49
Vazquez, F., 58
Vega, D. A., 11, 29, 30
Velasco, P. A., 42
Venken, L., 49
Vericat, F., 33
Vidales, A., 25
Vilgis, T. A., 10
Villar, M. A., 11, 30
Vindigni, A., 20
Vogel, E. E., 30

Weeks, E. R., 28
Wio, H. S., 25, 38, 45, 56, 57
Wolovick, N., 31

Zarragoicoechea, G. J., 59
Zgrablich, G., 28, 34, 40