UNED Facultad de Ciencias

SEMINARIOS DEL DEPARTAMENTO DE FÍSICA FUNDAMENTAL

Enrique Abad Jarillo

Departamento de Física, Universidad de Extremadura

Aplicación del cálculo fraccional a procesos de subdifusión y de subdifusión-reacción

El estudio de sistemas cuyos constituyentes satisfacen leyes no markovianas de evolución adquiere en la actualidad especial relevancia a la luz de recientes experimentos que ponen de manifiesto la importancia de efectos de memoria en una larga serie de sistemas físicos, químicos y biológicos. En sistemas donde el transporte mediante saltos aleatorios juega un papel central, es bien sabido que los efectos de memoria pueden describirse empleando ecuaciones maestras generalizadas que contienen distribuciones de cola larga. Un caso particular pero paradigmático es la ecuación integral para el CTRW (continuous time random walk), aplicada con éxito a multitud de problemas (transporte de excitaciones en sólidos amorfos, procesos de envejecimiento, evolución de mercados financieros, etc.). Para una distribución apropiada de tiempos de espera, la cinética engendrada por el CTRW en escalas de tiempo suficientemente largas se puede captar mediante una ecuación fraccional de subdifusión (EFS). La EFS es una ecuación que se caracteriza por la presencia de un operador integrodiferencial denominado derivada fraccional de Riemann-Liouville. El desplazamiento cuadrático medio de las partículas cuyo movimiento describe la EFS crece como t, donde 0 < < 1.

Empezaremos nuestra presentación con un breve recordatorio de la derivación de la EFS a partir de la ecuación integral del CTRW. Tomando la derivación de la EFS como punto de partida, mostraremos cómo llegar a una (nueva) ecuación fraccional de subdifusión-reacción (EFSR) introduciendo un término reactivo a nivel del CTRW.

En segunda instancia, pasaremos a estudiar una aplicación concreta de la EFS y la EFSR. Se trata del cálculo de la probabilidad de supervivencia P(t) de una partícula o target rodeada de un medio poblado por trampas subdifusivas. Este tipo de problemas de búsqueda de un target juega un papel especialmente relevante en un contexto biológico. Imaginemos por ejemplo que unos ligandos (=trampas) distribuidos aleatoriamente en el medio intracelular buscan una proteina (=target) para asociarse a ella y que el tiempo necesitado para la unión es mucho menor que el tiempo típico de difusión en el medio celular. Supongamos además que los tiempos de espera entre pequeños saltos consecutivos de los ligandos en el medio intracelular siguen una distribución de probabilidad de cola larga y que el CTRW subyacente da un movimiento subdifusivo en escalas de tiempo suficientemente grandes. Entonces una descripción en términos de una EFS resulta pertinente y P(t) puede identificarse como la probabilidad de que la unión entre la proteina y cualesquiera de los ligandos no se haya producido después de un tiempo t. Estudiaremos el comportamiento de P(t) para tiempos largos cuando el target no se mueve, cuando su movimiento es subdifusivo, y cuando es difusivo normal. Si además admitimos la posibilidad de que los ligandos se degraden espontáneamente en el curso de su movimiento subdifusivo, entonces la cinética de los mismos no vendrá dada por la EFS, sino por la EFSR. En este último caso estudiamos también P(t), aunque limitándonos al supuesto de un target inmóvil. Concluimos que el comportamiento de P(t) es extremadamente sensible al tipo de movimiento del target y a la velocidad de degradación de las trampas.

Lunes, 3 de mayo de 2010, 16:00h

Sala 05, Facultad de Ciencias, UNED – Senda del Rey, 9