

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA – IZTAPALAPA**  
**DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA**

Agradecimientos

**Estudio de un mapeo caótico  
determinista aplicado a  
canales iónicos**

Tesis que para obtener el  
grado de Maestro en Ciencias (Física)  
presenta

**Fís. Kenia Lolbeg Juayerk Herrera**

Asesor: Dr. José Luis del Río Correa

Jurado Calificador:

Presidente: Dr. Pedro Eduardo Miramontes Vidal

Secretario: Dr. Leonardo Dagdug Lima

Vocal: Dr. José Rafael Godínez Fernández



México, D. F. mayo de 2014.

Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, 09340, Iztapalapa, D. F. Tel. 5804-4600

## **Agradecimientos**

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento al Dr. Eduardo Piña Garza, Profesor Distinguido de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, por todo su apoyo y por sus invaluable comentarios y propuestas que enriquecieron este trabajo.

También agradezco de manera especial al Dr. José Luis Del Río Correa por aceptar el reto de dirigir mis estudios de maestría. Le agradezco también el haberme facilitado siempre los medios suficientes para llevar a cabo todas las actividades propuestas durante el desarrollo de esta tesis. Muchas gracias Profesor.

Kenia Juayerk  
Mayo de 2014

---

# Índice

<b>Introducción</b> .....	<b>1</b>
<b>Capítulo 1. Sistemas Dinámicos</b> .....	<b>5</b>
1.1 Definición de un Sistema Dinámico .....	5
1.2 Sistema Dinámico Continuo.....	6
1.3 Sistema Dinámico Discreto .....	11
<b>Capítulo 2. Caos Determinista</b> .....	<b>31</b>
2.1 La definición del Caos Determinista .....	31
2.2 Definición de un Sistema Dinámico Caótico .....	32
<b>Capítulo 3. Caracterización Estadística de un Sistema Dinámico Caótico</b> .....	<b>39</b>
3.1 Teorema ergódico de Birkhoff.....	39
3.2 Propiedad de “mezcla” (o Mixing).....	44
3.3 Conjuntos representativos para Sistemas Dinámicos y la Ecuación de Perron-Frobenius .....	45
3.4 La evolución de la función de distribución de grano grueso (punto de vista heurístico).....	52
3.5 Propiedades asintóticas de densidades (punto de vista formal).....	55
3.6 Consideraciones finales .....	59
<b>Capítulo 4. Estudio de Canales Iónicos</b> .....	<b>61</b>
4.1 Membrana biológica.....	61
4.2 Canales iónicos.....	63
4.3 El paso de iones a través de los canales y la técnica de Patch-Clamp.....	64
4.4 Modelos de estado para canales iónicos.....	70
<b>Capítulo 5. Modelo de Liebovitch y Toth</b> .....	<b>75</b>
5.1 Mapeo de Liebovitch-Toth .....	75
5.2 Puntos fijos del MLT .....	78
5.3 Análisis de los parámetros del MLT .....	83

---

## ÍNDICE

---

5.4 Cálculo del exponente Liapunov para el MLT .....	88
5.5 Partición markoviana para el MLT Tiempo de ocupación de un estado .....	89
5.6 La ecuación de Chapman-Kolmogorov .....	91
5.7 Tiempo de ocupación de un estado .....	94
<b>Capítulo 6. Resultados .....</b>	<b>97</b>
6.1 Puntos fijos repulsivos .....	97
6.2 Exponente de Liapunov .....	97
6.3 Series de tiempo .....	99
6.4 Diagrama de recurrencia del MLT .....	102
6.5 Partición markoviana .....	103
6.6 La ecuación de Chapman-Kolmogorov .....	106
6.7 Estudio de histogramas .....	108
<b>Capítulo 7. Conclusiones y Perspectivas .....</b>	<b>111</b>
<b>Bibliografía .....</b>	<b>115</b>

---

## Introducción

Esta tesis trata de sistemas dinámicos, que pueden ser cualquier proceso físico, químico o biológico que evoluciona en el tiempo. Su finalidad es predecir el comportamiento futuro del sistema del mejor modo posible. La gran mayoría de los métodos analíticos han sido desarrollados para estudiar sistemas dinámicos lineales, en tanto que para sistemas no-lineales solamente el análisis numérico y las técnicas aproximadas permiten tener un entendimiento parcial del comportamiento a largo plazo del sistema. Uno de los mayores descubrimientos en el estudio de los sistemas dinámicos es que las soluciones numéricas pueden tener un comportamiento errático. Esto significa que el más pequeño error al caracterizar el estado inicial del sistema es magnificado en el curso de la evolución de tal manera que la predicción a largo plazo es completamente errónea, fenómeno conocido como caos determinista. Así, estos sistemas aunque son deterministas son completamente impredecibles.

En este trabajo hacemos un análisis estadístico de los sistemas dinámicos utilizando diferentes ideas y conceptos de la mecánica estadística de procesos irreversibles. En particular, en esta tesis nos restringimos al estudio de un modelo de tres estados que bien pudiera representar la cinética de apertura y cierre de los canales iónicos de las membranas celulares por los que pasa una corriente determinada. El estudio de los canales iónicos normalmente se ha hecho mediante modelos estocásticos basados en procesos markovianos. Sin embargo, aquí se presenta un mapeo caótico determinista con el objetivo de complementar los estudios sobre este tan importante fenómeno biológico. En particular, este mapeo da como resultado una distribución de probabilidad exponencial de los tiempos de estancia para los estados abierto y cerrado de los canales iónicos, que también se obtiene al estudiar un modelo de Markov de dos estados (cerrado $\leftrightarrow$ abierto).

La estructura de la tesis se describe a continuación.

## INTRODUCCIÓN

---

En el primer capítulo se presentan algunos resultados básicos necesarios para el estudio de los sistemas dinámicos, continuos y discretos. Se precisan términos tales como: sistema dinámico, órbita, estabilidad, entre otros que son de suma importancia para el estudio y comprensión de los Sistemas Dinámicos Caóticos. Al mismo tiempo, se ofrecen algunos ejemplos ilustrativos de cada tema.

En el capítulo 2 se da la definición matemática de un Sistema Dinámico Caótico. Ésta involucra tres propiedades: la sensibilidad ante condiciones iniciales, la transitividad topológica y la existencia de un conjunto denso de puntos periódicos. Se introduce el concepto de órbita generada por un mapeo, se analiza la sensibilidad ante condiciones iniciales y se aborda el tema del exponente de Liapunov. Cuando este exponente es positivo, dos órbitas del mapeo eventualmente se separan y cuando es negativo se juntan, dando lugar a órbitas periódicas. Los Sistemas Dinámicos Caóticos al presentar la sensibilidad ante condiciones iniciales tienen un exponente de Liapunov positivo.

En el capítulo 3, analizamos los teoremas ergódicos de Birkhoff, los cuales se aplican a los Sistemas Dinámicos Caóticos debido a su propiedad de transitividad topológica. El primer teorema asegura la existencia del promedio de funciones fase tomadas sobre la órbita generada por un Sistema Dinámico Caótico para casi todas las condiciones iniciales, en tanto que el segundo teorema afirma que tal promedio no depende de la condición inicial y que es igual al promedio tomado sobre la distribución estacionaria asociada al Sistema Dinámico Caótico. La importancia de estos teoremas radica en que nos permiten caracterizar el comportamiento a largo plazo del sistema dinámico caótico por su distribución estacionaria que es una propiedad estadística, olvidándonos del comportamiento altamente irregular de las órbitas. También se introduce la propiedad de "mixing" y se demuestra cómo a partir de ella se obtiene la ergodicidad de los sistemas dinámicos caóticos. Debido a la sensibilidad ante condiciones iniciales y a la transitividad topológica, es posible describir estadísticamente la evolución de los sistemas dinámicos caóticos aplicando iterativamente el mapeo a una distribución inicial. Cuando el mapeo es aplicado

## INTRODUCCIÓN

---

muchas veces la función de distribución resultante tiende a la distribución estacionaria. La propiedad de mixing es más general que la propiedad ergódica, ya que garantiza que dada una distribución inicial arbitraria al aplicar el mapeo un número grande de veces se obtiene como límite la distribución estacionaria.

A lo largo del capítulo 4 se discute cómo los procesos de Markov pueden ser aplicados al estudio teórico y modelado de canales iónicos presentes en la membrana celular. Finalmente se detalla el modelo más simple de dos estados para un canal iónico. Desde luego, esto da pie a tratar el sistema mediante un mapeo caótico determinista y que se plantea en el quinto capítulo.

En el capítulo 5 se estudia un modelo caótico determinista propuesto por Liebovitch y Toth con la intención de reproducir el comportamiento de la cinética irregular de apertura y cerradura de un canal iónico. El mapeo consta de tres regiones: dos de ellas representan al canal en su estado cerrado o abierto, y una tercera región intermedia llamada “región de switcheo” que permite la transición entre los dos estados anteriores. También se estudia la evolución temporal de un ensemble de canales iónicos con ayuda de la ecuación de Perron-Frobenius asociada al mapeo. Se encuentran además las condiciones bajo las cuales la evolución está gobernada por la ecuación de Chapman-Kolmogorov. Posteriormente se halla el proceso de Markov generado por el mapeo de Liebovitch y Toth y se calcula su matriz de transición. Finalmente se encuentra la distribución invariante del sistema dinámico y se calculan las distribuciones de los tiempos de estancia en los estados cerrado y abierto del canal.

En el Capítulo 6 se obtienen los valores de los parámetros de un mapeo de Liebovitch y Toth en específico. Con ellos se lleva a cabo un estudio detallado del sistema y haciendo uso de la herramientas descritas en los capítulos anteriores se describen los resultados obtenidos para este mapeo.

Por último, en el séptimo capítulo se plantean las conclusiones principales del trabajo. De igual manera, se discute acerca de las vicisitudes y aciertos que se tuvieron durante el análisis y estudio del mapeo de Liebovitch y Toth.

## INTRODUCCIÓN

---



## 1. Sistemas Dinámicos

En el presente capítulo se definen formalmente los elementos sobre los cuales se desarrolla la teoría del Caos Determinista. Se precisan términos tales como Sistema Dinámico, órbita, estabilidad, entre otros. Del mismo modo se proporcionan algunos ejemplos con la idea de introducir el tema sujeto de estudio de esta tesis.

### 1.1. Definición de un Sistema Dinámico

Un Sistema Dinámico (SD) es cualquier proceso físico, químico o biológico que evoluciona en el tiempo. Si se conoce la ley que gobierna su evolución y su estado inicial, se puede predecir cualquier estado futuro del sistema. Todos los posibles estados del sistema se pueden representar por puntos en algún conjunto  $X$  llamado espacio de estados, de esta forma  $X = \{x : x \text{ es un estado del SD}\}$ . La evolución del SD supone un cambio de estado en un tiempo  $t \in T$ , donde  $T$  es un conjunto ordenado. Dependiendo de la naturaleza de  $T$ , se pueden clasificar los SD en dos grupos:

- SD de tiempo continuo, si  $T = \mathbb{R}$
- SD de tiempo discreto, si  $T = \mathbb{Z}$ .

Existen muchas aplicaciones que se pueden estudiar dentro del esquema de un SD, ya sea en el estado continuo o en el discreto, por ejemplo:

$$\begin{array}{l} \text{Tiempo Continuo} \left\{ \begin{array}{l} \text{Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO)} \\ \text{Ecuación de difusión} \\ \text{Ecuaciones Diferenciales Estocásticas} \end{array} \right. \\ \\ \text{Tiempo Discreto} \left\{ \begin{array}{l} \text{Métodos iterativos} \\ \text{Iteración de mapeos} \end{array} \right. \end{array}$$

En las siguientes secciones abordaremos con mayor detalle cada uno de estos SD.

## 1.2. Sistemas Dinámicos Continuos

Los SD que aparecen en la biología, la economía o la física, pueden ser modelados por sistemas de ecuaciones diferenciales. Si  $x$  es el vector de estado del SD, su evolución temporal queda descrita por un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma

$$\dot{x} = f(x, t) \tag{1.2.1}$$

donde  $f: D \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ . De acuerdo con estos modelos  $x$  representa el vector de estados del sistema, el cual la dinámica del sistema hace variar en el tiempo, dentro de un espacio euclidiano  $n$ -dimensional que constituye el espacio de estados del SD.

Por ejemplo, en un sistema mecánico  $x$  podría representar el vector de posiciones y velocidades de los cuerpos que constituyen al sistema. En cambio, en un sistema ecológico  $x$  puede representar la cantidad de individuos de cada especie en un cierto tiempo.

Para el estudio subsecuente consideraremos SD modelados por ecuaciones diferenciales cuyas soluciones cumplen las condiciones de existencia y unicidad en el dominio  $D \subset \mathbb{R}$ . Si  $(x_0, t_0) \in D$ , denotaremos como  $\varphi(t; t_0, x_0)$  a la solución  $\varphi(t)$  de la ecuación tal que  $\varphi(t_0) = x_0$ .

### Ejemplo 1:

Como ejemplo de un SD en tiempo continuo citaremos a la ecuación diferencial

escalar  $\frac{dx}{dt} = ax$  con  $x \in \mathbb{R}$  y donde  $a \in \mathbb{R}$  es un parámetro. Si  $x_0 \in \mathbb{R}$ , entonces

$\varphi(t) = e^{at}x_0$  es la solución que satisface  $\varphi(t_0 = 0) = x_0$ . ■

Un sistema lineal de dos dimensiones puede escribirse de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \dot{x} &= ax + by \\ \dot{y} &= cx + dy \end{aligned} \tag{1.2.2}$$

donde  $a, b, c, d$  son parámetros. También podemos escribir este sistema de forma matricial como se indica a continuación

$$\dot{\bar{x}} = A\bar{x}, \quad (1.2.3)$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \bar{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (1.2.4)$$

Este sistema es lineal en el sentido de que si  $\bar{x}_1$  y  $\bar{x}_2$  son soluciones, entonces la combinación lineal  $r_1\bar{x}_1 + r_2\bar{x}_2$  también es solución. En los puntos donde  $\dot{\bar{x}} = \bar{0}$ , no hay flujo; tales puntos son llamados *puntos fijos* (los cuales denotaremos como  $\bar{x}^*$ ). Se puede encontrar dos tipos de *puntos fijos*: *puntos fijos estables* (también llamados *atractores* o *sumideros*, porque el flujo está dirigido hacia ellos) y *puntos fijos inestables* (también llamados *repulsores* o *fuentes*).

En este caso debe observarse que  $\dot{\bar{x}} = \bar{0}$  cuando  $\bar{x} = \bar{0}$ , así  $\bar{x}^* = \bar{0}$  es siempre un punto fijo para cualquier matriz  $A$ .

La solución de  $\dot{\bar{x}} = A\bar{x}$  puede representarse como trayectorias moviéndose sobre el plano  $(x, y)$ , llamado *espacio fase*.

**Ejemplo 2:**

Resolver el sistema lineal  $\dot{\bar{x}} = A\bar{x}$ , donde  $A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ .

El sistema es

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

así

$$\dot{x} = ax$$

$$\dot{y} = -y$$

lo cual muestra que las dos ecuaciones están desacopladas. En este caso, cada ecuación debe resolverse por separado. La solución es la siguiente

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 e^{at} \\ y(t) &= y_0 e^{-t}. \blacksquare \end{aligned}$$

El ejemplo 2 tiene la particular característica de que dos de los elementos de la matriz  $A$  son cero. Por ello, queremos estudiar el caso general de una matriz arbitraria de tamaño  $2 \times 2$ . En concreto, nos gustaría encontrar trayectorias de la siguiente forma

$$\vec{x}(t) = e^{\lambda t} \vec{v}, \quad (1.2.5)$$

donde  $\vec{v} \neq \vec{0}$  es un vector fijo a determinar, y  $\lambda$  es una razón de crecimiento que también debe ser determinado.

Para encontrar las condiciones sobre  $\vec{v}$  y  $\lambda$ , sustituimos  $\vec{x}(t) = e^{\lambda t} \vec{v}$  en  $\dot{\vec{x}} = A\vec{x}$ , y obtenemos  $\lambda e^{\lambda t} \vec{v} = e^{\lambda t} A\vec{v}$ . Cancelando el factor escalar diferente de cero  $e^{\lambda t}$  se obtiene

$$A\vec{v} = \lambda \vec{v} \quad (1.2.6)$$

lo cual nos indica que las soluciones de líneas rectas existen si  $\vec{v}$  es un eigenvector de  $A$  con su correspondiente eigenvalor  $\lambda$ . En este caso, se dice que la solución (1.2.5) es una eigensolución.

En general, los eigenvalores de una matriz  $A$  están dados por la ecuación característica  $\det(A - \lambda I) = 0$ , donde  $I$  es la matriz identidad. Para una matriz  $2 \times 2$

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

la ecuación característica es

$$\det \begin{pmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{pmatrix} = 0, \quad (1.2.7)$$

$$\lambda^2 - \tau\lambda + \Delta = 0$$

donde

$$\tau = \text{Traza}(A) = a + d,$$

$$\Delta = \det(A) = ad - bc$$

Entonces

$$\lambda_1 = \frac{\tau + \sqrt{\tau^2 - 4\Delta}}{2},$$

$$\lambda_2 = \frac{\tau - \sqrt{\tau^2 - 4\Delta}}{2}$$
(1.2.8)

son las soluciones de la ecuación cuadrática. Es decir, los eigenvalores dependen únicamente de la traza y el determinante de la matriz  $A$ .

El caso más común es cuando  $\lambda_1 \neq \lambda_2$  cuyos eigenvectores  $\vec{v}_1$  y  $\vec{v}_2$  son linealmente independientes. En particular, existe alguna condición inicial  $\vec{x}_0$  que puede escribirse como una combinación lineal de eigenvectores, es decir  $\vec{x}_0 = r_1 \vec{v}_1 + r_2 \vec{v}_2$ . Esta observación nos permite escribir la solución general para  $\vec{x}(t)$

$$\vec{x}(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} \vec{v}_1 + c_2 e^{\lambda_2 t} \vec{v}_2$$
(1.2.9)

esta solución, es una combinación lineal de soluciones para  $\dot{\vec{x}} = A\vec{x}$ , y por lo tanto es una solución de si misma, también es importante notar que  $\vec{x}(0) = \vec{x}_0$  y empleando el teorema de existencia y unicidad nos indica que la solución (1.2.9) es única.

### 1.2.1. Estabilidad

Para el análisis de los SD es importante saber cómo responden las soluciones de las ecuaciones que lo gobiernan a perturbaciones de las condiciones iniciales. Para tal fin nos basaremos en la siguiente definición.

Una solución  $\varphi(t; t_0, x_0)$  de (1.2.1) definida para  $t \in R$  se llama estable si para cada  $\varepsilon(t_0) > 0$  existe  $\delta > 0$  tal que si todas las soluciones  $\varphi(t; t_0, y)$  de (1.2.1) con  $|y - x_0| < \delta$  están definidas para  $t \in R$  y además  $|\varphi(t; t_0, y) - \varphi(t; t_0, x_0)| < \varepsilon$  para  $t \in R$  (ver Fig. 1). Si la

$\varepsilon$  no depende de  $t_0$ , entonces decimos que la solución  $\varphi(t; t_0, x_0)$  es uniformemente estable. Si además  $\lim_{t \rightarrow \infty} |\varphi(t; t_0, y) - \varphi(t; t_0, x_0)| = 0$  para  $|y - x_0| < \delta$  entonces se dice que  $\varphi(t; t_0, x_0)$  es asintóticamente estable.

Si el sistema de ecuaciones describe la evolución de un proceso natural o un mecanismo, las soluciones estables tienen una importancia especial para el estudio del mismo. La solución  $x = \varphi(t)$  es asintóticamente estable si es estable y además toda solución con valores iniciales suficientemente próximos tiende a ella cuando  $t \rightarrow \infty$ . En el último caso la solución es un atractor (o un repulsor si este comportamiento ocurre cuando  $t \rightarrow -\infty$ ).

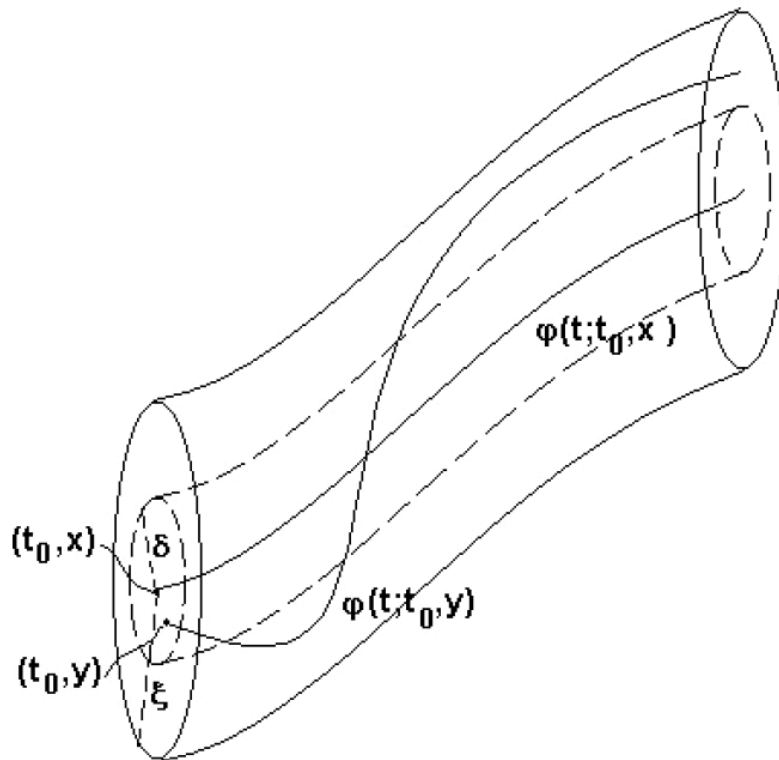


Figura 1. Ilustración de una solución estable.

### 1.3. Sistemas Dinámicos Discretos.

Muchos de los conceptos y tipos de soluciones mencionados para las ecuaciones diferenciales tienen su equivalente para las ecuaciones en diferencias. Simplemente al discretizar una ecuación diferencial ordinaria (EDO) para resolverla por métodos numéricos aparecen ecuaciones en diferencias que hay que resolver recursivamente.

Otra forma de estudiar un SD es mediante la iteración de funciones. Esto es de especial utilidad para modelar Sistemas Dinámicos Discretos (SDD), en tal caso nos apoyaremos de la siguiente definición.

Si  $\varphi$  es una función real de una variable real, la correspondiente ecuación en diferencias o sistema dinámico a tiempo discreto es

$$x_{n+1} = \varphi(x_n), \quad \text{para } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1.3.1)$$

Dada una condición inicial  $x_0 \in \mathbb{R}$ , una solución consistirá generalmente de una sucesión de puntos  $x_0, x_1, x_2, \dots$  que puede construirse iterando a partir de la ecuación (1.3.1). En otras palabras:

Sea  $X$  un conjunto cualquiera y  $\varphi : X \rightarrow X$  tal que:

- i. Denotamos a  $\varphi \circ \varphi \circ \dots \circ \varphi(x)$  ( $n$  veces) como  $\varphi^n(x)$ . Si  $\varphi$  es invertible, denotamos a  $\varphi^{-1} \circ \varphi^{-1} \circ \dots \circ \varphi^{-1}(x)$  ( $n$  veces) como  $\varphi^{-n}(x)$ .
- ii. Para cada  $x_0 \in D$  definimos al conjunto  $O^+(x_0) = \{x_0, x_1, \dots\}$ , donde  $x_n = \varphi^n(x_0)$  como la semiórbita positiva de  $x_0$ .
- iii. Si  $\varphi$  es biyectiva, para  $x_0 \in X$  definimos  $O^-(x_0) = \{x_0, x_{-1}, \dots\}$ , como la semiórbita negativa de  $x_0$ , donde  $x_{-n} = \varphi^{-n}(x_0)$ .
- iv. Si  $\varphi$  es biyectiva, definimos la órbita de  $x_0 \in X$  como  $O(x_0) = O^+(x_0) \cup O^-(x_0) = \{\dots, x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2, \dots\}$ .

#### Ejemplo 3:

Para ilustrar la definición anterior usamos la función  $f(x) = 0.5x$  y  $x_0 = 2$ , al iterar la función obtenemos la sucesión de números  $1, 0.5, 0.25, 0.125, 0.0625, \dots$ . ■

A diferencia de los SD continuos tenemos en vez de una curva un conjunto discreto de puntos que puede ser finito. El caso finito es equivalente al hecho de que en general las soluciones de una ecuación diferencial dada no tienen por qué estar definidas para todo  $t \in \mathbb{R}$ .

**Ejemplo 4:**

Un caso extremo de esta situación es por ejemplo la función  $g(x) = -\sqrt{x}$ , que está definida sólo para  $x \geq 0$  y toma valores no positivos. Si partimos de un  $x_0 > 0$  entonces  $x_1 = -\sqrt{x_0} < 0$  y ya no podemos calcular el segundo iterado  $x_2$ . Si tomamos la condición inicial  $x_0 = 0$ , todos los iterados existen y son nulos. ■

**1.3.1. Teoría de iteraciones**

Se llama iteración de una función  $\varphi(x)$  de la variable  $x$ , a la aplicación repetida de la función. La función  $\varphi(x)$  se itera al usar su valor como nuevo argumento de la misma función. A partir de  $x_0$ , se obtiene la sucesión de iterados

$$x_0, x_1 = \varphi(x_0), x_2 = \varphi(x_1), x_3 = \varphi(x_2), \dots, x_n = \varphi(x_{n-1}). \tag{1.3.1.1}$$

Llamamos  $\varphi^n(x)$  a la aplicación sucesiva n-veces de la función  $\varphi$ , por ejemplo:

$$x_2 = \varphi^2(x_0) = \varphi \circ \varphi(x_0), x_3 = \varphi^3(x_0) = \varphi \circ \varphi \circ \varphi(x_0), \dots \tag{1.3.1.2}$$

La función  $\varphi^n(x)$  tiene la propiedad

$$\varphi^{n+m}(x) = \varphi^n \circ \varphi^m(x) = \varphi^m \circ \varphi^n(x), \tag{1.3.1.3}$$

donde  $n$  y  $m$  son enteros positivos.



La sucesión de iteraciones se representa gráficamente por una línea quebrada que se dobla  $90^\circ$  al tocar la gráfica de la función  $y = \varphi(x)$ , o de la recta  $y = x$ , según se muestra en la Fig.2. Esta representación muestra con claridad la posibilidad de la convergencia de la iteración, esto es, cuando se cumple que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi^n(x_0) = x^* = \varphi(x^*). \quad (1.3.1.4)$$

Para la definición del límite de la ecuación (1.3.1.4), se dice que  $x^*$  es punto fijo de  $\varphi$ . De ahí resulta la última igualdad.

### 1.3.2. Definición de punto fijo

Llamamos punto fijo de la función de iteración  $\varphi(x)$  a la solución de la ecuación

$$x^* = \varphi(x^*). \quad (1.3.2.1)$$

El punto fijo es invariante de la iteración, es decir

$$\varphi^n(x^*) = x^*, \quad \forall n \text{ entero positivo.} \quad (1.3.2.2)$$

Un punto fijo de  $\varphi^n(x^*)$  genera un ciclo de orden  $n$ , a pesar de que puede no ser un punto fijo de  $\varphi(x^*)$ , aunque lo contrario sea cierto.

Pero si  $x^*$  es punto fijo de  $\varphi^n(x^*)$ , entonces  $x^*$  es punto fijo de  $\varphi^{np}(x^*)$ , donde  $np$  es cualquier múltiplo entero de  $n$ .

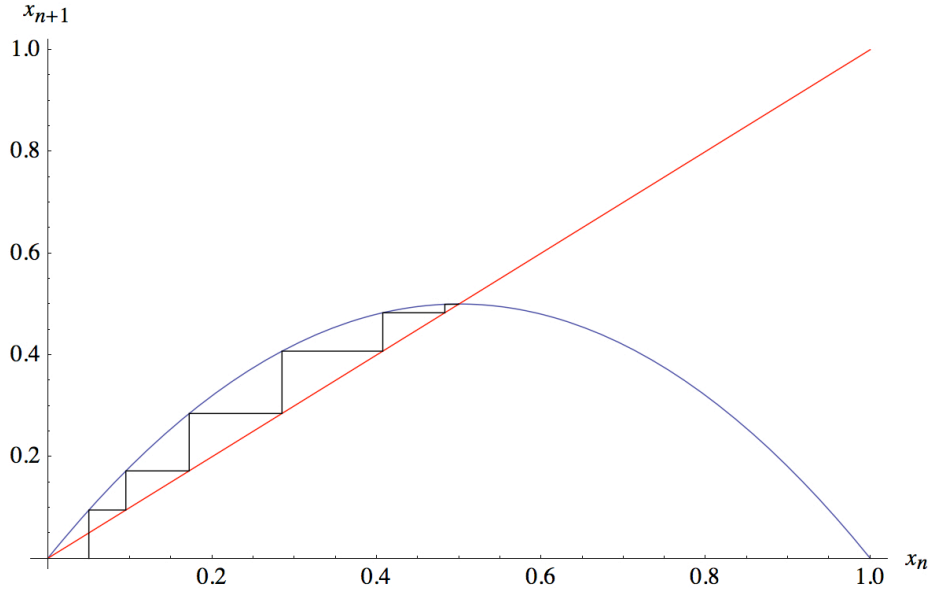
En el supuesto que  $x^*$  sea punto fijo de  $\varphi^n$ ,

$$\varphi^n(x^*) = x^*, \quad (1.3.2.3)$$

pero  $x^*$  no es punto fijo de ningún  $\varphi^j(x)$  para  $j$  menor que  $n$ , entonces

$$x^*, \varphi(x^*), \varphi^2(x^*), \dots, \varphi^{n-1}(x^*), \quad (1.3.2.4)$$

son también puntos fijos de  $\varphi^n$ , debido a la propiedad fundamental (1.3.1.3).



**Figura 2.** Representación de iteraciones del mapeo logístico  $x_{n+1} = 2x_n(1-x_n)$ .

Lo anterior amerita la siguiente demostración.

Sea  $a$  punto fijo de  $\varphi^n$ , es decir  $\varphi^n(a) = a$ , pero  $a$  no es punto fijo de ningún  $\varphi^j(x)$  para  $j$  menor que  $n$ , entonces tenemos el siguiente ciclo:  $a, \varphi(a), \varphi^2(a), \dots, \varphi^{n-1}(a)$ . Ahora, evaluemos  $\varphi(a)$ :  $\varphi^n(\varphi(a)) = \varphi^n \circ \varphi(a) = \varphi^{n+1}(a) = \varphi \circ \varphi^n(a) = \varphi(\varphi^n(a)) = \varphi(a)$ , es decir,  $\varphi^n(\varphi(a)) = \varphi(a)$ . Si repetimos la evaluación para todos los  $\varphi^j(x)$ . El resultado será:

$$\varphi^n \circ \varphi^j(a) = \varphi^j \circ \varphi^n(a) = \varphi^j(a) \quad \text{para } j = 1, 2, \dots, n-1.$$

Al conjunto de  $n$  valores (1.3.2.4) se le llama ciclo de orden  $n$  de la función  $\varphi$ . Este ciclo es invariante ante la función  $\varphi$ . Se tiene una representación no lineal del grupo cíclico de orden  $n$ .

### 1.3.2.1. Estabilidad en puntos fijos

Consideramos la convergencia de  $\varphi$ . Sea  $E_n$  la desviación del iterado  $x_n$  respecto a su punto fijo  $x^*$ :

$$x_n = x^* + E_n. \quad (1.3.2.1.1)$$

Tenemos entonces, por la serie de Taylor de  $\varphi$ ,

$$x_{n+1} = \varphi(x_n) = \varphi(x^* + E_n) = \varphi(x^*) + E_n \varphi'(x^*) + \frac{E_n^2}{2!} \varphi''(x^*) + \dots \quad (1.3.2.1.2)$$

pero como

$$E_{n+1} = x_{n+1} - x^* = x_{n+1} - \varphi(x^*), \quad (1.3.2.1.3)$$

la ecuación (1.3.2.1.2) se transforma en

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \varphi'(x^*) + \frac{E_n}{2!} \varphi''(x^*) + \dots, \quad (1.3.2.1.4)$$

y la condición para la convergencia de la sucesión  $x_n$  es entonces

$$|\varphi'(x^*)| < 1. \quad (1.3.2.1.5)$$

Cuando se cumple esta condición, el punto fijo  $x^*$  actúa como un atractor de la sucesión y se dice que es estable. Por el contrario, cuando la magnitud de la derivada es mayor que uno en el punto fijo, éste es un punto fijo inestable que repele los iterados de la función.

El caso  $|\varphi'(x^*)| = 1$  puede conducir a diferentes resultados.

### 1.3.3. Cuenca de atracción.

En algunos casos, al iterar una función  $\varphi(x)$  se obtiene como límite un ciclo de orden  $n$ .

Esta situación corresponde al caso anterior cuando  $\varphi^n(x)$  es la función de iteración con un punto fijo  $x^*$ :

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \varphi^{pn}(x_0) = x^*. \quad (1.3.3.1)$$

Los puntos (1.3.2.4) son también límites de  $\varphi^n$  con diferente condición inicial, y se llaman por eso ciclo límite.

Si  $x^*$  es un punto fijo atractor, definimos la cuenca de atracción de  $x^*$ ,  $A(x^*)$ , como

$$A(x^*) = \left\{ x \in X : \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi^n(x) = x^* \right\}. \quad (1.3.3.2)$$

**Observaciones:**

- i.  $x, y \in O^+(x^*) \Rightarrow O^+(x) \subset O^+(y)$  ó  $O^+(y) \subset O^+(x)$ .
- ii.  $O^+(x) \cap O^+(y) \neq \emptyset \Leftrightarrow x \in O^+(y)$  ó  $y \in O^+(x)$ .

**1.3.4. Construcción geométrica del conjunto de Cantor**

Hay objetos que son completamente autosimilares, estos consisten de copias muy pequeñas de si mismos. Una de las formas más simples de autosimilaridad es el conjunto de Cantor. El conjunto de Cantor consiste de dos copias pequeñas de si mismo, y la longitud de cada copia es una tercera parte de la longitud del conjunto completo, separadas por una región vacía cuya longitud también es una tercera parte de la longitud del conjunto completo.

Tomamos el intervalo unitario  $[0,1]$  de la recta real. Dividimos este intervalo en tres subintervalos iguales. De esta manera obtenemos los siguiente intervalos

$$\left[0, \frac{1}{3}\right], \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right), \left[\frac{2}{3}, 1\right].$$

El primer paso para la construcción del conjunto de Cantor consiste en quitar el subintervalo abierto intermedio, es decir quitamos a  $\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right)$ . Sea el conjunto  $C_1$  la unión de los intervalos

$$\text{restantes, o sea } C_1 = \left[0, \frac{1}{3}\right] \cup \left[\frac{2}{3}, 1\right].$$

El segundo paso consiste en repetir el mismo proceso a cada uno de intervalos que componen a  $C_1$ . En otras palabras, a cada intervalo que componen  $C_1$  lo dividimos en tres partes iguales generándose los siguientes subintervalos

$$\left[0, \frac{1}{9}\right], \left(\frac{1}{9}, \frac{2}{9}\right), \left[\frac{2}{9}, \frac{3}{9}\right] \text{ y } \left[\frac{6}{9}, \frac{7}{9}\right], \left(\frac{7}{9}, \frac{8}{9}\right), \left[\frac{8}{9}, 1\right]$$

quitamos ahora los subintervalos abiertos intermedios. Así formamos el siguiente conjunto

$$C_2 = \left[0, \frac{1}{9}\right] \cup \left[\frac{2}{9}, \frac{3}{9}\right] \cup \left[\frac{6}{9}, \frac{7}{9}\right] \cup \left[\frac{8}{9}, 1\right].$$

Repetimos el proceso a cada uno de los intervalos que componen a  $C_2$ , los dividimos en tres partes iguales y quitamos los intervalos abiertos. Con esto obtenemos el tercer paso de la construcción que consiste en el conjunto

$$C_3 = \left[0, \frac{1}{27}\right] \cup \left[\frac{2}{27}, \frac{3}{27}\right] \cup \left[\frac{6}{27}, \frac{7}{27}\right] \cup \left[\frac{8}{27}, \frac{9}{27}\right] \cup \left[\frac{18}{27}, \frac{19}{27}\right] \cup \left[\frac{20}{27}, \frac{21}{27}\right] \cup \left[\frac{24}{27}, \frac{25}{27}\right] \cup \left[\frac{26}{27}, 1\right].$$

Este proceso se sigue indefinidamente. Es decir,  $C_{m+1}$  se construye dividiendo en tres partes iguales a los intervalos que componen a  $C_m$  y quitando los intervalos abiertos intermedios. Finalmente el conjunto de Cantor se define como la intersección de todos los conjuntos  $C_m$ . Es decir

$$C = \bigcap \{C_m : m \in \mathbb{N}\}.$$

### 1.3.5. Estabilidad en ciclos

A continuación mencionaremos dos criterios importantes para considerar la estabilidad en los ciclos.

1. Si  $|\varphi'(x^*)| < 1$  entonces la órbita  $O(x^*)$  es asintóticamente estable. En este caso,  $O(x^*)$  se llama atractor periódico exponencial (ver Fig. 3).

La condición de convergencia de (1.3.3.1) es ahora

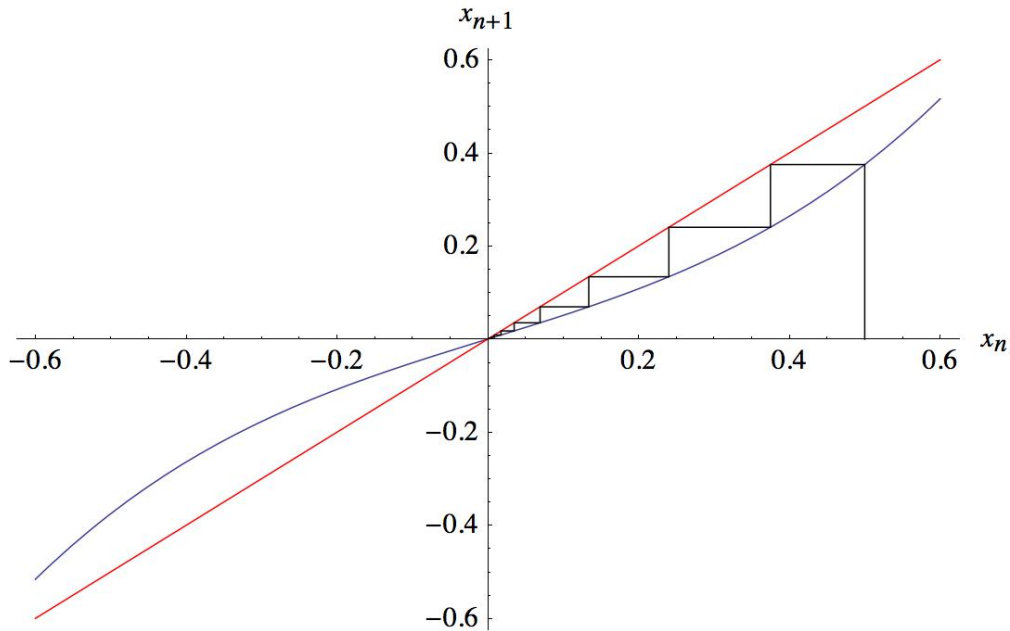
$$|\varphi^h(x^*)| < 1 \tag{1.3.5.1}$$

y por la regla de la cadena se encuentra que

$$\varphi^h(x^*) = \prod_{j=0}^{h-1} \varphi'(\varphi^j(x^*)). \tag{1.3.5.2}$$

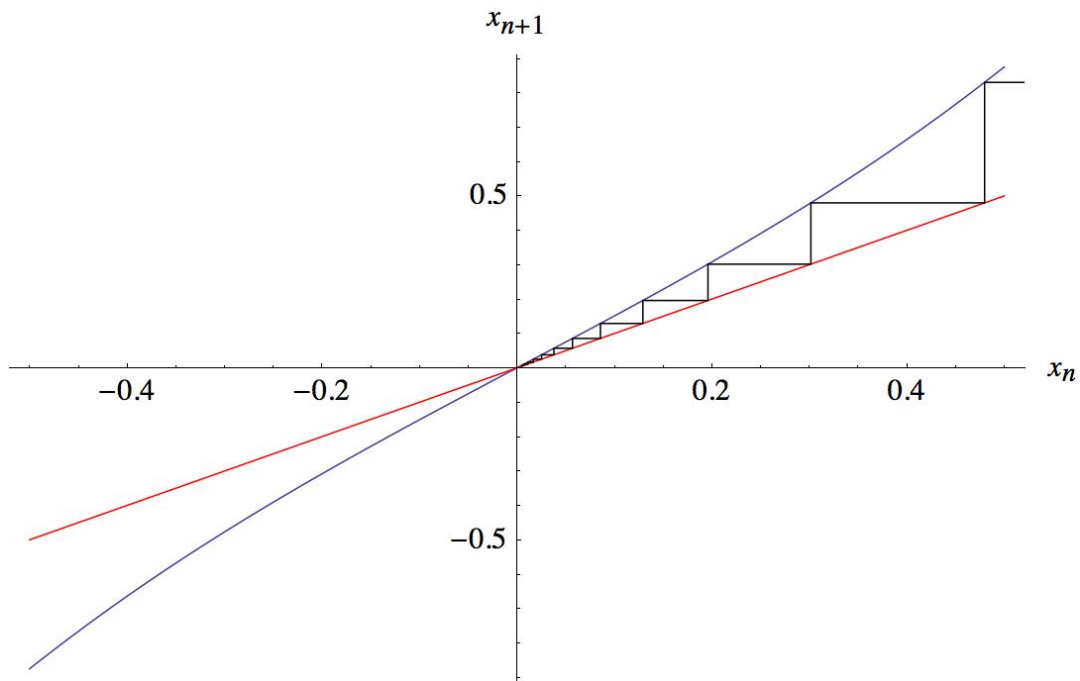
Resulta entonces que la derivada de la función  $\varphi^n(x)$  es la misma en todos los puntos de un ciclo de orden  $n$ , por ser igual al producto de las derivadas en los puntos del ciclo. Y por otra parte observamos que

$$\varphi^{hn}(x^*) = \left(\varphi^h(x^*)\right)^p. \quad (1.3.5.3)$$



**Figura 3.** Gráfica de la función  $f(x) = x^3 + \frac{x}{2}$  la cual tiene un punto fijo estable en  $x = 0$ .

2. Si  $|\varphi'(x^*)| > 1$ , entonces existe una vecindad  $U$  de  $x^*$  tal que si  $x^* \in U$ ,  $x \neq x^*$ , entonces existe  $n$  tal que  $\varphi^p(x) \notin U \quad \forall p \geq n$ . En este caso,  $x^*$  se llama repulsor periódico exponencial (ver Fig. 4).



**Figura 4.** Gráfica de la función  $f(x) = x^3 + \frac{3x}{2}$  la cual tiene un punto fijo inestable en  $x = 0$ .

### 1.3.6. Funciones invertibles

Es importante observar en estas ecuaciones que si  $x^*$  es punto fijo de  $\varphi(x)$ , también es raíz de la función  $x - \varphi(x)$ ,

$$x^* - \varphi(x^*) = 0. \tag{1.3.6.1}$$

Dado un iterado se puede preguntar uno por el valor del argumento de la función  $\varphi$  igual al iterado. El argumento se llama el antecedente del iterado y se denota por  $\varphi^{-1}(x)$ .  $\varphi^{-1}$  es la

función inversa de  $\varphi$  y  $\varphi^{-n}$  es la iterada enésima de la misma. Por ejemplo, de las ecuaciones (1.3.1.1) deducimos

$$\varphi^{-1}(x_1) = x_0, \varphi^{-1}(x_2) = x_1, \varphi^{-1}(x_3) = x_2, \dots \quad (1.3.6.2)$$

En algunos casos este inverso no es único, sino que existen varios antecedentes que pueden dar el mismo resultado. Si el inverso de la función es único, entonces se dice que es invertible.

**Ejemplo 5:**

Consideremos la iteración del mapeo logístico:

$$\varphi(x) = 4x(1-x),$$

entonces

$$\varphi^{-1}(x) = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1-x}$$

con doble antecedente. Este es un claro ejemplo de una función sin inverso único.  $x^* = \frac{3}{4}$  Es punto fijo del mapeo logístico, pero  $x = \frac{1}{4}$  es otro antecedente de  $\frac{3}{4}$ . Como consecuencia, existe la posibilidad de que el antecedente de un punto fijo no sea punto fijo. ■

**1.3.7. Bifurcaciones.**

Consideremos ahora un SDD que depende de una serie de parámetros, y que puede representarse como:  $\varphi(x, k)$ , donde  $x \in R$  y  $k \in R$  son las variables y los parámetros del sistema respectivamente. Los puntos fijos  $x^*$  dependerán del valor de los parámetros  $k$ . Cuando éstos varían, tanto el número de puntos fijos como su naturaleza (estables, inestables,...) pueden variar. Cuando esto sucede se dice que el sistema sufre una bifurcación.



**Ejemplo 6:**

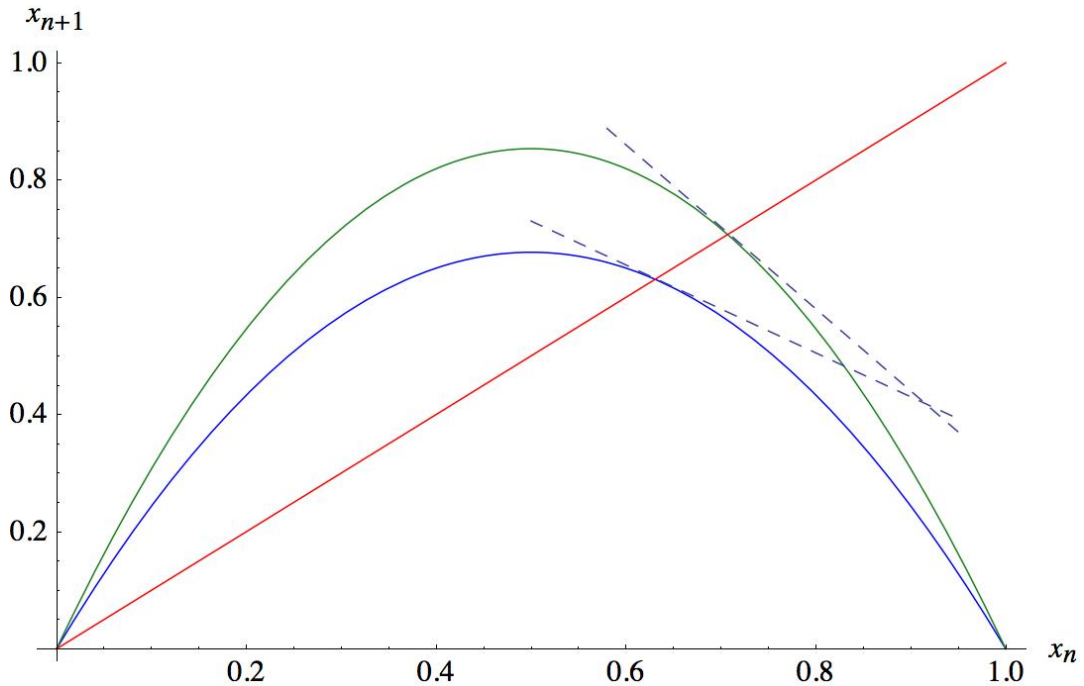
Una de las iteraciones más estudiadas es la iteración cuadrática o logística  $\varphi(x,k) = kx(1-x)$ , donde  $x$  varía en el intervalo  $(0,1)$  y donde  $k$  es un parámetro ajustable que puede variar entre  $(1,4)$  para asegurar que el resultado  $\varphi(x,k)$  está entre  $(0,1)$ , y puede servir nuevamente de argumento de la función de iteración. Esta función de iteración es convexa y tiene un máximo único en el intervalo unitario, ver Fig. 5.

En un subintervalo de aquel donde  $k$  puede tomar valores, se encuentra un punto fijo, único y estable. Al alcanzar cierto valor de  $k$ , éste se vuelve inestable y nace un ciclo límite de período doble, estable en otro subintervalo adyacente al anterior. Este a su vez se vuelve inestable en otro valor de  $k$  y surge otro ciclo límite estable de período 4. Las bifurcaciones de período continúan sin parar, pero los subintervalos en que son estables disminuyen de tamaño, y las bifurcaciones se acumulan en cierto valor de  $k$ , donde se tiene un ciclo límite de período infinito, o lo que es idéntico, en un ciclo límite aperiódico.

A continuación aparecen ciclos estables de cualquier período, ordenados en forma complicada pero conocida. Cada uno de estos ciclos estables aparecen para cierto valor de  $k$ , junto con otro ciclo del mismo período pero inestable. Este último se mantiene inestable para todo  $k$  en  $(1,4)$ .

$$3.414(1 - x_n)x_n$$

$$2.707(1 - x_n)x_n$$



**Figura 5.** Gráfica descrita por el mapeo logístico con los siguientes parámetros:

- a.  $k = 2.707$ , para este caso su pendiente es menor a  $45^\circ$  y el punto fijo es estable.
- b.  $k = 3.414$  su pendiente es mayor a  $45^\circ$  y el punto fijo es inestable.

El ciclo de período dado arbitrario es estable en un subintervalo dentro de  $(1,4)$ .

Al extremo del subintervalo el sistema se vuelve inestable, y aparece por bifurcación un ciclo estable de período doble. Surge entonces una cascada de bifurcaciones que continúa hasta acumularse en cierto valor de  $k$ , en un ciclo límite aperiódico semejante al que se mencionó antes (ver Fig. 6).

La iteración logística tiene como puntos fijos a

$$x_1^* = 0$$

$$x_2^* = 1 - \frac{1}{k}$$

y las derivadas en ellos valen

$$\varphi'(x_1^* = 0) = k$$

$$\varphi'\left(x_2^* = 1 - \frac{1}{k}\right) = 2 - k.$$

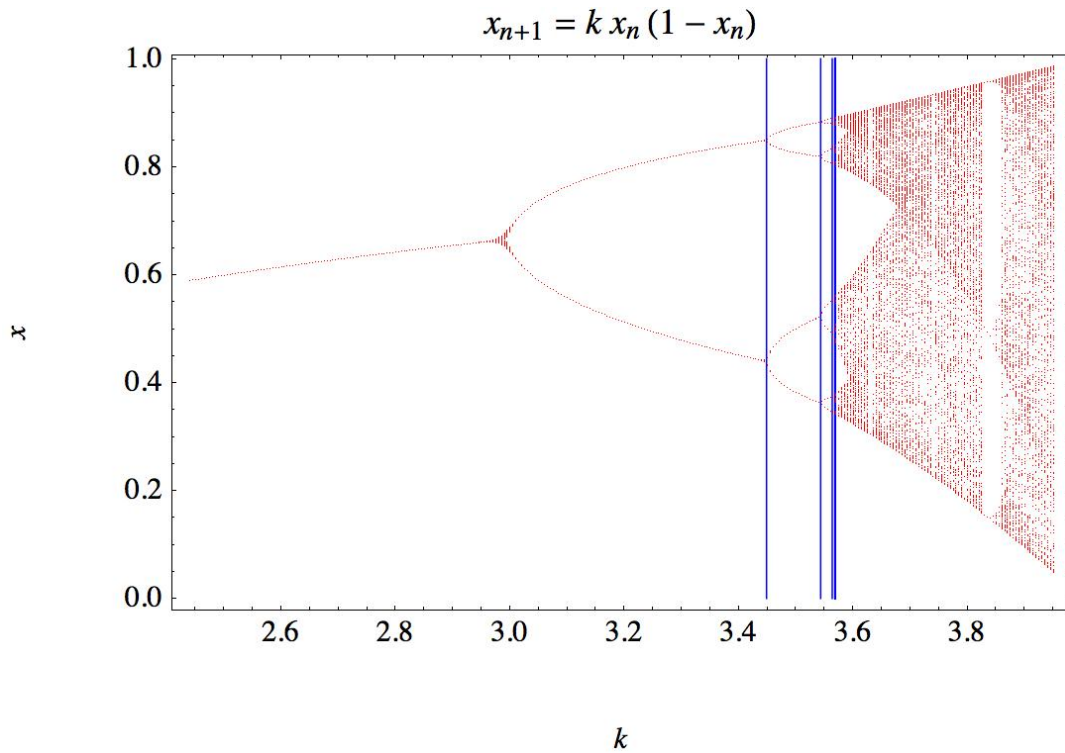
La primera bifurcación se encuentra en los puntos fijos de la función  $\varphi^2$  dada por  $\varphi^2(x) = k^2x(1-x)[1-kx(1-x)]$ . Los puntos  $x_1^*$  y  $x_2^*$  vuelven a ser puntos fijos de  $\varphi^2(x)$ . El polinomio característico de la función  $\varphi^2(x)$  tiene también otra solución doble estable cuando  $k$  está en el intervalo  $(3, 1 + \sqrt{6})$ .

Los ciclos de período 3 vienen del estudio de los puntos fijos de la función

$$\varphi^3(x) = k^3x(1-x)[1-kx(1-x)]\{1 - k^2x(1-x)[1-kx(1-x)]\},$$

que nos lleva a la igualdad  $2^3 = 8$ . Los puntos  $x_1^*$  y  $x_2^*$  son soluciones de esta ecuación y las otras 6 raíces se dividen en dos ciclos de período 3, uno estable y otro inestable cuando  $k > 1 + \sqrt{8}$ .

Los ciclos de período 4 resultan del estudio de los puntos fijos de  $\varphi^4$  que son soluciones de una ecuación de grado  $2^4 = 16$ . Los cuatro puntos fijos de  $\varphi^2$  son también puntos fijos de  $\varphi^4$ . Esta función tiene otros doce puntos fijos que forman tres ciclos de período 4. Uno de ellos existe y es estable a partir de  $k = 1 + \sqrt{6}$ , que es el armónico por bifurcación del ciclo 2. Los otros dos ciclos de período 4 nacen, uno estable y el otro inestable en  $k = 3.9$ . ■



**Figura 6.** Diagrama de bifurcación para la aplicación logística. La constante  $k$  aumenta horizontalmente desde 2.5 hasta 3.6. La coordenada vertical es el estado  $x$ .

### 1.3.8. Cuenca de atracción y fractalidad

Muchos de los sistemas dinámicos que se han estudiado tienen más de un resultado final, dependiendo de su condición inicial. Algunas veces las condiciones iniciales que conducen a diferentes estados asintóticos están perfectamente definidas y algunos casos como el del mapeo cuadrático, las diferentes cuencas de atracción son intercaladas de forma complicada. En el caso del mapeo logístico, únicamente hay un conjunto de condiciones iniciales que eventualmente te conducen al punto fijo inestable en el origen o al punto  $\frac{(k-1)}{k}$ . Equivalentemente, existe un conjunto de

puntos que también conducen a los ciclos periódicos inestables (ver ejemplo 6). Finalmente, para el resto de las condiciones iniciales, el resultado diverge a  $-\infty$ .

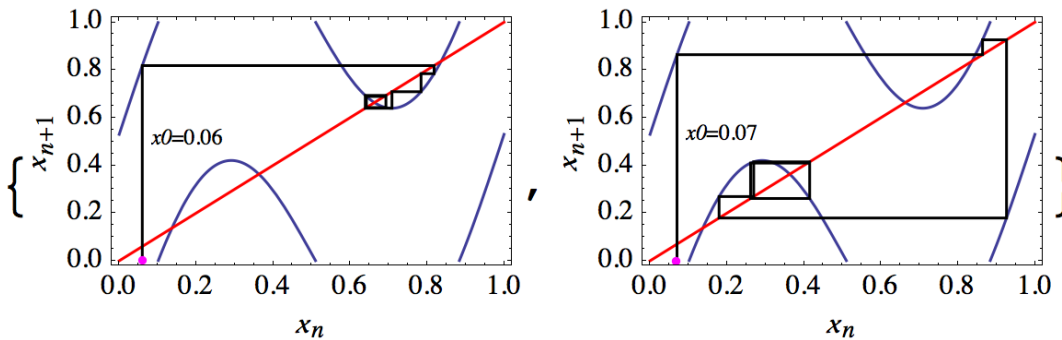
**Ejemplo 7:**

Consideremos la siguiente ecuación de diferencia finita, no lineal

$$x_{n+1} = x_n + a + b \sin(2\pi x_n) \pmod{1}.$$

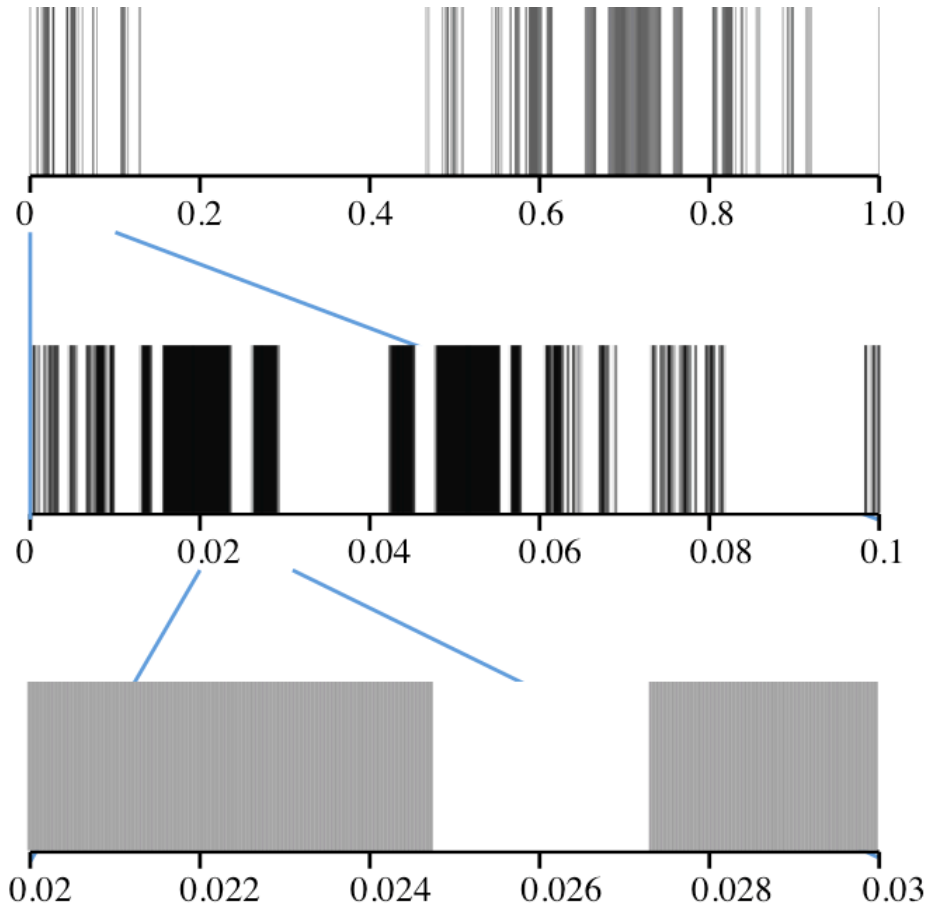
$a$  y  $b$  son constantes reales, y  $\pmod{1}$  significa que consideramos solo la parte fraccional de la expresión. Como se ha venido haciendo, al evaluar una condición inicial  $x_0$  se genera una secuencia de números entre 0 y 1. El estudio de la dinámica de esta ecuación es muy complejo, ya que depende de los parámetros  $a$  y  $b$ . Nos interesa observar la dinámica de esta ecuación cuando aplicamos diferentes condiciones iniciales y después de evaluar iterativamente nos fijamos en el límite asintótico cuando  $t \rightarrow \infty$ .

Para el caso en el cual  $a = 0.53$  y  $b = 0.62$  se muestra la gráfica en Fig. 7. Para este caso en particular existen dos ciclos periódicos estables: para el ciclo de periodo 2 sus puntos son  $x_1^* \approx 0.667$  y  $x_2^* \approx 0.651$  y para el ciclo de periodo 4  $x_1'^* \approx 0.399$ ,  $x_2'^* \approx 0.298$ ,  $x_3'^* \approx 0.420$  y  $x_4'^* \approx 0.248$ . Iniciando a partir de cualquier condición inicial ( $0 \leq x_0 \leq 1$ ), la dinámica se inclina por cualquiera de los dos comportamientos estables antes mencionados, es decir, existe multiestabilidad, como se muestra en la Fig. 7.



**Figura 7.** Dinámica descrita por la ecuación del ejemplo 7. Se muestra que para la condición inicial  $x_0 = 0.06$  su iteración conduce a un ciclo de periodo 2 y análogamente la iteración de  $x_0 = 0.07$  conduce a un ciclo de periodo 4.

Nos interesa saber el comportamiento de este mapeo cuando iniciamos a partir de todas las posibles condiciones iniciales. La Fig. 8 muestra cuales son las condiciones que conducen a los ciclos de periodo 2 y de periodo 4; las condiciones que tienden al ciclo de periodo 2 está sombreadas de negro, y las que se aproximan al otro periodo están en blanco. Si se hace una ampliación dentro de los subintervalos del intervalo unitario se puede apreciar que hay más intervalos de los que aparentaba a simple vista, es decir, ya no es continuo. En otras palabras, cada vez que se pretende definir de una forma más precisa el límite entre el blanco y el negro, se observa una frontera fracturada. Esto significa que no se puede dibujar una sola línea como frontera entre estos dos ciclos. Las cuencas de atracción para los ciclos de período 2 y de período 4 son fractales (son un tipo de conjunto de Cantor). ■



**Figura 8.** Arriba, diagrama de la dinámica descrita por el mapeo de la figura 7, donde las condiciones iniciales  $0 \leq x_0 \leq 1$  están distribuidas uniformemente, este muestra como eventualmente estas iteraciones conducen a el ciclo de período 2 marcado en color negro, mientras las ventanas en blanco indican que estos puntos se encuentran en el ciclo de período 4. Para visualizar un intervalo menor que el unitario, nos fijamos en condiciones iniciales entre el 0 y 0.1, los resultados (diagrama de en medio) se muestran de la misma manera que en la parte superior. Y análogamente se exponen los resultados abajo para las condiciones iniciales  $0.02 \leq x_0 \leq 0.03$ .

### 1.3.9. Conjugación topológica

Vamos a considerar ahora la operación de conjugación de alguna función de iteración, la cual corresponde a un cambio de variable.

Dos mapeos  $\varphi(x)$  y  $\phi(y)$  se dice que son topológicamente conjugados si pueden transformarse uno en otro por medio de la llamada función de conjugación  $f$ . Esto nos lleva a las coordenadas  $x$  como una función de  $y$

$$x = f(y) \tag{1.3.8.1}$$

Supongamos que  $f^{-1}(x)$  existe y es único. Si el mapeo  $x_{n+1} = \varphi(x_n)$  se transforma en su mapeo conjugado topológicamente

$$y_{n+1} = \phi(y_n), \tag{1.3.8.2}$$

en las variables  $x$  tenemos la nueva iteración

$$x_{n+1} = f(y_{n+1}) = \varphi(f(y_n)) \tag{1.3.8.3}$$

Es decir,

$$\begin{aligned} f(y_{n+1}) &= f(\phi(y_n)) = \varphi(f(y_n)) \\ \text{ó} \\ \phi(y_n) &= f^{-1}(\varphi(f(y_n))) \end{aligned} \tag{1.3.8.4}$$

La nueva función de iteración

$$\phi = f^{-1} \circ \varphi \circ f \tag{1.3.8.5}$$

es la conjugada (bajo  $f$ ) de la función  $\varphi$ .

#### Ejemplo 8:

Denotemos por  $\varphi_4$  y  $T$ , dos transformaciones continuas, definidas en el intervalo  $I = [0,1]$  de la siguiente manera:



$$\varphi_4(y) = 4y(1-y),$$

$$T(x) = \begin{cases} 2x & \text{si } x \in \left[0, \frac{1}{2}\right) \\ 2(1-x) & \text{si } x \in \left[\frac{1}{2}, 1\right] \end{cases}$$

la función  $T$  es conocida como la función tienda, por la forma de su gráfica.  $\varphi_4$  es un miembro de la familia logística para  $k = 4$ .

La función  $f(x) = \frac{1}{2}[1 - \cos(\pi x)]$  es una conjugación entre  $T$  y  $\varphi_4$ . Para verificar que  $f$  conjuga  $T$  y  $\varphi_4$  basta probar que  $f \circ T(x) = \varphi_4 \circ f(x)$ . Para todo  $x \in [0, 1]$ . Supongamos que  $x \in \left[0, \frac{1}{2}\right]$ , calculemos la parte derecha de la igualdad anterior:

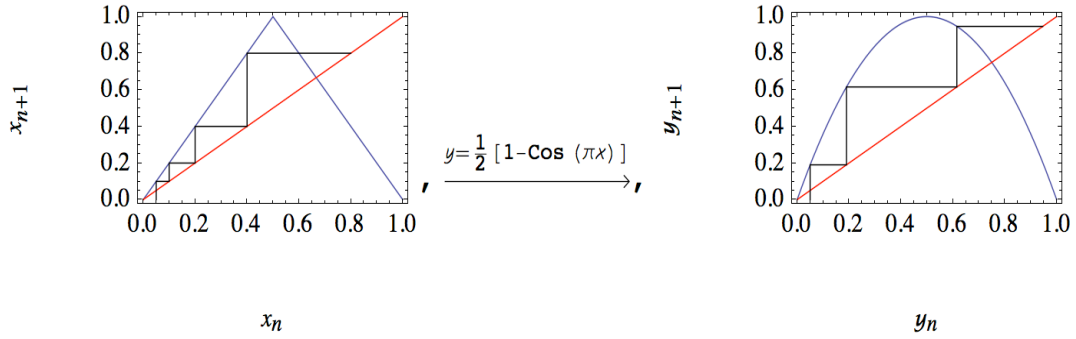
$$\begin{aligned} \varphi_4 \circ f(x) &= 4f(x)[1 - f(x)] \\ &= 2[1 - \cos(\pi x)] \left(1 - \frac{1}{2}[1 - \cos(\pi x)]\right) \\ &= [1 - \cos(\pi x)][1 + \cos(\pi x)] \\ &= 1 - \cos^2(\pi x) = \text{sen}^2(\pi x) \end{aligned}$$

Ahora la parte izquierda:

$$\begin{aligned} f \circ T(x) &= \frac{1}{2}[1 - \cos(\pi T(x))] \\ &= \frac{1}{2}[1 - \cos(2\pi x)] \\ &= \text{sen}^2(\pi x) \end{aligned}$$

Por lo tanto,  $f \circ T(x) = \varphi_4 \circ f(x)$ , si  $x \in \left[0, \frac{1}{2}\right]$ . La demostración es análoga

para el intervalo  $x \in \left[\frac{1}{2}, 1\right]$ . ■



**Figura 9.** Transformación del mapeo tienda al mapeo logístico de acuerdo al cambio de coordenadas dado por  $f(x) = \frac{1}{2} [1 - \cos(\pi x)] = \text{sen}^2\left(\frac{\pi}{2} x\right)$ . Las iteraciones son igualmente transformadas, por lo que las dos órbitas son equivalentes.

## 2. Caos Determinista

Así como en el capítulo anterior se dieron las definiciones elementales del tema de los SD, en éste nos enfocamos a las concernientes con el caos determinista propiamente dicho.

### 2.1. La definición del caos determinista

En la literatura encontramos consignadas las siguientes definiciones de caos:

- 1) La materia desordenada y sin forma que se supone que existió antes del universo ordenado.
- 2) Desorden completo, confusión absoluta.
- 3) Comportamiento estocástico que ocurre en un sistema determinista.

Desde luego nos quedaremos con ésta última definición técnica. Aquí aparecen dos palabras, “estocástico” y “determinista”. “Estocástico” significa aleatorio. Esto significa que para comprender el fenómeno del caos tendremos que analizar su significado con más detalle, ya que en su forma presente la definición es una paradoja, veamos. Por una parte, el comportamiento determinista está gobernado por leyes exactas e inamovibles. Por otra, el comportamiento estocástico es el opuesto: sin ley e irregular, gobernado por el azar. Así, el caos es el comportamiento sin ley gobernado completamente por la ley.

En el estudio de los sistemas no-lineales se ha encontrado que las soluciones numéricas pueden carecer completamente de sentido, esto es, que tienen un comportamiento errático de manera que el más pequeño error al caracterizar el estado inicial del sistema, es magnificado en el curso de la evolución de tal manera que la predicción a largo plazo es completamente errónea. Este fenómeno es conocido como caos determinista. Estos sistemas, aunque son deterministas, son impredecibles.

## 2.2. Definición de un Sistema Dinámico Caótico (SDC)

Desde el punto de vista matemático hay varias definiciones posibles de un sistema dinámico caótico (SDC), en este trabajo adoptaremos la definición de caos propuesta por R. Devaney.

Sea  $\varphi : X \rightarrow X$ . Decimos que  $\varphi$  es caótica en  $X$  si se cumplen las siguientes tres condiciones:

- i. El conjunto de puntos periódicos de  $\varphi$  forma un conjunto denso en  $X$ .
- ii.  $\varphi$  es transitiva en  $X$ .
- iii.  $\varphi$  es sensible a las condiciones iniciales en  $X$ .

Por tanto, si un SD es caótico, tiene una componente de impredecibilidad, una componente de irreducibilidad pero aún así tiene una tercera componente de regularidad (puntos periódicos densos).

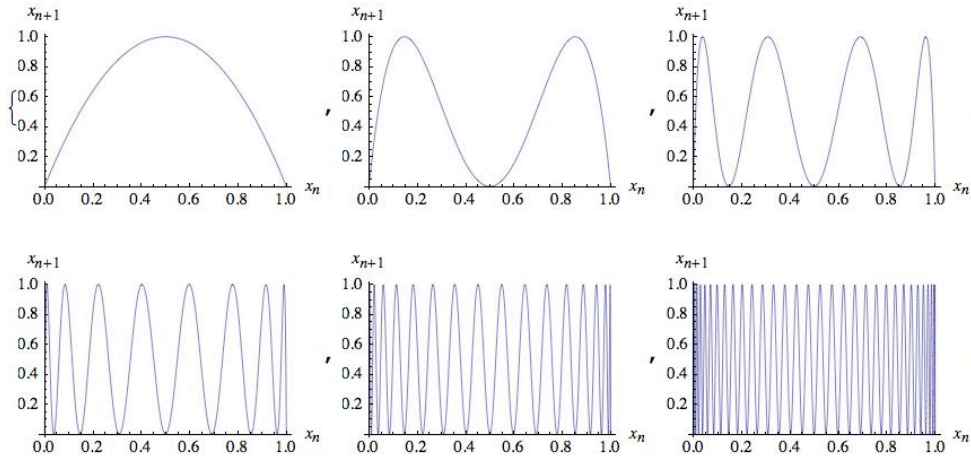
### 2.2.1. Puntos periódicos densos en $X$

Para explicar este tema, partiremos de la siguiente definición:

Sean  $J$  y  $K$  dos conjuntos tales que  $J \subset K$ . Decimos que  $J$  es denso en  $K$  si para todo punto  $x \in K$  y para todo  $\varepsilon > 0$ , existe  $y \in J$  tal que la distancia de  $x$  a  $y$  es menor que  $\varepsilon$ ,  $d(x, y) < \varepsilon$ .

#### Observación:

- i. Si  $J \subset K \subset \mathbb{R}$ , entonces  $J$  es denso en  $K$  si para todo intervalo  $(a, b)$  con la propiedad de que  $(a, b) \cap K \neq \emptyset$  se tiene que  $(a, b) \cap J \neq \emptyset$ .
- ii. Si  $K$  es un intervalo, entonces  $J$  es denso en  $K$  si para todo intervalo  $(a, b) \subset K$ ,  $a < b$ , se tiene que  $(a, b) \cap J \neq \emptyset$ .

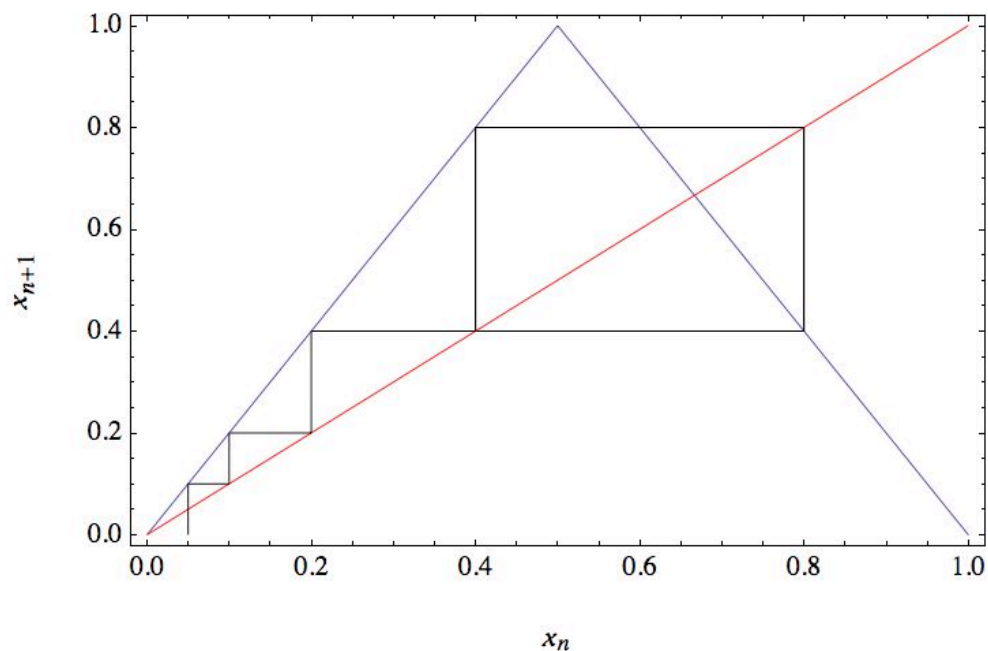


**Figura 10.** Gráficas de la evolución de las iteraciones del mapeo logístico. Se observa que hay puntos periódicos repulsivos de todos los períodos posibles y que además éstos son densos, es decir, sea cual sea el subintervalo que escojamos siempre existe un punto periódico en ese intervalo.

De aquí en adelante denotaremos con la letra  $I$  el intervalo  $[0,1]$ . Las funciones cuya dinámica más nos interesa estudiar son de la forma  $\varphi: I \rightarrow I$ . Veremos que en este conjunto de funciones se presentan propiedades dinámicas muy interesantes.

Sea  $\varphi: I \rightarrow I$ . Dos órbitas periódicas, digamos  $O(x^*)$  y  $O(y^*)$ , de período distinto son ajenas. Por tanto, la presencia de una cantidad infinita de órbitas periódicas bajo  $\varphi$  tal que cada par de ellas tiene período distinto nos dice que el SDD generado por  $\varphi$  tiene una infinidad de comportamientos distintos posibles. Si, además, los puntos periódicos forman un conjunto denso en  $I$ , entonces la dinámica de  $\varphi: I \rightarrow I$  es realmente muy rica. Tal es el caso de la función tienda,  $T(x)$  (véase Fig. 11).

Sea  $\varphi: I \rightarrow I$  y  $x \in I$ . Si la  $O(x)$  es un conjunto denso en  $I$ , entonces el conjunto de puntos en  $I$  tales que tienen órbita densa forman un conjunto, a su vez, denso en  $I$ .



**Figura 11.** Sistema dinámico denominado “tienda”,  $T(x)$ . Puede verse que la iteración de un punto arbitrario racional siempre es periódica.

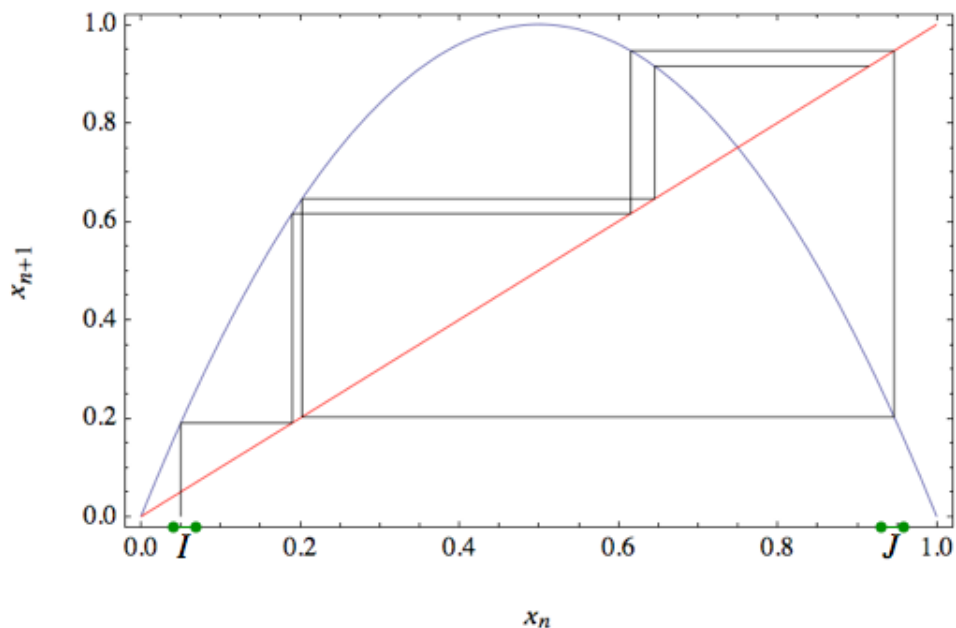
### 2.2.2. Transitividad topológica.

El concepto de transitividad topológica, que definiremos a continuación, trata de reflejar la siguiente característica (presente en algunos SD): Dadas dos zonas cualesquiera del espacio donde está definida la función, existe un punto en la primera zona cuya órbita visita, en algún momento, la segunda. Así, una función transitiva, aseguraría la existencia de puntos cuya órbita viaja de una parte arbitraria del espacio a otra parte igualmente arbitraria del mismo.

*Sea  $\varphi : X \rightarrow X$ . Decimos que  $\varphi$  es topológicamente transitiva (o transitivo) en  $X$  si para cualquier pareja de subconjuntos abiertos de  $X$ ,  $A$  y  $B$ , distintos del vacío, existen  $a \in A$  y  $n \geq 1$  tales que  $\varphi^n(a) \in B$ .*

**Observación:**

*i.* Sea  $\varphi: I \rightarrow I$  y  $x \in I$ . Si la  $O(x)$  es un conjunto denso en  $I$ , entonces  $\varphi$  es transitiva.



**Figura 12.** La iteración de una condición inicial tomada dentro del intervalo  $I$ , recorre todo el intervalo unitario. Para cualquier vecindad  $J$  hay una condición inicial en  $I$  cuya órbita pasa por  $J$ . En esta figura se muestra que 3 iteraciones de la función logística son suficientes para ir de  $I$  a  $J$ .

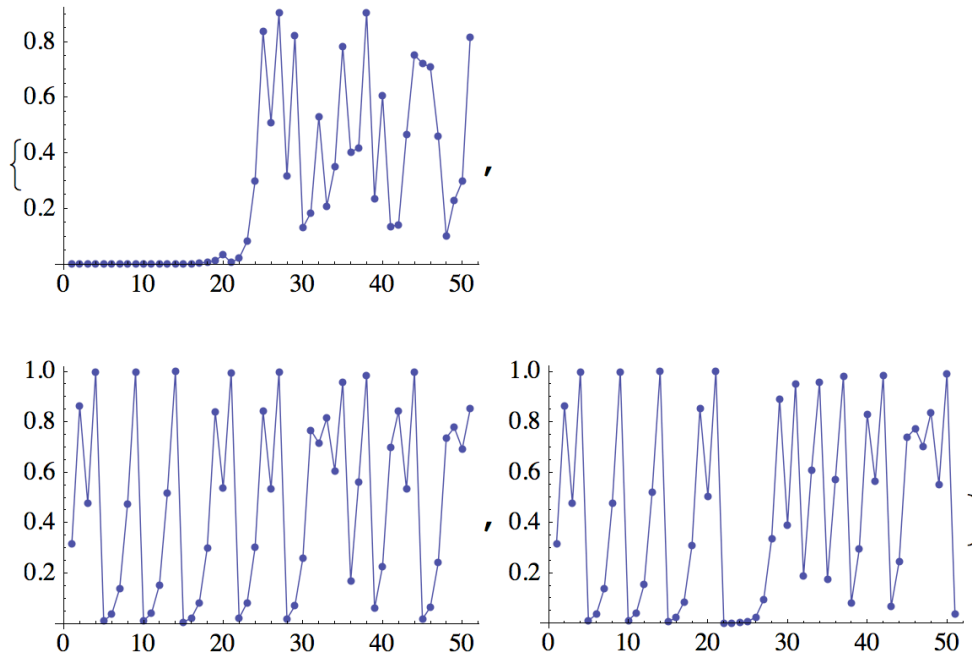
**2.2.3. Sensibilidad a las condiciones iniciales**

Usaremos la siguiente definición:

Sea  $\varphi: I \rightarrow I$ . Decimos que  $\varphi$  es sensible a las condiciones iniciales en  $I$  si existe  $\varepsilon > 0$  tal que para toda  $x \in I$  y para toda  $\delta > 0$ , existen  $y \in (x - \delta, x + \delta) \cap I$  y  $n > 0$  tales que  $|\varphi^n(y) - \varphi^n(x)| \geq \varepsilon$ .

**Observación:**

- i. Si  $\varphi$  es sensible, entonces todas sus órbitas son inestables.
- ii. Una pequeña desviación en la condición inicial se incrementa sustancialmente en cada iteración.



**Figura 13.** Series de tiempo generadas por  $\varphi(x) = 4x(1-x)$  (parte inferior) para dos condiciones iniciales que difieren por  $10^{-8}$ . En la parte de arriba se muestra la diferencia de las dos series de tiempo.

**2.2.3.1. Exponente de Lyapunov.**

Una cantidad directamente relacionada con la predictibilidad es el exponente de Lyapunov, el cual da una medida promedio (para tiempos largos) de cómo se van alejando las órbitas del SD que partieron con condiciones iniciales muy cercanas.



Consideremos la órbita generada por el punto  $x_0 + \varepsilon$ , muy cercano a  $x_0$ :

$$O(x_0 + \varepsilon) = \{x_0 + \varepsilon, \varphi(x_0 + \varepsilon), \varphi^2(x_0 + \varepsilon), \dots, \varphi^n(x_0 + \varepsilon), \dots\} \quad (2.2.3.1.1)$$

la diferencia entre los  $n$ -iterados de las series  $O(x_0)$  y  $O(x_0 + \varepsilon)$  está dada por:

$$\varphi^n(x_0 + \varepsilon) - \varphi^n(x_0) = \varepsilon \left. \frac{d\varphi^n(x)}{dx} \right|_{x_0} = \varepsilon \varphi'(x_{n-1}) \varphi'(x_{n-2}) \dots \varphi'(x_0) \quad (2.2.3.1.2)$$

expresando (2.2.3.1.2) de la siguiente manera

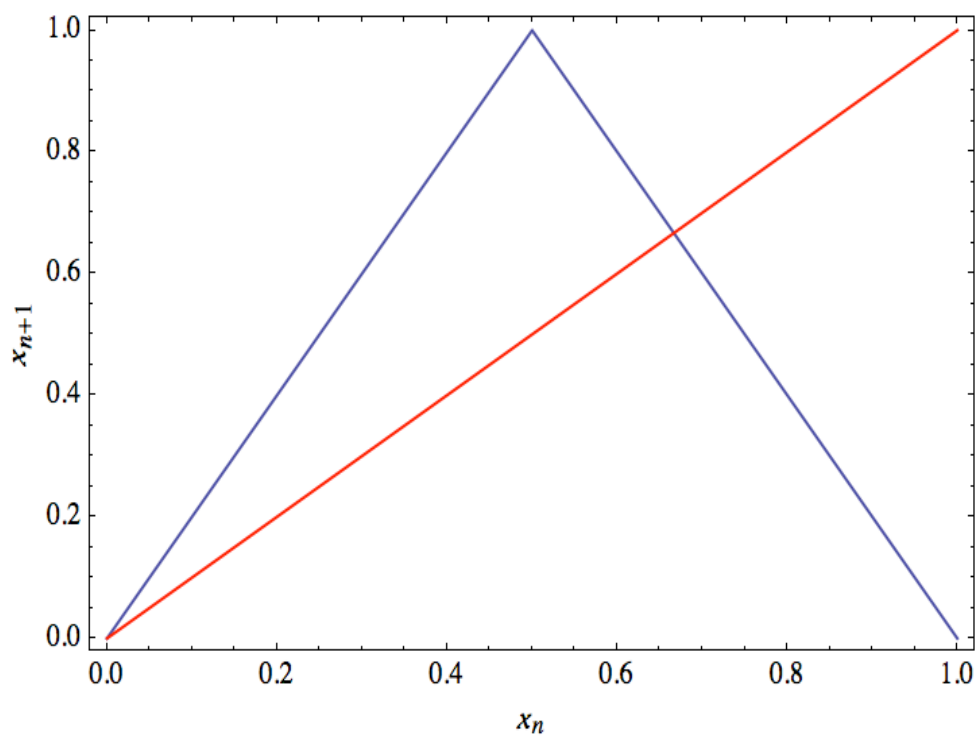
$$\left| \varphi^n(x_0 + \varepsilon) - \varphi^n(x_0) \right| = |\varepsilon| e^{\sum_{i=0}^{n-1} \ln |\varphi'(x_i)|} = |\varepsilon| e^{n\Lambda_n(x_0)} \quad (2.2.3.1.3)$$

con  $\Lambda_n(x_0) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ln |\varphi'(x_i)|$ . Para cuantificar la diferencia entre los iterados a largo plazo

se define el exponente de Lyapunov como

$$\Lambda(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \left| \frac{\varphi^n(x_0 + \varepsilon) - \varphi^n(x_0)}{\varepsilon} \right| = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ln |\varphi'(x_i)|. \quad (2.2.3.1.4)$$

Si  $\Lambda < 0$ , la diferencia entre las dos trayectorias desaparece exponencialmente a lo largo del tiempo y el sistema presenta un atractor. En este caso el tiempo característico opera como un tiempo de relajamiento. Si  $\Lambda > 0$ , las órbitas cercanas se alejan exponencialmente, se presenta la sensibilidad a condiciones iniciales, las incertidumbres iniciales divergen para tiempos largos y se tiene una dinámica caótica. En estas condiciones, el exponente de Lyapunov es una medida del tiempo característico que se requiere para que las dos órbitas estén descorrelacionadas, o sea, es una medida del horizonte de predictibilidad. Cuanto mayor sea el caos, mayor será  $\Lambda$  y menor el horizonte de predictibilidad. El caso  $\Lambda = 0$  es marginal, no hay tiempo característico, pues el inverso de  $\Lambda$  tiende a infinito.



**Figura 14.** Gráfica del SD “tienda”. Para cualquier  $x_0 \in I$  se satisface que  $|T'(x_0)| = 2$ , entonces el exponente de Lyapunov es el mismo para todos los puntos,  $\Lambda = \ln(2)$ . Por lo tanto, es imposible predecir el comportamiento de la órbita a largo plazo, donde se observa un comportamiento caótico.

## 3. Caracterización Estadística de un Sistema Dinámico Caótico

El punto de vista que adoptaremos en este trabajo consiste en hacer un análisis estadístico de los SD utilizando las diferentes ideas y conceptos de la mecánica estadística de procesos irreversibles.

Se dice que un SD es caótico, cuando conociendo las leyes que gobiernan su evolución temporal, somos incapaces de predecir su comportamiento a tiempos grandes, y solamente podemos hacer predicciones de carácter estadístico.

### 3.1. Teorema ergódico de Birkhoff

Hemos visto que un SD requiere satisfacer tres condiciones para tener un comportamiento caótico:

- I. La existencia de puntos periódicos densos,
- II. Que sea topológicamente transitivo, y
- III. Dependencia sensitiva ante las condiciones iniciales.

La segunda propiedad garantiza que el mapeo es ergódico, por lo que es posible aplicar los teoremas de Birkhoff a los SDC, lo que permite hacer una descripción estadística de los SDC.

El hecho de que un SDC sea ergódico nos permite describir estadísticamente su comportamiento a largo plazo.

Empezaremos por definir  $\mu(A)$  la medida estadística de un conjunto  $A$ , que consiste en asociar al conjunto  $A$  un número positivo entre cero y uno, con la propiedad de que si  $A$  y  $B$  son disconexos ( $A \cap B = \emptyset$ ) entonces  $\mu(A \cup B) = \mu(A) + \mu(B)$ , y además que la medida del conjunto de definición  $X$  del mapeo tenga una medida igual a uno, es decir  $\mu(X) = 1$ .

La medida del intervalo diferencial  $(x, x + dx)$  que será denotada por  $\mu(dx)$  es entonces

$$\mu(dx) = \rho(x) dx \quad (3.1.1)$$

donde  $\rho(x)$  es la densidad de probabilidad, que satisface:

$$\mu(A) = \int_A \mu(x) dx = \int_A \rho(x) dx . \quad (3.1.2)$$

Dado un mapeo  $\varphi(x)$ , se dice que la medida es invariante ante el mapeo si cumple lo siguiente:

$$\mu(A) = \mu(\varphi^{-1}(A)) \quad (3.1.3)$$

donde  $\varphi^{-1}(A) = \{x | \varphi(x) \in A\}$ , la medida invariante del intervalo  $(x, x + dx)$  ante el mapeo será denotada por:

$$\mu_{st}(dx) = \rho_{st}(x) dx . \quad (3.1.4)$$

Consideremos ahora una función dinámica  $b(x)$  que es integrable sobre el espacio fase  $X$ , es decir,

$$\int_X |b(x)| \mu_{st}(dx) = \int_X |b(x)| \rho_{st}(x) dx < \infty . \quad (3.1.5)$$

El promedio de  $b(x)$  sobre la órbita  $O(x_0)$  se define como:

$$\overline{b(x_0)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} b(\varphi^i(x_0)) . \quad (3.1.6)$$

**Observaciones:**

- i. El primer teorema de Birkhoff asegura la existencia de este promedio para casi todas las condiciones iniciales, excepto un conjunto de medida cero.
- ii. El segundo teorema de Birkhoff establece que cuando el mapeo es topológicamente transitivo el promedio sobre la órbita tiene las siguientes propiedades:

- a.  $\overline{b(x_0)}$  es independiente de  $x_0$ , de manera que este promedio es constante casi en cualquier punto del espacio fase.
- b. El promedio sobre la órbita es igual al promedio sobre el espacio fase, es decir,

$$\overline{b(x_0)} = \langle b(x) \rangle = \int_X b(x) \mu_{st}(dx) = \int_X b(x) \rho_{st}(x) dx . \quad (3.1.7)$$

Este es el célebre teorema ergódico de Birkhoff, cuya importancia radica en lo siguiente:

Cuando se requiere calcular promedios sobre órbitas de funciones dinámicas, uno se enfrenta con el problema de evaluar exactamente los puntos que conforman la  $O(x_0)$ . Como un SDC presenta dependencia sensitiva ante sus condiciones iniciales, la evaluación de  $O(x_0)$  para todo propósito práctico desafía cualquier calculo numérico, ya que sin importar que tan aproximado se haga, a largo plazo la órbita calculada no tendrá nada que ver con la órbita real. Sin embargo, podemos calcular este promedio utilizando el teorema ergódico de Birkhoff, reduciendo el problema al calculo de la medida invariante  $\mu_{SI}$ .

Para determinar la medida invariante, dividimos el espacio fase  $X$  en  $K$  celdas o regiones  $A_j$  tales que:

$$A_j \cap A_k \quad \text{para } j \neq k \text{ y } \bigcup_{j=1}^K A_j = X. \quad (3.1.8)$$

Consideremos una función fase, que toma un valor constante  $b_j$  sobre la celda  $A_j$ :

$$b(x) = \sum_{j=1}^K b_j I_{A_j}(x) \quad (3.1.9)$$

donde hemos utilizado la función característica de la celda  $A_j$ :

$$I_{A_j}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in A_j \\ 0 & \text{si } x \notin A_j \end{cases}. \quad (3.1.10)$$

El promedio sobre la órbita de la función fase es:

$$\overline{b(x_0)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=1}^K b_j I_{A_j}(\varphi^i(x_0)). \quad (3.1.11)$$

Denotando por  $O_n(x_0)$  los primeros  $n$  puntos de la órbita:

$$O_n(x_0) = \{x_0, \varphi(x_0), \varphi^2(x_0), \dots, \varphi^{n-1}(x_0)\} \quad (3.1.12)$$

y por  $n_j$  el número de puntos de la órbita que se encuentran en la celda  $j$ , obtenemos:

$$\sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=1}^K b_j I_{A_j}(\varphi^i(x_0)) = \sum_{j=1}^K \sum_{i=0}^{n-1} b_j I_{A_j}(\varphi^i(x_0)) = \sum_{j=1}^K b_j n_j, \quad (3.1.13)$$

de manera que el promedio sobre la órbita de la función fase está dado por:

$$\overline{b(x_0)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^K n_j b_j = \sum_{j=1}^K P_j b_j \quad (3.1.14)$$

donde  $P_j = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n_j}{n}$  es la frecuencia con que la órbita pasa por la celda  $A_j$ . Por otra parte, el promedio sobre el espacio fase de la función  $b(x)$  es:

$$\langle b(x) \rangle = \int_X \left( \sum_{j=1}^K b_j I_{A_j}(x) \right) \mu_{st}(dx) = \sum_{j=1}^K b_j \mu_{st}(A_j). \quad (3.1.15)$$

El teorema ergódico de Birkhoff asegura que el promedio sobre órbita (3.1.14) es igual al promedio sobre el espacio fase (3.1.15), de manera que la medida invariante de la celda  $A_j$ , es:

$$\mu_{st}(A_j) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n_j}{n} = P_j \quad (3.1.16)$$

por lo que la medida invariante de cualquier región del espacio fase corresponde a la frecuencia con que la órbita visita esa región. Este resultado nos permite encontrar la densidad de probabilidad invariante, ya que si denotamos por  $N(x, \Delta x)$  la frecuencia de visita del intervalo  $(x, \Delta x)$  obtenemos que:

$$\rho_{st}(x) \Delta x = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N(x, \Delta x)}{n}. \quad (3.1.17)$$

Así el teorema ergódico de Birkhoff nos permite encontrar un método para encontrar la distribución estacionaria asociada con un SDC, que consiste en construir un histograma que muestre la frecuencia con la cual la órbita visita las diferentes regiones del espacio fase. Para ello se divide el espacio fase en  $K$  regiones ajenas, se toma un estado inicial  $x_0$  al azar y se calcula una órbita  $O_n(x_0)$  suficientemente grande con  $n \gg K$ , se determina la fracción  $P_j$  de puntos de la órbita que se encuentran en la región  $A_j$  y se construye el histograma. Cuando se repite este proceso para otras condiciones iniciales en general se encuentra el mismo histograma. De manera que a pesar de la sensibilidad de las trayectorias a las condiciones iniciales, este hecho no se refleja en general en el cálculo de la densidad de probabilidad estacionaria. Sin embargo, para ciertos valores iniciales que conforman un conjunto de medida cero, pueden ocurrir otros comportamientos, por ejemplo cuando el punto inicial se encuentra en la cuenca de atracción de un punto fijo de  $\varphi^m(x^*) = x^*$ , existe un entero  $q$  tal que  $\varphi^q(x_0) = x^*$  de forma que después de un número finito de iteraciones  $O(x_0)$  llega a  $x^*$ . Este comportamiento se debe a que los SDC tienen puntos periódicos que son densos en  $X$ . La peor parte de

este comportamiento excepcional es que no tenemos una forma de predecir cuales estados iniciales tienen este comportamiento.

### 3.1.1. Mapeo métricamente transitivo

La condición necesaria y suficiente para que sea válido el teorema de Birkhoff es que ante el mapeo  $\varphi(x)$  el espacio fase sea métricamente transitivo.

Para entender la propiedad de transitividad métrica, empezaremos por recordar que  $A$  es un subconjunto invariante ante el mapeo  $\varphi(x)$  si satisface que  $\varphi^{-1}(A) = A$ .

Si esta propiedad se satisface solamente para un conjunto  $A$  la órbita generada por  $x_0 \in A$ , siempre permanece en  $A$ , ya que  $\varphi^n(x_0) \in A$  para cualquier valor de  $n$ . De manera que  $\varphi(x)$  mapea  $A$  sobre si mismo y ningún elemento de su complemento  $(X - A)$  se mapea sobre  $A$ .

Sea la medida estadística de cualquier conjunto  $A$  la medida estacionaria  $\mu_{st}(A)$ . Se dice que un mapeo  $\varphi(x)$  es métricamente transitivo si ante este mapeo el espacio fase  $X$ , no puede separarse en dos regiones  $A_1$  y  $A_2$  invariantes ante el mapeo, cuyas medidas sean diferentes de cero o de uno. De manera que cualquier conjunto  $A$  que satisfaga:

$$\varphi^{-1}(A) = A, \text{ tiene una medida } \mu_{st}(A) = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}.$$

#### Ejemplo:

Para mostrar que un SDC es métricamente transitivo, notemos que cualquier punto de  $X$ , pertenece a alguno de los siguientes dos conjuntos ajenos:

$$\begin{matrix} A \\ X - A \end{matrix}.$$

Donde  $A$  está conformado por todos los puntos periódicos, por ejemplo:  $\varphi^n(x^*) = x^*$  y sus cuencas de atracción, este conjunto satisface que  $\varphi^{-1}(A) = A$  y  $\mu_{st}(A) = 0$ . Por otra parte si  $x \in (X - A)$ , la órbita generada por este punto tocará eventualmente cualquier conjunto  $C \subset (X - A)$  con  $\mu_{st}(C) \neq 0$ , de manera que  $\varphi^{-1}(X - A) = (X - A)$ , la medida de este conjunto es  $\mu_{st}(X - A) = \mu_{st}(X) - \mu_{st}(A) = 1$ . Por lo que en un SDC los únicos conjuntos invariantes son  $A$  y  $(X - A)$  siendo

sus medidas cero y uno respectivamente. Por lo tanto un SDC es métricamente transitivo y el teorema ergódico de Birkhoff es válido.

### 3.2. Propiedad de mezcla (o *Mixing*)

La propiedad de mezcla (o mixing) juega un papel muy importante en la definición de caos determinista la cual es consecuencia de la sensibilidad ante condiciones iniciales y la transitividad topológica, esta propiedad nos permite hacer un tratamiento estadístico para cualquier paso de la iteración del sistema. Cuando el mapeo se aplica a un conjunto de puntos asociados con una distribución inicial, el mapeo tiene asociado un operador estadístico llamado el Operador de Perron-Frobenius (OPF), que al ser aplicado iterativamente a una distribución inicial genera una secuencia de funciones de distribución, y la propiedad de mezcla garantiza que esta secuencia tiende a la distribución estacionaria, la cual es un punto fijo del OPF.

Para entender cuando se dice que un mapeo es mixing, consideremos dos regiones del espacio fase  $A$  y  $B$ , ambas de medida finita  $\mu_{st}(A)$  y  $\mu_{st}(B)$ . Ahora consideremos el conjunto  $A \cap \varphi^{-n}(B)$ , formado por los puntos que pertenecen a  $A$  y que después de  $n$  iteraciones llegan a  $B$ , denotaremos por  $\mu_{st}(A \cap \varphi^{-n}(B))$  su medida estadística. La propiedad de mixing significa que las iteraciones del mapeo distribuyen los puntos de  $A$  cada vez más y más uniformemente, de tal forma para valores grandes de  $n$ , los puntos de  $A$  que lleguen a  $B$ , ven cualquier parte de  $B$  de manera similar a como los puntos de  $A$  ven todo el espacio fase. Así, la condición de mixing puede formularse matemáticamente como sigue:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu_{st}(A \cap \varphi^{-n}(B))}{\mu_{st}(\varphi^{-n}(B))} = \frac{\mu_{st}(A)}{\mu_{st}(X)} = \mu_{st}(A). \quad (3.2.1)$$

Se puede mostrar que la medida es invariante, lo que implica:

$$\mu_{st}(\varphi^{-n}(B)) = \mu_{st}(B) \quad (3.2.2)$$

la condición de mixing toma la forma:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_{st}(A \cap \varphi^{-n}(B)) = \mu_{st}(A)\mu_{st}(B). \quad (3.2.3)$$

La propiedad de mixing es una característica fuerte de caos. En particular, se tiene que: mixing  $\Rightarrow$  ergodicidad pero ergodicidad  $\not\Rightarrow$  mixing.



### 3.3. Conjuntos representativos para sistemas dinámicos y la Ecuación de Perron-Frobenius

El concepto de ensemble ó conjunto representativo se introduce en problemas de muchos cuerpos para tomar en cuenta que la información macroscópica que se tiene acerca de este sistema no nos permite determinar su estado microscópico, sino que existen una gran cantidad de estados microscópicos que son compatibles con el estado macroscópico del sistema, y cada uno de ellos se asocia al estado de un miembro del ensemble. En el estudio de SDC también es posible introducir conjuntos representativos, para ello se requiere reconocer que los números con que normalmente trabajamos son una aproximación muy burda de los números reales, ya que en general para especificar un real se requiere un número infinito de cifras, como la inmensa mayoría de los reales son irracionales y su representación decimal corresponde a una cadena infinita de dígitos, la cual en general es imposible de manejar, en la práctica todos los cálculos que hacemos sustituyen al número real que geoméricamente corresponde a un punto, por un intervalo conformado por un número infinito de puntos.

#### Ejemplo:

Consideremos el número  $\sqrt{2}$  que expresamos en forma decimal como 1.4142..., este es un número irracional y por lo tanto está representado por una secuencia infinita de cifras, de las cuales solamente conocemos un número finito, cuando escribimos que  $\sqrt{2} = 1.4142\dots$ , a  $\sqrt{2}$  le estamos asociando todo el conjunto de números comprendidos en el intervalo  $(1.4142, 1.4143)$ , de manera que la representación decimal de un número irracional le asocia a este número un intervalo de números reales, por lo que dada la representación decimal de un número irracional existen una multitud de números reales compatibles con esa representación decimal.

Desde un punto de vista matemático esto significa que estamos usando una descripción muy gruesa de los números reales, en este sentido los números que utilizamos para cualquier cálculo numérico constituyen una “representación macroscópica” de un número real, la cual corresponde con un intervalo y por tanto con un número infinito de números reales. Lo anterior nos hace ver la necesidad de trabajar con distribuciones, cuando se describe un SD. Recordando que los SDC presentan sensibilidad ante condiciones

iniciales, y que para predecir el comportamiento de estos sistemas a largo plazo se requiere conocer exactamente la condición inicial, el hecho de que solo conozcamos la representación macroscópica de la condición inicial implica que el comportamiento a largo plazo de los SDC solo puede hacerse utilizando una descripción estadística. Para averiguar el tipo de descripción estadística que se requiere para caracterizar a los SDC, utilizaremos como guía la forma en que N. G. Van Kampen introduce los conceptos estadísticos en los sistemas de muchos cuerpos. Al respecto nos dice lo siguiente:

*“ Consideremos dos puntos en el espacio fase muy cercanos uno de otro, que representan dos estados microscópicos similares. Ellos permanecen cerca uno del otro por un corto período de tiempo, pero después se separan rápida e irregularmente. Después de un tiempo del orden de duración de una observación macroscópica, estos puntos representan dos estados macroscópicos completamente diferentes. Por lo que, aunque es cierto que de acuerdo a las ecuaciones de Hamilton los valores iniciales de  $(q, p)$  determinan completamente todo el futuro, este hecho es de poca utilidad para un observador macroscópico. La más pequeña incertidumbre en los valores iniciales se magnifica tan rápidamente que uno conoce muy poco sobre el estado macroscópico, ya que solo es posible localizar burdamente una región en la cual se encuentre el punto fase. Esta es la razón por la cual, a pesar del determinismo que tienen las ecuaciones de Hamilton, procederemos a tratar el proceso en una escala macroscópica como un proceso estocástico, de forma análoga a como se describe el movimiento Browniano”.*

Sobre la forma en que los procesos estocásticos se introducen en física, Van Kampen señala:

*“ La idea básica de la Mecánica Estadística es que el sistema físico se puede reemplazar con un ensemble convenientemente escogido de sistemas, todos ellos teniendo la misma ecuación de movimiento pero diferentes microestados iniciales  $x$ . La estructura del ensemble se especifica por una función de densidad  $\rho(x)$ , tal que,*

$\rho(x)$  es el número de muestras del ensemble cuyo microestado inicial se encuentra en el elemento de volumen  $dx$

*Esta sustitución de un solo sistema por un ensemble tiene el efecto de convertir  $x$  en una variable estocástica. El rango de  $X$  consiste de todos los microestados posibles y la densidad de probabilidad es:*

$$P_x(x) = \frac{\rho(x)}{\int \rho(x) dx}. \quad (3.3.1)$$

*Una vez aceptada esta idea básica solamente resta seleccionar apropiadamente  $P_x$ , calcular promedios con esta densidad e interpretar los números resultantes como los valores observados de las cantidades físicas. **El ensemble solamente sirve como un medio para visualizar la distribución de probabilidad:** la probabilidad de que  $x$  se encuentre en determinado elemento de volumen  $dx$  es igual a la fracción de sistemas muestra del ensemble que yacen en ese intervalo. Esta sustitución de un sistema por un ensemble tiene el efecto de que cada cantidad física  $Y(t)$  se convierte en un proceso estocástico, cuyos promedios y momentos están relacionados con observaciones”.*

Discutiremos a continuación como al aplicar las ideas de N. G. Van Kampen a SDC, se encuentra la Ecuación de Perron-Frobenius (EPF).

Como ya se ha dicho, la dinámica de un mapeo  $\varphi(x)$  definida en el espacio fase (por ejemplo el intervalo  $I$ ) está descrita por órbitas, cada una de ellas obtenida por la aplicación sucesiva de  $\varphi(x)$  al valor inicial  $x_0$ , generando una órbita  $O(x_0)$  donde  $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ . Cuando damos la condición inicial “macroscópica”, tendremos un conjunto de diferentes estados iniciales “microscópicos” y debido a la sensibilidad ante condiciones iniciales el comportamiento a largo plazo de dos condiciones iniciales microscópicas que tienen el mismo “número macroscópico” serán completamente diferentes, de una manera similar a un proceso estocástico. Siguiendo el punto de vista de Van Kampen, construimos un ensemble de sistemas caracterizados por alguna distribución de los valores iniciales sobre el intervalo caracterizado por el número macroscópico y en lugar de evaluar la órbita generada por un valor inicial microscópico, analizamos la evolución temporal del ensemble. Consideraremos que  $x_0$  es una variable estocástica descrita por una densidad de probabilidad:

$$\rho_0(x) dx = \text{Prob}[x_0 \in (x, x + dx)] \quad (3.3.2)$$

en este caso la relación determinista  $x_n = \varphi^n(x_0)$  define un proceso estocástico, que está caracterizado por una función de distribución:

$$\rho_n(x)dx = \text{Prob}[x_n \in (x, x+dx)] \quad (3.3.3)$$

la cual está dada por

$$\rho_n(x)dx = \int_{x < \varphi^n(x_0) < x+dx} \rho_0(x_0)dx_0 = \int_{I_{(x, x+dx)} \varphi^n(x_0)} \rho_0(x_0)dx_0 \quad (3.3.4)$$

y utilizando la siguiente definición de la función  $\delta$ :

$$\delta(y-a) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} I_{(a, a+\Delta x)}(y) \quad (3.3.5)$$

tenemos que:

$$\rho_n(x)dx = \int \delta(\varphi^n(x_0) - x) \rho_0(x_0)dx_0 \quad (3.3.6)$$

utilizando este resultado es posible mostrar que:

$$\rho_n(x)dx = \int \rho_{n-1}(y) \delta(\varphi(y) - x) dy \quad (3.3.7)$$

e introduciendo el OPF definido como:

$$U\phi(x) = \int_0^1 \phi(y) \delta(\varphi(y) - x) dy \quad (3.3.8)$$

la evolución temporal de la función de distribución está dada por la secuencia:

$$\{\rho_0, \rho_1, \rho_2, \dots, \rho_n, \dots\} \quad (3.3.9)$$

donde

$$\rho_n(x) = U\rho_{n-1}(x) = U^n\rho_0(x) \quad (3.3.10)$$

esta relación conocida como la EPF, es el equivalente de la ecuación de Liouville para SD. Dada la distribución inicial, iterando la EPF obtenemos la secuencia de funciones de distribución que describe la evolución temporal del SDC.

Así, se obtiene una mejor descripción de un SDC cuando cambiamos nuestra atención de órbitas a funciones de distribución asociadas con el mapeo. Utilizando esta segunda opción no tenemos problemas para encontrar numéricamente la distribución estacionaria asociada al mapeo, la cual es invariante ante el mapeo. El proceso numérico que se sigue es el siguiente:

1. Se selecciona un número grande  $N$  de condiciones iniciales

$\{x_0^1, x_0^2, x_0^3, \dots, x_0^N\}$  que son realizaciones de la función de distribución inicial

$$\rho_0(x).$$

2. A cada uno de estos estados se le aplica el mapeo  $\varphi(x)$ , obteniéndose los siguientes  $N$  nuevos estados  $\{x_1^1, x_1^2, x_1^3, \dots, x_1^N\}$  donde  $x_1^i = \varphi(x_0^i)$ . Haciendo un histograma, obtenemos  $\rho_1(x)$ .

3. Repitiendo este proceso obtenemos numéricamente la secuencia de funciones de distribución, y cuando encontremos que después de alguna iteración  $q$  no cambia la distribución,

$$\rho_{q+1}(x) = U\rho_q(x) = \rho_q(x) \quad (3.3.11)$$

entonces hemos obtenido la función de distribución estacionaria  $\rho_{st}(x)$

que satisface la ecuación:

$$U\rho_{st}(x) = \rho_{st}(x) \quad (3.3.12)$$

Esta función de distribución es invariante ante la dinámica definida por (3.3.5) y describe un estado estacionario del sistema que corresponde a la densidad del estado de equilibrio en mecánica estadística.

Otro operador importante es el operador de Koopman que es el transpuesto del OPF, definido por la siguiente ecuación:

$$\int \psi(x) U\phi(x) dx = \int \phi(x) K\psi(x) dx \quad (3.3.13)$$

usando la ecuación (3.3.8) es posible mostrar que el operador de Koopman está dado por:

$$K\psi(x) = \psi(\varphi(x)). \quad (3.3.14)$$

Mostraremos a continuación que el valor esperado de cualquier función integrable  $b(x)$  es invariante ante el mapeo,

$$\langle b(x) \rangle = \langle b(\varphi(x)) \rangle. \quad (3.3.15)$$

Se muestra esta relación al considerar que:

$$\langle b(x) \rangle = \int b(x) \rho_{st}(x) dx = \int b(x) U\rho_{st}(x) dx \quad (3.3.16)$$

y utilizando (3.3.13) y (3.3.14) tenemos:

$$\langle b(x) \rangle = \int \rho_{st}(x) K b(x) dx = \int \rho_{st}(x) b(\varphi(x)) dx = \langle b(\varphi(x)) \rangle. \quad (3.3.17)$$

La ecuación (3.3.15) muestra que  $\langle b(x) \rangle$  corresponde con el valor de la observable macroscópica en equilibrio.

**Ejemplo:**

Utilizando el teorema ergódico, podemos evaluar el exponente de Liapunov para un SDC, que permite cuantificar la sensibilidad ante condiciones iniciales. Como este exponente es el promedio sobre la órbita, tenemos que:

$$\Lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ln \left| \varphi'(\varphi^i(x_0)) \right|$$

Como ya se mencionó anteriormente, una propiedad especialmente relevante en los SDC es la ergodicidad. Así el primer teorema de Birkhoff asegura la existencia de  $\Lambda$  y además, que es independiente de  $x_0$ ; por lo que el segundo teorema nos dice lo siguiente:

$$\Lambda = \int \rho_{st}(x) \ln |\varphi'(x)| dx$$

de manera que  $\Lambda$  es el promedio de la cantidad:

$$J(x) = \ln |\varphi'(x)|$$

Después de obtener la transformada de Fourier de  $J(x)$ , encontramos que la función generadora de momentos es la siguiente:

$$\langle e^{\sigma J(x)} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sigma^n}{n!} \langle J^n(x) \rangle,$$

donde  $\langle J^n(x) \rangle$  es el momento de orden  $n$ . Así mismo, la función generadora de cumulantes está dada por:

$$\ln \langle e^{\sigma J(x)} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sigma^n}{n!} \Gamma_n(J),$$

el primero y segundo cumulantes están relacionados con los momentos de la siguiente forma:

$$\Gamma_1(J) = \langle J \rangle$$

$$\Gamma_2(J) = \langle J^2 \rangle - \langle J \rangle^2$$

Dado que el SDC es ergódico tenemos que:

$$\langle e^{\sigma J(x)} \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} |\varphi'(x_n)|^\sigma = \int \rho_{st}(x) |\varphi'(x_n)|^\sigma dx$$

Por lo tanto la función generadora puede evaluarse tomando el promedio sobre la órbita o el promedio sobre ensamble de la función  $|\varphi'(x)|^\sigma$ .

Existe una propiedad muy importante entre la condición de mixing y las propiedades de la dependencia temporal de las densidades de probabilidad. Se puede mostrar que  $\varphi(x)$  cumple con la propiedad de mixing si y solo si  $U^n \rho_0(x)$  es débilmente convergente a  $\rho_{st}(x)$  para toda  $\rho_0(x)$  en el conjunto de funciones de densidad de probabilidad, en el siguiente sentido:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle U^n \rho_0(x) | g(x) \rangle = \langle \rho_{st}(x) | g(x) \rangle \quad (3.3.18)$$

donde el producto interno está definido por:

$$\langle f(x) | g(x) \rangle = \int f(x)g(x)dx . \quad (3.3.19)$$

De mayor interés en las aplicaciones físicas es la posibilidad de que  $U^n \rho_0(x)$  tienda a  $\rho_{st}(x)$ . Es en este punto donde el concepto de exactitud llega a ser crucial. Los SD exactos se definen por la siguiente propiedad:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_{st}(\varphi^n(A)) = 1, \quad (3.3.20)$$

para todos los conjuntos  $A$  en el espacio fase con  $\mu_{st}(A) > 0$ . Esto significa que si seguimos la evolución de un conjunto de condiciones iniciales dentro de un conjunto  $A$  de medida distinta de cero, entonces después de un gran número de iteraciones los puntos se habrán desparramado llenando completamente todo el espacio fase. Se puede demostrar que si el mapeo es exacto entonces también cumple con la propiedad de mezcla. Ahora existe una conexión entre exactitud y la dependencia temporal de las densidades, que establece que si la transformación es exacta entonces:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|U^n \rho_0(x) - \rho_{st}(x)\| = 0, \quad (3.3.21)$$

donde la distancia entre distribuciones está definida por:

$$\|f(x) - g(x)\| = \int |f(x) - g(x)| dx . \quad (3.3.22)$$

Es importante enfatizar que una transformación invertible no puede ser exacta. Ya que para cualquier transformación  $\varphi$  que preserve la medida y que sea invertible se cumple que:

$$\mu_{st}(\varphi(A)) = \mu_{st}(\varphi^{-1}(A) \circ \varphi(A)) = \mu_{st}(A), \quad (3.3.23)$$

por inducción demostramos lo siguiente

$$\mu_{st}(\varphi^n(A)) = \mu_{st}(A) \quad (3.3.24)$$

lo cual viola la condición (3.3.20) que define una transformación exacta. Este resultado implica que en Mecánica Estadística solo es posible la convergencia débil a  $\rho_{st}(x)$  debido a que las ecuaciones de Hamilton son invertibles. Sin embargo para SDC en general este no es el caso, ya que la mayoría de los mapeos son no-invertibles y por lo tanto el mapeo puede ser exacto.

### 3.4. La evolución de la función de distribución de grano grueso: Punto de vista heurístico

Estamos interesados en conocer el comportamiento a largo plazo de la secuencia de funciones de distribución  $\{\rho_0(x), \rho_1(x), \rho_2(x), \dots, \rho_n(x), \dots\}$  que caracterizan a un SDC. Como sabemos, si un SDC presenta la propiedad de mixing eventualmente su secuencia converge a  $\rho_{st}(x)$ , así que lo complicado del problema es describir la forma en que ocurre esta convergencia.

Consideraremos que la evolución desde la distribución inicial a la estacionaria ocurre en dos pasos, primero la secuencia  $\{\rho_0(x), \rho_1(x), \rho_2(x), \dots, \rho_n(x), \dots\}$  tiende a  $\rho_n^{cg}(x)$  que es una función de distribución de grano grueso, y posteriormente la secuencia de funciones de grano grueso  $\{\rho_n^{cg}(x), \rho_{n+1}^{cg}(x), \rho_{n+2}^{cg}(x), \dots, \rho_{n+r}^{cg}(x), \dots\}$  llega a la distribución estacionaria.

Como primer paso para alcanzar la distribución estacionaria supondremos que una consecuencia de la propiedad de mixing es que existe una iteración  $m$ , tal que para  $n > m$ ;  $\rho_n(x)$  solo recuerda su dependencia de  $x$  a través de las llamadas variables de grano grueso  $G(x)$ .

Empezaremos por dividir el espacio fase en  $K$  regiones mutuamente excluyentes  $(A_1, A_2, \dots, A_K)$ . Una función de grano grueso  $G(x)$ , es aquella que tiene la siguiente forma:

$$G(x) = \sum_{r=1}^K \alpha_r I_{A_r}(x) \quad (3.4.1)$$

donde  $\alpha_r$  es un número real asociado con la  $r$ -ésima celda  $A_r$ . En particular definimos la función de distribución de grano grueso  $\rho_n^{cg}(x)$  como aquella que es constante dentro de



cada celda y que da el mismo valor promedio para las funciones de grano grueso  $G(x)$  que el que se obtiene al usar  $\rho_n(x)$ :

$$\langle G(x) \rangle_n = \int \rho_n(x) G(x) dx = \int \rho_n^{cg}(x) G(x) dx . \quad (3.4.2)$$

Utilizando (3.4.1) se encuentra que:

$$\langle G(x) \rangle_n = \sum_{r=1}^K \alpha_r P_n(A_r) \quad (3.4.3)$$

donde  $P_n(A_r)$  es la probabilidad de que  $x_n \in A_r$ :

$$P_n(A_r) = \int \rho_n(x) I_{A_r}(x) dx . \quad (3.4.4)$$

Para encontrar  $\rho_n^{cg}(x)$  utilizaremos la construcción de Ehrenfest, que usa el criterio de que  $\rho_n^{cg}(x)$  asocia el mismo peso probabilístico a cada celda  $A_r$  que el asociado con  $\rho_n(x)$ :

$$\int \rho_n^{cg}(x) I_{A_r}(x) dx = P_n(A_r) = \int \rho_n(x) I_{A_r}(x) dx . \quad (3.4.5)$$

Así, proponemos lo siguiente:

$$\rho_n^{cg}(x) = \sum_{r=1}^K P_n(A_r) \frac{I_{A_r}(x)}{\Omega_r} \quad (3.4.6)$$

donde  $\Omega_r$  es el volumen de la celda  $A_r$ . El promedio  $G(x)$  con esta distribución está dado por:

$$\int \rho_n^{cg}(x) G(x) dx = \sum_{r=1}^K \frac{P_n(A_r)}{\Omega_r} \int I_{A_r}(x) G(x) . \quad (3.4.7)$$

Una de las propiedades de las funciones características de las celdas, es la siguiente:

$$\int I_{A_r}(x) I_{A_s}(x) dx = \Omega_r \delta_{r,s} , \quad (3.4.8)$$

usando (3.4.1) y (3.4.8) en la ecuación (3.4.7) obtenemos

$$\int \rho_n^{loc}(x) G(x) dx = \sum_{r=1}^K \alpha_r P_n(A_r) \quad (3.4.9)$$

de manera que se cumple (3.4.2). Notemos que la evolución de la función de distribución está gobernada por el vector de probabilidad:

$$\vec{P}_n = (P_n(A_1), P_n(A_2), \dots, P_n(A_K)) \quad (3.4.10)$$

El segundo paso al estado estacionario, consiste en describir la forma en la cual  $\rho_n^{cg}(x)$  tiende a la distribución estacionaria. Para este último paso daremos argumentos

cualitativos para hacer énfasis en que esta evolución está gobernada por un proceso markoffiano.

Cualquier punto dentro de una celda fase genera una trayectoria, los puntos dentro de una celda se mueven siguiendo un patrón muy complejo, debido a la sensibilidad ante condiciones iniciales. Si solamente sabemos que el estado inicial se encuentra dentro de una celda, después de un corto intervalo de tiempo podrá encontrarse la órbita en cualquier otra celda, de manera similar a lo que ocurre en un proceso de difusión, por lo que aplicaremos los métodos habituales en el fenómeno de difusión a un SDC.

Si inicialmente  $x_0$  se encuentra en la celda  $A_i$ , el sistema tiene una probabilidad  $T_n(A_j|A_i)$  de que  $x_n = \varphi^n(x_0)$  se encuentre en la celda  $A_j$ . Claramente debemos tener:

$$\begin{aligned} T_0(A_j|A_i) &= \delta_{ji}; \\ T_n(A_j|A_i) &\geq 0; \end{aligned} \tag{3.4.11}$$

por lo tanto

$$\sum_{j=1}^K T_n(A_j|A_i) = 1. \tag{3.4.12}$$

La definición de esta probabilidad es que si distribuimos inicialmente un conjunto de puntos sobre la celda  $A_i$  de manera homogénea, en la  $n$ -ésima iteración se encuentra una fracción  $T_n(A_j|A_i)$  de estos puntos en la celda  $A_j$ . Esto significa que si construimos un ensemble con densidad constante en  $A_i$  y cero fuera de esta celda, entonces una fracción  $T_n(A_j|A_i)$  de los sistemas de la muestra se encontrarán en  $A_j$  después de la  $n$ -ésima iteración.

La definición de  $T_n(A_j|A_i)$  no involucra ninguna hipótesis, sin embargo su utilidad reposa sobre la validez de la siguiente identidad:

$$T_{n+m}(A_j|A_i) = \sum_{k=1}^K T_m(A_j|A_k) T_n(A_k|A_i) \tag{3.4.13}$$

que significa que el proceso estocástico utilizado para describir la evolución del sistema es un proceso de Markoff. Esta ecuación se puede visualizar de la siguiente forma: Tomemos inicialmente un ensemble caracterizado por una densidad constante en la celda  $A_i$  y cero fuera de ella, al iterar  $n$  veces todos los sistemas que componen al ensemble, sobre cada celda  $A_k$  se encuentra una fracción  $T_n(A_k|A_i)$  de sistemas del ensemble distribuidos de alguna forma sobre ella. A continuación redistribuimos los

puntos dentro de la celda  $A_k$  de forma que obtengamos una distribución con densidad constante sobre cada una de ellas. Después de hacer esto iteramos  $m$  veces los puntos, finalmente contamos la fracción de puntos del ensamble original que han llegado a cualquier celda  $A_j$  después de  $m+n$  iteraciones. La ecuación (3.4.13) afirma que esta fracción será la misma que la obtenida si se iteran  $n+m$  veces los puntos del ensamble original. De manera que la redistribución intermedia no afecta la fracción final.

De la ecuación (3.4.13) se obtiene que:

$$T_n(A_j|A_i) = \sum_{k=1}^K W_{j,k} T_{n-1}(A_k|A_i) \quad (3.4.14)$$

donde  $W_{j,k} = T_n(A_j|A_k)$  es la probabilidad de transición de la celda  $A_k$  a la celda  $A_j$  en una iteración.

Consideraremos ahora que el ensamble inicial está distribuido sobre todas las celdas, de manera que estará caracterizado por la fracción de miembros del ensamble que se encuentran en cada celda, lo que está dado por el vector:

$$\vec{P}_0 = (P_0(A_1), P_0(A_2), \dots, P_0(A_K)) \quad (3.4.15)$$

donde  $P_0(A_i)$  es la probabilidad de que  $x_0$  se encuentre en la celda  $A_i$ . Después de  $n$  iteraciones la fracción de miembros del ensamble que se encuentran en la celda  $A_i$  es:

$$P_n(A_i) = \sum_{r=1}^K T_n(A_i|A_r) P_0(A_r) \quad (3.4.16)$$

substituyendo (3.4.14) en esta ecuación obtenemos:

$$P_n(A_i) = \sum_{k=1}^K W_{i,k} P_{n-1}(A_k) \quad (3.4.17)$$

que es la ecuación de Chapman-Kolmogorov que caracteriza a una cadena de Markoff. Hasta este punto hemos extendido las ideas heurísticas de Van Kampen para mostrar la manera en que los procesos de Markoff aparecen en los SDC, sin ninguna referencia a la ecuación de Perron-Frobenius que gobierna la evolución de las distribuciones.

### 3.5. Propiedades asintóticas de densidades (punto de vista formal)

En esta sección estableceremos criterios cuantitativos sobre el comportamiento a largo plazo de las distribuciones de densidad. Empezaremos por identificar a  $\rho_n^{loc}(x)$  como la parte proyectada sobre la partición de  $\rho_n(x)$ ; el SDC está descrito por  $\rho_n(x)$  que

converge débilmente a su parte parte proyectada y eventualmente podemos substituir a  $\rho_n(x)$  por  $\rho_n^{loc}(x)$ , lo cual sucede cuando sea posible describir al sistema como un conjunto completo de variables de grano grueso. En este régimen, la evolución temporal de la distribución está gobernada por un mapeo irreversible del vector de probabilidad asociado con la partición, el principio de Green permite mostrar que este vector de probabilidad evoluciona siguiendo la ecuación de Chapman-Kolmogorov.

Para establecer la relación entre  $\rho_n(x)$  y  $\rho_n^{loc}(x)$  utilizaremos la técnica de operadores de proyección. Dada una partición del espacio fase  $(A_1, A_2, \dots, A_K)$  definimos el operador de proyección como:

$$\Pi = \sum_{i=1}^K \frac{|A_i\rangle\langle A_i|}{\mu(A_i)} \quad (3.5.1)$$

donde  $|A_i\rangle$  denota la función característica de la  $i$ -ésima celda, y el producto interno entre funciones se define:

$$\langle \varphi | \phi \rangle = \int_X dx \varphi(x) \phi(x) \quad (3.5.2)$$

utilizando este producto interno, tenemos:

$$\langle A_k | A_i \rangle = \int_X dx I_{A_k}(x) I_{A_i}(x) = \delta_{k,i} \mu(A_i) \quad (3.5.3)$$

donde

$$\mu(A_i) = \int_{A_i} dx \quad (3.5.4)$$

es la medida de la  $i$ -ésima celda. Las componentes del vector de probabilidad dadas por (3.4.6) se pueden expresar en la siguiente forma:

$$P_n(A_r) = \int I_{A_r}(x) \rho_n(x) dx = \langle A_r | \rho_n(x) \rangle = \langle A_r | U^{n-s} \rho_s(x) \rangle \quad (3.5.5)$$

donde en el último paso hemos utilizado la ecuación de Perron-Frobenius. Utilizando el operador de proyección podemos separar la función de distribución en dos partes:

$$\rho_s(x) = \Pi \rho_s(x) + (1 - \Pi) \rho_s(x). \quad (3.5.6)$$

La proyección de la función de distribución sobre la partición está dada por:

$$\Pi \rho_s(x) = \sum_{i=1}^K \frac{|A_i\rangle\langle A_i|}{\mu(A_i)} P_s(A_i) = \rho_s^{loc}(x) \quad (3.5.7)$$

donde hemos utilizado (3.4.7) en el último paso. Por lo que la parte proyectada de la función de distribución corresponde a la distribución de grano grueso, la cual no contiene

información alguna sobre la estructura de la función de distribución sobre la celda, de (3.5.6) vemos que tal estructura está contenida en  $(1-\Pi)\rho_s(x)$ .

Consideremos a la observable como el valor promedio de la función de grano grueso  $\langle G(x) \rangle_n$ , este promedio está determinado por el vector de probabilidad  $\vec{P}_n = (P_n(A_1), P_n(A_2), \dots, P_n(A_K))$ , de manera que dado un mapeo  $\varphi(x)$  la secuencia de vectores de probabilidad  $(\vec{P}_0, \vec{P}_1, \dots, \vec{P}_s, \dots, \vec{P}_n, \dots)$  determina las observables a diferentes tiempos:

$$\langle G(x) \rangle_0, \langle G(x) \rangle_1, \dots, \langle G(x) \rangle_s, \dots, \langle G(x) \rangle_n, \dots \quad (3.5.8)$$

A continuación diremos que el vector de probabilidad conforma un conjunto completo de variables de grano grueso, si existe un valor  $r \geq 0$  tal que la subsecuencia de vectores de probabilidad  $(\vec{P}_r, \vec{P}_{r+1}, \dots, \vec{P}_s, \dots, \vec{P}_n, \dots)$ , satisfaga que  $\vec{P}_n$  está determinada por cualquier  $\vec{P}_s$  para  $n > s \geq r$ , es decir:

$$\vec{P}_n = F(\vec{P}_s, n-s) \quad \text{para } n > s \geq r. \quad (3.5.9)$$

La dependencia funcional anterior debe de satisfacer que para cualquier  $\vec{P}_s$  se debe obtener el mismo resultado, por lo que para  $n > s_2 > s_1 \geq r$  se satisface:

$$\vec{P}_n = F(\vec{P}_{s_1}, n-s_1) = F(\vec{P}_{s_2}, n-s_2) = F(F(\vec{P}_{s_1}, s_2-s_1), n-s_2). \quad (3.5.10)$$

Esta condición se satisface cuando existe un mapeo entre los vectores de probabilidad de la siguiente forma:

$$\vec{P}_n = G(\vec{P}_{n-1}). \quad (3.5.11)$$

Para encontrar la forma funcional que satisface al vector de probabilidad dado por la ecuación (3.5.9), sustituimos (3.5.6) y (3.5.7) en (3.5.5) y obtenemos:

$$P_n(A_k) = \sum_{i=1}^K \frac{\langle A_k | U^{n-s} | A_i \rangle}{\mu(A_i)} P_s(A_i) + \langle A_k | U^{n-s} | (1-\Pi)\rho_s(x) \rangle. \quad (3.5.12)$$

Para que se satisfaga la condición (3.5.9) se requiere que el segundo término del lado derecho de (3.5.12) se anule, lo que se satisface cuando

$$(1-\Pi)\rho_s(x) = 0, \quad (3.5.13)$$

lo que implica que:

$$\rho_s(x) = \Pi\rho_s(x) = \rho_s^{bc}(x) \quad (3.5.14)$$

de manera que cuando la función de distribución es igual a su parte proyectada, (3.5.12) se reduce a:

$$P_n(A_k) = \sum_{i=1}^K T_{n-s}(A_k | A_i) P_s(A_i) \quad (3.5.15)$$

donde  $T_{n-s}(A_k | A_i) = \frac{\langle A_k | U^{n-s} | A_i \rangle}{\mu(A_i)}$ . La ecuación (3.5.15) es la probabilidad condicional de

que  $x_n = \varphi^n(x_0) \in A_k$  dado que  $x_s = \varphi^s(x_0) \in A_i$ , así mismo, muestra como el mapeo y la partición determinan la forma explícita de (3.5.9).

A continuación veremos la condición que se requiere para que se cumpla la ecuación (3.5.10). Cuando se determina  $\vec{P}_n$  a partir de  $\vec{P}_{s_2}$ , se tiene que (3.5.15) toma la forma:

$$P_n(A_k) = \sum_{j=1}^K T_{n-s_2}(A_k | A_j) P_{s_2}(A_j), \quad (3.5.16)$$

en tanto que cuando se determina a partir de  $\vec{P}_{s_1}$ :

$$P_n(A_k) = \sum_{i=1}^K T_{n-s_1}(A_k | A_i) P_{s_1}(A_i) \quad (3.5.17)$$

por otra parte tenemos lo siguiente

$$P_{s_2}(A_j) = \sum_{i=1}^K T_{s_2-s_1}(A_j | A_i) P_{s_1}(A_i). \quad (3.5.18)$$

Substituyendo esta expresión en (3.5.16) obtenemos

$$\begin{aligned} P_n(A_k) &= \sum_{j=1}^K T_{n-s_2}(A_k | A_j) \sum_{i=1}^K T_{s_2-s_1}(A_j | A_i) P_{s_1}(A_i) \\ &= \sum_{i=1}^K \left( \sum_{j=1}^K T_{n-s_2}(A_k | A_j) T_{s_2-s_1}(A_j | A_i) \right) P_{s_1}(A_i) \end{aligned} \quad (3.5.19)$$

Finalmente comparando (3.5.19) con (3.5.15) obtenemos

$$T_{n-s_1}(A_k | A_i) = \sum_{j=1}^K T_{n-s_2}(A_k | A_j) T_{s_2-s_1}(A_j | A_i) \quad (3.5.20)$$

de manera que para que se cumpla la condición de compatibilidad dada por (3.5.10) se requiere que las probabilidades de transición satisfagan la ecuación anterior, que es la ecuación (3.4.13) que define a un proceso estocástico Markoffiano.

La ecuación de Chapman-Kolmogorov se obtiene directamente de (3.5.15) tomando  $s = n - 1$ , de forma que:

$$P_n(A_k) = \sum_{i=1}^K W_{k,i} P_{n-1}(A_i) \quad (3.5.21)$$

donde

$$W_{k,i} = T_i(A_k | A_i) = \frac{\langle A_k | U | A_i \rangle}{\mu(A_i)} \quad (3.5.22)$$

Así, conjuntando la ecuación de Perron-Frobenius con el principio de Green, al considerar que los vectores de probabilidad conforman un conjunto completo de variables de grano grueso, hemos demostrado que la evolución de la función de distribución hacia la distribución estacionaria está gobernada por la ecuación de Chapman-Kolmogorov, y que todos los detalles del mapeo y la partición utilizada están contenidos dentro de la matriz de transición de probabilidad dada por (3.5.21).

### 3.6. Consideraciones finales

Hemos estudiado el comportamiento a largo plazo de la densidad de probabilidad asociada a un SDC, aplicando diversas técnicas habituales en Mecánica Estadística de Procesos Irreversibles. A continuación se resume:

Primero generalizamos a un SDC el análisis heurístico de N. G. Van Kampen, en el que se hace ver como la sensibilidad ante condiciones iniciales implica de manera natural la introducción de una descripción estadística. Donde notamos que el análogo a la ecuación de Liouville para un sistema de muchos cuerpos es la ecuación de Perron-Frobenius que da la evolución temporal de la densidad de probabilidad asociada al SD. Posteriormente observamos que debido a la propiedad de mixing el comportamiento a largo plazo de la densidad de probabilidad esta gobernado por un proceso estocástico Markoffiano, que eventualmente lleva a describir estadísticamente al sistema por su densidad de probabilidad estacionaria, que se convierte en un punto fijo dentro del conjunto de funciones de distribución asociadas con el mapeo.

Este proceso corresponde en Mecánica Estadística a la evolución de la función de distribución de muchos cuerpos hacia el estado de equilibrio termodinámico.

Para dar una base teórica a la descripción de Van Kampen, empezamos por señalar la diferencia que existe en el comportamiento de las funciones de distribución a largo plazo de un SDC asociado con mapeos reversibles e irreversibles, ya que en el primer caso la función de distribución tiende de forma débil a la distribución estacionaria, entendiéndose por ello que los valores esperados tomados con las distribuciones a largo plazo tienden a

acercarse a los promedios tomados con la distribución estacionaria. En tanto que cuando el mapeo que genera el SDC es irreversible, entonces la función de distribución a largo plazo tiende a la distribución estacionaria, así se convierte en un “punto fijo” de las funciones de distribución asociadas al mapeo. Hemos mostrado que existe una íntima relación entre los Sistemas Dinámicos Caóticos y la Mecánica Estadística de Procesos Irreversibles, y dada la relativa simplicidad de los SDC que son susceptibles de ser analizados numéricamente, esta relación nos permitirá entender mejor desde un punto de vista microscópico la evolución temporal de sistemas de muchos cuerpos hacia estados de equilibrio, en particular la flecha del tiempo.



## 4. Estudio de Canales Iónicos

Los canales iónicos son estructuras heterogéneas de naturaleza proteica que se encuentran embebidos en todas las membranas de las células, desde las bacterianas hasta las complejas células animales y vegetales. La función de los canales iónicos esencialmente es transportar ciertos iones desde el interior de la célula hacia el exterior y viceversa. Vamos a aclarar un poco sobre esto.

Todas las células sin excepción están delimitadas por un organelo denominado membrana celular, que funge principalmente como la barrera física que separa el medio interior de la célula de su entorno. Las células son sistemas abiertos, es decir, intercambian materia y energía con sus alrededores. Este constante flujo hace posible el mantenimiento de la homeostasis celular y por ende propicia todos los fenómenos bioquímicos que la vida conlleva. Sin embargo, todo el material que debe ser ingresado hacia la célula o bien, todos los desechos de las reacciones metabólicas internas de la célula deben cruzar de alguna manera a la membrana celular. A continuación se describe la naturaleza de las membranas biológicas para luego pasar a comentar sobre los canales iónicos.

### 4.1 Membrana biológica

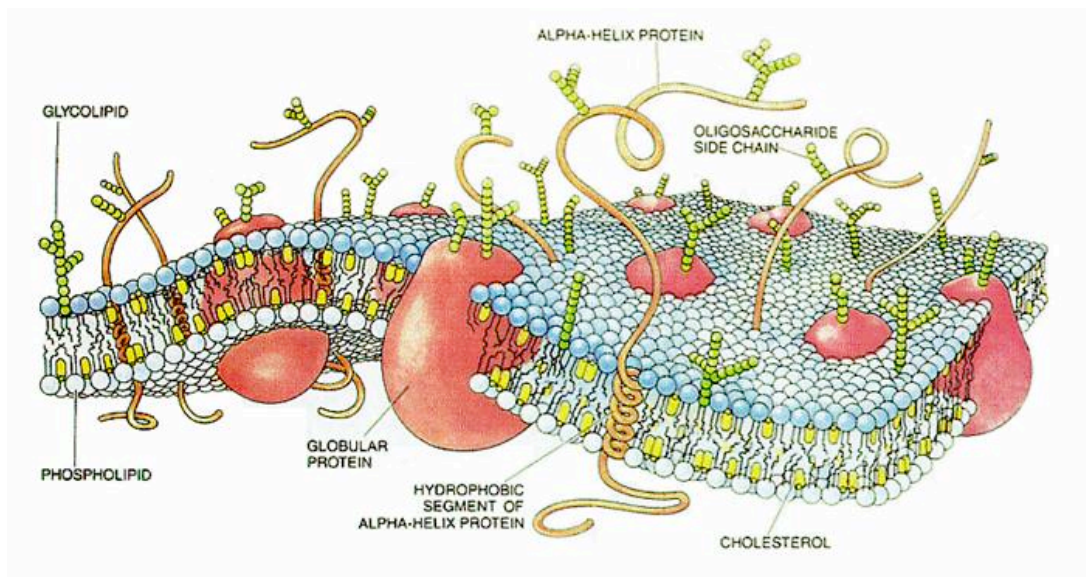
Las membranas biológicas están constituidas de una mezcla de lípidos y proteínas. Las proporciones de esos dos componentes difieren en entre los distintos tipos celulares.

Los lípidos de los que están hechas las membranas biológicas son principalmente fosfolípidos, aunque también hay colesterol. Todos los fosfolípidos son derivados del ácido fosfatídico, que consiste de una “columna vertebral” de glicerol fosforilado a la que dos “tallos” de ácidos grasos está unidos por enlaces éster. La mayoría de los fosfolípidos prevalecientes encontrados en las membranas biológicas, tales como fosfatidilcolina, fosfatidilserina, fosfatidilinositol y fosfatidiletanolamina, resultan de la esterificación del grupo fosfato libre del ácido fosfatídico con los grupos hidroxilo de colina, serina, inositol y etanolamina, respectivamente. Lo importante es que todos los fosfolípidos contienen un grupo soluble en agua, o de carácter hidrofílico, al cual muy a menudo se le denomina

cabeza polar, y dos colas insolubles en agua, de carácter hidrofóbico o lipofílico. Así, los fosfolípidos son moléculas anfipáticas y en medios acuosos son capaces de formar espontáneamente bicapas, con sus cabeza solubles en agua inmersos en la fase acuosa y sus colas lípidicas, formando un “corazón” hidrofóbico.

En la célula, los fosfolípidos y el colesterol forman una bicapa fluida donde además hay proteínas. Algunas proteínas atraviesan el espesor de la bicapa, llamadas proteínas integrales, otras sólo se ubican en la superficie interna o externa de la bicapa, a las cuales se les llama proteínas periféricas. Actualmente se acepta como modelo estructural de la membrana celular al modelo del mosaico fluido, el cual es dinámico y proporciona la base ideal para la correlación de la estructura y función de la membrana, véase la Fig. 15.

Por la naturaleza lipídica de la membrana celular, queda claro que no cualquier sustancia puede atravesarla libremente, a menos que posea naturaleza hidrofóbica. Sin embargo, muchos de los metabolitos, iones y demás sustancias indispensables para el funcionamiento



**Figura 15.** Representación de la membrana celular.

celular poseen carga eléctrica. Para transportar estas sustancias, la célula posee un sinnúmero de estrategias altamente complejas que a la fecha no se han elucidado del todo. Una de ellas es el transporte de los iones. La célula transporta iones a través de las membranas usando estructuras proteicas altamente especializadas denominadas canales iónicos. En la siguiente sección se describen los aspectos más relevantes de los canales biológicos.

## **4.2 Canales iónicos**

Los canales iónicos son proteínas integrales de la membrana que forman poros en su interior y que conducen iones a través de ellos. Son altamente selectivos y existen de muchos tipos. Los canales iónicos generalmente se clasifican de acuerdo a los iones que están destinados a conducir, como son el sodio, potasio, calcio y cloro, principalmente. Se sabe que los poros de los canales iónicos no siempre se encuentran abiertos, por lo que para que pueda transitar un ion a través de ellos se requiere de la participación de ciertos estímulos. Por ejemplo, el control del cierre y apertura de algunos canales iónicos está determinado por cambios locales en el voltaje de la membrana celular. Otros canales iónicos se abren y se cierran cuando una molécula en particular, denominada ligando, se enlaza al canal. Por último, también se conocen canales cuya cinética depende de estímulos mecánicos o incluso, se sabe de canales que permanentemente se encuentran abiertos.

Los canales iónicos son importantes en la comunicación de señales entre neuronas, pues juegan un papel importante en la propagación del potencial de acción. Asimismo, los canales son indispensables para que se establezca la unión motora y los estímulos nerviosos puedan ser convertidos en acciones musculares.

El paso de los iones a través de los canales iónicos propiamente dicho es un problema de gran actualidad. Se ha tratado de entender haciendo uso de las más sofisticadas técnicas cristalográficas, de la microscopía electrónica e incluso, de las más modernas técnicas bioinformáticas. En la siguiente sección se menciona cómo se puede estudiar el paso de los iones a través de los canales iónicos mediante la técnica del patch clamp.

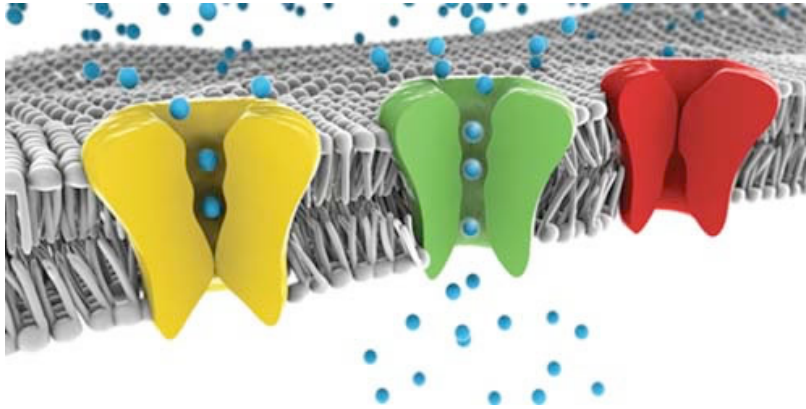


Figura 16. Esquema de los canales iónicos.

### 4.3 El paso de iones a través de los canales y la técnica de Patch-Clamp

En esta sección nos enfocamos en el estudio del paso de iones a través de los canales iónicos. Como un primer acercamiento, se puede considerar que el paso de los iones está mediado por un proceso difusivo. En este sentido, es interesante averiguar, de manera aproximada, qué tan rápido los iones atraviesen una bicapa lipídica asumiendo que el coeficiente de difusión es el mismo que en una solución acuosa. Por ejemplo, el  $K^+$  puede considerarse como un ion cuyo radio cristalino es alrededor de  $r_i = 0.15nm$ , y su coeficiente de difusión en el bulto es  $D_i = 2 \times 10^{-5} cm^2/s$ . Si suponemos que el canal para iones de potasio tiene un radio  $r_c = 0.2nm$  y que la bicapa tiene un espesor de  $\Delta x = 5nm$ , y que existe una diferencia de concentración a través del canal de  $\Delta C_i = 100mM$ , se puede calcular la densidad de flujo de corriente como

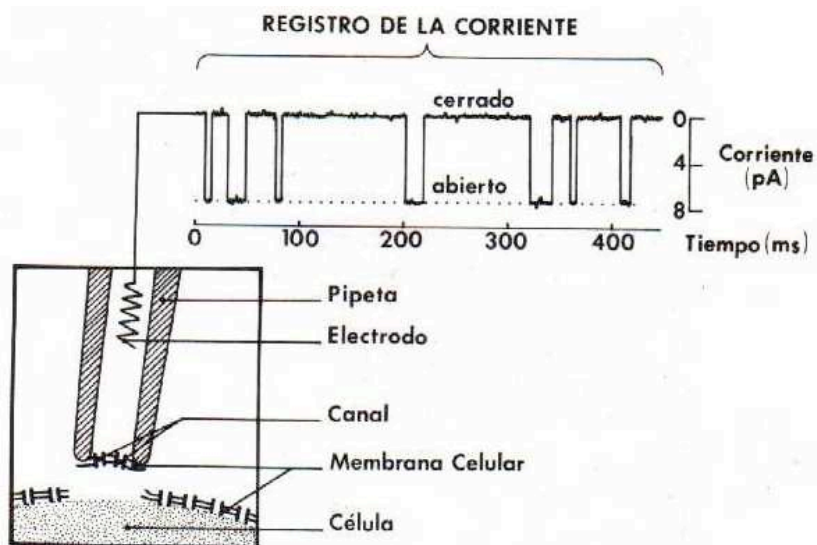
$$J_i = \frac{\pi r_c^2 D_i \Delta C_i}{\Delta x} = 5 \times 10^{-18} mol/s.$$

Multiplicando este resultado por el número de Avogadro se obtiene  $J_i = 3 \times 10^6 \text{ iones}/s$ . Como el ion de nuestro ejemplo es monovalente, se sabe que la carga electrónica es  $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ coulombs}$  y por lo tanto la corriente atribuida a este flujo de iones es  $5 \times 10^{-13} \text{ coulombs}/s = 0.5pA$ . Aunque estas estimaciones han sido burdas, lo importante de este ejercicio es que se estima que más de un millón de iones pueden ser capaces de difundirse

en un segundo a través de un poro muy estrecho, y que esto debería dar lugar a una corriente que puede ser fácilmente medida usando los amplificadores apropiados.

Las mediciones de pulsos de corriente a través de membranas biológicas que se obtienen de experimentos son muy consistentes con el ejercicio anterior y junto con otras evidencias, dejan poca duda de que estos pulsos son el resultado del movimiento de iones a través de poros o canales iónicos. Por lo tanto las proteínas de los canales iónicos controlan el flujo de iones a través de la membrana celular.

El método experimental que se usa para medir las corrientes iónicas a través de un solo canal se conoce como la técnica del Patch-Clamp, ver la Fig. 17. Vamos a describirla de manera breve. Con una punta fina de una micropipeta de vidrio que tiene un diámetro de aproximadamente  $1\mu m$  se presiona contra un parche de la membrana celular formando un sello que esencialmente es a "prueba de fugas" de iones (la resistencia del sello es más grande que  $1 \times 10^{12} Ohms$ ). Así, si hay un canal iónico en el parche de la membrana, las



**Figura 17.** La técnica de Patch-Clamp o medida de la conductividad a través de un canal individual permite investigar la apertura, cierre de los canales iónicos individuales. La imagen proviene de <http://www.creces.cl/new/index.asp?imat=++%3E++13&tc=3&nc=5&art=342>.

corrientes iónicas hacia adentro o hacia fuera de la célula quedan restringidas dentro de la pipeta. A su vez, se puede conectar un circuito a la pipeta y así poder registrar los cambios en la corriente local. También se puede separar el parche que contiene al canal de la membrana y examinar las propiedades del canal individual bajo condiciones artificiales bien definidas y fácilmente controladas.

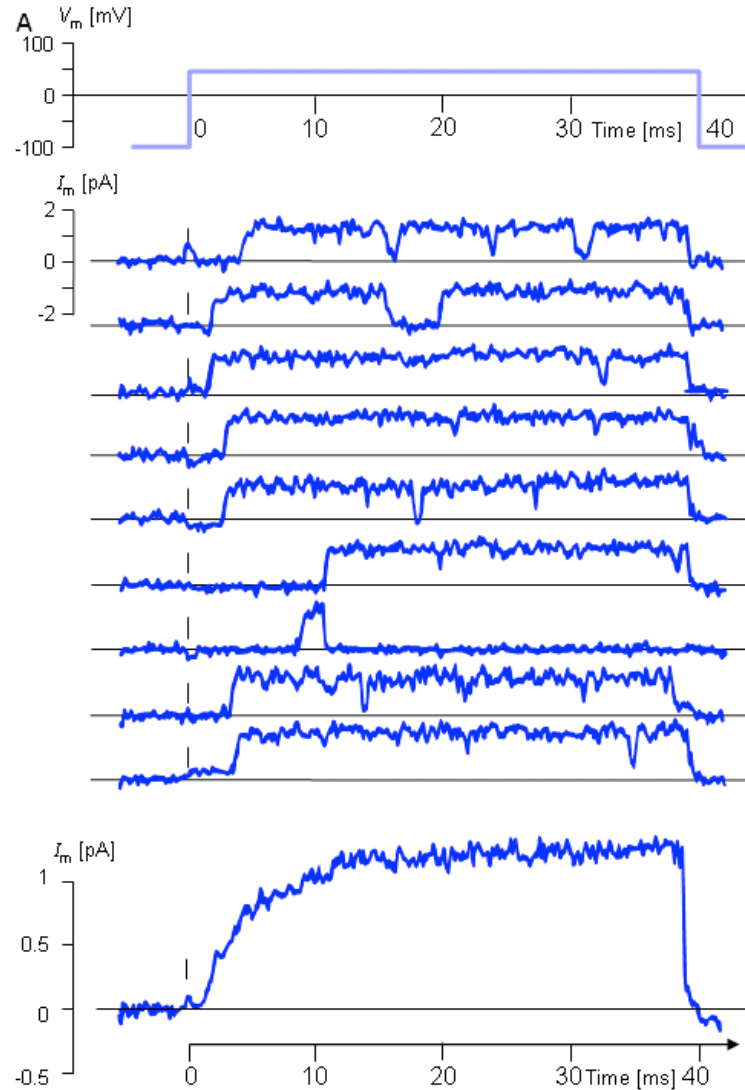
Un ejemplo del registro de la actividad de un canal iónico individual se muestra en la Fig. 17. Nótese que durante la apertura del canal se observan deflexiones ascendentes abruptas de la línea base que alcanzan una meseta y entonces abruptamente se cierran.

Como se observa en la Fig. 17, los registros de corriente de un canal unitario son de naturaleza aleatoria. La apertura del canal se refleja en aumentos o disminuciones repentinas en la intensidad de la corriente registrada, según el sentido de la corriente iónica. Los pulsos que aparecen en un registro de un canal unitario son cuadrados y corresponden a las transiciones finitas entre los estados cerrado (no conductor) y abierto (conductor) del canal.

En la Fig. 18 podemos ver el comportamiento de un mismo canal cuando se aplica varias veces el mismo pulso de prueba. Vamos a suponer que en el potencial base de  $-100$  mV el canal se encuentra cerrado. Eventualmente, al despolarizar la membrana con un salto de voltaje que llegue a los  $+50$  mV, el canal debería abrirse.

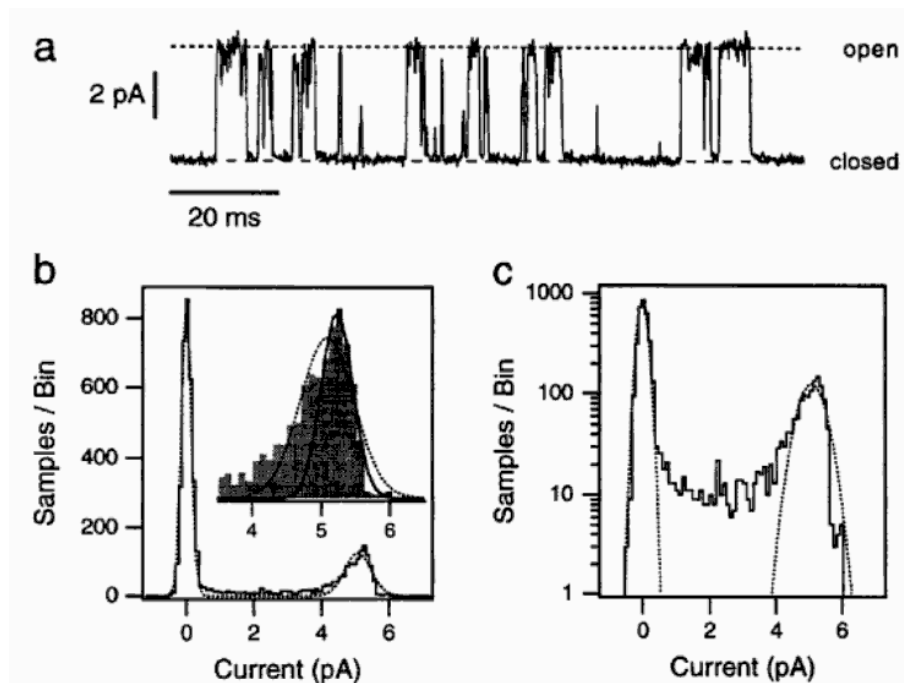
Ya se había mencionado que la naturaleza proteica de un canal iónico puede ser muy compleja y sus cambios conformacionales pueden ser muy variados. Por razones de simplicidad supondremos que el canal de estudio presenta sólo dos estados, uno al que llamaremos estado cerrado y otro, estado abierto.

A partir de los registros de Patch-Clamp y del modelo sugerido, es posible determinar la probabilidad de apertura de un canal, es decir, la probabilidad de encontrar el canal abierto a un determinado potencial. Lo anterior se consigue simplemente dividiendo el tiempo que el canal está abierto por el tiempo total de observación. Además, si promediamos todos los registros de un canal único realizados a diferentes tiempos, con un mismo pulso de voltaje, podemos obtener un registro similar al obtenido con una corriente macroscópica. Es interesante ver que a pesar de que se trata del mismo canal analizado varias veces con el mismo pulso de voltaje, todos los registros son diferentes, lo que corrobora que el fenómeno de apertura y cierre del canal es aleatorio.



**Figura 18.** Registros patch clamp de corrientes de canal único de potasio en el axón gigante de calamar durante pasos de voltaje desde -100 mV a +50mV. Panel superior: Nueve ensayos consecutivos muestran una conductancia de 20 pS. Panel inferior: Promedio de 40 repeticiones de mediciones de canal único como las mostradas en el panel superior. La imagen proviene del libro de Hille de 1992, que a su vez se basa en los datos de F. Bezanilla and C. K. Augustine (1986): Voltage dependent gating. In *Ionic Channels in Cells and Model Systems*, ed. R Latorre, pp. 37-52, Plenum Press, New York.

Para construir un **histograma de amplitudes** o **histograma de distribución de estados** se mide la intensidad de corriente de cada punto del registro de canal unitario y se agrupan las medidas en intervalos de amplitud determinada (por ejemplo de 0.08 pA). Realizada la agrupación, se grafica la frecuencia (corriente iónica (eje X) contra el número de casos (eje Y). El resultado es una distribución con uno o más picos: Si el registro tiene dos estados, el histograma mostrará dos picos claramente definidos, cada uno con una distribución gaussiana, que corresponden a los estados cerrado y abierto. Con el histograma de amplitudes, los valores experimentales pueden ajustarse a distribuciones de Gauss para determinar los parámetros que las caracterizan. Un ejemplo se muestra en la Fig. 19.



**Figura 19.** Análisis de registros de canal único (tomado del libro de Hille de 1992):

- A. Corriente de salida.
- B. Histograma de distribución de estados. El eje X está en función de la corriente, mientras que el eje Y es el número de eventos. Se ven dos picos, donde el de la izquierda corresponde a los estados cerrados mientras que el de la derecha corresponde al estado abierto. En líneas punteadas se puede ver el ajuste gaussiano. Ya que el registro se basa en la actividad de sólo un canal, se puede medir la probabilidad de apertura, midiendo el área bajo la curva.
- C. Se puede ver el mismo histograma de B, pero en función logarítmica.



De los histogramas se puede obtener lo siguiente:

- Si se traza una línea recta desde el pico de cada campana hasta el eje X (corriente), se obtendrán dos valores diferentes para cada distribución gaussiana; es decir, un valor de corriente para los canales cerrados, que será cero o estará cerca de cero y otro para la corriente de los estados abiertos. De este modo, si se restan los valores máximos obtenidos para los canales abiertos y cerrados, se puede obtener el valor de la corriente promedio para los canales abiertos.
- Además, la razón del área bajo la curva de las dos campanas nos permiten calcular la probabilidad de apertura del canal. Claramente, cuanto mayor sea el área de una distribución mayor será el tiempo de residencia del canal en ese estado particular y mayor será la probabilidad de encontrarle en ese estado. Y la probabilidad del estado cerrado puede calcularse fácilmente siguiendo la misma estrategia.

Matemáticamente, el comportamiento de un canal iónico se describe como no determinístico, por lo que se requiere del análisis estocástico para manejar e interpretar dicho comportamiento. Gracias a esta herramienta sabemos que la probabilidad de apertura y cierre de los canales está determinada por el voltaje a través de la membrana, para los canales dependientes de voltaje, o por la unión de ligandos en el caso de los canales dependientes de ligando. El comportamiento de la corriente de muchos canales del mismo tipo (promedio del ensamble) puede aproximarse mediante una expresión matemática que incluya una conductancia promedio de cada canal y un número típico de canales activos, o bien, sabiendo su probabilidad de apertura. Si se suma la corriente unitaria de muchos canales, se obtiene la corriente macroscópica llamada corriente de células completas sólo si corresponde a la suma de la corriente debida a todos los canales del mismo tipo presentes en dicha célula.

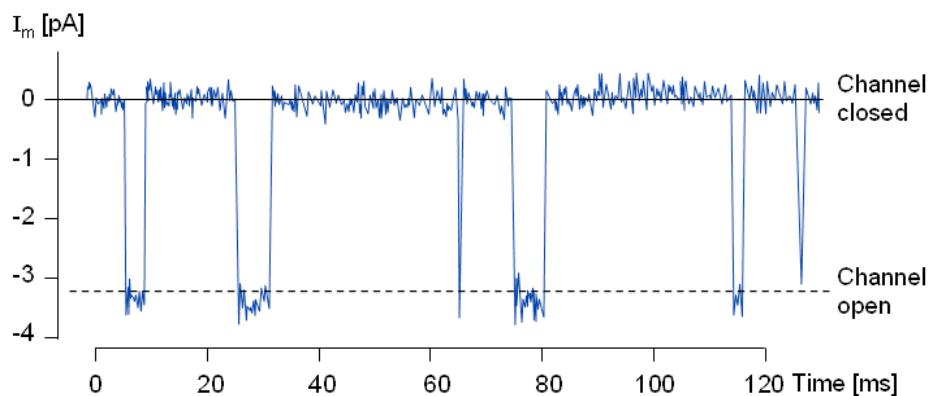
Aunque las propiedades cinéticas de un canal iónico se han representado mediante más de un modelo matemático, el modelo de proceso de Markov resulta ser muy útil puesto que proporciona un marco conceptual para una amplia gama de variables medibles para un canal iónico, tales como carga de compuerta, conductancia o corriente unitaria. Esto se logra suponiendo que el canal funciona como una cadena de estados discretos entre los cuales puede transitar el canal bajo diferentes condiciones, y que pueden ser asociables con

algunos estados conformacionales de la molécula correspondiente a un tipo de canal iónico, por los cuales pasa el canal durante el proceso de activación.

Un proceso de Markov se define en términos de las probabilidades de transición entre los estados que lo componen. Esas probabilidades caracterizan al proceso, en el sentido de que todas las propiedades de un proceso de Markov pueden derivarse a partir de ellas.

#### 4.4 Modelos de estado para canales iónicos

La apertura o cierre de un solo canal iónico puede verse como un proceso estocástico ya que no se puede predecir con exactitud cuándo tendrá o no una transición entre un estado u otro; por ejemplo, no podemos anticipar si el canal pasará de un estado abierto a uno cerrado. Se han propuesto diferentes modelos para estudiar a los canales iónicos con el fin de poder explicar las propiedades observadas mediante técnicas experimentales. Estos modelos van desde los más simples, donde se suponen sólo dos estados posibles, hasta los más sofisticados, donde el canal transita en el tiempo entre varios estados (abierto, cerrado e inactivo), dependiendo de las variables. La Fig. 20 muestra un registro de canal unitario obtenido con la técnica de patch clamp, en el cual se observa que los canales sólo transitan entre dos estados.



**Figura 20.** Corriente unitaria de un canal iónico dependiente del voltaje, obtenida con la técnica de *Patch-Clamp*. Esquema basado en los datos de E. Neher y B. Sackmann, "Single-channel currents recorded from membrane of denervated frog muscle fibres", *Nature* 260, 799 – 802 (1976).

#### 4.4.1 El modelo de dos estados

El modelo más sencillo es el que considera que el canal sólo tiene dos posibles estados, A abierto y C cerrado, mutuamente excluyentes. El diagrama cinético de un sistema de este tipo es:



De esta ecuación que representa la cinética de un sistema es claro que la probabilidad de que el canal esté cerrado más la probabilidad de que el canal esté abierto suman uno, lo que representa una conservación de probabilidad. Entonces, para conocer cuál es la probabilidad de que el canal se encuentre en alguno de los estados a un tiempo  $t$ , debe resolverse el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden extraído del modelo cinético arriba mostrado. Asignemos arbitrariamente el número 1 al estado abierto y el número 2 al estado cerrado. Entonces, el sistema de ecuaciones diferenciales que describe las probabilidades de transición entre los dos estados puede escribirse en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} P_{11}(t) & P_{12}(t) \\ P_{21}(t) & P_{22}(t) \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} P_{11}(t) & P_{12}(t) \\ P_{21}(t) & P_{22}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\alpha & \alpha \\ \beta & -\beta \end{pmatrix}. \quad (4.4.1.2)$$

Donde  $P_{12}(t)$  y  $P_{21}(t)$  son las probabilidades de que el canal pase del estado abierto al cerrado y viceversa, respectivamente. Nótese que la suma en las filas de la matriz de razones de transición (matriz de transición,  $\alpha$ ) de estados es igual a cero.

Para encontrar las probabilidades de transición como función del tiempo, debemos determinar los valores propios de  $\alpha$ , esto es, resolver el problema de valores propios asociados:

$$\begin{vmatrix} -\alpha-\lambda & \alpha \\ \beta & -\beta-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (4.4.1.3)$$

que arroja el polinomio característico:

$$\lambda(\lambda+(\alpha+\beta))=0 \quad (4.4.1.4)$$

De donde se obtienen los dos valores propios de este modelo:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0 \\ \lambda_2 &= -(\alpha+\beta). \end{aligned} \quad (4.4.1.5)$$

Estos valores propios nos indican que el modelo se comportará como asintóticamente estable, y que el valor de estado estacionario que alcanzarán las probabilidades será una constante diferente de cero.

Para  $\lambda_1 = 0$ , la matriz característica  $\alpha - \lambda_1 \mathbf{I}$  sería

$$\alpha - \lambda_1 \mathbf{I} = \begin{pmatrix} -\alpha & \alpha \\ \beta & -\beta \end{pmatrix} \quad (4.4.1.6)$$

de donde el vector propio se obtiene como aquel vector  $\mathbf{Z}_1$  que resuelve el problema de valores propios asociado a  $\alpha$  para  $\lambda_1 = 0$ ; esto es:

$$\begin{pmatrix} -\alpha & \alpha \\ \beta & -\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_{11} \\ z_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.4.1.7)$$

Por lo tanto, el vector asociado a  $\lambda_1 = 0$  es

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.4.1.8)$$

o cualquier múltiplo constante de él. De manera similar, se puede plantear la matriz característica para el valor propio  $\lambda_2 = -(\alpha + \beta)$ :

$$\alpha - \lambda_2 \mathbf{I} = \begin{pmatrix} \beta & \alpha \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \quad (4.4.1.9)$$

y el vector propio asociado a  $\lambda_2$  será

$$\mathbf{Z}_2 = \begin{pmatrix} 1/\beta \\ -1/\alpha \end{pmatrix} \quad (4.4.1.10)$$

o cualquier múltiplo constante. Así, las probabilidades de transición entre estados finalmente queda así:

$$\begin{pmatrix} P_{11}(t) & P_{12}(t) \\ P_{21}(t) & P_{22}(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\alpha + \beta} \begin{pmatrix} \beta + \alpha e^{-(\alpha + \beta)t} & \alpha - \alpha e^{-(\alpha + \beta)t} \\ \beta - \beta e^{-(\alpha + \beta)t} & \alpha + \beta e^{-(\alpha + \beta)t} \end{pmatrix} \quad (4.4.1.11)$$

Y las probabilidades de ocupación de los estados Abierto y Cerrado,  $P_o(t)$  y  $P_c(t)$ , será

$$\begin{aligned} P_o(t) &= P_o(0)e^{-(\alpha+\beta)t} + \frac{\beta}{\alpha+\beta}(1 - e^{-(\alpha+\beta)t}) \\ P_c(t) &= P_c(0)e^{-(\alpha+\beta)t} + \frac{\alpha}{\alpha+\beta}(1 - e^{-(\alpha+\beta)t}) \end{aligned} \quad (4.4.1.12)$$

La ecuación para  $P_c(t)$  nos hace ver que la probabilidad de ocupación del estado Cerrado es una función exponencial con constante de tiempo  $1/(\alpha+\beta)$ , valor inicial  $P_c(0)$  y valor de estado estacionario  $\alpha/(\alpha+\beta)$ . Por ejemplo, si el estado inicial del canal es Cerrado, esto es  $P_c(0)=1$ , la probabilidad de que el canal esté cerrado para tiempos muy largos (estado estacionario) es  $\alpha/(\alpha+\beta)$ . Por conservación de probabilidad, la probabilidad de que el canal esté abierto en el estado estacionario es  $1 - \alpha/(\alpha+\beta)$ , es decir,  $\beta/(\alpha+\beta)$ . Análogamente podríamos concluir lo que sucede si el estado inicial del canal es Abierto.

Con esto concluimos que en un modelo de dos estados para un canal iónico, la probabilidad de ocupación en estado estacionario sólo depende de las velocidades de transición,  $(\alpha+\beta)$ . Durante la fase transitoria, la ocupación de un estado depende exponencialmente del tiempo. Estos resultados pueden ser empleados para simular la actividad de un solo canal.

Cabe mencionar que el modelo de dos estados ignora los otros estados conformacionales de un canal iónico. Esto es, un canal en realidad presenta otros estados durante su proceso de activación o desactivación, tales como el estado inactivo, ampliamente reportado. En consecuencia, un modelo de dos estados sólo nos permite estudiar y simular parte de la información que se obtiene durante un registro experimental. Esta es la razón principal por la cual se han publicado modelos que incluyen decenas de estados discretos y que reproducen con mayor fidelidad el comportamiento real de un cierto tipo de canal iónico.

El objeto de estudio de este trabajo es el desarrollo de un modelo determinista de tres estados que reproduce los registros obtenidos mediante la técnica de Patch-Clamp. En el siguiente capítulo se abordará dicho modelo y el cálculo de algunas propiedades.



## 5. Modelo de Liebovitch y Toth

Normalmente el estudio de la cinética de apertura y cierre de canales iónicos se ha hecho mediante modelos estocásticos basados en procesos Markovianos (como los mencionados en el Capítulo 4). En este capítulo se presenta un mapeo caótico determinista que puede reproducir el comportamiento de los canales iónicos cuando éstos se modelan usando exclusivamente tres estados, denominado modelo de Liebovitch-Toth. Dicho mapeo consta de tres regiones: dos de ellas representan al canal en su estado abierto o cerrado, y una tercera región intermedia llamada “región de switcheo” que permite la transición entre los dos estados anteriores.

### 5.1. Mapeo de Liebovitch-Toth

El mapeo de Liebovitch y Toth (MLT) es un mapeo lineal a pedazos del intervalo unitario en sí mismo (ver Fig. 21). Cada pedazo está definido en un subintervalo, y los tres son disjuntos (no se intersectan entre sí). La dinámica está dada por la aplicación sucesiva del mapeo a los puntos del intervalo unitario. A continuación se ofrecen los detalles del MLT en el contexto de los canales iónicos.

Como se muestra en la Fig. 21, el mapeo tiene tres diferentes regímenes. En uno de ellos la corriente  $x$  a través del canal es pequeña y el canal está cerrado. En el otro régimen la corriente  $x$  a través del canal es grande y el canal está abierto. El tercer régimen actúa para alternar el comportamiento del canal entre los estados (abierto  $\rightarrow$  cerrado, cerrado  $\rightarrow$  abierto, cerrado  $\rightarrow$  cerrado ó abierto  $\rightarrow$  abierto) cuando la corriente alcanza ciertos valores.

La corriente a través del canal al tiempo  $t = n\Delta t$  es dada por el valor de la variable  $x_n$ , se considera que la corriente al tiempo  $(n+1)\Delta t$  solamente depende del valor de la corriente al tiempo  $t$ . Así el proceso se representa por una ecuación de iteración de la forma  $x_{n+1} = f_{LT}(x_n)$  donde  $f_{LT}(x_n)$  está definida como

$$f_{LT}(x_n) = \begin{cases} L_1(x_n) = a_1 x_n & \text{si } 0 \leq x_n < d_1 \\ L_2(x_n) = \left[ \frac{d_2 - x_n}{d_2 - d_1} \right] & \text{si } d_1 \leq x_n \leq d_2 \\ L_3(x_n) = a_2(x_n - 1) + 1 & \text{si } d_2 < x_n \leq 1 \end{cases} \quad (5.1.1)$$

cuyos parámetros  $d_1$  y  $d_2$  son los extremos del subintervalo de la región de switcheo,  $a_1$  y  $a_2$  denota las pendientes de los mapeos lineales correspondientes a los estados cerrado y abierto respectivamente. El MLT se muestra en la Fig. 21 para diferentes valores de las pendientes, pero siempre fijos ambos valores de los umbrales.

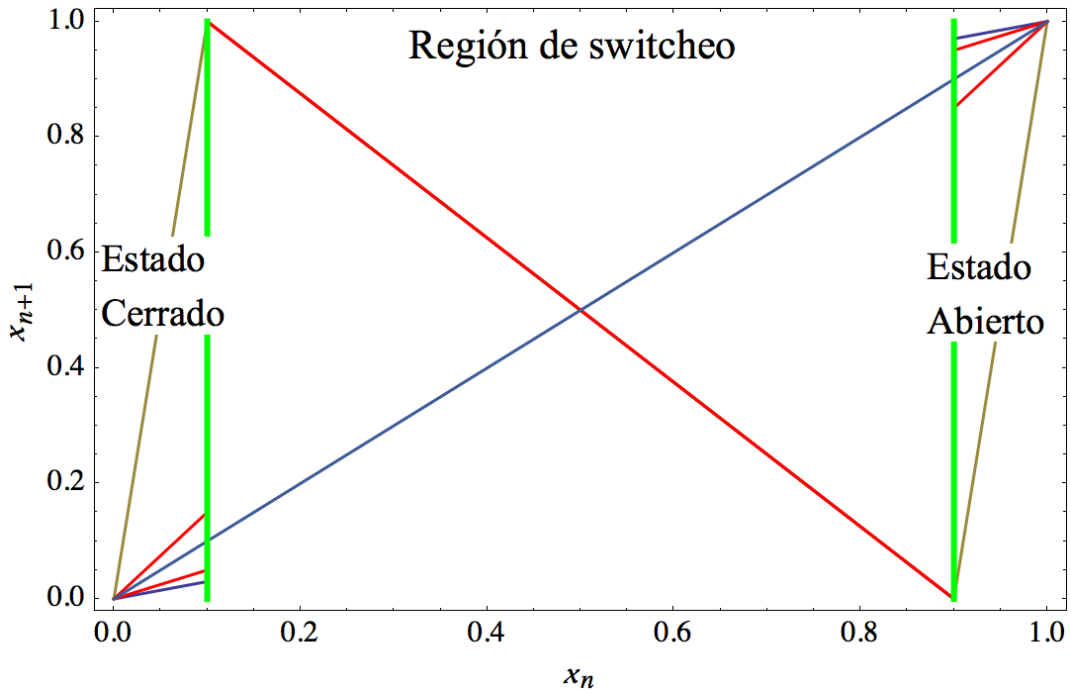
La representación gráfica de este proceso iterativo se consigue mediante la alternancia vertical y horizontal entre las líneas  $x_{n+1} = f(x_n)$  y  $x_{n+1} = x_n$ . Una trayectoria típica empezando en  $x_0$  se muestra en la Fig. 22, la cual corresponde a iniciar en  $x_0$ , dentro del estado cerrado en el subintervalo  $(0, d_1)$ , y moverse hacia valores más grandes de la corriente  $x$ . Después de varias iteraciones la corriente alcanza un valor mayor que  $d_1$ . Cuando esto pasa, el subintervalo medio del mapeo produce una alternancia del estado cerrado al estado abierto. Una vez que el sistema está en el abierto empieza a moverse fuera de ese estado de manera que el valor de la corriente decrece hasta volver a alcanzar la región intermedia y regresará al estado cerrado. Si el proceso continúa, se producen una gran cantidad de tiempos de estancia en los estados abierto y cerrado. La condición más importante para una alternancia sostenida entre los dos estados es que  $a_1$  y  $a_2$  sean mayores que uno. El tiempo de residencia promedio en cada uno de los estados depende de los valores de los parámetros del modelo. El tiempo de residencia es mas breve si las pendientes  $a_1$  o  $a_2$  son más pronunciadas, debido a que unas cuantas iteraciones son suficientes para salir del estado correspondiente. Los valores  $d_1$  y  $d_2$  tienen también un impacto en la magnitud del tiempo de residencia promedio. La condición es que  $0 < d_1 < d_2 < 1$ , y los valores de las pendientes se encuentran acotados por estos umbrales, es significativo recalcar lo siguiente

ante lo visible del mapeo  $\left\{ \begin{array}{l} 0 < a_1 \leq \frac{1}{d_1} \\ 0 < a_2 \leq \frac{1}{1-d_2} \end{array} \right\}$  lo que nos indica los intervalos en los cuales las

pendientes pueden tomar algún valor. En la siguiente sección abordaremos la importancia y



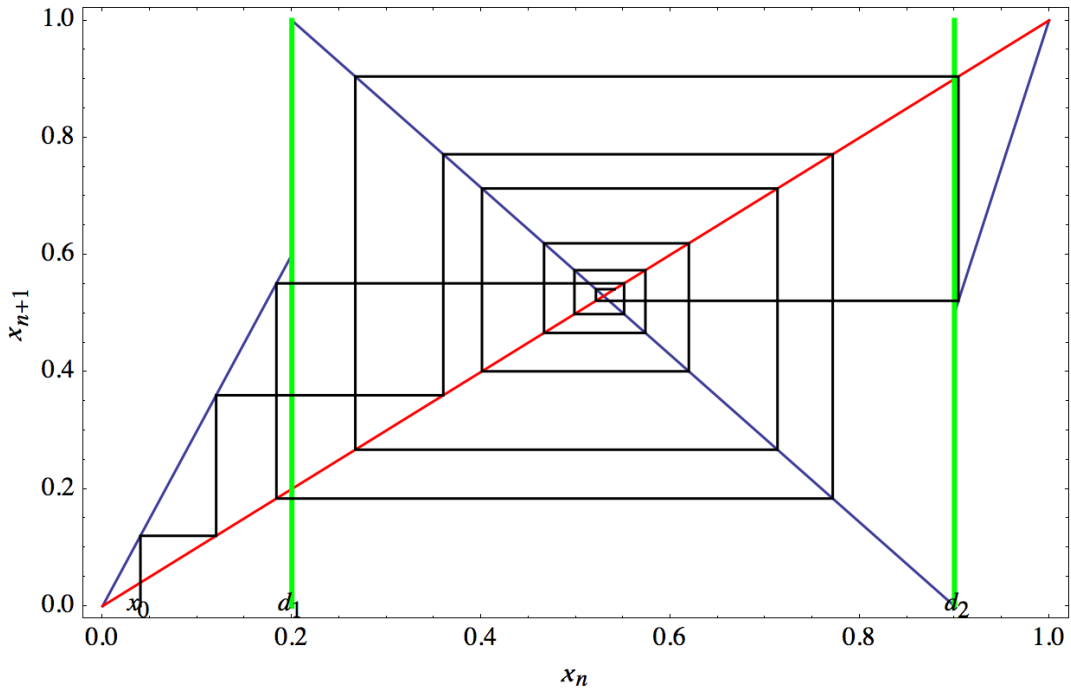
las restricciones correspondientes de los parámetros que componen al mapeo de Liebovitch y Toth.



**Figura 21.** Mapeo lineal a pedazos de un modelo determinístico para la cinética de canales iónicos. El mapeo muestra la función que predicen el valor de la corriente  $x_{n+1}$  como una función del valor de la corriente previa  $x_n$ . Los parámetros del mapeo son  $d_1 = 0.1$  y  $d_2 = 0.9$  los cuales son extremos de los regímenes funcionales y las pendientes varían de forma ascendente como se indica

$$a_1 = 0.3, 0.5, 1.5, a_{1,m\acute{a}x} = \frac{1}{d_1}, \quad a_2 = 0.3, 0.5, 1.5, a_{2,m\acute{a}x} = \frac{1}{(1-d_2)}$$

correspondientes a los estados cerrado y abierto respectivamente.



**Figura 22.** Órbita generada por el MLT para los parámetros:  $d_1 = 0.2$ ,  $d_2 = 0.9$ ,  $a_1 = 3$  y  $a_2 = 5$  con la condición  $x_0 = 0.04$ .

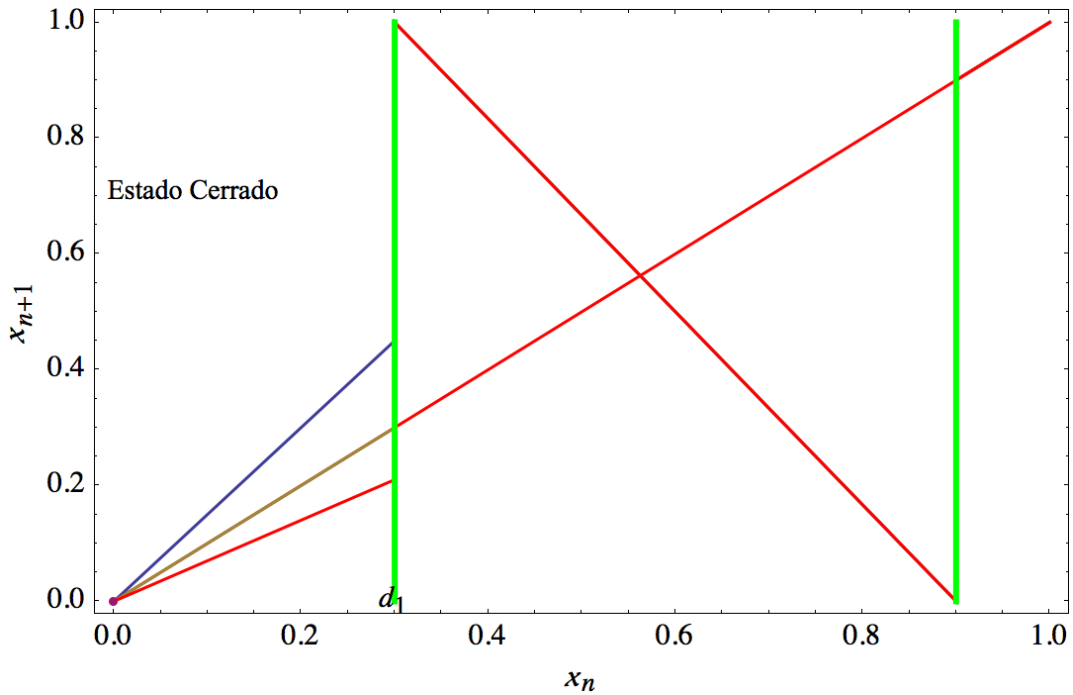
### 5.2. Puntos fijos del MLT

Encontrar los puntos fijos de este mapeo y determinar si son atractores o repulsores nos brinda información sobre el SD. Sin embargo, esta información es de índole local, pues sólo afirma qué sucede con la órbitas suficientemente cercanas al punto fijo.

A continuación se analizan los puntos fijos de cada una de las tres regiones que conforman al MLT. Recordemos que la dinámica de este mapeo es de la forma:  $f_{LT} : [0,1] \rightarrow [0,1]$ .

- *Estado cerrado:*

$$L_1(x) = a_1 x, \quad \text{si } 0 \leq x < d_1.$$



**Figura 23.** Punto fijo del estado cerrado del MLT para los parámetros:  $d_1 = 0.3$ ,  $a_1 < 1$ ,  $a_1 = 1$  y  $a_1 > 1$ .

El punto  $x^* = 0$  es un punto fijo para  $L_1$ . Dado un punto inicial  $x_0 \neq 0$ , denotemos su órbita a partir de este punto como  $x_n = L_1^n(x_0)$ , con  $n \geq 1$ . Para saber cuál es la dinámica de la órbita de  $x_0$  calcularemos los iterados

$$\begin{aligned} x_1 &= a_1 x_0, \\ x_2 &= a_1 x_1 = (a_1)^2 x_0, \\ &\vdots \\ x_n &= (a_1)^n x_0 \end{aligned}$$

- $a_1 < 1$  como el valor de  $x_0$  no depende de  $n$ , la sucesión de  $x_n$  tiende a cero, cuando  $n$  tiende a  $+\infty$ . Entonces la órbita de cualquier punto en el intervalo  $[0, d_1)$  converge a cero. Así el punto fijo 0 es un atractor. Cabe mencionar que en el contexto del modelo de canal iónico, esto nos indica que el canal registra

cambios en la corriente iónica pero siempre se encuentra en el estado cerrado.

- $a_1 = 1$ , cualquier condición inicial que se tome permanece estable, es decir, no hay dinámica que seguir en este caso. En otras palabras, todos los puntos son fijos.
- $a_1 > 1$  como el valor de  $x_0$  no depende de  $n$ , la sucesión de  $x_n$  tiende a  $+\infty$ , cuando  $n$  tiende a  $+\infty$ . Entonces la órbita de cualquier punto diferente de 0 diverge. No es difícil ver que dado cualquier  $\varepsilon > 0$ , si  $x_0 < \varepsilon$ , existe  $k \in \mathbb{Z}$  tal que  $x_k > \varepsilon$ , es decir, el punto fijo 0 es un repulsor.

- *Región de "switchero".*

$$L_2(x) = \frac{d_2 - x}{d_2 - d_1}, \text{ si } d_1 \leq x \leq d_2.$$

El punto  $x_s = \frac{d_2}{d_2 - d_1 + 1}$  es un punto fijo de  $L_2$ . A continuación se mostrará las restricciones de los umbrales  $d_1$  y  $d_2$ . Primero se lleva a cabo la expansión, como se muestra

$$\frac{d_2}{d_2 - d_1 + 1} = \frac{d_2}{1 - (d_1 - d_2)} = \sum_{n=0}^{\infty} d_2 (d_1 - d_2)^n = d_2 \sum_{n=0}^{\infty} (d_1 - d_2)^n = d_2 \{1 + (d_1 - d_2) + (d_1 - d_2)^2 + (d_1 - d_2)^3 + \dots\}$$

- Si  $d_1 > d_2$ , entonces  $x_s > d_2$ , este caso no es posible ya que nos interesa la dinámica dentro de la región intermedia.
- Si  $d_1 < d_2$ , entonces  $x_s$  se encuentra dentro de esta región.

Con fundamento en los resultados anteriores, se pide los siguiente  $d_1 < x_0 < d_2$  y denotemos por  $x_n = L_2^n(x_0)$ , con  $n \geq 1$  a los elementos de la órbita futura de  $x_0$ .

Calculemos la diferencia  $|x_n - x_s|$ , primero

$$\begin{aligned} |x_1 - x_s| &= \left| \left( -\frac{1}{d_2 - d_1} x_0 + \frac{d_2}{d_2 - d_1} \right) - \frac{d_2}{d_2 - d_1 + 1} \right| = \left| -\frac{1}{d_2 - d_1} x_0 + \frac{d_2}{(d_2 - d_1)(d_2 - d_1 + 1)} \right| \\ &= \left| \left( -\frac{1}{d_2 - d_1} \right) \left( x_0 - \frac{d_2}{d_2 - d_1 + 1} \right) \right| = \left| \left( -\frac{1}{d_2 - d_1} \right) (x_0 - x_s) \right| = \left| -\frac{1}{d_2 - d_1} \right| |x_0 - x_s| \end{aligned}$$

donde  $\left( -\frac{1}{d_2 - d_1} \right)$  es la pendiente del mapeo lineal  $L_2$ . De manera inductiva podemos

calcular el término general,

$$\begin{aligned} |x_n - x_s| &= \left| \left( -\frac{1}{d_2 - d_1} x_{n-1} + \frac{d_2}{d_2 - d_1} \right) - \frac{d_2}{d_2 - d_1 + 1} \right| = \left| -\frac{1}{d_2 - d_1} \right| |x_{n-1} - x_s| \\ &= \dots = \left| -\frac{1}{d_2 - d_1} \right|^{n-1} |x_1 - x_s| = \left| -\frac{1}{d_2 - d_1} \right|^n |x_0 - x_s| \end{aligned}$$

Debido a que  $\left| -\frac{1}{d_2 - d_1} \right| > 1$ , entonces

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - x_s| = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| -\frac{1}{d_2 - d_1} \right|^n |x_0 - x_s| = +\infty,$$

para cualquier condición inicial  $x_0$ , es decir  $x_n \rightarrow +\infty$ . Por lo tanto, la órbita de

cualquier punto, excepto el punto fijo  $x_s$  diverge, así el punto fijo  $x_s$  es un repulsor.

Cabe hacer notar que este punto fijo siempre es repulsor, recordando que la única condición es  $0 < d_1 < d_2 < 1$  (ver Fig. 24).

- *Estado abierto.*

$$L_3(x) = a_2(x-1)+1, \quad \text{si } d_2 < x \leq 1.$$

El punto  $x^* = 1$  es un punto fijo de  $L_3$ . Sea  $d_2 < x_0 < 1$ . Como en los estados anteriores,

calculemos la diferencia  $|x_n - x^*|$ ,

$$|x_1 - x^*| = |(a_2 x_0 + 1 - a_2) - 1| = |a_2 x_0 - a_2| = |a_2| |x_0 - 1| = |a_2| |x_0 - x^*|.$$

De manera inductiva,

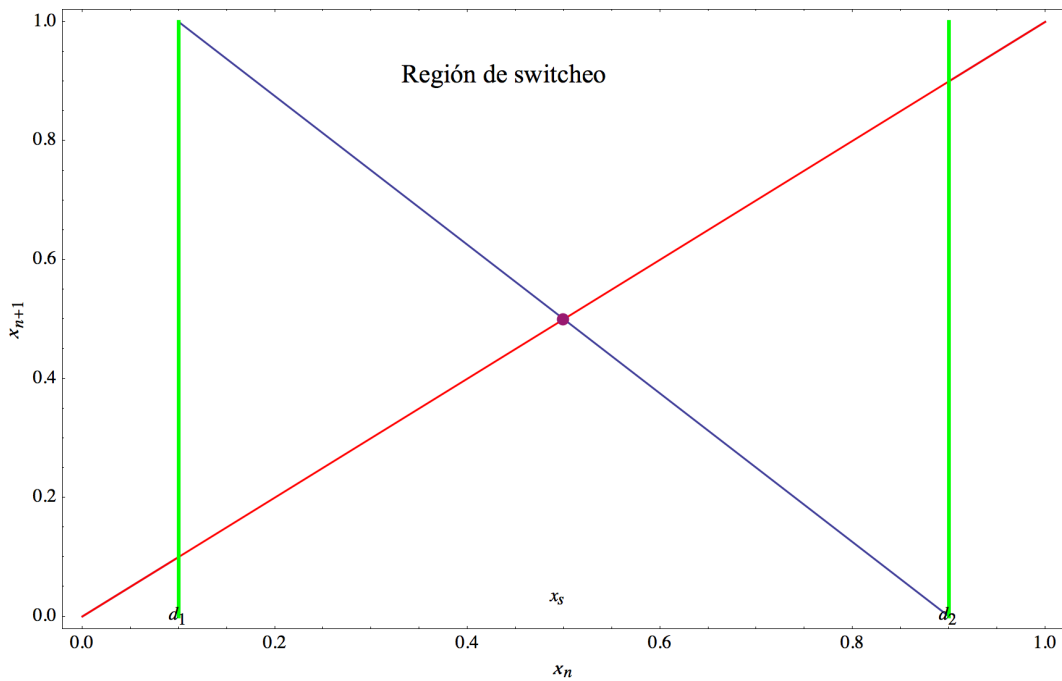
$$\begin{aligned} |x_n - x^*| &= |(a_2 x_{n-1} + 1 - a_2) - 1| = |a_2| |x_{n-1} - 1| \\ &= \dots = |a_2|^{n-1} |x_1 - x^*| = |a_2|^n |x_0 - x^*| \end{aligned}$$

- Si  $a_2 < 1$ , el punto fijo  $x^* = 1$  es un atractor. En términos del modelo de canales iónicos, esto nos indica que el canal se encuentra en el estado abierto siempre, ya que nunca visita los otros posibles estados.
- Si  $a_2 = 1$ , todos los puntos son fijos.
- Si  $a_2 > 1$  tenemos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - x^*| = \lim_{n \rightarrow \infty} |a_2|^n |x_0 - x^*| = +\infty,$$

sin importar la condición inicial  $x_0$ , es decir  $x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} +\infty$ . Por lo tanto,  $x^* = 1$  es un punto

fijo repulsor de  $L_3$ .



**Figura 24.** Punto fijo repulsor de la región de switcheo del MLT para los parámetros:  $d_1 = 0.1$  y  $d_2 = 0.9$

Así, en esta sección hemos hallado los puntos fijos de cada uno de los mapeos lineales que componen al MLT. Además, se mostraron las condiciones y restricciones de cada uno de los parámetros, según se requiera abordar el uso de este modelo para canales iónicos.

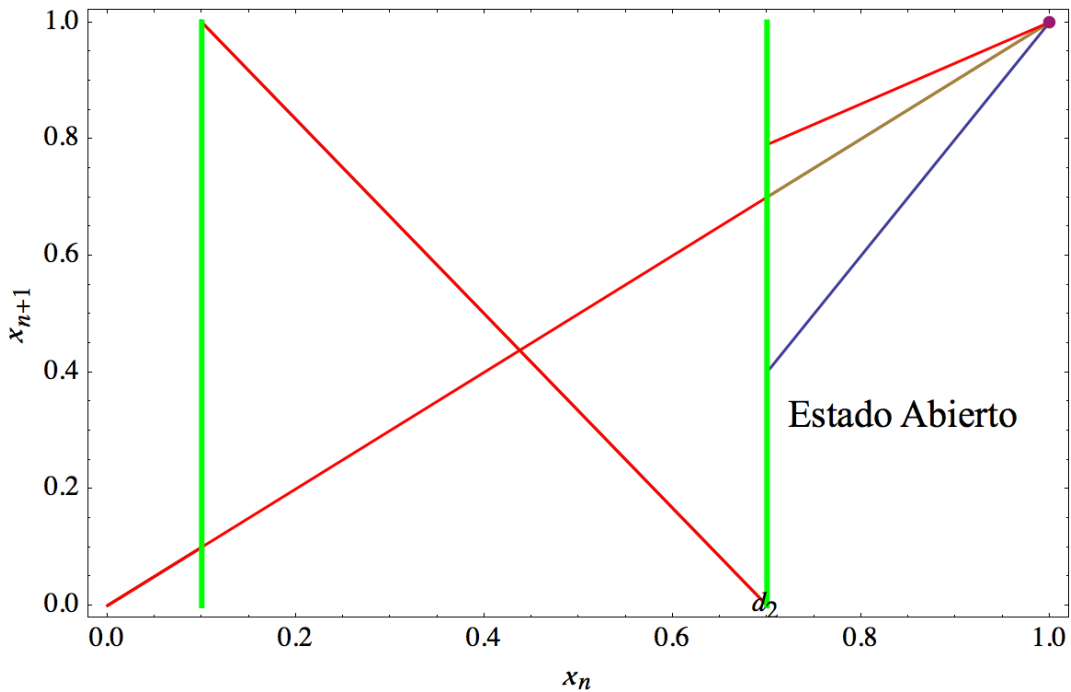
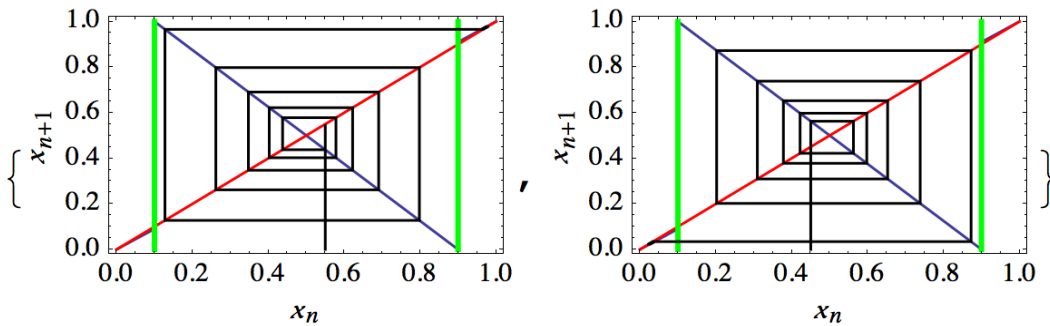


Figura 25. Punto fijo del estado abierto del MLT para los parámetros:  $d_2 = 0.7, a_2 < 1, a_2 = 1$  y  $a_2 > 1$ .

### 5.3. Análisis de los parámetros del MLT

- Si  $a_1 < 1$  cualquier condición inicial dentro del intervalo cerrado tiende al punto fijo atractor, cero. Y análogamente para  $a_2 < 1$ . El punto fijo  $x_s$  es un repulsor, así que nos interesa saber que sucede alrededor de este punto, es decir, queremos conocer la dinámica dentro de la región de switcheo. En la Fig. 26 se muestran dos órbitas

alrededor del punto fijo repulsor. Si tomamos condiciones iniciales dentro del intervalo  $[d_1, d_2]$ , después de iterarlos estos se ubicarán en el estado cerrado o abierto, una vez que se encuentren en una de estas dos regiones tienden a su respectivo punto fijo atractor. Es importante notar que los puntos que se encuentran alrededor de  $x_s$  se empiezan a desplazar de tal forma que tratan de aproximarse a los extremos del intervalo unitario. A continuación se muestra la dinámica de un MLT para ambas pendientes menores a uno (ver Fig. 26). Donde se observa que la dinámica dentro de la región de alternancia es muy complicada, ya que si ampliamos cada vez más los subintervalos dentro de este intervalo no se encontraría la frontera entre las condiciones iniciales que se van al punto fijo de la región cerrada y al punto fijo del estado abierto.



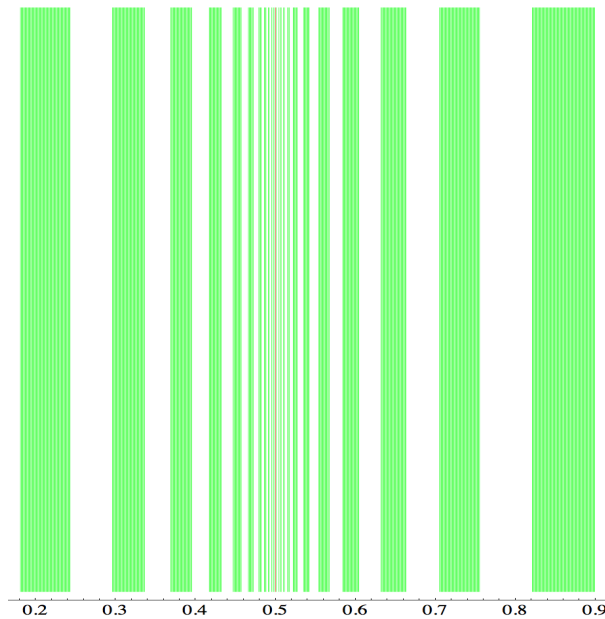
**Figura 26.** Órbita generada por el MLT para los parámetros:  $d_1 = 0.1, d_2 = 0.9, a_1 = 0.9,$  y  $a_2 = 0.9$  con condiciones iniciales alrededor de  $x_s = 0.5$ . Se observa que cada una de estas condiciones es atraída a cada uno de los puntos fijos atractores, ya que son repelidas por el punto fijo repulsor.

- Si  $a_1 = 1$ , todos los puntos dentro del intervalo  $[0, d_1)$  son fijos. Si  $a_2 < 1$  todas las condiciones iniciales dentro de este intervalo tienden a su punto fijo atractor. Pero en la región intermedia se comporta similar al caso anterior (Fig. 27), la única diferencia es que las franjas verdes indican cuenca de atracción hacia el estado cerrado (es decir, no tienden a un solo punto más bien a todos los posibles puntos dados por el



intervalo cerrado). Sin embargo, las ventanas en blanco muestran lo mismo que el caso anterior.

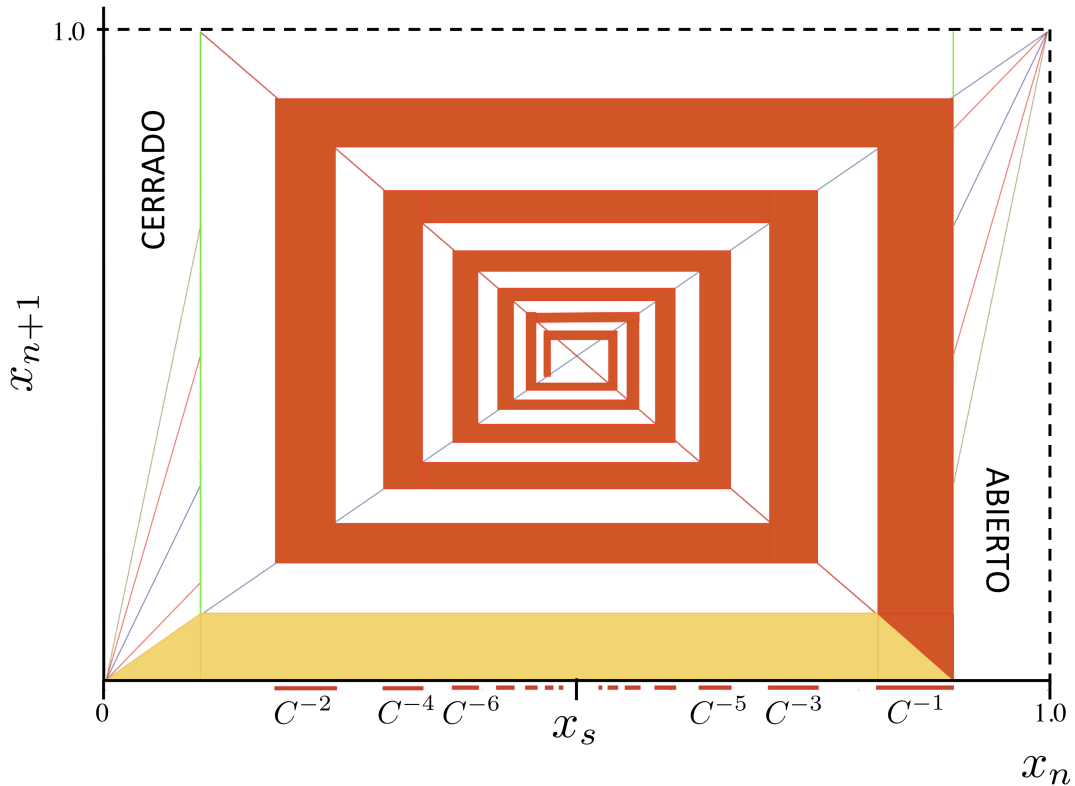
- Análogamente para el caso en el cual  $a_1 < 1$  y  $a_2 = 1$ , sólo que esta vez la cuenca de atracción es el cero por un lado y por el otro son todos los puntos dentro del estado abierto.
- Si  $a_1 = 1$  y  $a_2 = 1$ , cualquier condición inicial tomada dentro de los intervalo extremos serán puntos fijos. Haciendo un estudio dentro de la región de alternancia, la situación es la misma que la que se muestra en la Fig. 27, solo que las ventanas o líneas indican cuencas de atracción hacia los estados, y no hacia un solo punto.



**Figura 27.** Dinámica generada en la región de switcheo por el MLT para los parámetros:  $d_1 = 0.1, d_2 = 0.9, a_1 = 0.9, y a_2 = 0.9$ . La línea roja indica que si tomamos al  $x_s$  como condición inicial este es un punto fijo, así que no habrá dinámica que analizar. Pero alrededor de este punto fijo la dinámica es muy compleja, las líneas verdes indican que estas condiciones iniciales tienden al punto fijo atractor dado por el estado cerrado, mientras las ventanas blancas muestran que la dinámica de estas condiciones iniciales se aproximaron al otro extremo del intervalo unitario.

- Si  $a_1 > 1$  y  $a_2 < 1$ , las condiciones iniciales dentro de la región del estado abierto todas tienden al punto fijo atractor uno. A excepción de los puntos fijos repulsores, es decir el cero y  $x_s$ , cualquier otra condición inicial de los intervalos cerrado y de switcheo tienden al punto fijo atractor del MLT.
- Si  $a_1 < 1$  y  $a_2 > 1$  la dinámica es similar al del caso anterior. En este caso el único punto fijo atractor es el cero, y los puntos fijos repulsores son  $x_s$  y uno.
- Si  $a_1 > 1$  y  $a_2 = 1$ , todas las condiciones iniciales dentro del intervalo abierto son puntos fijos. Las condiciones iniciales dentro de los intervalos cerrado y de switcheo tienden a la cuenca de atracción dada por el estado abierto, es decir, no tienden a un solo punto dado por esta región. A excepción de los puntos fijos repulsores (0 y  $x_s$ ), la dinámica es como se mencionó anteriormente.
- Si  $a_1 = 1$  y  $a_2 > 1$ , el análisis es similar al del caso anterior. Todas las condiciones iniciales dadas dentro del intervalo cerrado son puntos fijos. En este caso los puntos fijos repulsores son: uno y  $x_s$ . Cualquier otra condición inicial tiende a esta cuenca de atracción dada por todos los puntos dentro del estado cerrado.
- Por último si ambas pendientes son mayores a uno, entonces la dinámica es más compleja. En este caso existen tres puntos fijos repulsores (0,  $x_s$  y 1). El resto de los puntos dentro del intervalo unitario tienen una dinámica más complicada. En otras palabras, si tomamos condiciones iniciales dentro del intervalo  $(0, d_1)$  estas órbitas pueden visitar a todo el intervalo unitario sin tender un solo punto o cuenca de atracción. Y análogamente para las condiciones iniciales dadas dentro del intervalo abierto. A continuación se muestra en la Figura 28 que dada la región de switcheo esta a su vez la podemos dividir en subintervalos, los cuales nos indican que si tomamos una condición dentro de cualquiera de estos sabremos cual es su cuenca de atracción de estados y una vez que se encuentra en cualquiera de estas dos cuencas la dinámica es más difícil de seguir. La Figura 28 exhibe las pre imágenes (franjas anaranjadas) de la cuenca de atracción del estado cerrado, donde
 
$$C^{-i} = \begin{cases} [L_2^{-i}(d_1), L_2^{1-i}(d_2)] & \text{para } i \text{ non} \\ [L_2^{1-i}(d_2), L_2^{-i}(d_1)] & \text{para } i \text{ par} \end{cases},$$
 esto ejemplifica que si alguna condición inicial se encuentra dentro de cualquiera de estas franjas marcadas después de iterar el

número de veces adecuadas esta órbita se encontrará en la cuenca de atracción del estado cerrado (intervalo  $[0, d_1)$ ). Dentro de esta región de alternancia, también se expone como alrededor de las franjas naranjas hay espacios blancos (o franjas blancas), estos indican las pre imágenes de la cuenca de atracción del estado abierto. Los subintervalos blancos se definen de una manera análoga como los que se describen para la cuenca de atracción del estado cerrado. Cabe mencionar que alrededor del punto  $x_s$  hay estructura, en otras palabras las fronteras cercanas a este punto fijo están fracturadas.



**Figura 28.** Dinámica generada en la región de switcheo por el MLT para los parámetros:

$$d_1 = 0.1, d_2 = 0.9, a_1 = 0.9, \text{ y } a_2 = 0.9 .$$

El objeto de estudio de este trabajo es el último caso, esto es, se requiere analizar las órbitas dadas por el MLT dadas por las pendientes mayores a uno. Esta ocurrencia es de nuestro interés ya que si los tres puntos fijos son repulsores, aquello genera órbitas aperiódicas que recorrerán todo el intervalo unitario, es decir, la trayectoria del estado del sistema no se estabiliza en los puntos fijos o ciclos ni diverge a infinito.

#### 5.4. Cálculo del exponente de Liapunov para el MLT

A continuación, usando el teorema ergódico demostraremos que el MLT (dado por ambas pendientes mayores a uno) es caótico, para ello basta mostrar que el exponente de Liapunov es positivo. Recordemos del capítulo 3 que el exponente de Liapunov para un SDC se define de la siguiente manera

$$\Lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ln |f'(f^i(x_0))| = \int_0^1 \rho_{st}(x) \ln |f'(x)| dx \quad (5.4.1)$$

Al substituir en el lado derecho de la ecuación (5.3.1) la forma explícita del MLT, se obtiene

$$\begin{aligned} \int_0^1 \rho_{st}(x) \ln |f'_{LT}(x)| dx &= \int_0^{d_1} \rho_{st}(x) \ln |L'_1(x)| dx + \int_{d_1}^{d_2} \rho_{st}(x) \ln |L'_2(x)| dx + \int_{d_2}^1 \rho_{st}(x) \ln |L'_3(x)| dx \\ &= P_C \ln a_1 - P_S \ln(d_2 - d_1) + P_O \ln a_2 \end{aligned} \quad (5.4.2)$$

donde se han definido los valores de  $P_i$  para  $i = C, S, O$  dependiendo de la región. Por ejemplo, para el estado cerrado tenemos  $P_C = \int_0^{d_1} \rho_{st}(x) dx$ , y de manera similar para las otras dos regiones del MLT. Así, el exponente de Liapunov para el MLT se expresa de la siguiente manera

$$\Lambda = P_C \ln a_1 - P_S \ln(d_2 - d_1) + P_O \ln a_2 \quad (5.4.3)$$

Es directo ver que la cantidad anterior es positiva cuando  $a_1 > 1$  y  $a_2 > 1$  y que  $0 < (d_2 - d_1) < 1$ . Por lo tanto, al ser el exponente de Liapunov del MLT positivo se ha demostrado que este SD es caótico.

### 5.5. Partición markoviana para el MLT

Cuando se tiene un mapeo lineal a pedazos y los parámetros del mapeo generan una partición especial llamada markoviana, es posible caracterizar a un proceso markoviano. Se demostró en capítulos anteriores que la ecuación de Chapman-Kolmogorov caracteriza a un proceso markoviano. Una partición markoviana está definida por los siguientes puntos

$$(b_0, b_1, b_2, \dots, b_K) \quad (5.5.1)$$

que satisfacen que  $f(b_l) = b_{l+1}$  para  $l = 0, 1, 2, \dots, K$ . Esta partición genera los conjuntos

$A_i = (b_i, b_{i+1})$  cuya función característica denotamos por  $|i\rangle$ , es decir,

$$|i\rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in A_i \\ 0 & \text{si } x \notin A_i \end{cases} \quad (5.5.2)$$

Aplicando el OPF a la función característica de  $A_i$  obtenemos,

$$U|i\rangle = \sum_{k=0}^K u_{i,k} |k\rangle = \begin{cases} \neq 0 & \text{si } A_k \subset (f(b_i), f(b_{i+1})) \\ = 0 & \text{si } A_k \not\subset (f(b_i), f(b_{i+1})) \end{cases} \quad (5.5.3)$$

Una partición markoviana para el MLT se escribe como

$$[0, L_1^{-n}(d_1), \dots, L_1^{-1}(d_1), d_1, L_2^{-1}(d_2), L_2^{-2}(d_1), \dots, L_2^{-r}(d_2), x_s, L_2^{-r}(d_1), \dots, L_2^{-2}(d_2), L_2^{-1}(d_1), d_2, L_3^{-1}(d_2), \dots, L_3^{-q}(d_2), 1] \quad (5.5.4)$$

donde  $x_s$  es el punto fijo repulsor de la región de "switchero" hallado en la sección anterior y  $r$  es un entero no pero también puede ser cero. En esta partición podemos identificar  $K$  celdas en el intervalo unitario, las cuales se indican explícitamente a continuación,

$$\begin{aligned}
 A_1 &= [0, L_1^n(d_1)] \\
 A_i &= [L_1^{i-(n+2)}(d_1), L_1^{i-(n+1)}(d_1)]; \quad i = 2, \dots, n+1 \\
 A_{n+2} &= [d_1, L_2^{-1}(d_2)] \\
 A_{n+3} &= [L_2^{-1}(d_2), L_2^{-2}(d_1)] \\
 A_{n+4} &= [L_2^{-2}(d_1), L_2^{-3}(d_2)] \\
 &\vdots \\
 A_{n+r+2} &= [L_2^{-r}(d_2), x_s] \quad \text{para } r \text{ impar} \\
 A_{n+r+3} &= [x_s, L_2^{-r}(d_1)] \\
 &\vdots \\
 A_{K-(q+3)} &= [L_2^{-3}(d_1), L_2^{-2}(d_2)] \\
 A_{K-(q+2)} &= [L_2^{-2}(d_2), L_2^{-1}(d_1)] \\
 A_{K-(q+1)} &= [L_2^{-1}(d_1), d_2] \\
 A_{K-i} &= [L_3^{-qi}(d_2), L_3^{-q+i-1}(d_2)]; \quad i = 1, \dots, q \\
 A_K &= [L_3^{-q}(d_2), 1]
 \end{aligned} \tag{5.5.5}$$

Sin embargo, el número de celdas totales está determinado por los nuevos parámetros  $n, q$  y  $r$  que a su vez están condicionados por los parámetros que rigen al MLT. Las condiciones que se deben cumplir son

$$\begin{aligned}
 L_2^r \circ L_1(d_1) &= L_3^{-q}(d_2) \\
 L_2^r \circ L_3(d_2) &= L_1^n(d_1).
 \end{aligned} \tag{5.5.6}$$

De (5.5.6) observamos que  $n, q$  y  $r$  deben ser enteros, por lo que tenemos un problema que plantea una ecuación del tipo diofantina. No es fácil resolver estas ecuaciones, pero en el siguiente capítulo se presenta la solución de uno de los casos más sencillos, que es cuando  $r=1$ .

Notemos que los estados del canal iónico están constituidos por las celdas dadas por el MLT:

$$\begin{aligned}
 \text{Estado Cerrado} &= \bigcup_{i=1}^{n+1} A_i \\
 \text{Región de Switcheo} &= \bigcup_{i=n+2}^{K-(q+1)} A_i \\
 \text{Estado Abierto} &= \bigcup_{i=K-q}^K A_i
 \end{aligned} \tag{5.5.7}$$

Cabe recordar que la unión de todos estos intervalos da como resultado el intervalo unitario.

### 5.6. La ecuación de Chapman-Kolmogorov

La forma en que la distribución inicial evoluciona temporalmente en general está dada por  $\rho_{n+1} = U\rho_n$ , sin embargo bajo ciertas condiciones se reduce a la ecuación de Chapman-Kolmogorov. Haciendo uso de la partición markoviana para el MLT se caracterizará al proceso markoviano.

Una distribución homogénea sobre  $A_i$  tiene la forma

$$\rho_0 = \frac{|i\rangle}{\langle i|i\rangle} = \frac{|i\rangle}{\mu(A_i)} \quad (5.6.1)$$

donde  $\langle i|i\rangle = \mu(A_i) = b_{i+1} - b_i$  es la longitud del intervalo  $A_i$ . Al aplicar iterativamente el OPF a la distribución homogénea se obtiene la secuencia  $\{\rho_0, \rho_1, \dots, \rho_n, \dots\}$ . La probabilidad condicional de que la variable aleatoria  $x_1$  se encuentre en la celda  $k$  dado que  $x_0$  está en la celda  $i$  es

$$P(k, 1|i) = \langle k|\rho_1\rangle = \int_{A_k} \rho_1(x) dx = \frac{\langle k|U|i\rangle}{\langle i|i\rangle}. \quad (5.6.2)$$

Análogamente la probabilidad de que la variable aleatoria  $x_n$  se encuentre en la celda  $k$  dado que  $x_0$  está en la celda  $i$  es

$$P(k, n|i) = \langle k|\rho_n\rangle = \frac{\langle k|U^n|i\rangle}{\langle i|i\rangle}. \quad (5.6.3)$$

Usando (5.5.3) en (5.6.2) encontramos que

$$P(k, 1|i) = \frac{\langle k|k\rangle}{\langle i|i\rangle} u_{ik} = \frac{\mu(A_k)}{\mu(A_i)} u_{ik} \equiv \mathbf{W}_{i,k} \quad (5.6.4)$$

donde  $\mathbf{W}_{i,k}$  es la probabilidad de transición de la celda  $A_k$  a la celda  $A_i$  en una iteración.

Aplicando iterativamente (5.5.3) se obtiene

$$U^n|i\rangle = \sum_{l=1}^K (\mathbf{u}^n)_{il} |l\rangle \quad (5.6.5)$$

y utilizando este resultado en (5.6.3) se tiene

$$P(k, n|i) = \frac{\langle k|k \rangle}{\langle i|i \rangle} (\mathbf{u}^n)_{k,i}. \quad (5.6.6)$$

Utilizando que para toda  $1 < r < n$  se cumple

$$(\mathbf{u}^n)_{k,i} = \sum_r (\mathbf{u}^r)_{k,l} (\mathbf{u}^{n-r})_{l,i} = \sum_r \frac{(\mathbf{u}^r)_{k,l}}{\langle l|l \rangle} (\mathbf{u}^{n-r})_{l,i} \langle l|l \rangle \quad (5.6.7)$$

la ecuación (5.6.6) toma la forma

$$P(k, n|i) = \sum_{l=1}^k P(k, r|l) P(l, n-r|i) \quad (5.6.8)$$

que es la ecuación de Chapman-Kolmogorov.

Cuando la función de distribución inicial es una superposición de distribuciones homogéneas, *i.e.*

$$\rho_0 = \sum_{j=0}^K P_j(0) \frac{|j\rangle}{\mu(A_j)} \quad (5.6.9)$$

que cumple la condición de normalización  $\sum_{j=0}^K P_j(0) = 1$ . Y aplicando el OPF obtenemos

$$\rho_1 = \sum_{r=1}^K P_r(1) \frac{|r\rangle}{\mu(A_r)} \quad (5.6.10)$$

donde  $P_r(1) = \sum_{j=1}^K P_j(0) u_{jr} \frac{\mu(A_r)}{\mu(A_j)}$ . Al iterar se llega a

$$\rho_{n+1} = \sum_{r=1}^K P_r(n+1) \frac{|r\rangle}{\mu(A_r)} \quad (5.6.11)$$

donde  $P_r(n+1) = \sum_{j=1}^K P_j(n) u_{jr} \frac{\mu(A_r)}{\mu(A_j)} = \sum_{j=1}^K P_j(n) \mathbf{W}_{jr}$ . La probabilidad de que la variable aleatoria  $x$ ,

con una función de distribución  $\rho_n(x)$  se encuentre en la celda  $r$  está dada por

$$P_r(n) = \langle r|\rho_n \rangle = \int_{b_r}^{b_{r+1}} \rho_n(x) dx, \quad (5.6.12)$$

de manera que la probabilidad de que el sistema se encuentre en la celda  $A_r$  al tiempo  $n+1$  está dada por

$$P_r(n+1) = \sum_{j=1}^K P(r, 1|j) P_j(n) \quad (5.6.13)$$

definiendo el vector de probabilidades como



$$\bar{P}(n) = (P_0(n), P_1(n), \dots, P_K(n)) \quad (5.6.14)$$

la ecuación de evolución para la probabilidad toma la forma

$$\bar{P}(n+1) = \bar{P}(n) \cdot \mathbf{W} = \bar{P}(0) \cdot \mathbf{W}^{n+1}. \quad (5.6.15)$$

La solución general de esta ecuación es

$$\bar{P}(n) = C_1 \lambda_1^n \mathbf{v}_1 + C_2 \lambda_2^n \mathbf{v}_2 + \dots + C_K \lambda_K^n \mathbf{v}_K \quad (5.6.16)$$

donde  $C_i$  son constantes,  $\lambda_i$  y  $\mathbf{v}_i$  son los eigenvalores y eigenvectores de la matriz  $\mathbf{W}$ , respectivamente. Los eigenvalores satisfacen que  $|\lambda_i| \leq 1$ , donde al menos uno de ellos es igual a la unidad. Tomando el límite de la solución cuando  $n \rightarrow \infty$  solamente sobrevive el eigenvector que corresponde al eigenvalor uno. De manera que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{P}(n) = c \mathbf{v}_1. \quad (5.6.17)$$

Esta solución del vector de probabilidad corresponde a la distribución invariante dada por  $U \rho_\infty(x) = \rho_\infty(x) = \rho_{st}(x)$ . Para encontrarla se requiere resolver la ecuación de eigenvalores para  $\lambda = 1$ ,  $\mathbf{v}_1 \mathbf{W} = \mathbf{v}_1$ . De manera que se tiene que resolver la ecuación  $\det|\mathbf{W} - \mathbf{I}| = 0$ , así el vector de probabilidad estacionario satisface

$$\bar{\mathbf{P}}^{st} = \bar{\mathbf{P}}^{st} \cdot \mathbf{W} \quad (5.6.18)$$

es decir,  $P_r^{st} = \sum_{i=1}^K P_i^{st} W_{i,r}$ .

Resolviendo para la partición markoviana del MLT cuando el sistema alcanza su estado de equilibrio se debe cumplir que el vector de probabilidad estacionaria sea

$$P_{st} = c \left( \frac{a_1}{a_1 - 1}, 1, 1, \dots, 1, 0, 0, 1, \dots, 1, 1, \frac{a_2}{a_2 - 1} \right) \quad (5.6.19)$$

donde

$$c^{-1} = \left[ n + q + \alpha + \frac{a_1}{a_1 - 1} + \frac{a_2}{a_2 - 1} \right] \quad (5.6.20)$$

y  $\alpha$  es un valor a determinar dado el comportamiento dentro de la región de alternancia del MLT.

### 5.7. Tiempo de ocupación de un estado

El tiempo que un canal permanece en un estado se conoce como tiempo de ocupación. Para encontrar la distribución de los tiempos de estancia recordemos que los estados del canal iónico están constituidos por las celdas

$$\begin{aligned} \text{Estado Cerrado} &= \bigcup_{i=1}^{n+1} A_i \\ \text{Región de Switcheo} &= \bigcup_{i=n+2}^{K-(q+1)} A_i \\ \text{Estado Abierto} &= \bigcup_{i=K-q}^K A_i \end{aligned} \quad (5.7.1)$$

Empezaremos por analizar la distribución de tiempos de estancia en el estado cerrado, como la última celda que corresponde a este estado es  $A_{n+1}$ , notemos que

$$L_1^{n+1-i}(A_i) = A_{n+1} \quad \text{para } i = 2, \dots, n \quad (5.7.2)$$

si se considera que el mapeo se aplica en intervalos de tiempo  $\Delta t$ , entonces los puntos que se encuentran en la celda  $A_i$  duran un tiempo  $\tau_i = (n+1-i)\Delta t$  en el estado cerrado, por lo que la probabilidad de que el tiempo de estancia en el estado cerrado sea  $M\Delta t$  está dado por

$$\begin{aligned} P_c(\tau = M\Delta t) &= P_{st}(n+1-M); & \text{para } M = 1, 2, 3, \dots, n-1 \\ P_c(\tau = M\Delta t) &= P_{st}(1) \left( \frac{L_1^{-M}(d_1) - L_1^{-M-1}(d_1)}{L_1^{-n}(d_1)} \right) = P_{st}(1) \frac{a_1 - 1}{a_1^{M+1-n}}; & \text{para } M \geq n \end{aligned} \quad (5.7.3)$$

De manera que la probabilidad acumulada de que el tiempo de estancia en el estado cerrado sea  $M\Delta t$ , la cual se define como la probabilidad de que  $\tau$  sea mayor o igual a  $M\Delta t$

$$P_c(\tau \geq M\Delta t) = \sum_{r=M}^{\infty} P_c(\tau = r\Delta t) \quad (5.7.4)$$

toma la siguiente forma cuando  $M < n$

$$P_c(\tau \geq M\Delta t) = P_{st}(1) + \sum_{r=2}^{n+1-M} P_{st}(r) \quad (5.7.5)$$

en donde usamos que

$$P_c(\tau \geq n\Delta t) = P_{st}(1) \quad (5.7.6)$$

En tanto que cuando  $M > n$  usamos lo siguiente

$$P_c(\tau \geq M\Delta t) = \frac{L_1^{-M}(d_1)}{L_1^{-n}(d_1)} P_{st}(1) = \frac{1}{a_1^{M-n}} P_{st}(1) \quad (5.7.7)$$

Utilizando la forma explicita del vector de probabilidad estacionario dada por (5.5.19), obtenemos

$$\begin{aligned} P_c(\tau = M\Delta t) &= c \quad \text{para } M = 1, 2, \dots, n-1 \\ P_c(\tau = M\Delta t) &= \frac{c}{a_1^{M-n}} \quad \text{para } M \geq n \end{aligned} \quad (5.7.8)$$

Así, la probabilidad acumulada para el estado cerrado es:

$$\begin{aligned} P_c(\tau \geq M\Delta t) &= P_{st}(1) + P_{st}(2) + \dots + P_{st}(n+1-M) = P_{st}(1) \left[ 1 + \left(1 - \frac{1}{a_1}\right)(n-M) \right]; \text{ para } M < n \\ P_c(\tau \geq M\Delta t) &= \frac{1}{a_1^{M-n}} P_{st}(1); \quad \text{para } M \geq n, \end{aligned} \quad (5.7.9)$$

definiendo

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \frac{\ln a_1}{\Delta t}, \\ \kappa_2 &= \frac{\ln a_2}{\Delta t} \quad \text{y} \\ \tau_r &= r\Delta t \end{aligned} \quad (5.7.10)$$

las expresiones anteriores toman la forma

$$P_c(\tau \geq \tau_M) = \begin{cases} P_{st}(1) e^{-\kappa_1(\tau_M - \tau_n)}; & \text{si } \tau_M \geq \tau_n \\ P_{st}(1) \left[ 1 + \frac{\tau_n - \tau_M}{\Delta t} (1 - e^{-\kappa_1 \Delta t}) \right]; & \text{si } \tau_M \leq \tau_n \end{cases} \quad (5.7.11)$$

Veremos ahora cuál es la distribución de tiempos de estancia en el estado abierto, para tal fin usamos que la primera celda de este estado es la  $A_{K-q}$  y para llegar a ella partiendo de las celdas que conforman al estado abierto (excluyendo la primera y la última celda que conforman al estado abierto) se aplica la función  $L_3$ .

$$L_3^{q-i}(A_{K-i}) = A_{K-q} \quad \text{para } i = 1, \dots, q-1 \quad (5.7.12)$$

de manera que los puntos que están en  $A_{K-i}$  duran un tiempo  $\tau_{K-i} = (i+q)\Delta t$  en el estado abierto, para el subíndice  $i$  definido arriba, así la probabilidad de que el tiempo de estancia en el estado abierto sea  $M\Delta t$  es

$$\begin{aligned}
 P_o(\tau = M\Delta t) &= P_{st}(M + K - q); && \text{para } M = 1, 2, \dots, q-1 \\
 P_o(\tau = M\Delta t) &= P_{st}(K) \frac{L_3^{-M-1}(d_2) - L_3^{-M}(d_2)}{1 - L_3^{-q}(d_2)} = \left( \frac{a_2 - 1}{a_2^{M+1-q}} \right) P_{st}(K); && \text{para } M \geq q
 \end{aligned} \quad (5.7.13)$$

La probabilidad acumulada para  $M < q$  es entonces

$$P_o(\tau \geq M\Delta t) = \sum_{r=M}^{q-1} P_{st}(r + K - q) + P_{st}(K) \quad (5.7.14)$$

y haciendo uso de (5.6.19) obtenemos

$$P_o(\tau \geq M\Delta t) = c \left( (q - M) + \frac{a_2}{a_2 - 1} \right) = \left[ 1 + \left( 1 - \frac{1}{a_2} \right) (q - M) \right] P_{st}(K); \quad \text{para } M < q \quad (5.7.15)$$

La probabilidad acumulada para  $M > q$  está dada por

$$P_o(\tau \geq M\Delta t) = P_{st}(K) \frac{1 - L_3^{-M}(d_2)}{1 - L_3^{-q}(d_2)} = \frac{1}{a_2^{M-q}} P_{st}(K); \quad \text{para } M > q \quad (5.7.16)$$

utilizando las definiciones dadas en (5.8.10) tenemos

$$P_o(\tau \geq \tau_M) = \begin{cases} P_{st}(K) e^{-k_2(\tau_M - \tau_q)}; & \text{para } \tau_M \geq \tau_q \\ P_{st}(K) \left[ 1 + \frac{\tau_q - \tau_M}{\Delta t} (1 - e^{-k_2 \Delta t}) \right]; & \text{para } \tau_M \leq \tau_q \end{cases} \quad (5.7.17)$$

## 6. Resultados

A continuación, analizaremos un modelo LT muy sencillo con la herramientas descritas en el capítulo anterior.

El mapeo es el siguiente

$$f_{LT}(x_n) = \begin{cases} L_1(x_n) = (1.1)x_n & \text{si } 0 \leq x_n < (0.1) \\ L_2(x_n) = \left[ \frac{(0.9)-x_n}{(0.8)} \right] & \text{si } (0.1) \leq x_n \leq (0.9) \\ L_3(x_n) = (1.8)(x_n - 1) + 1 & \text{si } (0.9) < x_n \leq 1 \end{cases} \quad (6.1)$$

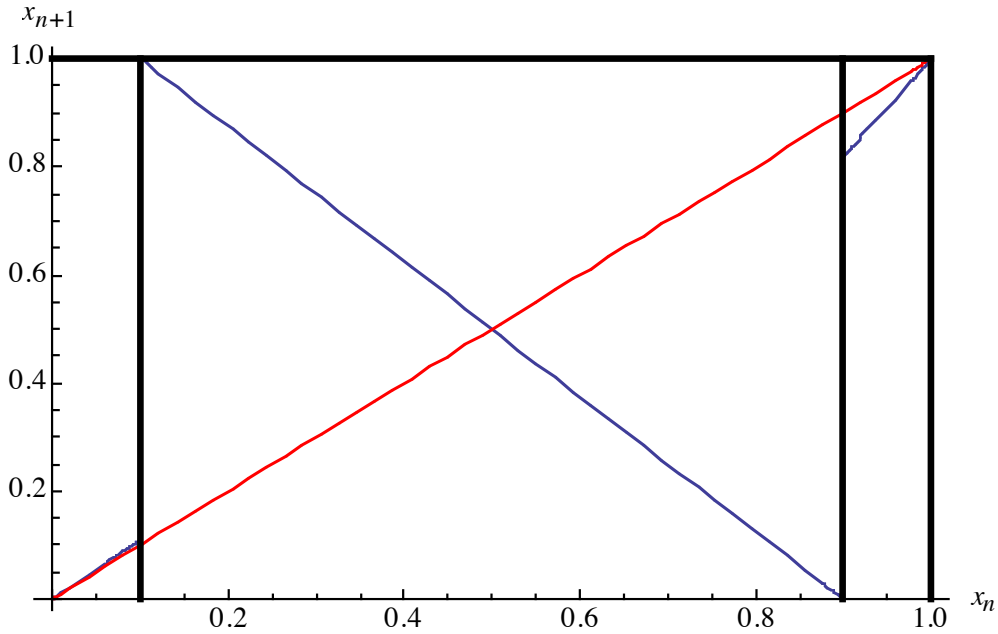
donde se han substituido los siguientes valores para los parámetros:  $a_1 = 1.1, a_2 = 1.8, d_1 = 0.1, y d_2 = 0.9$ , en la Fig. 29 se muestra este mapeo.

### 6.1. Puntos fijos repulsores

Como ya se mencionó en el capítulo 6, para todos los mapeos de LT (sin importar el valor de sus parámetros) existe un punto periódico repulsor para cada región. En el caso de los estados cerrado y abierto el valor de estos puntos fijos repulsores siempre son  $x_c^* = 0$  y  $x_o^* = 1$  para su respectivo estado. Para el calculo del punto fijo repulsor correspondiente a la región de switcheo, se substituyen los parámetros  $d_1 = 0.1$  y  $d_2 = 0.9$ , así que el valor que toma para este MLT en específico es  $x_s = 0.5$ . Cabe mencionar que el punto fijo  $x_s$  es la intersección del MLT y la recta de  $45^\circ$  dentro de la región de switcheo en la Fig. 29. El valor de este punto fijo se empleará en las siguientes secciones.

### 6.2. Exponente de Liapunov

El cálculo del exponente de Liapunov para este MLT en específico que se está analizando se escribe a continuación de manera cualitativa, ya que como recordaremos del capítulo 5 este



**Figura 29.** El MLT muestra la función (líneas moradas) que predicen el valor de la corriente  $x_{n+1}$  como una función del valor de la corriente previa  $x_n$ . Los parámetros del mapeo son  $d_1 = 0.1$  y  $d_2 = 0.9$  los cuales son extremos de los regímenes funcionales y las pendientes  $a_1 = 1.1$  y  $a_2 = 1.8$  de los mapeos lineales corresponden a los estados cerrado y abierto respectivamente.

valor depende de la distribución invariante del sistema, sin embargo, el calculo de esta densidad de probabilidad no se lleva a cabo explícitamente.

$$\Lambda = (0.095)P_C + (0.22)P_S + (0.59)P_O \quad (6.2.1)$$

donde

$$P_C = \int_0^{0.1} \rho_{st}(x) dx,$$

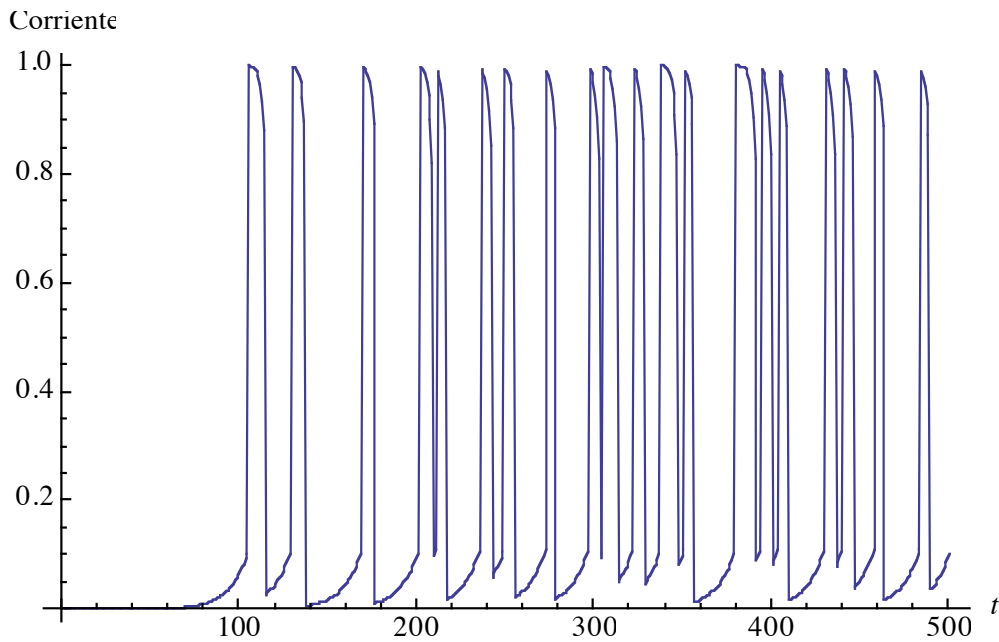
$$P_S = \int_{0.1}^{0.9} \rho_{st}(x) dx \text{ y } . \quad (6.2.2)$$

$$P_O = \int_{0.9}^1 \rho_{st}(x) dx,$$

Es importante recalcar que aunque no se tiene el valor explícito del exponente de Liapunov, debemos notar que  $\Lambda > 0$ . De (6.2.1) y dado que  $P_i$  para  $i = C, S$  y  $O$  cumplen con la condición de normalización esto nos asegura que el exponente de Liapunov es positivo y además, que el mapeo es caótico.

### 6.3. Series de tiempo

La corriente de salida generada por un canal iónico se puede representar mediante una serie de tiempo. Usando el MLT propuesto en este capítulo se obtuvo la serie de tiempo que se muestra en la Fig. 30. A juzgar por su forma, la similitud con los registros obtenidos experimentalmente mediante la técnica del Patch-Clamp (ver capítulo 4) salta a la vista.

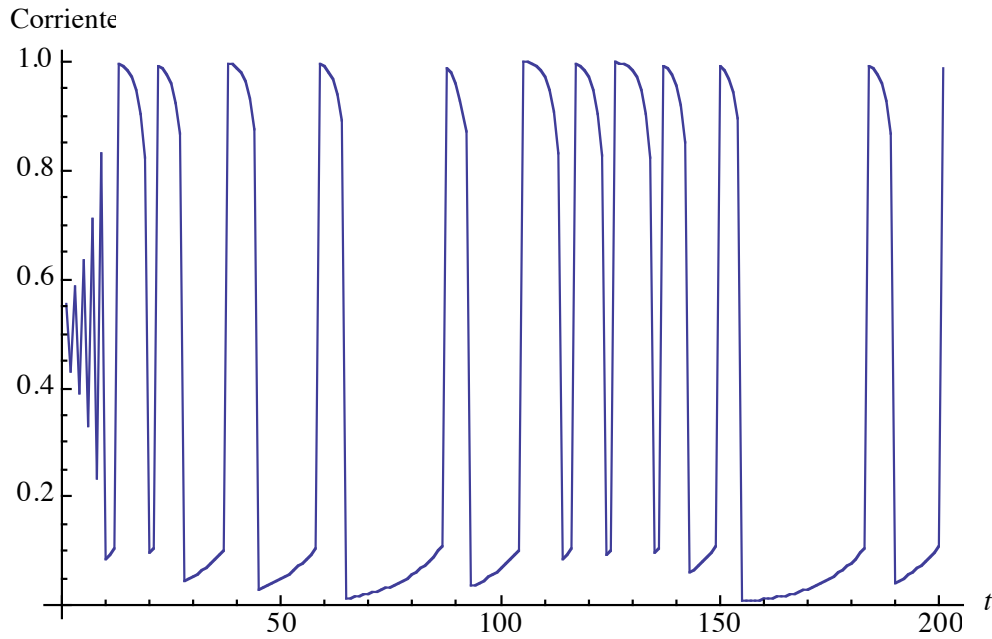


**Figura 30.** Serie de tiempo generada por el MLT para los parámetros

$$a_1 = 1.1, a_2 = 1.8, d_1 = 0.1, \text{ y } d_2 = 0.9.$$

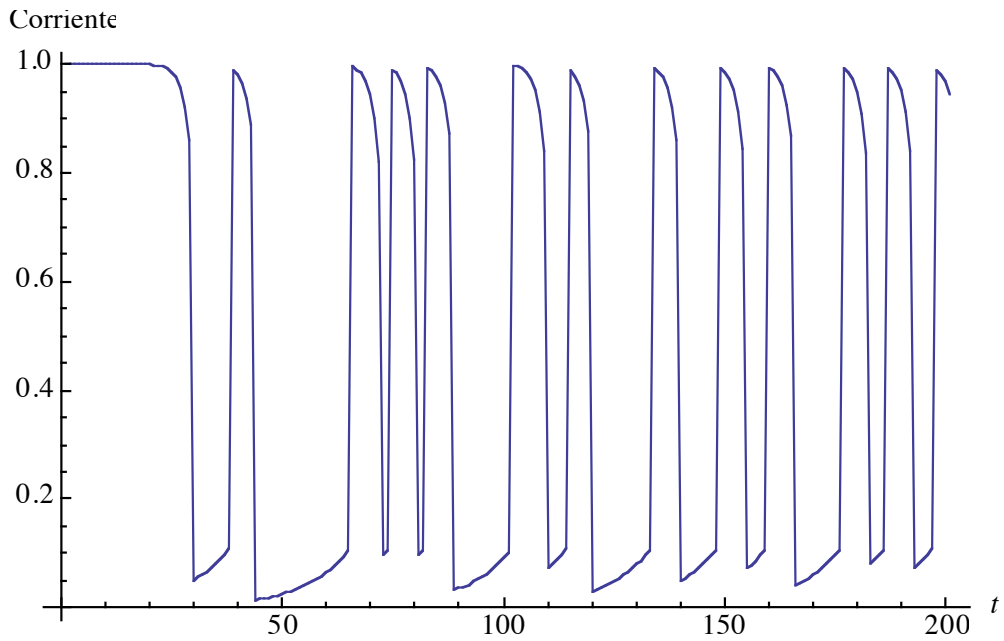
De la Fig. 30, notemos que en el subintervalo  $[0,0.1)$  esta serie de tiempo representa al canal en su estado cerrado, y en  $(0.9,1]$  es la representación del canal iónico en el estado abierto. Es importante mencionar que la condición inicial de esta serie de tiempo es  $x_0 = 5 \times 10^{-6}$ , la cual está cercana al punto fijo del estado cerrado,  $x_C^* = 0$ , así que esta serie de tiempo nos recalca que este punto fijo es un repulsor. A continuación, se mostrarán otras series de tiempo con los mismos parámetros del MLT, pero con diferentes condiciones iniciales.

Debemos notar de estas series de tiempo que al igual que los registros proporcionados por la técnica de Patch-Clamp, la representación del canal iónico en los estados abierto y



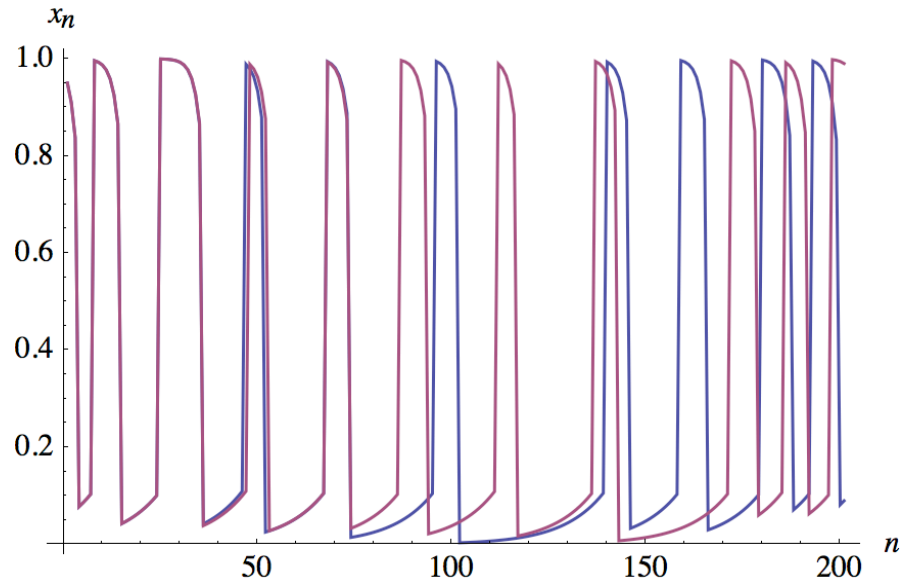
**Figura 31.** Serie de tiempo generada por el MLT dado por la ecuación 6.1 con la condición inicial  $x_0 = 0.555555$ , cercana al punto fijo repulsor de la región de switcheo.





**Figura 32.** Serie de tiempo generada por el MLT dado por la ecuación 6.1 con la condición inicial  $x_0 = 0.99999999$ , cercana al punto fijo repulsor del estado abierto.

cerrado está dada por intervalos, es decir, el mapeo permanece un cierto tiempo en los subintervalos correspondiente y luego visita la región de switcheo (un breve tiempo), únicamente para hacer el cambio de estado, y en este nuevo estado se repite el proceso. Finalmente se muestra que una pequeña variación en las condiciones iniciales de este mapeo puede llevar a diferentes estados finales como se indica en la Fig. 33.



**Figura 33.** Series de tiempo generadas por el MLT para dos condiciones iniciales que difieren por  $10^{-8}$ .

#### 6.4. Diagrama de recurrencia del MLT

Un método gráfico muy utilizado para hallar el valor de la sucesión de puntos  $\{x_n\}$  y de los puntos de convergencia consiste en realizar una representación gráfica de la función, denominada diagrama de recurrencia, tal y como podemos observar en la Fig. 34.

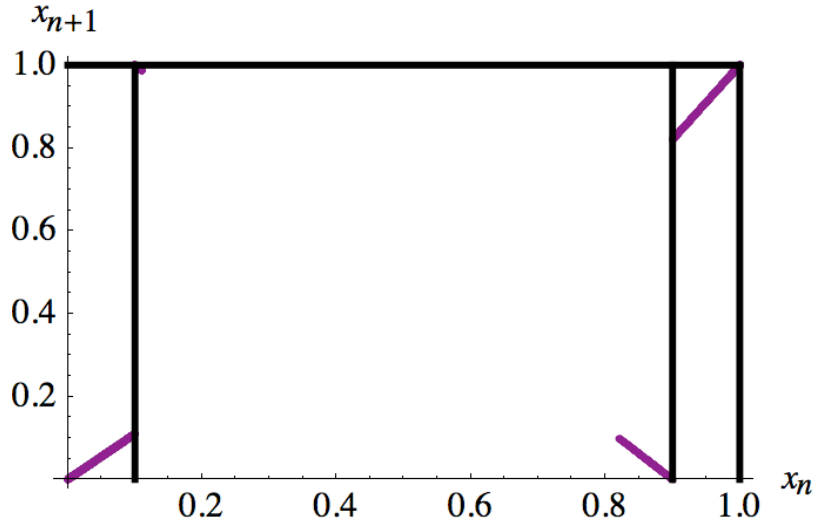


Figura 34. Diagrama de recurrencia para el MLT de estudio en este capítulo.

### 6.5. Partición markoviana

Para hallar una partición markoviana de este MLT, primero debemos resolver las condiciones dadas por la ecuación (5.5.6), como ya se mencionó el caso más sencillo es cuando  $r = 1$ , es decir,

$$\begin{aligned} L_2 \circ L_1(d_1) &= L_3^{-q}(d_2) \\ L_2 \circ L_3(d_2) &= L_1^{-n}(d_1) \end{aligned} \tag{6.5.1}$$

que en conjunto, deben cumplir la siguiente relación

$$(d_2 - d_1)^2 = a_1^n a_2^q (a_1 - 1)(a_2 - 1) \tag{6.5.2}$$

esta relación puede reescribirse en la forma

$$q = \alpha n + \beta \tag{6.5.3}$$

donde

$$\alpha = \frac{\ln a_1}{\ln a_2} \quad \text{y}$$

$$\beta = \frac{\ln \left( \frac{(d_2 - d_1)^2}{(a_1 - 1)(a_2 - 1)} \right)}{\ln a_2}. \quad (6.5.4)$$

La ecuación (6.5.3) es la ecuación diofantina lineal a resolver para el MLT que se está analizando en este capítulo, cuya solución corresponde a los puntos sobre la línea  $q = \alpha n + \beta$  con valores enteros tanto para la abscisa como para la ordenada. Nótese que se trata de una ecuación diofantina inusual debido a que los coeficientes alfa y beta son números reales, no necesariamente racionales.

En la Fig. 35 se muestra una representación gráfica de la ecuación diofantina lineal para los valores correspondientes para el MLT en cuestión. Se observa que los valores de  $n$  y  $q$  no son enteros, pero por razones de simplicidad, emplearemos los aproximados que señala la gráfica.

Haciendo uso de los valores  $n = 3$  y  $q = 4$  dados por la gráfica de la Fig. 35, también que  $r = 1$ , y substituyendo demás parámetros en la partición markoviana propuesta por (5.5.4), obtenemos la siguiente partición para el MLT en cuestión

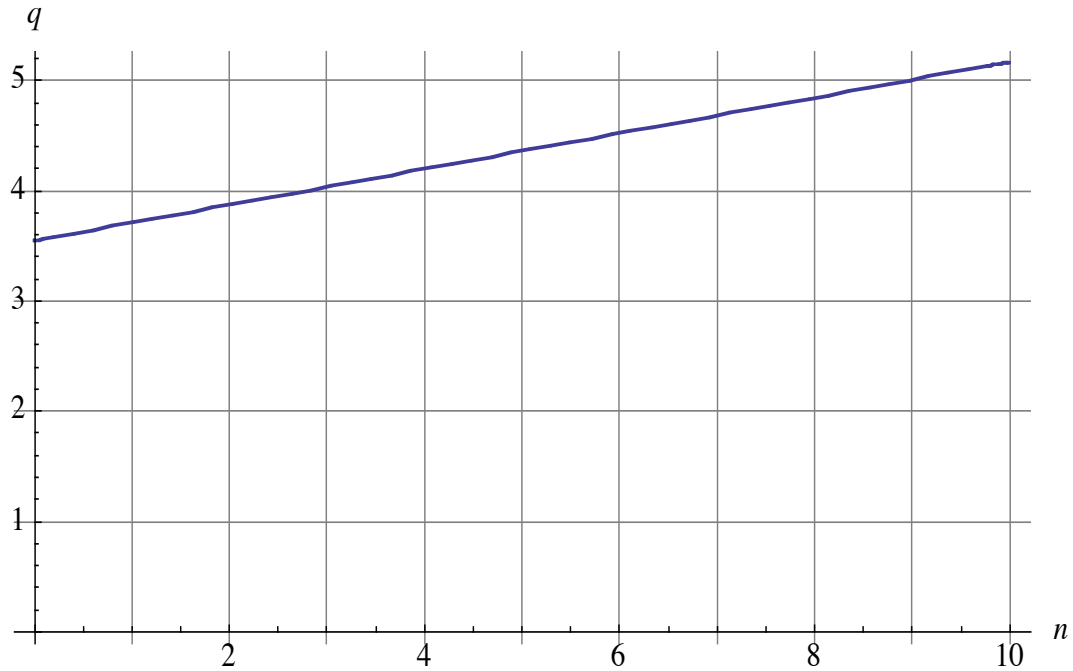
$$[0, L_1^{-3}(0.1), \dots, L_1^{-1}(0.1), 0.1, L_2^{-1}(0.9), 0.5, L_2^{-1}(0.1), 0.9, L_3^{-1}(0.9), \dots, L_3^{-4}(0.9), 1] \quad (6.5.5)$$

donde

$$L_1^{-n}(x) = \frac{x}{a_1^n};$$

$$L_2^{-r}(x) = (d_1 - d_2)^r (x - x_s) + x_s \quad \text{y}.$$

$$L_3^{-q}(x) = 1 + \frac{x - 1}{a_2^q} \quad (6.5.6)$$



**Figura 35.** Gráfica de la diofantina lineal para los valores del MLT,  
 $a_1 = 1.1, a_2 = 1.8, d_1 = 0.1, y d_2 = 0.9$  .  $n = 3$  y  $q = 4$  Serán las soluciones a estudiar.

La partición dada por (6.5.5) nos dice que existen  $K = 13$  celdas para el intervalo unitario, las cuales se indican explícitamente a continuación

$$\begin{aligned}
 A_1 &= [0, L_1^{-3}(0.1)) \\
 A_i &= [L_1^{i-5}(0.1), L_1^{i-4}(0.1)); \quad i = 2, \dots, 4 \\
 A_5 &= [0.1, L_2^{-1}(0.9)) \\
 A_6 &= [L_2^{-1}(0.9), 0.5) \\
 A_7 &= [0.5, L_2^{-1}(0.1)] \\
 A_8 &= (L_2^{-1}(0.1), 0.9] \\
 A_{13-i} &= (L_3^{-4+i}(0.9), L_3^{i-5}(0.9)]; \quad i = 1, \dots, 4 \\
 A_{13} &= (L_3^{-4}(0.9), 1]
 \end{aligned} \tag{6.5.7}$$

Finalmente, los intervalos quedan de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
 \text{Estado Cerrado} &= \bigcup_{i=1}^4 A_i \\
 \text{Región de Switcheo} &= \bigcup_{i=5}^8 A_i \\
 \text{Estado Abierto} &= \bigcup_{i=9}^{13} A_i
 \end{aligned} \tag{6.5.8}$$

### 6.6. La ecuación de Chapman-Kolmogorov

Usando la partición markoviana para este MLT en la ecuación (5.4.3) se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned}
 U|1\rangle &= \frac{1}{a_1} \{|1\rangle + |2\rangle\} \\
 U|i\rangle &= \frac{1}{a_1} |i+1\rangle; \quad i = 2, 3, \dots, 4 \\
 U|5\rangle &= (d_2 - d_1) |13\rangle \\
 U|6\rangle &= (d_2 - d_1) \bigcup_{i=9}^{12} |i\rangle \\
 U|7\rangle &= (d_2 - d_1) \bigcup_{i=2}^4 |i\rangle \\
 U|8\rangle &= (d_2 - d_1) |1\rangle \\
 U|i\rangle &= \frac{1}{a_2} |i-1\rangle; \quad i = 9, \dots, 12 \\
 U|13\rangle &= \frac{1}{a_2} \{|13\rangle + |12\rangle\}
 \end{aligned} \tag{6.6.1}$$

de manera que los elementos de matriz asociados con el OPF son:

$$\begin{aligned}
 u_{1,k} &= \frac{1}{a_1}(\delta_{1,k} + \delta_{2,k}) \\
 u_{i,k} &= \frac{1}{a_1}(\delta_{i+1,k}) \quad i = 2,3,4 \\
 u_{5,k} &= (d_2 - d_1)\delta_{13,k} \\
 u_{6,k} &= (d_2 - d_1) \sum_{j=2}^{12} \delta_{j,k} \\
 u_{7,k} &= (d_2 - d_1)\delta_{1,k} \\
 u_{i,k} &= \frac{1}{a_2}(\delta_{i-1,k}) \quad i = 8,\dots,12 \\
 u_{13,k} &= \frac{1}{a_2}(\delta_{12,k} + \delta_{13,k})
 \end{aligned} \tag{6.6.2}$$

Y la longitud de las celdas están dadas por

$$\begin{aligned}
 \mu(A_1) &= \frac{d_1}{a_1^3}; \\
 \mu(A_j) &= \frac{d_1(a_1 - 1)}{a_1^{5-j}}, \quad j = 2,\dots,4; \\
 \mu(A_5) &= d_2(d_2 - d_1) \\
 \mu(A_6) &= \frac{d_2(d_2 - d_1)^2}{1 + (d_2 - d_1)} \\
 \mu(A_7) &= \frac{(d_2 - d_1)^2(1 - d_1)}{1 + (d_2 - d_1)} \\
 \mu(A_8) &= d_1(d_2 - d_1) \\
 \mu(A_{9+i}) &= \frac{(1 - d_2)(a_2 - 1)}{a_2^i}, \quad i = 0,\dots,3; \\
 \mu(A_{13}) &= \frac{(1 - d_2)}{a_2^4}
 \end{aligned} \tag{6.6.3}$$

Haciendo uso de estos resultados y substituyendo los valores de los diversos parámetros, podemos obtener la matriz de probabilidades de transición del proceso de Markov

$$\begin{pmatrix}
 0.91 & 0.091 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
 0 & 0.0085 & 0.009 & 0.01 & 0.011 & 0.8 & 0.09 & 0.05 & 0.028 & 0.015 & 0.009 & 0.005 & 0 \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.444 & 0.555 & 0
 \end{pmatrix} \tag{6.6.4}$$

y el vector de probabilidad estacionaria es

$$P_{st} = (0.045)(1,1,1,1,1,0,0,1,1,1,1,2.25) . \tag{6.6.5}$$

### 6.7. Estudio de histogramas

Para el análisis de varios canales iónicos (ensemble), también se puede generar un histograma como se muestra en la Fig. 36 con los resultados del modelo propuesto. En esta figura se ven dos picos: el de la izquierda corresponde a las realizaciones que dieron lugar al estado cerrado, mientras que el de la derecha corresponde a las realizaciones que fueron a dar al estado abierto. Cabe señalar que este histograma se generó a partir de una función inicial de distribución azarosa en el intervalo completo. Desde luego, esta distribución aún no ha llegado a su estado de equilibrio, la cual se observaría si los picos fuesen más pronunciados. Además, es importante señalar que el histograma aquí mostrado ya se encuentra normalizado, es decir, no este no es el histograma de poblaciones.

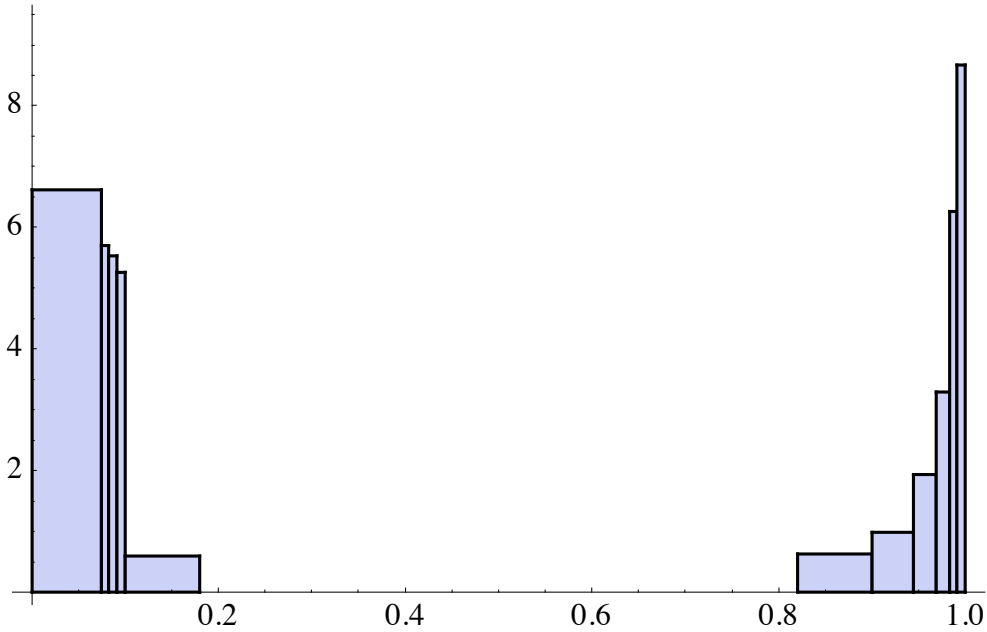
Notemos que los estados del canal iónico están constituidos por las celdas dadas por el MLT:

$$\begin{aligned}
 (A_1, A_2, A_3, A_4) & \quad \text{Estado cerrado} \\
 (A_5, A_6, A_7, A_8) & \quad \text{Región de Switcheo} \\
 (A_9, A_{10}, A_{11}, A_{12}, A_{13}) & \quad \text{Estado abierto}
 \end{aligned} \tag{6.7.1}$$

Reescribiendo el vector de probabilidad estacionaria de (6.6.5) para el MLT de nuestro estudio, obtenemos

$$P_{st} = (0.495, 0.045, 0.045, 0.045, 0.045, 0, 0, 0.045, 0.045, 0.045, 0.045, 0.045, 0.101) . \tag{6.7.2}$$





**Figura 36.** Histograma generado por el MLT para los parámetros  $a_1 = 1.1$ ,  $a_2 = 1.8$ ,  $d_1 = 0.1$ ,  $d_2 = 0.9$ ,  $x_s = 0.5$ ,  $n = 3$ ,  $q = 4$  y  $r = 1$ .

Análogamente, para los datos del histograma mostrado en la Fig. 36 tras la simulación computacional se halló que el vector de probabilidad estacionario queda

$$\mathbf{P}_{st} = (0.4978, 0.0428, 0.0457, 0.0478, 0.0484, 0, 0, 0.0503, 0.0439, 0.0477, 0.0453, 0.0477, 0.0826). \quad (6.7.3)$$

Es claro que de los resultados obtenidos en (6.7.2) y (6.7.3) se nota que el histograma mostrado se encuentra fuera de equilibrio, aunque muy cerca de él. Por lo tanto, los resultados hasta ahora son satisfactorios en cuanto a que se observa tienden a los valores esperados, lo que hace falta entonces para llegar al estado estacionario es seguir iterando el sistema; es decir, aumentar el tiempo de cómputo.



## 7. Conclusiones y Perspectivas

En este trabajo se proporcionan herramientas conceptuales y matemáticas para analizar el comportamiento estocástico de las corrientes de canal unitario y aquellas generadas por un gran número o ensamble de canales iónicos. Del registro experimental de un canal iónico, como el de la Fig. 17, se pueden medir los tiempos medios de apertura y cierre, de tal manera que se puede determinar el esquema de transición, así como las velocidades de transición. En los registros de largos períodos se puede observar el comportamiento de apertura y cierre del canal, y a partir de ahí es posible proponer el esquema de transición que sigue el canal. Los mecanismos de funcionamiento de un canal iónico se han descrito a partir de las mediciones experimentales de señales producidas por ellos durante su actividad en reposo y bajo estímulos. Las señales que comúnmente se miden son la corriente unitaria (corriente de un solo canal), la corriente de compuerta, la corriente macroscópica (corriente debida a todos los canales) y las conductancias. Según se ha planteado anteriormente, cualquiera de estas mediciones se puede asociar a una variable aleatoria que la describa, de forma que cada canal tenga asociados como atributos a estas variables.

Así, el poder establecer la probabilidad de que un canal se encuentre en un estado u otro, nos permite definir el valor de cada atributo para un tiempo dado. Con ello podemos llegar a predecir, sobre bases estadísticas, el comportamiento de cada variable en el tiempo, y así complementar el estudio experimental de los canales iónicos y sus propiedades. La herramienta del análisis estocástico es útil para describir el comportamiento de cada canal en forma individual, para luego asociarlo con las corrientes macroscópicas.

Si cada canal presente en la célula puede ser modelado como un proceso de dos estados, de acuerdo a lo presentado en el Capítulo 4 podríamos conocer tanto la disponibilidad de cada canal como el tiempo de ocupación de cada estado, con lo cual seríamos capaces de evaluar la corriente total para cada tiempo. Cabe mencionar que el modelo de dos estados ignora los otros estados conformacionales de un canal iónico. Esto es, un canal en realidad presenta otros estados durante su proceso de activación o desactivación, tales como el estado inactivo, ampliamente reportado. En consecuencia, un modelo de dos estados sólo nos permite estudiar y simular parte de la información que se obtiene durante un registro

experimental, aunque es muy conveniente y de fácil acceso. Esta es la razón principal por la cual se han publicado modelos que incluyen decenas de estados discretos y que reproducen con mayor fidelidad el comportamiento real de un cierto tipo de canal iónico.

Matemáticamente, el comportamiento de un canal iónico comúnmente se describe como no determinístico, por lo que se requiere del análisis estocástico para manejar e interpretar dicho comportamiento.

En este trabajo se estudió un mapeo caótico determinista propuesto por Liebovith y Toth para modelar la cinética de apertura y cierre de los canales iónicos. Este modelo representa tres estados conformacionales del canal, es decir, el MLT además de modelar los estados cerrado y abierto también incluye al estado inactivo del canal.

Los resultados obtenidos hasta el momento, para el estudio de un solo canal, son capaces de generar series de tiempo muy similares a las obtenidas mediante la técnica experimental del patch-clamp, por lo que puede pensarse que la dinámica de cierre y apertura de los canales iónicos puede modelarse mediante el MLT. Para el estudio de un canal, se requiere examinar una órbita muy grande generada por el MLT, es decir para  $N \rightarrow \infty$  donde  $N$  es el número de iteraciones, posteriormente se realiza el histograma generado por esta órbita y finalmente se pretende obtener la distribución invariante que caracteriza al sistema dinámico caótico. Hay que señalar que este proceso no es sencillo, por lo que se recurre a una forma alternativa de hallar la distribución invariante del sistema.

La otra forma de encontrar a la distribución invariante que caracteriza al sistema dinámico caótico en cuestión se resume enseguida. Primero se consideró un ensamble de canales iónicos, de los cuales sus estados iniciales son variables aleatorias, de tal modo que este conjunto está caracterizado por su respectiva densidad de probabilidad. Al aplicar el MLT a este conjunto de variables aleatorias, se generó un nuevo conjunto de variables aleatorias y la densidad de probabilidad que lo caracteriza. Entonces, el MLT define un proceso estocástico, caracterizado por la secuencia de sus funciones de distribución. Es importante recordar que esta sucesión de funciones de distribución está gobernada por el OPF. Esta secuencia de densidades de probabilidad tiende a una distribución límite  $\rho_\infty(x)$ , que es independiente de la forma explícita de la distribución inicial, esta propiedad es consecuencia de que el MLT es caótico.

Cuando le aplicamos el OPF a  $\rho_\infty(x)$ , la distribución permanece invariante, de forma que

satisface la EPF, es decir,  $U\rho_\infty(x) = \rho_\infty(x) = \rho_{st}(x)$ . Así, la distribución límite es la distribución invariante ante el MLT. Finalmente, la evolución temporal dada por  $U\rho_n(x) = \rho_{n+1}(x)$  se redujo a la ecuación de Chapman-Kolmogorov, la cual caracteriza a un proceso de Markov.

En general se demostró que el MLT, el cual es un mapeo caótico determinista, puede generar un proceso estocástico. Se propuso una partición markoviana dentro del intervalo unitario para este modelo en particular mostrando así que la ecuación de Perron-Frobenius se resume a la ecuación de Chapman-Kolmogorov y poder así describir un proceso Markoviano.

Utilizando que la solución estacionaria de un proceso de Markov es proporcional al eigenvector de la matriz de transición correspondiente al eigenvalor uno, se encuentra la matriz de transición que corresponde al mapeo de Liebovitch y Toth. Se resuelve luego la ecuación de eigenvalores, con lo que se encuentra la solución estacionaria para el mapeo. Con este resultado se calculan las distribuciones de tiempos de espera en los estados abierto y cerrado y finalmente se evalúan las distribuciones acumuladas de tiempos de estancia en tales estados, encontrando que son simétricas. Estas expresiones difieren de las encontradas por Liebovitch y Toth, que con una hipótesis ad-hoc predicen un comportamiento exponencial, que solamente se cumple en el caso de que los tiempos de espera sean grandes.

Cabe destacar que se realizaron diversos estudios del MLT para diferentes valores de los parámetros que componen a este modelo, pero por cuestiones de espacio se seleccionó uno de los mas representativos para exponer en este trabajo. De estos diversos mapeos de estudio, se concluyó que las pendientes  $a_1$  y  $a_2$  tienen un gran peso en las probabilidades de estancia en su respectivo estado. Como ejemplo, recordemos el caso del MLT analizado en el Capítulo 6, donde  $a_1 < a_2$  y la probabilidad de estar en el estado cerrado era mucho mayor que la probabilidad de estar en el estado abierto. Los valores umbrales ( $d_1$  y  $d_2$ ) definen el comportamiento del sistema en la región de switcheo. Y finalmente, merece mencionar que las ecuaciones diofantinas generadas por los diversos mapeos de LT, se analizaron tanto numérica como geométricamente, pero como ya se mencionó antes, no están incluidas en este informe. La mayoría de las soluciones de las ecuaciones diofantinas son aproximaciones, pero los casos más sencillos si son soluciones exactas.

## Capítulo 7 CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

---

Como se observa de las series de tiempo mostradas en el Capítulo 6, aún se requiere modelar mejor el comportamiento del canal iónico en los estados de transición. Esto se logra mediante una partición markoviana dentro de la región de switcheo más detallada, de tal forma que sea más visitada por la órbita de estudio. Sin embargo, esto implica mayores vicisitudes al resolver la ecuación diofantina.

También, queda pendiente resolver por completo el exponente de Liapunov para este mapeo caótico. Ya que debemos recordar que depende explícitamente de la distribución invariante, pero como ya se ha venido mencionando, esto se pudo resolver mediante la ecuación que caracteriza al proceso estocástico.

## Bibliografía

- Alberts, B., A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, and P. Walter, *Molecular Biology of the Cell* (Garland Science, New York, 2002).
- Ávila-Pozos, R. and J. R. Godínez-Fernández, *Rev. Mex. Ing. Biomed.* **27**, 106 (2006).
- Beck, C. and F. Schlögl, *Thermodynamics of chaotic systems: An introduction* (Cambridge University Press, UK, 1993).
- Birkhoff, G. D., *Proc. Nat. Acad. Sci.* **17**, 650 (1931). *Dynamical Systems, American Mathematical Society* (Coloquium Publications vol. XX, USA, 1966).
- Boltzmann, L., *J.F. Math.* **100**, 201 (1887).
- Colquhoun, D. and A. G. Hawkes, *Proc. R. Soc. London [Biol.]* **211**, 205 (1981).
- Colquhoun, D. and A. G. Hawkes, *The principles of the stochastic interpretation of ion-channel mechanism*, in *Single-Channel Recording*, B. Sakmann and E. Neher eds. (Plenum Press, USA, 1995), pp. 397-482.
- del Río-Correa, J. L. and L. S. García-Colín, *Physica A* **241**, 518 (1997).
- del Río-Correa, J. L. and L.S. García-Colín, *Phys. Rev. A*, **43**, 6657 (1991).
- del Río-Correa, J. L. and L.S. García-Colín. *Physica A* **77**, 258 (1998)
- Devaney, R. L., *An introduction to Chaotic Dynamical Systems* (Addison-Wesley Publishing Company, USA, 1989).
- Ehrenfest, P. and T. Ehrenfest, *The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics*. (Cornell University Press, USA, 1959).
- Fujisaka, H., *Prog. Theor. Phys.* **70**, 1264 (1983).
- Gibbs, J. W., *Elementary Principles in Statistical Physics* (Dover, New York, 1960).
- Green, M. S., *J. Chem. Phys.* **20**, 1281 (1952). *ibid J. Chem. Phys.* **22**, 398 (1954).
- Hirsch, M. W., S. Smale and R. Devaney, *Differential Equations, Dynamical Systems and an Introduction to Chaos* (Academic Press, New York, 2003).
- Hopf, E., *Ergodentheorie* (Springer, Germany, 1937).

## BIBLIOGRAFIA

---

- Lasota, A. and M. C. Mackey, *Chaos, Fractals and Noise* (Springer-Verlag, USA, 1994).
- Liboff, R. L., *Introduction to the Theory of Kinetic Equations* (John Wiley and Sons, USA, 1969).
- Liebovitch, L. S. and T. I. Toth, *J. Theor. Biol.* **148**, 267 (1991).
- Liebovitch, L. S., *Fractals and Chaos. Simplified for the life sciences* (Oxford University Press, USA, 1998).
- M. C. Mackey, *Reviews of Modern Physics*, **61**, 981 (1989); ver también: *Time's Arrow: The origins of the Thermodynamical Behaviour* (Springer-Verlag, 1992).
- Marcus, M., *A survey of finite mathematics* (Dover, New York, 1969).
- May, R. M., *Nature* **261**, 459 (1976).
- Mori, H., *Prog. Theor. Phys.* **33**, 423 (1965).
- Newmann, J., *Proc. Nat. Acad. Sci.* **18**, 70 (1932).
- Nicolis, G., G. Mayer-Kress, and G. Haubs. *Z. Naturf* **36a**, 1157 (1983).
- Nicolis, G., *Introduction to Nonlinear Science* (Cambridge University Press, USA, 1995).
- Peitgen, H. O., H. Jurgens and D. Saupe, *Chaos and Fractals: New Frontiers of Science* (Springer-Verlag, USA, 1992).
- Peitgen, H.-O., H. Jürgens, D. Saupe, *Chaos and fractals: New frontiers of science.* (Springer-Verlag, USA, 1992).
- Piña, E., *Lectures Notes in Phys.* **189**, 402 (1983).
- Piña, E., *Rev. Mex. Phys.* **29**, 173 (1983).
- Prigogine, I., *Las leyes del caos* (Crítica, Barcelona, 1993).
- Reichl, L., *A Modern Course in Statistical Physics* (John Wiley and Sons, New York, 1998).
- Sakmann, B. and E. Neher, *Single-Channel Recording* (Plenum Press, London, 1985).
- Sinai, I., *Russian Math. Surv.* **25**, 137 (1970). *Introduction to Ergodic Theory* (Princeton University Press, USA, 1976).
- Solé, R. V. and S. C. Manrubia, *Orden y caos en sistemas complejos: Fundamentos* (Edicions UPC, Barcelona, 2001).
- Stewart, I., *¿Juega Dios a los dados?* (Grijalbo Mondadori, Barcelona, 1991).



## BIBLIOGRAFIA

---

- Stratonovich, R. L., *Topics in the theory of Random Noise, Vol. I* (Gordon and Breach, USA, 1963).
- Strogatz, S. H., *Nonlinear dynamics and chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering (Studies in Nonlinearity)* (Perseus Publishing, Boulder, 2000).
- Takács, L., *Stochastic processes: Problems and solutions* (Halsted Press, New York, 1966).
- Uhlenbeck, G. E., and M. Cheng, *Rev. Mod. Phys.* **17**, 323 (1945).
- van Kampen, N. G., *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, E. D. Cohen, ed. (North Holland Publishing Company, 1962).
- van Kampen, N. G., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North Holland Publishing Company, 1981).
- Zwanzig, R., *Phys. Rev.* **24**, 983 (1961).

BIBLIOGRAFIA

---