



REAL ACADEMIA DE DOCTORS

L'ordre dels sistemes desordenats



Discurs de recepció com Acadèmic Numerari de l'

Excm. Sr. Josep M^a Costa i Torres

Doctor en Ciències Químiques

A l'acte de la seva recepció, 10 de desembre de 1996, i

discurs de contestació de l'Acadèmic de número

Excm. Sr. Joan Trayer i García

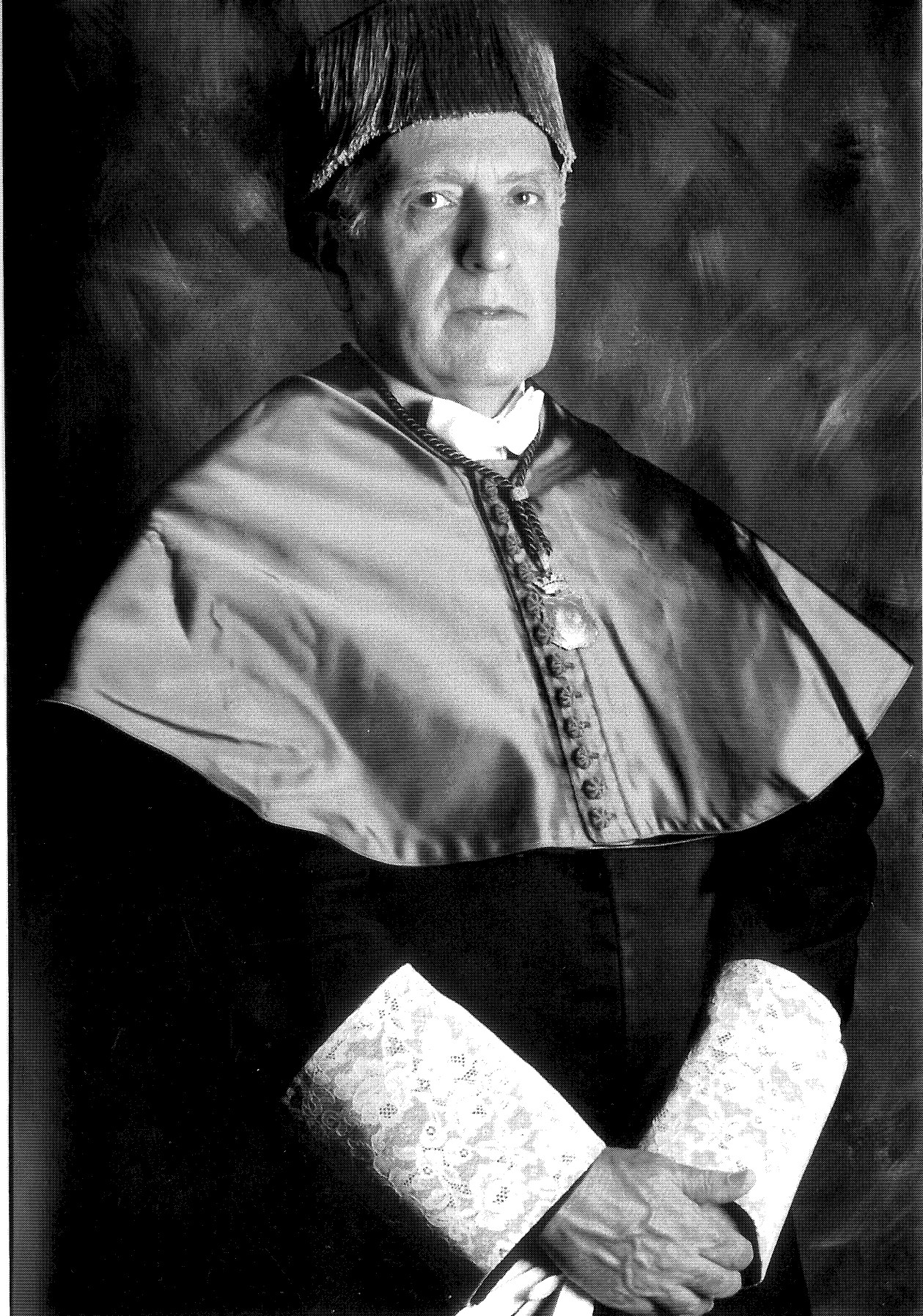
Doctor en Ciències Econòmiques i Empresarials

Barcelona

1996

Excm. Sr. Josep M^a Costa i Torres
Doctor en Ciències Químiques

L'ordre dels sistemes desordenats



Excm. Sr. President
Excms. i Il·lms. Senyors
Excms. Srs. Acadèmics
Senyores i senyors

En ser invitat a formar part de la Reial Acadèmia de Doctors, no puc negar que em vaig sentir molt honorat, i el fet em va produir una gran satisfacció. Però ben aviat el goig donà pas a una preocupació, ja que crec que l'honor amb el qual se'm distingeix és superior als meus mèrits. Així se'm presentà un difícil problema, doncs no podia dir que no mereixo aquest honor, perquè això posaria en dubte el bon criteri de l'Acadèmia. No tinc altre remei que acceptar la invitació, amb la seguretat que va ser la magnanimitat dels acadèmics allò que donà lloc al nomenament.

Permeteu-me, doncs, correspondre a aquesta generositat amb unes paraules de gratitud als membres de l'Acadèmia. En particular, vull agrair al Dr. Josep Casajuana, president de la institució, la confiança que em demostrà en acollir-me. De manera molt especial, he de donar també les gràcies a l'acadèmic Dr. Joan Traiter, bon amic i company de tasques docents, per haver-me presentat a l'Acadèmia i haver-se dignat fer el discurs de contestació en aquest acte.

Sóc conscient que el nomenament d'acadèmic és un repte que m'estimula a col·laborar en les funcions d'aquesta institució, i, a més, fer-ho al costat de persones del prestigi científic i la qualitat humana que són els acadèmics. Això és, sens dubte, una excitant experiència intel·lectual d'emulació, resultat del mutu bescanvi d'idees entre els membres de l'Acadèmia.

Vaig pensar molt sobre el tema que voldria desenvolupar en el discurs d'ingrés, per tal que fos digne d'aquest acte i a la vegada interessés l'auditori. D'altra banda, la solemnitat de l'acte i el marc que el recull fan difícil l'ús de les tècniques visuals que tan ajuden els qui ens dediquem a les disciplines experimentals. Per això, amb molta freqüència, els discursos de l'Acadèmia tracten assumptes filosòfics, històrics o de crítica intel·lectual. Deprés d'una llarga reflexió vaig decantar-me per fer una excepció i parlar d'un tema que m'ha preocupat en aquests últims anys i que ha ocupat una bona part del meu recent treball de recerca. Es tracta de les relacions entre l'ordre i el desordre, qüestió d'actualitat, com tot allò que es refereix a l'evolució dels sistemes naturals i que conté punts de gran transcendència científica.

El tema no és senzill. Les dificultats que comporta l'exposició d'assumptes científics són potenciades quan es vol tractar la complexitat dels sistemes desordenats. Però tinc l'esperança que, de la mateixa manera que s'ha trobat un ordre en la complexitat, també, amb la paciència i la benevolència vostra, podrem ordenar i metoditzar algunes idees que han permès trobar recentment solucions acceptables a problemes plantejats des de fa anys.

L'ORDRE DELS SISTEMES DESORDENATS

INTRODUCCIÓ

La naturalesa presenta una gran varietat de sistemes amb evidents irregularitats a l'espai i al temps. Moltes de les anomalies observades són d'origen aleatori, i apareixen com a conseqüència de dinàmiques no-lineals, a les quals no es poden aplicar les metodologies científiques clàssiques. Els fenòmens així desenvolupats per aquests sistemes mostren un cert grau de complexitat i són difícils d'explicar, per la qual cosa sovint s'han considerat com a fets exòtics.

Tot va començar el segle passat, en estudiar la corrosió electroquímica dels metalls, on es descobriren fluctuacions que posen de manifest un comportament no-estacionari (Fechner, 1828, Joule, 1844). Més tard s'observaren també conductes semblants en altres sistemes fisicoquímics. Malauradament, aquests comportaments quedaren com pures curiositats i foren ràpidament oblidats. Així i tot, la problemàtica dels sistemes no-estacionaris ha cridat l'atenció de molts químics i també d'investigadors d'altres ciències, i avui hi ha registrats un bon nombre de fenòmens d'evident complexitat, resultat de dinàmiques no senzilles, en molt diverses branques del saber, tant científic i tecnològic com econòmic i social.

En realitat el terme complexitat, en l'accepció aquí emprada, apareix després de la II Guerra Mundial. S'aplica als fenòmens on falla la relació directa causa-efecte, en els quals una petita modificació del sistema pot donar lloc a importants conseqüències i al revés. És a dir, no hi ha una relació lineal.

La complexitat depèn del cas considerat. És difícil expressar el nivell de complexitat d'un sistema, degut a la pròpia naturalesa del fenomen, però es pot establir una jerarquia, basada

en la suposició que els sistemes més complexos depenen d'altres relativament més senzills. És a dir, en certa manera, les propietats dels sistemes macroscòpics es poden expressar en funció del comportament de sistemes microscòpics.

En passar del món microscòpic al macroscòpic, van augmentant els nivells de complexitat, i l'exploració dels sistemes corresponents ha fet necessària l'organització de les diverses àrees del saber. Així, la complexitat de la naturalesa evoluciona paral·lela a la complexitat del coneixement. De les partícules, els àtoms i les molècules, els quals representen el coneixement de la Física i la Química, passem a les agrupacions de molècules, a les cel·les i als organismes, els quals constitueixen els camps de treball de la Biologia molecular, la Biologia pròpiament dita i la Fisiologia, per arribar a les poblacions i al pensament, que són l'objecte d'estudi de la Sociologia i la Psicobiologia, respectivament. Tenim doncs unes àrees del coneixement que es poden agrupar en tres grans blocs, corresponents a les ciències físiques, les ciències de la vida i les ciències humanes, per ordre creixent de complexitat.

En la present exposició es pretén comentar la complexitat de determinats sistemes per tal de posar al descobert la seva ordenació, malgrat que es presentin disfressats d'un aparent desordre. Tractarem principalment sistemes químics, però tenim en compte que les complexitats es troben a qualsevol indret de la naturalesa, i per això tot seguit referirem alguns exemples d'altres branques de la ciència.

Les ciències ambientals mostren un ampli ventall d'esdeveniments complexos. Només cal pensar en fenòmens atmosfèrics, com les variacions sobtoses de pluviositat amb el curs del temps, que sorgeixen de forma aparentment embrollada. L'estudi d'aquests comportaments meteorològics té especial interès, ja que ha portat a l'establiment d'una sèrie de conceptes generals aplicables a altres sistemes complicats. L'atmosfera es comporta com un fluid turbulent, que es pot

expressar matemàticament per un sistema d'equacions no-lineals molt sensibles a petites variacions de les condicions inicials. La seva anàlisi porta a una figura geomètrica, la qual va ser anomenada atractor estrany. Aquesta configuració, tal com es comentarà més endavant, permet explicar molt diverses complexitats.

La medicina també es font abundant de fenòmens dinàmics que poden qualificar-se de complexes. El batec del cor canvia de tant en tant amb una aparent irregularitat, i mostra l'existència d'anticorrelacions de llarg abast pròpies del cor sa. La tràquea es ramifica en conduccions cada vegada més petites, de complicada geometria, les quals abasten una gran superfície, que en el cas de l'estructura branquial del pulmó humà s'ha calculat que assoleix la grandària d'un camp de tennis. D'altra banda, l'anàlisi de les periodicitats de certes malalties ha permès que les dinàmiques del seu desenvolupament es puguin descriure amb equacions no lineals, la qual cosa ha contribuït a entendre la fenomenologia de determinades epidèmies.

L'estudi de la complexitat ha tingut també un gran impacte en l'economia. La producció industrial, l'evolució del preu de les mercaderies o les cotitzacions de Borsa segueixen ritmes aleatoris amb variacions considerables i difícils d'aclarir. Determinades fluctuacions dels cicles econòmics, que s'expliquen en funció d'un equilibri competitiu, recorden les turbulències de certs sistemes físics. Això suggereix una descripció alternativa dels cicles dels negocis que porta a l'anàlisi de tendències futures. La teoria de la complexitat s'ha aplicat, per exemple, a pronosticar l'èxit d'una tecnologia en front d'un altre en competició, a preveure el curs de noves activitats econòmiques en una determinada zona geogràfica i fins i tot a optimitzar la situació de punts de venda per a construir un supermercat.

Avui no es dubta de la importància del comportament dels sistemes complexos, siguin naturals, artificials o es tracti d'es-

tructures socials. La complexitat es presenta tant en sistemes grans com en sistemes petits, de característiques molt diverses. A vegades aquestes característiques són difícils de definir, la qual cosa complica la descripció del sistema. D'altra banda, es tracta de sistemes dinàmics, habitualment fora de l'equilibri, la qual cosa complica el descobriment d'una explicació satisfactòria del seu comportament.

Malgrat tot, els estudis realitzats en el camp de la complexitat a la darrera dècada, ha donat lloc a la formulació de nous models aplicables a problemes tan diferents com el comportament de la matèria, l'evolució dels sistemes econòmics i l'origen de la vida. El remolí d'idees al voltant del tema de la complexitat ha despertat gran interès entre la comunitat científica, i ha cridat l'atenció dels pensadors més notables de la nostra època, i ha posat en moviment la maquinària intel·lectual de les institucions de recerca capdavanteres i de les universitats de més prestigi.

Així s'han actualitzat antigues teories, s'han modificat hipòtesis de treball i s'han desenrotllat noves metodologies, la qual cosa ha portat a entendre millor els *sistemes dinàmics*. Algunes idees aparentment contradictòries s'han pogut esbrinar amb l'ajut de la *geometria fractal* i els paràmetres que la caracteritzen. Cal tenir present que, en realitat, l'origen dels fractals és un problema dinàmic, no geomètric, com veurem més endavant. De vegades la forma fractal és evident, d'altres cal estudiar el sistema en funció del temps i representar-lo gràficament de manera adient per tal de poder quantificar matemàticament el sistema en termes de conceptes fractals.

En els darrers anys s'han publicat molts treballs sobre aquesta temàtica, la majoria adreçats a l'anàlisi de sistemes dinàmics (Haken, 1978; Thompson i Stewart, 1988; Vidal i Lemarchand, 1988; Jou i Llebot, 1989; Gray i Scott, 1990; Scott, 1991; Mahmeke, Schmelzer i Röpke, 1992; Medio, 1992; Kaye, 1993; Fernández Díaz, 1994; Dauphiné, 1995) i de la geometria fractal (Mandelbrot, 1982; Pietgen i Saupe, 1988;

Bornsley, 1988; Bellacicco, 1990; Piedgen, Jürgens i Saupe, 1992; Hastings i Sugihara, 1994). També tracten el tema determinades revistes generals, i s'han publicat alguns llibres de divulgació (Gleick, 1987; Schoeder, 1991; Çampel, 1993; Scott, 1994; Harrison, 1995). No cal dir que aquestes obres ens han ajudat a la preparació d'aquest treball, i el material que presentem a continuació recull bona part de les aportacions d'aquests autors. Volem aquí fer palesa del nostre reconeixement.

És evident l'extensió i qualitat de la bibliografia acumulada, però el lector no especialista té dificultat en obtenir una informació adient del tema. La nostra presentació aspira a contribuir a l'aclariment d'aquesta informació i posar a l'abast dels interessats els resultats assolits en aquest camp i les seves possibilitats. Es tracta de donar compte de la dinàmica dels processos no lineals i com aquesta porta a comportaments aleatoris o caòtics i engendra formes irregulars o fractals, l'estudi dels quals no es pot dur a terme amb les metodologies tradicionals. D'altre banda, es pretén posar de manifest com l'especulació teòrica pot suggerir una investigació experimental, tant el camp de la recerca fonamental com en l'aplicada. Ambdues fites són ambicioses, ja que avui la teoria no està perfectament estructurada, però cada dia s'elaboren noves eines de treball que van engrandint el camp d'aplicació, i es descobreixen nous fets, mitjançant els quals es van desenrotllant els fonaments conceptuals sobre els que descansa la problemàtica de la dinàmica dels sistemes reals.

EVOLUCIÓ DELS SISTEMES

L'experiència ens ensenya que els fenòmens de la naturalesa es desenrotllen en un sentit determinat. Tothom sap que en el nostre ambient la tassa de cafè es refreda i el gel es fon, i que mai passa al revés de manera espontània. Aquesta direccionalitat dels processos s'estudia en Termodinàmica, i representa l'evolució dels sistemes. La idea d'espontaneïtat a la termodinàmica està vinculada als conceptes d'organització i d'atzar, ja que la tendència dels processos és disminuir l'ordre i augmentar l'aleatorietat.

La termodinàmica s'inicia probablement amb els treballs de Lavoisier i Laplace, entre 1774-1779, sobre la calor despresa en les reaccions químiques. Una de les contribucions cabdals és la de Hess, que demostrà que la calor que acompanya a un procés químic és independent de les etapes en què tingui lloc. Avui aquesta llei no és més que un cas particular del primer principi de la termodinàmica, anunciat més tard per Mayer. Postula que l'energia no es perd, però no diu res sobre la forma d'aquesta energia. Vers el 1824, Carnot, en idear un cicle per a estudiar el rendiment de les màquines tèrmiques, va demostrar que cap transferència real de calor pot tenir un cent per cent d'eficàcia. Això portà a la formulació del segon principi. Hi ha molts enunciats del segon principi de la termodinàmica, la majoria formulats a la primera meitat del segle passat i, en general, lligats amb les màquines tèrmiques, la qual cosa és comprensible, ja que és l'època del començament de l'era industrial. Ja en aquest segle, cap el 1950, Prigogine proposa la generalització del segon principi, aplicable a l'estudi de sistemes fora de l'equilibri.

A partir dels principis s'han establert criteris termodinàmics per a predir l'evolució dels sistemes. La termodinàmica considera un sistema la porció d'Univers en estudi, de manera que representa el contingut d'un volum determinat i macroscòpic, que pot ser material o no, i que està separat de l'entorn o medi exterior per una paret real o imaginària.

Cal dir que, en general, aquí ens referim a sistemes materials, com un gas o un metall, però qualsevol ésser immaterial com, per exemple, una institució representa també un sistema. En general es tracta de sistemes no aïllats, ja que sempre hi ha algun tipus de bescanvi o influència del medi, és a dir, són sistemes oberts. El cos humà, l'automòbil o les institucions en són bons exemples. L'home es nodreix d'aliments i elimina residus, rep energia i en torna, obté informació i pren decisions; l'automòbil rep combustible i dóna productes de combustió i produeix energia mecànica que fa moure les rodes, el conductor rep senyals i pren decisions; finalment, una institució o un col·lectiu importa materials i n'exporta, entren i surten persones, i bescanvia informació i serveis. El sistema, encara que representa una sola entitat, està format per components relacionats entre ells. Així, el sistema planetari està format pels planetes afectats de la força gravitatòria, i el sistema econòmic reuneix diferents agents vinculats per transaccions. Un sistema és, doncs, un conjunt complex, natural o artificial, que es pot estudiar en funció dels components vinculats a l'estructura que els dóna entitat.

El comportament dels sistemes representa la seva evolució amb el temps. A continuació es comenta com es pot preveure aquesta evolució.

Predicibilitat

La termodinàmica clàssica estableix que en qualsevol procés mecànic macroscòpic es dissipa tota l'energia o part d'aquesta en forma de calor. Només cal refregar-se les mans per a comprovar-ho. La dissipació de calor s'expressa matemàticament per l'augment d'un paràmetre anomenat *entropia*, introduït fa quasi cent cinquanta anys (Clausius, 1850). El terme entropia significa *evolució* i inicialment estava vinculat als bescanvis tèrmics, però la noció d'entropia ha variat amb els anys i en l'actualitat inclou aspectes fenomenològics, esta-

dístics i fins i tot dinàmics o geomètrics. Mitjançant el concepte d'entropia s'ha definit el que s'anomena la fletxa del temps, és a dir, l'orientació del temps, del passat al futur.

A partir del segon principi de la termodinàmica resulta que en un sistema aïllat el canvi d'entropia total és igual o més gran que zero pels processos reversibles o irreversibles, respectivament. Així que un procés irreversible comporta un augment de l'entropia total, una *producció d'entropia*, que origina una dissipació d'energia. L'entropia d'un sistema aïllat augmenta fins arribar al seu valor màxim a l'equilibri.

Per fer palesa d'aquesta tendència natural dels sistemes, considereu de nou la tassa de cafè abans esmentada. En afegir-hi un raig de llet, s'observa al cap d'un moment un canvi de color. És que les "molècules" de la llet s'han repartit amb les "molècules" de cafè per tota la tassa. Boltzmann expressà aquesta evolució vers la uniformitat en termes d'ordre, en dir que el sistema evoluciona fins un estat d'ordre mínim, o de desordre màxim, i l'entropia dona una mesura d'aquest desordre. Aquest postulat fou motiu d'un ampli debat entre els científics de l'època, en afirmar que l'entropia del Univers va cap un màxim, la qual cosa portà a Helmholtz a predir la mort tèrmica de l'Univers.

Afortunadament l'Univers no és un sistema aïllat. Les observacions astrofísiques de Hubble el 1927 i les prediccions de Gamov el 1946, més tard confirmades, assenten les bases per a pensar en un Univers que s'estructura progressivament. Avui és ben acceptat que l'Univers és un sistema obert en expansió (Weinsberg, 1986).

Per tal de generalitzar a sistemes no aïllats, d'acord amb Prigogine, cal expressar la variació d'entropia com la suma de dues contribucions: el canvi d'entropia a causa dels processos que tenen lloc dins del sistema mateix i la transferència d'entropia a través de les parets del sistema o contribució externa. La primera pot ser positiva o zero, mentre que la

segona pot ser positiva, negativa o zero i és pròpia dels sistemes oberts.

El canvi d'entropia a causa dels processos a l'interior del sistema representa la *producció d'entropia* que en haver de ser igual o més gran de zero, en un procés irreversible no pot prendre valors negatius. En aquest cas, la producció d'entropia porta a una dissipació d'energia, amb un flux d'energia, de massa, etc. Per analitzar els canvis que es produeixen en un procés irreversible s'han de tenir en compte aquests fluxos i les forces que els impulsen.

El 1931, Onsager proposà una teoria macroscòpica que permet l'estudi d'aquests processos, amb l'acoblement de fenòmens irreversibles, tals com la difusió tèrmica o la conducció electrònica. A partir de la relació lineal entre fluxos i forces s'estableix la base de l'anomenada *Termodinàmica dels processos irreversibles*. Estudia les lleis generals de les transformacions reals en el curs del temps, les quals tenen lloc a una velocitat finita a través d'estats de no equilibri. Es tracta, doncs, de canvis irreversibles, espontanis, que controlen l'evolució dels sistemes.

Els processos irreversibles que es produeixen en el sistema provoquen una producció d'entropia, que consegüentment s'ha de considerar per unitat de temps. Així es pot definir una *velocitat* de producció d'entropia, que depèn de les característiques que regulen en comportament del sistema.

Comportament lineal

En un procés d'equilibri, les forces generalitzades desapareixen i no hi ha fluxos. Però a les proximitats de l'equilibri, es pot suposar l'existència de forces relativament febles. Això representa una aproximació lineal, la qual és aplicable a l'estudi molts fenòmens irreversibles que presenta la naturalesa.

Per tal de relacionar processos irreversibles independents, cal tenir en compte que el flux corresponent a un procés irreversible està influenciat per la força del procés mitjançant l'anomenada *relació de reciprocitat* (Onsager, 1931). És a dir, les forces produeixen fluxos mentre que els fluxos produeixen forces. La relació d'Onsager constitueix un dels resultats més importants de la termodinàmica irreversible lineal.

Així resulta que la producció d'entropia és un paràmetre a la vegada termodinàmic i cinètic, a través de forces i fluxos termodinàmics. D'aquesta forma l'anàlisi termodinàmic d'estats estacionaris al interval lineal, sota condicions properes a l'equilibri, mostra que el sistema està dirigit cap a un estat de *mínima producció d'entropia*. El teorema de mínima producció d'entropia (vegeu Glansdorff i Prigogine, 1970), estableix que la velocitat de producció d'entropia és més petita o igual a zero fora o a l'estat estacionari, respectivament. És vàlid solament si es compleixen determinades condicions, com la relació de reciprocitat, i si els coeficients fenomenològics són constants. Es tracta d'un criteri per estudiar l'evolució dels sistema i també de l'estabilitat de l'estat estacionari, més útil que la noció d'equilibri de entropia màxima, ja que en el món real res és a l'equilibri.

Si el sistema està al no equilibri, els processos que tenen lloc són irreversibles, amb una producció d'entropia positiva. Però segons com es desenrotllin els processos, depenen de les forces i els fluxos, aquesta producció serà més gran o més petita, i a l'estat estacionari coincideix amb el de mínima producció d'entropia. Qualsevol altre procés no estacionari portaria a un valor de producció d'entropia més alt.

Un sistema en un estat determinat evoluciona fins arribar al valor mínim que correspon a l'estat d'equilibri. En pertorbar l'equilibri, el sistema reacciona a aquesta pertorbació fins a un mínim compatible amb la restricció imposada, que correspon a l'estat estacionari. El sistema evoluciona cap l'estat d'equilibri, però si es manté fix i diferent de zero el valor d'una de les

forces, el sistema evoluciona a l'estat estacionari, caracteritzat per la mínima producció d'entropia.

Cal dir que aquí els estats estacionaris desenvolupen una funció semblant al dels estats d'equilibri en la termodinàmica clàssica. En l'estat estacionari no solament es minimitza la producció d'entropia, sinó que també és l'estat cap a on tendeixen a evolucionar els sistemes reals.

Comportament no-lineal

Les conclusions anteriors són vàlides per a sistemes que no es trobin molt allunyats de l'equilibri. A més, certs fenòmens no poden ser descrits mitjançant l'aproximació lineal, encara que freqüentment s'ensenyen els sistemes lineals com si fossin els únics. Cal tenir en compte que la no-linealitat domina la naturalesa, i que lluny de l'equilibri, l'estat estacionari del sistema no és estable. El sistema passa a un nou estat estacionari, el qual pot tenir una producció d'energia diferent i com a conseqüència de les inestabilitats, es formen en el sistema estructures ordenades.

Cal obtenir una visió de l'evolució de l'estabilitat per a situacions més complicades, com els sistemes no-lineals que es mantenen lluny de l'equilibri. Per tal d'establir una nova regla s'ha reformulat la manera en la qual es produeix l'entropia, d'acord amb Prigogine, i així s'ha obtingut un criteri suficient i no necessari d'estabilitat d'un estat termodinàmic. És a dir, tan sols hi ha la possibilitat que tingui lloc, no que sigui inevitable, la qual cosa significa la manca de la universalitat que té el segon principi.

Com a conseqüència, tant la distància a l'equilibri com la no linealitat poden portar el sistema a una configuració ordenada. Un sistema d'aquest tipus s'anomena *dissipatiu*, en contrast amb els sistemes d'equilibri coneguts com a *conservatiu*. Aquí el mot "dissipatiu" indica la generació espontània d'una

estructura organitzada, el procés de la qual té lloc amb una producció d'entropia. Esbrinar com té lloc l'organització del sistema va portar a l'estudi de processos químics dels anomenats exòtics, com la reacció de Belousov-Zhabotinskii, on es presenten estructures organitzades fora de l'equilibri.

Aquests estudis han portat a establir connexions entre els processos d'auto-organització i les teories dels sistemes dinàmics, on els sistemes dissipatius presenten estructures característiques, anomenades *attractors*, que es comentaran més endavant.

SISTEMES DINÀMICS

Els criteris termodinàmics comentats a l'apartat anterior operen satisfactòriament en sistemes senzills, governats per lleis dinàmiques simples. Malauradament els sistemes de la naturalesa són complexos i la seva evolució dona lloc a fenòmens de complicada interpretació. Cal pensar que, com a sistemes dinàmics que són, es puguin tractar a partir de les teories de Newton, basades en les idees de Galileo i Kepler, sobre el mecanisme que regeix l'evolució dels planetes, si tenim en compte les aportacions de càlcul de Leibniz i de Euler i la teoria de les equacions diferencials de D'Alembert.

L'aplicació d'aquests procediments matemàtics és complicada, ja que gran nombre de sistemes físics s'expressen per equacions diferencials no-lineals. Per un altre banda, l'evolució d'aquests sistemes freqüentment és molt sensible a les condicions inicials i depèn de mecanismes que inclouen etapes de realimentació. Així doncs, resulta difícil calcular una funció que descriu el curs en l'espai i amb el temps dels sistemes dinàmics no-lineals que, a més, són lluny de l'equilibri

Les aportacions dels matemàtics Legendre o Fourier, i més recentment les idees de Poincaré i de Liapounov, han contribuït eficaçment a resoldre el problema. D'altre banda, és cert també que moltes d'aquestes idees s'han pogut dur a la pràctica gràcies al positiu ús de l'ordinador. En l'actualitat es disposa de procediments de càlcul que constitueixen veritables eines matemàtiques de demostrada utilitat per a la resolució dels problemes no-lineals, i així dilucidar l'evolució vers l'estabilitat o la inestabilitat dels estats estacionaris d'un sistema determinat (Thompson i Stewart, 1988; Vidal i Lemarchaud, 1988; Abraham, Albano, Passamante i Rapp, 1989; Baker i Gollub, 1990; Fernández Díaz, 1994).

A continuació es presenten alguns conceptes teòrics de les transformacions irreversibles no-lineals i es comenten, de

manera molt simplificada, determinats mètodes de treball de provada efectivitat per a la descripció dels sistemes dinàmics.

Conceptes generals

Comunament, els sistemes dinàmics estan formats per un conjunt d'elements caracteritzats per un conjunt de variables, entre els quals existeixen relacions matemàtiques expressades en forma d'equacions.

Els valors d'aquestes variables, com la posició, canvien d'un moment a altre, de manera que són funció del temps. Aquesta evolució de la posició assenyala la *trajectòria*, la qual dóna compte del comportament del sistema. La trajectòria es representa a l'espai cartesià i inclou el temps, de manera que el conjunt de trajectòries descriu el allò què fa el sistema.

Si interessa saber com ho fa, cal formular un mecanisme, expressat per un model matemàtic mitjançant equacions diferencials. Representen la descripció matemàtica del canvi instantani de propietats amb el temps, i es poden aplicar des d'un canvi de poblacions fins a la variació de les concentracions d'un sistema químic o dels indicadors de producció d'una gestió econòmica.

Els valors de les propietats en un moment determinat representen l'*estat* del sistema, i venen donades en forma de coordenades. És freqüent expressar l'estat d'un sistema mitjançant coordenades generalitzades. En general s'opera a l'*espai fàsic*, definit mitjançant el conjunt de variables dependents i que conté els possibles estats assolits pel sistema.

Anàlisi de sistemes dinàmics

L'estudi d'un sistema dinàmic comença pel seguiment de les seves trajectòries i les relacions entre elles. Cal tenir en

compte que la trajectòria és funció de l'estat inicial a més del temps. Dos exemples: l'escriptura de paraules en el popular joc del "intelect" i el recorregut que segueix una bola a la pista de la bolera acusen de manera molt diferent el tremolor de la mà; mentre els blocs de les lletres queden estabilitzats i es pot llegir fàcilment la paraula escrita, la superfície de contacte entre la bola i la pista és extremadament sensible al moviment de la mà, i resulta difícil aconseguir un recorregut en línia recta. Doncs be, aquesta dependència de les condicions inicials és característica de molts sistemes dinàmics.

Una altra particularitat dels sistemes dinàmics és la presència de mecanismes de realimentació. En química són ben conegudes les reaccions catalitzades, i també processos on el producte de reacció pot actuar de catalitzador de la propia reacció. Així s'estableix un circuit en el qual la sortida torna al sistema com entrada. Mecanismes d'aquesta mena governen molts processos dinàmics i són responsables de la seva evolució.

Els sistemes en els quals la trajectòria es contreu i mostra tendència cap a una zona restringida, es coneixen a com sistemes *dissipatius*, tal com s'ha dit anteriorment. La zona en la qual convergeix forma un *atractor* d'evolució temporal, que representa els valors de les variables pels quals s'estabilitza el sistema. La pilota que roda per la muntanya fa cap a la vall, on assoleix l'equilibri. Però no sempre és així; la pilota podria quedar atrapada i fer voltes en un bucle unidimensional, com l'ala d'un barret, o bé rodolar en un espai més extens, com l'anella d'un Donut. L'atractor està rodejat d'una *conca d'atracció*, formada pels punts de la trajectòria que tendeixen a ell. Un atractor és, doncs, una forma geomètrica característica del comportament del sistema, i representa la configuració a la qual tendeix o és atreta la trajectòria.

El concepte d'atractor es pot contemplar fàcilment amb un sistema senzill com el pèndol. El moviment del pèndol ve determinat per la posició i la velocitat, de manera que el seu

estat es defineix per un punt en el pla, les coordenades del qual són aquestes dues variables. En oscil·lar el pèndol d'un costat a l'altre, segueix una trajectòria en l'espai fàsic. En el cas d'un pèndol ideal, sense fregament, la trajectòria és una corba tancada, però sota l'efecte del fregament la trajectòria descriu una espiral que tendeix a un punt.

Qualsevol sistema que tendeix al repòs, com el pèndol, es caracteritza per un *punt fix* en l'espai fàsic, el qual constitueix el seu atractor. Altres sistemes tendeixen periòdicament a una successió d'estats, com el pèndol ideal, i el seu atractor correspon a un *cicle límit*. En el cas de sistemes que presenten moviments de dues oscil·lacions independents, l'atractor és el *torus*. Un atractor més complex és l'atractor *estranys*, característic dels comportaments caòtics.

Els atractors estranys representen un concepte d'especial interès a l'estudi dels sistemes dinàmics. Les trajectòries corresponents mostren les característiques de les funcions aleatòries i la seva dependència de les condicions inicials, la qual cosa porta a la impredictibilitat del comportament del sistema a llarg termini.

L'estudi d'aquests sistemes no va despertar l'entusiasme de molts científics, en particular, dels d'obediència positivista, els quals consideraven que tot està sota control experimental. A més a més, la metodologia matemàtica per estudiar l'evolució mitjançant la resolució d'equacions diferencials, resulta difícil d'aplicar en el cas d'equacions no-lineals, i cal recórrer a procediments alternatius, a través de mètodes gràfico-qualitatius o aproximacions numèriques.

De fet, es tracta d'una metodologia ja esbossada el segle passat per Poincaré, quan el 1889 va mostrar que un sistema de tres cossos, com el Sol, la Terra i la Lluna, és un sistema intrínsecament no-integrable, és a dir, que la seva anàlisi matemàtica no du a una solució exacta (Poincaré, 1890). Això va implicar un fort cop a la simplificada mecànica

establerta per Newton, però ha servit de base per a alguns procediments de la matemàtica del caos, assentada en la topologia combinatòria de Poincaré on es presenta la integració qualitativa d'equacions diferencials.

Amb aquests procediments la complexitat d'un espai fàsic en tres o més dimensions es pot reduir a una o dues dimensions mitjançant la transformació coneguda com a aplicació o *secció* de Poincaré. Consisteix en una seqüència de punts corresponent a talls transversals de l'espai fàsic a temps determinats. Així, la secció de Poincaré opera en un espai de menys dimensions que l'espai fàsic.

Caos

La paraula *caos* dóna compte de l'aspecte imprevisible d'un fenomen, el qual es diu *caòtic*. Quan el caos ve descrit mitjançant equacions senzilles però no lineals, generalment de solució complicada, es parla de *caos determinista*, és a dir, es pot seguir el comportament del sistema si es conèixen l'estat inicial i les equacions que governen la seva evolució. L'estudi del caos determinista ha proliferat en els anys últims. Previst per Poincaré al segle passat (Poincaré, 1890), no ha estat fins la segona meitat d'aquest segle que s'han descobert sistemes reals caòtics regits per lleis deterministes (Lorenz, 1963).

D'altra banda, la popularització de la informàtica, amb ordinadors cada vegada més fàcils d'usar, ha permès la simulació de molts models matemàtics. S'ha pogut organitzar i manipular informació a una escala abans impensable, i així portar a terme gran nombre d'experiments numèrics d'exemples de caos determinista. Així, l'ordinador ha passat a ser una part fonamental del procés de raonament.

El comportament caòtic de certs sistemes s'explica com a conseqüència del valor que prenen determinats paràmetres de les equacions no lineals que els descriuen. Una petita variació

d'aquests valors dona lloc a una alteració de l'evolució que augmenta ràpidament amb el temps. Així és difícil qualsevol previsió i el comportament del sistema passa ser caòtic, la qual cosa desbarata el binomi determinisme-predicibilitat de la ciència clàssica.

El trànsit d'un règim estable a un règim caòtic es visualitza mitjançant el *mapa logístic*. Es basa en l'*equació en diferències finites*, així anomenada perquè, en contra de les equacions per temps continu, genera el valor d'una variable a partir del seu valor a l'etapa anterior multiplicat per un factor, és a dir, en forma discreta porta a una variació temporal per etapes. En els mapes logístics es representa la corba de l'equació indicada i les línies que connecten cada etapa amb la següent. A partir d'un valor inicial i per successives iteracions s'obté una teranyina, l'estructura de la qual depèn del valor del factor; per a valors alts s'assoleixen solucions no estables, corresponents a comportaments caòtics.

El mecanisme que origina els atractors representa una *inestabilitat* estructural del sistema, molt sensible a petites variacions dels paràmetres de control, amb la subsegüent *bifurcació*. Les bifurcacions ja havien estat previstes per Poincaré, en considerar la naturalesa com a essencialment uniforme i estable, però subjecta a canvis sobtats i no previsibles a gran escala, i que donen lloc a determinades variacions. Una bifurcació significa una reestructuració d'un sistema, la qual té lloc quan els paràmetres de control passen per un determinat valor crític, on la branca de solució única perd la seva estabilitat i es generen noves branques de solucions. Les zones de solució única i de solucions múltiples, les quals donen lloc a la inestabilitat del sistema, són funció del paràmetre de control.

Les bifurcacions es presenten en els sistemes inestables. Els sistemes bifurcats presenten branques de solucions, però amb el increment posterior del paràmetre de control s'arriba a un valor per al qual apareixen noves inestabilitats i augmenta el nombre de bifurcacions. La situació es pot repetir per a altres

valors del paràmetre de control, i així donar lloc a estats cada vegada més complicats. Les successives bifurcacions es fan cada vegada més ràpides, i s'origina una *cascada* de bifurcacions, que porta a l'evolució caòtica del sistema.

Si el sistema segueix amb l'allunyament de l'equilibri, la seva complexitat augmenta cada vegada més fins a arribar a un punt on és difícil reconèixer l'estructura desenrotllada. En general es tracta d'un atractor estrany, conseqüència d'una situació caòtica.

Mitjançant l'anomenat *exponent de Liapounov* es poden distingir els diferents tipus d'atractors. A més, aquest exponent permet caracteritzar el comportament del sistema corresponent sota diverses condicions i identificar un atractor estrany, que mostra una estructura més complicada que la que presenten els atractors més simples.

L'anàlisi de les formes dels atractors estranys està associat generalment amb la presència d'algun tipus de geometria *fractal*, la qual cosa suggereix la possibilitat d'estudiar el comportament dels sistemes caòtics en termes fractals, tal com van posar de manifest Hentschel i Procaccia el 1983. Caos i ordre es consideren normalment conceptes diferents, però en la naturalesa coexisteixen complexitat i estructures amb un alt grau d'ordre espai-temporal. En realitat, les estructures caòtiques i les estructures ordenades sorgeixen del mateix tipus de lleis no-lineals i freqüentment són inseparables. El grau d'ordre en el caos s'expressa moltes vegades en funció d'una dimensió fractal, relacionada amb l'exponent abans esmentat.

FRACTALS

El terme *fractal* s'aplica a sistemes complexos de configuració irregular que presenten el mateix aspecte en totes les escales de longitud. El caràcter de les irregularitats d'una zona es presenta també en les seves successives ampliacions. Un fractal típic és la forma retallada de la línia del litoral: la distància per la vora del mar entre dos punts de la Costa Brava en un mapa d'Europa és considerablement més petita que la que determinada en un mapa d'Espanya, la qual, a la vegada, és inferior a la mesurada en un mapa de Catalunya. La longitud és més gran quant més detallat és el mapa. I, naturalment, en fer un passeig a peu entre els dos punts, després d'haver recorregut totes les cales de la costa, encara enregistrariem una distància més gran. Això significa que el litoral no té una escala de longitud característica.

Aquesta és una propietat de molts sistemes complicats, com corbes, objectes, funcions o conjunts, que poden ser caracteritzats mitjançant una dimensió no-sencera. L'esmentada línia litoral té una dimensió entremig de la d'una línia unidimensional i la d'un pla bidimensional. Des d'un punt de vista matemàtic, la noció de dimensió no-sencera ja va ser estudiada fa bastants anys. Els treballs de Cantor, Peano i Hilbert, el segle passat, i els de von Koch, Sierpinski, Julia i Hausdorff, al principi del present, representen l'avanguardia de la recerca dels sistemes de dimensió no-sencera, avui anomenats fractals, i de les conseqüències que se'n dedueixen. En realitat, el terme "fractal", com a substantiu i adjectiu, ha estat implantat recentment, cap el 1975. Va introduir-lo Mandelbrot, un matemàtic d'idees atrevides, que es va dedicar a molt diverses matèries científiques, i que té el mèrit d'haver desenvolupat alguns conceptes i mètodes que han quedat incorporats a la ciència actual.

El llarg interval de temps entre el moment de ser imaginades les estructures fractals i la seva recent popularització es podria explicar perquè fins ara no s'ha disposat de recursos de càlcul

adients. El paper i llapis quedaren ràpidament estroncats i l'ordinador no existia. El desenvolupament de la informàtica ha fet possible la ràpida floració recent de fractals. En l'actualitat les idees fractals representen un eina matemàtica per tractar diferents problemàtiques, i permet, així, descriure molts sistemes que presenten característiques similars quan s'examinen a escales diferents.

Avui són abundants les monografies on vénen recollits exemples significatius de fractals (Mandelbrot, 1982; Feder, 1988; Méhauté, 1990; Barralo, 1992; Pietgen, Jürgens i Saupe, 1992; Guzmán *et al.*, 1993). La naturalesa presenta un exuberant nombre d'objectes d'aquest tipus, de vegades considerats com “irregulars”, però amb certes “regularitats” que resulten evidents si s'analitzen a través dels conceptes fractals (Avnir, 1989; Schroeder, 1981; Kaye, 1993; Harrison, 1995).

Hi ha diverses raons que aconsellen recórrer a aquestes idees. D'una banda, casi tots els objectes reals tenen una forma irregular, que requereixen dimensions més generals que les euclidianes, i d'altra banda, molts dels sistemes complexos de la naturalesa són caòtics, i tenen associats atractors estranys, els quals no poden ser descrits per dimensions senceres.

Els fractals poden generar-se per una senzilla repetició reglada o produir-se mitjançant un procés estocàstic, i s'anomenen, respectivament, *deterministes* i *aleatoris*. Encara que els fractals de la naturalesa són aleatoris, les propietats dels fractals deterministes, les quals estan ben establertes, poden ajudar a entendre els fractals naturals.

Fractals deterministes

Els fractals deterministes es generen de forma sistemàtica, segons regles matemàtiques. La seva estructura està totalment determinada per l'aplicació d'un procés iteratiu, constituït per un *iniciador* (estat inicial) i un *generador* (procés de iteració).

En repetir una i altre vegada l'operació implacablement es fa cap a una estructura típicament fractal.

Un exemple ben conegut de fractal determinista és la clàssica *corba de Koch*, així anomenada en honor al matemàtic que la va descriure per primera vegada el 1904. La corba s'origina a partir d'un segment que es reemplaça per una línia trencada (generador), formada per quatre segments, cadascun de longitud $1/3$ de l'anterior, disposats en forma angular, i que es repeteix a cada iteració. A la primera iteració els segments tenen una longitud $1/3$ de l'original, la segona serà de $1/9$, ja que cada segment es reemplaça altra vegada pel generador, i així successivament. D'aquesta manera s'obté una corba infinitament llarga, ja que cada iteració multiplica la longitud total per $4/3$. El resultat va desconcertar als matemàtics de començament de la centúria, ja que sortia de qualsevol previsió raonable.

Una estructura provinent de l'anterior és l'*illa de Koch*. Sobre cada costat d'un triangle equilàter inicial es col·loca un triangle semblant de costat $1/3$ de l'anterior; així els tres costats lineals del triangle primitiu s'han substituït per quatre línies, de longitud $1/3$ de la del costat del triangle original. La repetició d'aquesta operació genera l'estructura regular en forma d'estrella. En continuar les iteracions s'obté una illa de Koch, el perímetre de la qual és cada vegada més gran, fins arribar a la situació problemàtica d'un perímetre de longitud infinita que conté una superfície d'àrea finita. Aquest perímetre és per definició una corba fractal ideal. Si s'amplia una porció del perímetre de l'illa, resulta que l'ampliació presenta el mateix aspecte que la porció original. Això significa que és impossible distingir entre diverses ampliacions mitjançant la rugositat del perímetre, ja que sempre sembla la mateixa a qualsevol ampliació. Aquesta propietat dels fractals, abans ja esmentada, té gran importància i serà comentada més endavant.

El treballs de Koch no van cridar l'atenció de la majoria dels seus col·legues, però alguns matemàtics s'interessaren per aquestes idees i imaginaren i projectaren altres estructures de característiques fractals. Entre aquestes cal esmentar les anomenades *tamís*, *tapís* i *esponja de Sierpinski*, molt útils per a estudiar diverses propietats físiques de sistemes naturals. El tamís de Sierpinski, conegut també com a *triangle de Sierpinski*, es forma en dividir un triangle, iniciador, en quatre petits triangles i en eliminar el triangle central, l'estructura del qual és el generador. Aquesta operació es repeteix en cada un dels triangles que queden, i així indefinidament. Es comença amb un triangle i es formen 3, 9, 27, 81, 243, . . . triangles, cadascun dels quals és una versió reduïda dels triangles de l'etapa precedent. El tapís de Sierpinski es construeix de manera anàloga al tamís. A partir d'un quadrat que es divideix en 3^2 quadrats, es treu el quadrat central, i en cada iteració es repeteix l'operació.

Cal dir que aquestes estructures de Sierpinski són fractals coneguts com *finitament ramificats*. Un fractal es diu finitament ramificat si qualsevol part d'aquest es pot aïllar per separació d'un nombre finit de llocs o trams. Així, la corba de Koch és també un fractal finitament ramificat. D'altre banda, aquestes estructures es poden multiplicar per tal de generar noves formes fractals deterministes. Les originades a partir del tamís de Sierpinski, originen geometries de gran importància pràctica. Les seves propietats són aplicables als fractals naturals i permeten estudiar molts processos que tenen lloc en els sistemes sòlids i modelitzar diversos fenòmens fisicoquímics.

Els procediments utilitzats per a la generació dels fractals darrerament descrits, poden aplicar-se a la formació d'objectes tridimensionals. Els "sòlids" obtinguts contenen un conjunt de línies i superfícies, amb una estructura interior de interconnexions entre els espais desocupats. A partir d'un cub es forma l'anomenada esponja de Sierpinski. El cub inicial es divideix en 3^3 cubs d'igual grandària i s'elimina la part creuera central formada per 7 cubs. Es repeteix l'operació en cada un

dels $3^3 - 7$ cubs que queden, i així a cada iteració. Una modificació de l'esponja de Sierpinski, també en tres dimensions, és l'estructura que resulta quan el cub de partida es divideix en 2^3 cubs més petits i d'igual grandària, dels quals s'eliminen els 2 diagonalment oposats. A la primera iteració queden $8 - 2$ cubs, a la segona hi resten $6 \times 2^3 - 6 \times 2$, i així successivament.

Els objectes creats al cap d'un nombre molt gran d'aquestes iteracions presenta un aspecte semblant al de moltes estructures reals. Per això s'han aplicat al disseny de models tridimensional per explicar diversos fenòmens naturals. Ajuden, per exemple, a l'estudi del transport en medis porosos i dels processos electroquímics que tenen lloc a l'interfase entre un metall i una dissolució.

Per tal d'entendre determinats sistemes i processos fisicoquímics, com la reactivitat dels cristalls o el comportament dels catalitzadors o de les drogues, és útil emprar estructures com les ideades pel matemàtic Cantor. Es tracta d'un tipus de fractal format per punts escampats en línia recta, conegut com a *conjunt de Cantor*. Publicat el 1883, uns 40 anys abans que les estructures de Sierpinski, és probablement el fractal més important, tant per consideracions matemàtiques conceptuals com per les seves aplicacions als sistemes dinàmics. Es genera a partir d'un segment, que es divideix en tres intervals iguals i, en comptes de substituir una part per una línia més complicada com en el cas de la corba de Koch, s'elimina la tercera part del mig de la recta. A les successives iteracions es treu el terç central de cada un dels segments que queden. En augmentar el nombre d'iteracions, resta un "pols" de punts separats, el nombre dels quals tendeix a l'infinit, però la grandària de cadascun s'acosta a zero.

Les propietats del conjunt de Cantor van desconcertar els matemàtics del segle passat. Resulta ser l'atractor estrany més senzill, com queda de manifest en considerar el mapa logístic unidimensional, i correspon a un sistema caòtic.

Una altra forma del conjunt de Cantor és l'anomenada *escala del diable*. És una escala on es pot observar que el creixement de cada replà segueix una distribució com el conjunt de Cantor. L'escala del diable recorda moltes estructures reals, com les imperfeccions d'alguns cristalls, i és útil per explicar processos tals com reaccions químiques catalítiques.

Els exemples de fractals deterministes són infinits. Les geometries que presenten es poden fer servir per modelitzar molts problemes d'interès científic i tècnic. No ens estenem amb més comentaris i tot seguit passem a considerar els fractals aleatoris.

Fractals aleatoris

Els fractals deterministes rarament es troben a la naturalesa, però hi ha nombroses estructures originades com a conseqüència de processos naturals, que presenten propietats fractals, en particular si s'estudien en un ampli interval d'escala d'observació. La formació d'aquestes estructures es pot atribuir a les dinàmiques incertes, sovint oscil·latòries, dels processos naturals i que donen lloc a fractals aleatoris.

Els fractals aleatoris es poden generar per etapes, mitjançant un procediment semblant al dels fractals deterministes. De fet, l'aplicació a l'atzar de les regles de formació d'un fractal determinista porta a un fractal aleatori. Així, per exemple, en reemplaçar el segment inicial de la corba de Koch per la línia trencada (generador) hi ha dues possibles orientacions a la l'etapa de substitució, que ens porta a una estructura generada a l'atzar. De manera semblant es forma l'illa de Koch. A partir d'una unitat inicial, s'agreguen triangles, com en el cas dels fractals deterministes, però amb una orientació a l'atzar en cada etapa i de manera que coincideixin els punts finals. En el cas del tapís de Sierpinski cal pensar en dues possibles alternatives a l'atzar: que els sub-triangles no siguin equilàters aleatòriament i s'elimini el central, o que els sub-triangles

siguin equilàters, i s'elimini aleatoriament un d'ells. El mètode està relacionat amb l'anomenada *percolació*, fenomen amb força aplicacions en diferents branques de la ciència.

Els fractals aleatoris són estructures a l'atzar on la iteració ve definida per una o diverses lleis probabilístiques per tal de triar el generador a aplicar en cada iteració. Aquests sistemes mostren un comportament arbitrari i la seva organització estructural es recolza en un conjunt de causes sense lògica aparent.

Dimensió fractal

En començar aquesta secció hem mencionat la dificultat de determinar el litoral d'un indret. No és el mateix mesurar-lo des d'un satèl·lit que seguir-lo pel recorregut d'un cargol. Però és lògic que hi hagi un valor de la veritable extensió de l'esmentat litoral. Això està relacionat amb la noció de dimensió. El concepte de dimensió no és senzill. En el llenguatge normal la paraula "dimensió" es refereix tant a la mesura d'un objecte com a l'espai que ocupa. Des del punt de vista matemàtic, la dimensió d'un conjunt geomètric implica diverses idees. La configuració dels punts d'un conjunt a l'espai dona la *dimensió topològica*, D_T : a un punt s'assigna una dimensió topològica 0, a una línia 1, a una àrea 2, a un volum 3. Aquests conjunts són a l'espai euclidià, amb una *dimensió euclidiana*, D_E , igual, respectivament, a 0, 1 ó 2 segons sigui una recta o una corba, 2 i 2 ó 3 segons sigui la superfície o el volum que conté. Aquesta concepció d'Euclides dels objectes com unidimensionals, bidimensionals o tridimensionals és que s'utilitza a diari.

La longitud, l'àrea o el volum d'un objecte regular, com una línia recta, un rectangle o un cub, de dimensions euclidianes 1, 2 i 3, respectivament, són fàcils de determinar. Però si s'ha de mesurar, per exemple, el perímetre d'un objecte irregular,

és clar que el resultat és funció de la unitat emprada en la determinació. En aquests casos és convenient establir un nou concepte de dimensió que caracteritzi el grau d'irregularitat del conjunt a mesurar i doni compte de la seva extensió en l'espai on es troba. És una dimensió no-sencera, D , anomenada *dimensió fractal*, que té per objectiu definir matemàticament els sistemes fractals. En l'exemple del perímetre, la longitud és asimptòticament igual a la longitud "veritable" en el límit on la unitat tendeix a zero, independentment de la grandària de la unitat de mesura. A partir de la proporcionalitat entre la longitud i la unitat elevada a un terme que depèn de la dimensió, es pot veure que el gràfic logarímic d'aquests paràmetres és una línia recta, el pendent de la qual porta a la dimensió fractal.

La dimensió fractal depèn lògicament de la complexitat del conjunt. En augmentar la rugositat d'una línia en un pla, la dimensió fractal agafa valors creixents, mentre que la dimensió topològica resta constant i igual a 1 i la dimensió euclidiana passa a 2 de forma abrupta. D'aquests resultats es pot deduir que $D_T \leq D \leq D_E$. S'accepta que $D - D_T$ és una mesura del desordre del conjunt; així, quan $D_T = D$ el conjunt està ordenat i si $D_T < D$ tenim un conjunt desordenat. Així doncs, la dimensió fractal representa una forma de matematitzar característiques com la irregularitat d'un objecte, que d'altre manera no tindria una definició clara i efectiva.

Determinats objectes fractals mostren estructures bastant complexes pel que fa a la seva distribució heterogènia. La dimensió fractal d'un conjunt d'aquest tipus difícilment caracteritza la geometria de l'objecte. Es tracta d'estructures que no són veritablement fractals, sinó una combinació d'una multitud de conjunts fractals, de manera que per a la seva caracterització total és necessari un conjunt de dimensions fractals. Són els anomenats sistemes *multifractals*, pels quals va ser convenient l'introducció del concepte de dimensió fractal *generalitzada*. Els sistemes multifractals són molt diversos, com per exemple les superfícies d'agregats dels anomenats

“dits viscosos” o els originats pel creixement de dipòsits electroquímics. D'aquests últims en tractarem més endavant.

Auto-semblança i auto-afinitat

Una de les propietats dels fractals deterministes és que l'ampliació de qualsevol de les parts de l'objecte és semblant a l'original. Així s'ha vist explícitament amb la corba de Koch. Es tracta de sistemes formats per parts que són similars a tot el conjunt, de manera que si s'amplia isotròpicament una part fins a la grandària de l'original, original i ampliació tenen el mateix aspecte. Aquesta propietat s'anomena *auto-semblança* i comporta la invariabilitat de les transformacions d'escala isotròpica.

La propietat d'auto-semblança no s'observa en els fractals aleatoris, ja que tenen més d'un factor de reducció, de manera que les parts de la seva estructura poden presentar correspondència amb el tot si es redueix amb factors diferents en direccions diferents. En altres paraules, l'augment de grandària no és uniforme en totes direccions. Malgrat aquesta aleatorietat, aquests fractals poden ser auto-semblants en sentit estadístic. Es diu que presenten *auto-semblança estadística* i, per tant, mostren un comportament anisotròpic. Amb canvis d'escala simultanis però de factors numèricament diferents s'obtenen còpies similars, encara que distorsionades. La diferència entre una transformació isotròpica i una anisotròpica es veu clarament en transfigurar un cercle, per donar un altre cercle i una el·lipse, respectivament. Aquesta propietat s'anomena *auto-afinitat* i és característica de les estructures fractals aleatòries. És evident que la geometria afi no distingeix un cercle d'una el·lipse.

FRACTALS NATURALS

Un dels motius del recent desenvolupament de les idees fractals és probablement la seva aplicació pràctica a l'estudi de sistemes naturals. Avui dia, els conceptes fractals descriuen moltes estructures irregulars i expliquen força fenòmens complexos que presenta la naturalesa, tant a escala macroscòpica com a escala microscòpica.

Els sistemes fractals naturals són molt variats. Trobem estructures fractals a tot arreu: des de a les galàxies fins a les colònies de virus, passant pels astres i planetes, muntanyes i serralades, rius i llacs, turbulències, agregacions i dissolucions, canvis de fases i trajectòries de partícules, etc. També mostren el seu caràcter fractal moltes estructures generades artificialment i processos provocats, com els nous materials o determinades reaccions químiques. La majoria d'estructures naturals i artificials són el resultat de la juxtaposició de diversos components homogenis, amb interfícies que afavoreixen el desenvolupament de determinats processos. Tenim interfícies en molts sistemes sòlids, ja siguin naturals, com els minerals, aliatges, ceràmiques, o artificials, com les pintures, revestiments, contactes, soldadures. La morfologia d'aquestes interfícies, freqüentment de tipus fractal, influeix sobre la dinàmica dels processos que s'hi fan, i determina les característiques dels fenòmens corresponents.

L'estudi dels fractals naturals s'ha recollit en diverses publicacions, i un bon nombre d'aquestes és molt recent (Fleischman *et al.*, 1990; Bunde i Havlin, 1991; Gouyet, 1992; Bunde i Havlin, 1994). En aquests treballs es veu que el tema es pot exposar de moltes maneres. Com que aquí tan sols es pretén posar de manifest l'ordenació dels sistemes aparentment complicats, no donarem una descripció sistemàtica de les estructures fractals naturals, i comentarem només alguns fractals generats per processos fisicoquímics. En simplificar al més possible, es presenten alguns exemples significatius, la selec-

ció dels quals s'ha fet en tenir en compte la seva importància teòrica i utilitat pràctica, encara que també, sens dubte, ha influït l'interès personal per determinats sistemes que hem estudiat recentment.

Estructures fisicoquímiques

Agregacions. L'agregació de petites partícules per formar estols i transformar-se en estructures complexes és un fenomen que es dona sovint a la naturalesa. Només cal fixar-nos en els flocs de neu que cauen a l'atzar i formen agregats que creixen i s'integren en capes cada vegada més espesses. L'estudi del procés d'agregació pertoca a moltes branques de la ciència i de la tècnica. Per exemple, es troben agregacions a la ciència dels materials, en els aerosols, a l'immunologia, en els canvis de fase, etc. Poden ser processos de creixement de cristalls o d'electrodeposicions de metalls, on les partícules s'uneixen per donar determinades estructures, o bé formació d'agregacions col·loïdals a partir de grups més petits. Cal considerar també el procés que governa la dinàmica global de l'agregació, per exemple, la *difusió* o una *reacció* química (vegeu Family i Landau, 1985; Vicsek, 1989; Barbási i Stanley, 1995). Encara que els agregats presenten una estructura complicada, la seva obtenció experimental és relativament senzilla. Així es pot veure a les electrodeposicions que comentem a continuació.

Electrodeposició. Entre els processos electroquímics d'utilitat industrial cal assenyalar l'electrodeposició de metalls i les seves diverses aplicacions, com els revestiments de protecció o decoració, la producció o reproducció d'articles, la recuperació de metalls, etc.

La formació de capes sobre un material en el curs d'una electrodeposició dóna lloc a estructures complexes, la geometria de les quals està relacionada amb l'evolució del procés del seu

creixement. Amb freqüència, la morfologia de les capes dipositades sobre metalls és conseqüència d'una dinàmica caòtica (Argoul i Arneodo, 1990), encara que hi ha constància experimental d'una gran varietat d'estructures, que va des de dendrites ordenades a fractals aleatoris, segons les condicions operatòries. La deposició electroquímica de metalls és un dels procediments més senzills d'obtenir fractals, particularment dipòsits "bidimensionals". Per tal de seguir el creixement del dipòsit, la cel·la electroquímica, que conté una capa molt fina d'electròlit, s'il·lumina per la part inferior, i s'enregistra amb una cambra de vídeo a través d'un microscopi, situats a la part superior. La digitalització de la imatge i el seu processament permet l'estudi de l'electrodipòsit i el tractament numèric de resultats. L'anàlisi simultani de l'estàtica i la dinàmica del creixement fractal d'aquestes estructures porta a la caracterització quantitativa del dipòsit i la seva dependència de les condicions experimentals (Sagués, Costa, Mas, Vilarrasa i López, 1991). El concepte de dimensió fractal generalitzada és útil per a discutir l'auto-semblança de les morfologies experimentals d'aquests dipòsits (Sagués, Mas, Vilarrasa i Costa, 1990). En variar les condicions operatòries, com la durada de l'experiment, la concentració dels ions, el potencial aplicat, entre altres, s'observen canvis en la velocitat de creixement dels dipòsits i diferències en les textures. (Costa, Sagués i Vilarrasa, 1991).

Per tal d'explicar les diferències observades en els dipòsits segons les condicions de treball cal considerar com creix l'estructura. A la reacció que té lloc al càtode els ions metalls en dissolució es redueixen a metall sòlid. La velocitat de la reacció electròdica, la qual en general s'escriu en termes de corrent elèctric, és funció del potencial de l'elèctrode, del corrent de bescanvi (valor comú dels corrents parcials a l'equilibri) i també de les concentracions de les formes oxidada i reduïda prop de l'elèctrode i al si de la dissolució (vegeu, per exemple, Costa, 1981). Quan el potencial és suficientment gran i el corrent de bescanvi és alt, la relació entre les concentracions a l'elèctrode i al si de la dissolució controla el

procés i, per tant, la velocitat en què arriben els ions a l'elèctrode té una influència decisiva sobre el corrent, i per tant, sobre l'electrodipòsit. En aquests casos es parla de processos de difusió. Així doncs, el creixement del dipòsit ve governat per la difusió de les espècies des del si de la dissolució, i es tracta d'una *agregació limitada per difusió*, la qual és responsable de la naturalesa fractal de l'agregat electrodepositat.

En el curs del creixement de dipòsits electroquímics de metalls s'han observat oscil·lacions extremadament sensibles a les condicions experimentals inicials, que donen estructures geomètriques intricadament relacionades amb l'evolució dinàmica. L'anàlisi de les morfologies corresponents porta a una dimensionalitat característica de sistemes caòtics (Sutter i Wong, 1989; Argoul i Arneodo, 1990).

Dissolució. La dissolució de materials sòlids sota l'acció d'un fluid agressiu s'origina freqüentment mitjançant l'avanç del front irregular de reacció, entre el sòlid i el fluid. En general es tracta de processos d'interès tècnic com, per exemple, la reacció de partícules en una combustió, la reducció d'òxids metàl·lics o l'oxidació dels metalls. Quan el sòlid conté diverses espècies, el procés presenta sovint un caràcter selectiu. És el cas dels aliatges, on la presència d'elements diferents fa que la dissolució del material tingui lloc segons les propietats de cadascun d'ells. La reacció es coneix com "desaliatge". El procés de dissolució està relacionat amb l'estabilitat dels materials, que en el cas particular dels materials metàl·lics presenta un interès tècnic cabdal. Aquesta reacció espontània i no desitjada de deteriorament dels materials, anomenada *corrosió*, pot tenir efectes d'alt cost econòmic i, de vegades, arribar a ser catastròfics.

Electrodissolució. L'electrodissolució dels metalls és un procés d'oxidació anòdica i representa essencialment la reacció inversa a la de deposició, però amb característiques electroquí-

miques i morfològiques pròpies. Els productes d'oxidació poden ser solubles, la qual cosa promou la ràpida dissolució del metall, o bé insolubles, ja siguin poc adherents o formin capes que recobreixen el metall. El procés de creixement d'aquestes últimes és molt semblant al dels electrodipòsits. La reacció electroquímica d'oxidació anòdica, generalment té lloc en un medi aquós, per la qual cosa és suficient la presència d'una fina capa d'humitat sobre el metall. Una vegada assolit l'estat estacionari, el corrent corresponent a l'oxidació s'anomena *corrent de corrosió*, i el seu valor expressa la velocitat de dissolució del material (vegeu, per exemple, Costa, 1981).

Determinats processos d'electrodissolució de metalls presenten un comportament oscil·latori, amb fluctuacions de corrent o de potencial. Freqüentment aquestes oscil·lacions són irregulars i es detecten en elèctrodes sobre els quals es formen capes superficials. El coure és un metall del qual s'ha estudiat àmpliament el seu comportament oscil·latori, en particular en medis fosfòric i clorur (Albahadily i Schell, 1988; Bassett i Hudson, 1989). En treballs recents (Fricoteau, Gu i Faidy, 1992; Gu, Chen i Fahidy, 1992), s'ha aplicat la teoria del moviment brownià fraccionari (Mandelbrot i van Ness, 1968) per a dilucidar el comportament oscil·latori d'aquest metall, la qual permet calcular l'anomenat exponent de Hust, relacionat amb la dimensió fractal. L'estudi de l'electrodissolució del níquel, en medi àcid sulfúric, ha portat a confeccionar un diagrama detallat de bifurcacions de la dinàmica del procés (Lev *et al.*, 1988; Haim *et al.*, 1992). L'efecte de les condicions d'agitació s'ha analitzat recentment en el curs de la dissolució anòdica del ferro (D'Alba i Di Lorenzo, 1989). El comportament anòdic del ferro és bastant complex (Diem i Hudson, 1987). Per tal de caracteritzar les oscil·lacions s'han calculat les dimensions dels atractors, i s'han obtingut valors entre 2,4 i 6,0, segons el potencial de treball. També s'han estudiat altres efectes, com el de l'àrea de l'elèctrode.

Durant el procés d'oxidació, la superfícies dels metalls poden ser atacades localment; aleshores s'origina moltes vegades la

formació de “picadures”, que és una de les formes severes de corrosió. Les picadures rarament estan distribuïdes de manera uniforme i, a més, mostren una gran varietat de grandàries, formes i profunditats. En el curs del creixement de les picadures durant la corrosió de certs metalls també s'ha posat de manifest el comportament caòtic del sistema. Per a la plata, el corrent varia amb l'invers de l'arrel quadrada del temps (Corcoran i Sieradzki, 1992), i a determinades profunditats de picadura apareixen oscil·lacions tant periòdiques com caòtiques, relacionades amb la dinàmica de corrosió.

L'aplicació dels conceptes fractals a la forma de les picadures experimentals ha permès distingir entre l'estructura i la textura del contorn de les picadures (Costa, Sagués i Vilarrasa, 1991). A baixa resolució es descriu l'estructura rugosa del perfil de la picadura, mentre que a resolució intermèdia dóna compte de la textura. Així les dimensions fractals corresponents permeten obtenir una descripció quantitativa de la picadura. D'altra banda, la geometria fractal ha portat també a caracteritzar la profunditat de les picadures mitjançant l'evaluació de la dimensió fractal a distints nivells (Costa i Vilarrasa, 1992; 1993). A tal efecte s'analitzen els canvis de geometria de la picadura a diverses profunditats, de manera que l'estudi s'exten a tres dimensions. La dimensió fractal augmenta lleugerament en passar a nivells més baixos, la qual cosa suggereix que la picadura és més irregular en penetrar a l'interior del material. Els fractals han permès també estudiar la distribució superficial de picadures de l'acer inoxidable sotmès a l'acció agressiva d'una atmosfera marina (Vilarrasa i Costa, 1996). L'anàlisi de la variació del nombre mitjà de picadures a l'entorn de cadascuna d'aquestes en funció de la grandària d'aquest entorn posa de manifest una distribució fractal, la dimensionalitat de la qual depèn lleugerament del temps durant el qual ha estat exposat el material. S'ha observat que la relació àrea-perímetre de les picadures revela certa informació pel que fa a la superfície corroïda (Vilarrasa i Costa, 1996 b).

Recentment s'ha publicat un interessant estudi on s'analitzen els canvis que experimenta el perfil superficial en el curs de la corrosió de l'alumini (Trethewey *et al.*, 1993). També es comparen els resultats fractals amb els de paràmetres convencionals de rugositat i es discuteix l'aplicabilitat del model a l'atac localitzat. En un treball posterior (Trethewey *et al.*, 1993 b), s'analitzen les tècniques experimentals pel càlcul de perfils superficials en relació amb la geometria fractal.

Aspectes cinètics

La majoria de reaccions químiques de la naturalesa es fan en medis heterogenis. Només cal pensar que qualsevol procés geoquímic o bioquímic té lloc en porus, membranes o altres punts específics. Així, els arbres intercanvien aigua i sals a través de la superfície de les arrels i la sang bescanvia l'oxigen de l'aire a la superfície dels alvèols pulmonars. Hi ha també reaccions no naturals, entre aquestes molts processos industrials, que són de tipus heterogeni. Per exemple, el cracking catalític de fraccions del petroli, el tractament de minerals o determinats processos electroquímics que tenen lloc a la interfície elèctrode-electròlit. En l'estudi d'aquestes reaccions, a més de considerar el tancament i formació d'enllaços, l'estereoquímica i el perfil energètic del canvi, s'ha de tenir en compte l'estructura i la geometria del medi on es desenrotlla la transformació química.

Malgrat la seva importància, les característiques dels medis de reacció no es coneixen com cal, a causa possiblement de la gran complexitat de les seves geometries. Els catalitzadors metàl·lics són agregats compactes desordenats, amb estructures cristal·lines trencades, i el suport de moltes reaccions, com l'alúmina o el negre de carbó són materials molt porosos, amb un gran àrea superficial. La descripció tradicional d'aquests sistemes es basa en la distribució de formes i grandàries del porus, l'àrea superficial i la tortuositat del medi. Però aquests aspectes tenen un cert grau de subjectivitat, ja que estan

assentats sobre suposicions particulars per a cada sistema. És bo, per tant, trobar un procediment de descripció de la geometria de sistemes heterogenis que sigui representatiu i d'aplicació general.

Els materials que donen suport a les reaccions químiques heterogènies presenten geometries molt semblants a les de certs objectes fractals. Per exemple, les imperfeccions cristal·lines o l'estructura laminar dels grafit recorden els plans de l'escala del diable, les superfícies defectuoses dels diamants s'assemblen al tamís de Sierpinski. Cal pensar, per tant, que la geometria fractal pot ser un eina eficaç per a la cinètica química heterogènia, que permeti descriure el procés en termes de dimensions no senceres del medi.

Adsorció sobre superfícies fractals. L'àrea efectiva de la superfície porosa on esdevé un fenomen d'adsorció depèn de la grandària de les espècies que hi prenen part. És clar que la geometria de la superfície té un efecte sobre la velocitat d'una reacció heterogènia. Les forces de van der Waals ocasionen fenòmens de *fisisorció*, pels quals les molècules d'un fluid recobreixen una superfície físicament accessible. En canvi, les interaccions covalents, més fortes, provoquen la *quimisorció*, la qual es manifesta en llocs superficials específics, de manera que tan sols en una part de la superfície total es formen enllaços veritablement químics amb les molècules del fluid.

La manera més senzilla d'explicar la fisisorció és suposar la formació d'una monocapa de molècules, on l'energia implicada és la mateixa en tots els punts i independent del recobriments. L'expressió matemàtica assolida s'anomena *isoterma de Langmuir*. Però sovint es formen capes múltiples, i s'assoleix un equilibri adsorció-desadsorció; l'isoterma corresponent es coneix com *BET* (Brunauer, Emmett i Teller). En el cas d'una superfície fractal cal modificar aquestes relacions matemàtiques i incloure-hi les característiques geomètriques. Així s'obtidràn equacions per a calcular la dimensió fractal del

material suport a partir de les dades d'adsorció. La quimi-sorció acostuma a formar enllaços als cantons o als angles del material adsorbent, i per aquesta raó cal esperar dimensions inferiors a 2. D'altre banda, s'ha de tenir en compte la naturalesa de la molècula adsorbida, la reactivitat de la qual pot no ser igual en tots els punts de la superfície fractal.

Reaccions a les superfícies. Són moltes les reaccions que es realitzen a les superfícies, però tan sols comentarem el cas de reaccions unimoleculares d'espècies adsorbides a la superfície d'un metall, i en particular quan aquesta superfície actua com a un catalitzador. Com en tota reacció cal distingir diverses etapes, una de les quals és la mateixa reacció química. Si aquesta és l'etapa determinant de la velocitat i depèn del grau de recobriment de cada espècie, la velocitat del procés és proporcional a aquests recobriments. L'activitat del catalitzador és funció del recobriment, i si aquest té característiques fractals, l'activitat es pot expressar mitjançant una *dimensió de reacció* definida empíricament. La dimensió de reacció s'interpreta com la dimensió fractal efectiva del sistema respecte a la reacció. En principi sembla que el seu valor hauria de ser inferior al de la dimensió fractal de la superfície, però resulta experimentalment que varia dintre d'un ampli interval. S'han obtingut valors inferiors, iguals i superior al de la dimensió fractal de la superfície.

El concepte de dimensió de reacció s'ha aplicat a la dissolució de les drogues, un procés de gran interès farmacològic ja que d'aquest depèn la bioassequibilitat de la droga. Cal tenir en compte que, a més de la solubilitat, el procés de dissolució és funció d'altres paràmetres de la partícula de droga, com la morfologia i l'àrea superficials, porositat, distribució de grandàries, forma de la partícula i coeficient de difusió del material dissol (Avnir, Gutfraind i Farin, 1994). En introduir aquests termes a l'equació cinètica s'obté l'expressió fractal del procés, on es pot veure que la dimensió de reacció és igual a la dimensió fractal quan les partícules de droga tenen baixa

porositat i són poc solubles. Aquests conceptes són de gran interès pràctic.

Aquests conceptes han permès també dilucidar els curs de fenòmens electroquímics. Ja que que la reacció té lloc en una interfície, les característiques de la superfície de separació juguen un paper cabdal en el desenvolupament del procés. Així s'han establert relacions numèriques entre les propietats macroscòpiques de la reacció i la morfologia de l'elèctrode, les quals posen de manifest el caràcter fractal de la interfície. Molt sovint interessa un corrent elevat, per exemple en un procés de la generació d'electricitat o en una reacció d'electrosíntesi, per a la qual cosa cal augmentar la superfície de l'elèctrode. Una forma pràctica per a aconseguir-ho és l'ús d'elèctrodes porosos, en els quals s'obté una àrea màxima per unitat de volum. La geometria fractal que freqüentment presenten els elèctrodes porosos, ha facilitat l'estudi dels comportaments de certs sistemes electròdics, i els ha expressat amb equacions que inclouen una dimensionalitat fractal.

Per investigar reaccions electroquímiques ha estat particularment efectiva l'aplicació dels conceptes de la dinàmica no lineal. La sensibilitat i precisió de les mesures de corrents i de potencials elèctrics i la possibilitat del seu control, ha permès dur a terme experiments electroquímics que són dels més representatius de la teoria bifurcacions i caos. Així s'han pogut comprovar previsions assolides teòricament.

MODELS DE SISTEMES FRACTALS

Per tal de comprendre millor i explicar correctament les complicades estructures fractals de la naturalesa es pot recórrer a la modelització. Modelitzar és una tasca corrent de l'activitat científica que permet construir una imatge que representa determinats aspectes de la realitat experimental. Freqüentment es treballa amb models matemàtics amb els quals, amb l'ajut d'equacions diferencials, es lliguen la resposta d'un sistema (fenomen observat) amb l'estímul imposat (condició d'observació). La resolució d'aquestes equacions no sempre és senzilla i s'ha d'acudir a mètodes numèrics, encara que de vegades el procediment resulta enfarfegador i llarg.

Afortunadament, avui es disposa de l'ordinador per dur a terme el treball de càlcul. Amb el progressiu augment de la seva velocitat i de la capacitat de memòria, l'ordinador s'ha convertit en un eina eficient i familiar del científic, tal com s'esmentava abans. D'aquesta manera, el modelat i la corresponent simulació per ordinador ha passat a ser un mètode de treball a l'abast de la investigació, que permet l'estudi de molts sistemes complexos on els càlculs analítics resulten prohibitius.

En el camp dels fractals, els models idealitzats i la seva simulació han permès explorar estructures i dilucidar el comportament de molts sistemes a l'espai i amb el temps. Amb l'aplicació al moviment aleatori de les partícules, i algunes normes generals que regulen la seva incidència en els processos fisicoquímics, s'han formulat models senzills que imiten geometries fractals i que reproduïxen molts fenòmens observats en els materials reals (vegeu, per exemple, Fleischman *et al.*, 1990; Bunde i Havlin, 1991; Gouyet, 1992; Bunde i Havlin, 1994). Dins d'aquest marc dels sistemes materials, a continuació es donen alguns exemples que il·lustren les noves pautes per ecarrilar l'ordenament de diversos aspectes del desordre aparent dels sistemes naturals.

Model d'Eden

Una manera molt senzilla d'explicar el fenomen de la formació d'agregats naturals és l'aplicació del *model d'Eden*, així anomenat en honor al seu autor. Inicialment va ser proposat per reproduir el creixement cel·lular en la proliferació dels tumors (Eden, 1961). És el primer model que aplicà la simulació per ordinador a aquest problema. Després s'usà per a l'anàlisi de fenòmens molt diversos com el desplegament d'epidèmies en les poblacions o de plagues en els boscos.

A la versió original del model, el procés de creixement s'inicia en un lloc únic, *llavor*, que està envoltat de posicions lliures, les quals són els possibles llocs de creixement. Un d'aquests llocs, triat a l'atzar, passa a formar part de l'agregat, i les posicions veïnes d'aquests dos llocs són els nous emplaçaments possibles de creixement. El procediment es repeteix a cada iteració. El model és evidentment molt simple, però capaç de donar agregats molt grans amb l'ús d'un algorisme bastant senzill. L'estructura que s'obté és compacta, ja que els llocs interiors lliures s'ocupen en les successives iteracions, i el seu contorn pot resultar complex (Hermann, 1986). Per tal d'aplicar el model d'Eden a l'estudi de les interfícies, cal fer el creixement de l'agregat en una línia (Kertész i Wolf, 1988).

Camí aleatori

El desplaçament lliure de partícules fins quedar fixades en posicions adjacents és una forma particularment fàcil, i freqüent a la naturalesa, de dur a terme un procés d'agregació. El model més elemental per descriure el desplaçament d'una partícula sotmesa a un moviment aleatori o similar en els sistemes reals és el del *camí aleatori*, en anglès conegut com RW, *random walk* (Pearson, 1905).

En la seva forma més simple el desplaçament té lloc en una única dimensió, de manera que la partícula es pot moure un

lloc endavant o un lloc endarrera en cada moment, cada pas té igual probabilitat i és independent de l'anterior. Cal pensar també que les partícules es moguin aleatòriament sobre una superfície o dins un volum. La probabilitat per a cada pas dependrà de que la partícula pugui o no tornar als punts on ja ha estat. Com és lògic, en cada cas s'han d'introduir hipòtesis addicionals per tal de fixar les condicions particulars del sistema a estudiar.

El model del camí aleatori ha demostrat ser força efectiu per a explicar el creixement d'estructures lineals o amb forma de branques. Per exemple, la polimerització, on un monòmer amb dos o més llocs per a formar enllaços, pot donar polímers lineals o brancats, respectivament. Les simulacions corresponents han desenrotllat estructures bi i tridimensionals, i han permès analitzar les dimensions fractals assolides (Avnir, 1989; Bunde i Avlin, 1994; Barabàsi i Stanley, 1995).

Agregació limitada per difusió

El creixement natural d'una estructura en una posició determinada està governat per efectes locals i també per les condicions operatòries del sistema. Un exemple és el dels electrodipòsits catòdics d'ions metàl·lics. En aquest cas, les partícules (ions) es difonen aleatòriament cap a una superfície (càtode) on queden fixades (dipositats) sota determinades condicions (efectes del camp elèctric, del potencial, etc.). El procés es pot simular amb el model d'*agregació limitada per difusió*, en anglès DLA, *diffusion-limited aggregation*, que consisteix en el creixement d'una estructura a partir d'una partícula inicial mitjançant addicions exteriors a aquesta, sense cap reorganització de l'estructura formada (Witten i Sander, 1981, 1983). L'estructura generada per DLA a partir d'una partícula inicial és força semblant a les colònies d'incubacions obtingudes per inoculació de superfícies d'agar amb un cert contingut de peptona com a nodridor. Aquestes estructures experimentals tenen una dimensió fractal de

l'ordre de 1,72, en concordança amb els resultats de les simulacions.

El model és un dels més importants per explicar l'agregació i ha inspirat un gran nombre de treballs. És el punt de partida de diversos algorismes per a programes d'ordinador on s'usen freqüentment tècniques de simulació de Monte Carlo.

Un model de particular interès per a explicar els electro-dipòsits és el de l'agregació simultània multiparticular sobre una línia activa (Sagués i Costa, 1989). L'algorisme considera una xarxa bidimensional, on una fracció de llocs estan inicialment ocupats per partícules mòbils d'acord amb un paràmetre que actua com a concentració. El costat inferior de la xarxa se suposa que és la línia activa, sobre la qual s'inicia l'agregació, i el superior es pot mantenir a concentració fixa per tal de simular el si de la dissolució. Les partícules mòbils experimenten una difusió simultània en forma d'un recorregut aleatori isotròpic, amb la restricció òbvia que dues partícules no poden ocupar la mateixa posició al mateix instant. A cada iteració totes les partícules que resten mòbils prenen a l'atzar una nova posició. Si la nova posició correspon a un lloc d'agregació, la partícula queda fixa i passa a formar part de l'agregat amb una probabilitat que depèn d'un paràmetre prefixat. Estan previstes les condicions d'entorn periòdiques per a els costats transversals, de manera que les partícules que abandonen la xarxa per un costat apareixen per l'altre. La dimensió fractal és de 1,7. En comparar aquesta estructura simulada amb l'obtinguda en l'electrodipòsit experimental del zinc, es veu que presenten una gran semblança. Al model s'observa que les branques que destaquen agafen més partícules, i així s'impedeix que creixin les branques més petites. Així també té lloc a la naturalesa, on l'arbre gran ofega els petits, i destorba el creixement d'aquests al seu voltant.

El model DLA es pot aplicar a l'estudi de la corrosió, per la qual cosa s'ha de simular el fenomen com un procés aleatori generalitzat de dissolució. Les dimensions fractals calculades

per a les estructures simulades s'ajusta als valors trobats en experiments de corrosió metàl·lica (Aurian-Blajeni, Kramar i Tomkiewicz, 1987).

Aquest model és també útil per a analitzar la profunditat de les picadures de corrosió. Els fenòmens de corrosió d'aliatges per picadures s'ha investigat mitjançant versions modificades del model, com l'anomenat *anti-DLA*, amb el qual s'expliquen els perfils de les picadures considerant que la degradació del material està controlada per la difusió. S'observa un llindar de canvi de mecanisme, en què el procés limitat per difusió passa a ser controlat pel procés de dissolució, que dona lloc a una variació de la relació entre la grandària i la profunditat de la picadura (Nagatani, 1992). Per a la simulació de l'atac cap a l'interior del metall i que provoqui les picadures, s'ha dissenyat una modificació del model DLA, i s'ha utilitzat el mètode de Monte Carlo (Reigada, Sagués i Costa, 1993). El model contempla l'efecte de la concentració de l'espècie agressiva i del pH a l'interior de la picadura, així com la agitació externa del sistema. L'avanç de l'atac està basat en un procés elemental de "tunnelling". Així, amb un nombre reduït de paràmetres de control, interpretables fàcilment en funció de variables fisicoquímiques del procés, es poden reproduir els règims límits de la corrosió (Reigada, Sagués i Costa, 1994b). L'evolució del procés d'atac porta a diferents tipus de picadures, segons les condicions inicials i paràmetres imposats. El creixement de la picadura s'analitza en funció d'aquestes condicions, tan des del punt de vista de la resposta electroquímica com de la seva morfologia. Aquest últim aspecte, pel que fa als perfils i a les distribucions locals, queda descrit en termes de la geometria fractal (Reigada, Sagués i Costa, 1994).

Percolació

Un considerable nombre de processos que tenen lloc en sistemes desordenats, com el transport en medis heterogenis,

la dissolució de metalls i fins i tot els incendis forestals, es poden estudiar amb el model *percolació* (Newman *et al.*, 1992). Introduït el 1957 per Broadbent i Hammersley, el mot té el seu origen a l'analogia amb la possibilitat de passar un fluid a través d'un medi porós; per exemple, el fluid aigua i el medi cafè.

Aquest model considera una xarxa ocupada per partícules de diferents classes i distribuïdes aleatòriament, on les partícules d'una mateixa classe poden quedar aïllades o formar agrupacions, que fins i tot poden estar connectades. Supposeu, per exemple, dues classes de partícules, una que deixa passar l'electricitat i l'altre no, és a dir, unes partícules són conductores i les altres, aïllants. Un corrent elèctric podrà passar entre conductors veïns, però si el nombre de conductors és petit, en front del de no conductors, no hi ha possibilitat d'establir un camí entre dos punts a través de la xarxa, i el sistema es comportarà com un aïllant. Si el nombre de partícules conductores és gran, hi podrà haver connexió entre dos punts extrems, i el corrent passarà d'un a l'altre, fins i tot per diversos camins, i per tant, es tracta d'un material conductor. D'aquesta manera el corrent pot "percolar" d'un extrem a l'altre de la xarxa.

La simulació del procés de dissolució selectiva d'aliatges s'ha realitzat també mitjançant el model de percolació; per exemple, pel cas de percolació d'un aliatge binari (Sieradzki *et al.*, 1989). En el treball es discuteixen les dimensions fractals calculades en funció dels paràmetres introduïts al model i les prediccions es comparen amb els resultats d'aliatges reals. Aquest model s'ha aplicat també a la dissolució o corrosió d'aliatges en emprar un àcid com a agent agressiu. Les estructures fractals tenen una dimensió de 1,51, que lliga amb les dades experimentals d'atac d'aliatges de níquel-molibdè (Ding i Liu, 1990). El model de percolació resulta útil també per estudiar la passivació d'aliatges (Qian *et al.*, 1990). Per tal de simular el creixement bidimensional de les picadures, a la superfície del metall, s'ha construït un algorisme basat en la

percolació amb retroalimentació, on es considera que l'agressivitat de l'electròlit no és constant i que la corrosió ve restringida per altres reaccions químiques que acompanyen el procés (Balázs i Gouyet, 1995). El model de percolació s'ha utilitzat per a preveure processos de corrosió intergranular (Wells *et al.*; 1989). En aquest cas se suposa que la corrosió té lloc als intersticis entre els grans del material, originen un recorregut intergranular que dona pas als agents agressius i permet l'avanç del procés. El càlcul numèric del nombre de "passos" necessaris per a obtenir un camí continu, de banda a banda del material, s'ha dut a terme mitjançant el mètode de Monte Carlo en dues i tres dimensions. L'avaluació del límit de percolació, és a dir, el nombre de grans necessaris per tal que el camí sigui continu, permet disposar d'un criteri de previsió del fissurament per corrosió sota tensió. Les prediccions del model de percolació concorden amb els resultats assolits a l'acer inoxidable mitjançant altres mètodes experimentals.

Altres models

A més del modelat de les estructures fractals a l'espai, cal també esmentar la simulació de fenòmens fractals temporals. L'evolució temporal de les estructures tractades als apartats anteriors presenta aspectes dinàmics d'interès. En particular cal pensar en els processos que tenen lloc a l'interfase entre dos medis, com la catàlisi heterogènia o les reaccions electroquímiques. Per a reaccions electròdiques, com els processos de dissolució anòdica de metalls, s'han desenvolupat alguns models. En general es suposa que el procés anòdic té lloc a través d'una etapa intermèdia, a la qual els ions queden adsorbits a l'electrode, per passar a la dissolució en una etapa posterior (Talbot i Oriani, 1985). També i s'ha considerat els possibles trànsits entre els estats actiu i passiu, la qual cosa porta a respostes oscil·ladores (Wang *et al.*, 1990). El tema s'ha revisat recentment per diversos autors (Hudson i Basset, 1991; Costa, 1991; Hudson i Tsotsis, 1994).

COMENTARI FINAL

Les ciències clàssiques han acumulat en el curs del temps un cabal de coneixences, extens i profund, però no sempre amb el grau de congruència que exigeix el saber científic. Bon nombre de fets experimentals no poden ser explicats mitjançant la metodologia tradicional, i queden com a excepcions, per la qual cosa durant molts anys han estat considerats com a fenòmens curiosos de sistemes insòlits.

Per tal d'esbrinar aquests fenòmens atípics, a les darreres dècades s'han desenvolupat nous procediments per al seu tractament. Entre aquestes cal destacar les tècniques d'estudi dels sistemes dinàmics, que han demostrat ser unes eines de treball idònies per a l'anàlisi eficient i científic de fets no habituals, i han permès arribar a resultats fins ara inesperats.

Hem comentat con el comportament no lineal de molts sistemes reals es pot reproduir mitjançant la construcció de formes complexes per iteració de formes senzilles, i com una equació matemàtica no lineal pot explicar una evolució caòtica, imprevisible amb la metodologia clàssica. Hem vist que hi ha sistemes que tendeixen a un atractor senzill, com l'atractor de punt fix, o a un cicle límit, conseqüència del seu comportament oscil·latori, i també que determinats sistemes fan cap a un atractor estrany. Fins i tot, de vegades, els comportaments senzills no són més que la punta de l'iceberg d'un caos. Cal, doncs, una reformulació de conceptes i tractar els sistemes, i els fenòmens que hi tenen lloc, amb les noves tècniques de treball. L'evolució no-lineal dels sistemes i la seva sensibilitat a les condicions inicials ens porten a les formes que avui anomenem fractals. Aquestes formes poden presentar una evident complexitat externa, però moltes vegades aquesta no és altra cosa que el revestiment d'una simplicitat interior. Algunes vénen descrites aquí, on també s'ha comentat la formulació d'alguns dels models significatius per interpretar determinats sistemes reals, tan pel que fa a

l'aspecte temporal com a les formes de l'espai. La simulació de models per ordinador l'hem utilitzat per a algunes dinàmiques fisicoquímiques, però també ajuden a entendre els fenòmens de molt diferents branques del saber.

En els últims anys s'ha aconseguit, doncs, un important avanç. En aquesta presentació no ha estat possible donar compte de totes les aportacions recents; els exemples de fenòmens fisicoquímics recollits aquí són una mostra que recolza les possibilitats de les noves idees. Amb aquests exemples podem veure com les ciències experimentals, i la Química en particular, són un bon camp d'aplicació de les teories de la dinàmica no lineal. Per això aquí s'ha centrat l'atenció a l'ús de fractals a la Química, si bé cal tenir present que la metodologia és d'aplicació general a les altres ciències, tan diferents com l'Astronomia, la Biologia, la Sociologia o l'Economia.

D'altra banda, s'ha procurat també posar de manifest la necessitat de dur a terme nous experiments que contestin les moltes preguntes teòriques que avui resten sense resposta. Per a tal cosa cal descobrir el lligam entre l'estructura de les oscil·lacions i la naturalesa física i química dels processos que les generen. Això probablement farà necessari traspasar les fronteres tradicionals entre la cinètica química, la ciència de les superfícies, el transport de matèria i altres branques de la ciència. És clar que per tal d'assolir aquest repte cal programar, dissenyar i dur a terme un ampli ventall de recerques, la realització de les quals requereix la participació i la col·laboració dels investigadors de molt diverses especialitats.

Finalment, esperem haver aclarit la idea que, malgrat la varietat de comportaments de la naturalesa, hi ha uns principis generals que governen els sistemes, materials o immaterials, independentment de la branca del saber on siguin inclosos. I, també, que aquests principis són els que ens permeten preveure que les aparents complexitat, irregularitat i aleatorietat dels sistemes amaguen la seva senzillesa, simplicitat i ordre.

Agraïment

Vull fer constar el meu agraïment a tots als que, en un moment o altre de la meva vida universitària, han contribuït a la meva formació i al desenvolupament del meu treball. Als meus mestres, als col·laboradors i als estudiants, que m'han donat el seu saber, m'han afavorit amb el seu entusiasme i m'han comunicat les seves inquietuds, el meu reconeixement de gratitud. Els noms d'alguns, amb els que he estudiat el tema dels fractals, estan recollits en les referències bibliogràfiques. Amb altres he treballat temes relacionats de la Química Física i de l'Electroquímica. Però sense cap dubte, els uns i els altres han contribuït directe o indirectament amb el seu el suport a la realització de bona part de la tasca aquí exposada. Sense la col·laboració de tots ells avui no hauria pogut fer aquesta exposició.

Moltes gràcies per la seva atenció i paciència.

BIBLIOGRAFIA

- Abraham, N.B., Albano, A.M., Passamante, A. i Rapp, P.E. (1989), *Measures of Complexity and Chaos*, NATO Series, Plenum, Nova York.
- Albahadily, F.N. i Schell, M. (1988), *J. Chem. Phys.*, **88**, 4312.
- Argoul, F. i Arneodo, A. (1990), *J. Phys. France*, **51**, 2477.
- Aurian-Blajeni, B., Kramer, M. i Tomkiewicz, M. (1987), *J. Phys. Chem.*, **91**, 600.
- Avnir, D. (1989), Ed., *The Fractal Approach to Heterogeneous Chemistry*, Wiley, Nova York.
- Avnir, D., Gutfraind, R. i Farin, D. (1994), en A. Bunde i S. Havlin, Eds., *Fractals in Science*, Springer-Verlag, Berlin, p. 229.
- Baker, G.L. i Gollub, J.P. (1990), *Chaotic Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Balázs, L. i Gouyet, F.-J. (1995), *Physica A*, **217**, 319. *Physica D*, **35**, 289.
- Barabási, A.-L. i Stanley, H.E. (1995), *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Barnsley, M. (1988), *Fractals Everywhere*, Academic Press, Boston.
- Barrallo, J. (1992), *Geometria fractal*, Anaya, Madrid.
- Bassett, M.R. i Hudson, J.L. (1989), *J. Chem. Phys.*, **93**, 2731. *Physica D*, **35**, 289.
- Bellacicco, A. (1990), *La rappresentazione frattale degli eventi*, NIS, Roma.
- Berezin, A.A. (1993), *Isotopic Effects and Corrosion of Materials*, *Materials Chem. and Phys.*, **34**, 91.
- Bunde, A. i Havlin, S. (1991), Eds., *Fractals and Disordered Systems*, Springer-Verlag, Berlin.
- Bunde, A. i Havlin, S. (1994), Eds., *Fractals in Science*, Springer-Verlag, Berlin.
- Cattarin, S. i Tributsch, H. (1990), *J. Electrochem. Soc.*, **137**, 3475.
- Clausius, R. (1850), *Theorie mecanique de la chaleur*, citado por G. Poggendorff (1850), *Annalen der Physik und Chemie*, **79**.
- Corcoran, S.G. i Sieradzki, K. (1992), *J. Electrochem. Soc.*, **139**, 1568.
- Costa, J.M. (1981), *Fundamentos de Electrónica*, Alhambra, Madrid.
- Costa, J.M., Sagués, F. i Vilarrasa, M. (1991), *Phys. Rev. A*, **43**, 7057.
- Costa, J.M., Sagués, F. i Vilarrasa, M. (1991), *Corrosion Sci.*, **32**, 665.

- Costa, J.M. } (1991), *Non-Equilibrium Electrochemical Phenomena*, en *Port. Electrochim. Acta*, **9**, 665.
- Costa, J.M. i Vilarrasa, M. } (1992), en P.J. Tunturi, Ed., *Eurocorr '92*, Helsinki, Vol 1, p. 61.
- Costa, J.M. i Vilarrasa, M. (1993), *farbe + lake.*, **99** (3), 253.
- Çampel, A.B. (1993), *Applied Chaos Theory*, Academic, Nova York.
- D'Alba, F., Di Lorenzo, S. i Lucarini, C. (1989), *Electrochim. Acta*, **34**, 709.
- Daufiné, A. (1995), *Chaos, fractals et dynamiques en Géographie*, Reclus, Montpellier.
- Diem, C.B. i Hudson, N. (1987), *AIChE J.*, **33**, 218.
- Ding, J.R. i Liu, B.X. (1990), *J. Phys. Condens. Matter*, **2**, 1971.
- Eden, M. (1961), en F. Neyman, Ed., *Proceedings of the 4th Symposium on Mathematical Statistics and Probabilities*, **4**, Berkeley, p. 223.
- Fahidy, T.Z. i Gu, Z.H. (1995), en R.E. White *et al.*, Eds., *Modern Aspects of Electrochemistry*, Plenum, Nova York, p. 383.
- Family, F. i Landau, D.P. (1984), Eds., *Kinetics of Aggregation and Gelation*, North-Holland, Amsterdam.
- Fechner, G.Th. (1828), *Schweigg J. für Chemie Physik*, **53**, 129.
- Feder, J. (1988), *Fractals*, Plenum, Nova York.
- Fleischmann, M., Tildesley, D.J. i Ball, R.C. (1990), Eds., *Fractals in the Natural Science*, VCH, Princeton University Press, Princeton.
- Flos, J., (1995), Ed., *Ordre i caos en ecologia*, Universitat de Barcelona Publicacions, Barcelona.
- Fricoteau, P., Gu, Z.H. i Faigy, T.Z. (1992), *Electroanal. Chem.*, **324**, 161.
- Glansdorff, P. i Prigogine, I. (1970), *Entropy, Stability and Structure*, Wiley, Nova York.
- Gleick, J. (1987), *Chaos. Making a New Science*, Viking, Nova York.
- Gouyet, J-F. (1992), *Physique et structures fractales*, Masson, Paris.
- Gray, P., i Scott, S.K. (1990), *Chemical Oscillations and Instabilities*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Gu, Z.H., Chen, J. i Faigy, T.Z. (1992), *Electrochim. Acta*, **37**, 2637.
- Guzman, M. de, Martín, M.A., Morán, M. i Reyes, M. (1993), *Estructuras fractales i sus aplicaciones*, Labor, Barcelona.
- Haim, D., Lev, O., Pismen, L.M. i Sheintuch, M. (1992), *J. Phys. Chem.*, **96**, 2676.
- Haken, H. (1978), *Synergetics*, 2^a ed., Springer-Verlag, Berlin.
- Halsey, T.C., Jensen, M.H., Kadanoff, L.P., Procaccia, I. i Sharaiman, B.I. (1986), *Phys. Rev. A*, **33**, 1134.

- Harrison, A. (1995), *Fractals in Chemistry*, Oxford University Press, Oxford.
- Hastings, H.M. i Sugihara, G. (1994), *Fractals*, Oxford University Press, Oxford.
- Hermann, H.J. (1986), *Phys. Rep.*, **136**, 154.
- Hudson, J.L. i Basset, M.R. (1991), *Oscillatory Dissolution of Metals*, en D. Luss i N.R. Amundson, Eds., *Rev. in Chem. Engin.*, Londres.
- Hudson, J.L. i Tsotsis, T.T. (1994), *Electrochemical Reaction Dynamics: A Review*, *Chem. Eng. Sci.*, **49**, 1493.
- Jou, D. i Llebot, J.E. (1989), *Introducción a la Termodinámica de los procesos biológicos*, Labor, Barcelona.
- Joule, J. P. (1844), *Philos. Mag.*, **24**, 106.
- Kaye, B.H. (1989), *A Random Walk Through Fractal Dimensions*, VCH, Weinheim.
- Kaye, B.H. (1993), *Chaos and Complexity*, VCH, Weinheim.
- Kertész, J. i Wolf, D.E. (1988), *J.Phys.*, **A21**, 747.
- Lev, O., Wolffberg, A., Sheintuch, M. i Pismen, L.M. (1988), *Chem. Eng. Sci.*, **43**, 1359.
- Lev, O., Wolffberg, A., Pismen, L.M. i Sheintuch, M. (1989), *J. Phys. Chem.*, **93**, 1661.
- Lorenz, E.N. (1963), *J. Atmospheric Sci.*, **357**, 130.
- Mahmeke, R., Schmelzer, J. i Röpke, G. (1992), *Nichtlineare Phänomene und Selbstorganisation*, Teubner, Stuttgart.
- Mandelbrot, B. i van Ness, J.W. (1968), *SIAM Rev.*, **10**, 422.
- Mandelbrot, B. (1982), *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, Nova York.
- Medio, A. (1992), *Chaotic Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Méhauté, A. Le (1990), *Les géométries fractales*, Hermès, Paris.
- Nagatani, T. (1992), *Phys. Rev. A*, **45**, 2480, R6985.
- Newman, R.C., Song, Q., Cottis, R.A. i Sieradzki, K. (1992), en R.S. Munn, Ed., *Computer Modeling in Corrosion*, ASTM, Philadelphia, 17.
- Olexov, A. i Treindl, L. (1990), *Electrochim. Acta*, **35**, 1095.
- Onsager, L. (1931), *Phys. Rev.*, **37**, 405; **38**, 2265.
- Pearson, K. (1905), *Nature*, **72**, 294.
- Peitgen, H.O. i Saupe, D., Eds. (1988), *The Science of Fractal Images*, Springer-Verlag, Berlin.

- Peitgen, H.O., Jürgens, H. i Saupe, D. (1992), *Fractals for the Classroom*, 2 Vols., Springer-Verlag, Berlin.
- Poincaré, J.H. (1890), *Acta Mathematica*, **13**, 1-270.
- Prigogine, I. (1947), *Etude thermodynamique des phénomènes irréversibles*, Desoer, Lieja.
- Qian, S., Newman, R.C. i Cottis, R.A. (1990), *J. Electrochem. Soc.*, **137**, 435.
- Reigada, R., Sagués, F. i Costa, J.M. (1993), en J.M. Costa i A.D. Mercer, Eds., *Progress in the Understanding and Prevention of Corrosion*, The Institute of Materials, Londres, Vol 1, p 407.
- Reigada, R., Sagués, F. i Costa, J.M. (1994), *J. Chem. Phys.*, **101**, 2329.
- Reigada, R., Sagués, F. i Costa, J.M. (1994b), *Roestvast Staal*, **3**, 19.
- Sagués, F. i Costa, J.M. (1989), *J. Chem. Ed.*, **66**, 502.
- Sagués, F., Mas, F., Vilarrasa, M. i Costa, J.M. (1990), *J. Electroanal. Chem.*, **278**, 351.
- Sagués, F. i Costa, J.M. (1990), *An. Quím.*, **86**, 704.
- Sagués, F., Costa, J.M., Mas, F., Vilarrasa, M. i López, L. (1991), en Blumen, A., Amann, A. i Gans, W. Eds., *Large-Scale Molecular Systems*, Plenum, Nova York, p. 557.
- Sazou, D. i Pagitsas, M. (1993), *Electrochim. Acta*, **38**, 835.
- Schroeder, M. (1991), *Fractals, Chaos, Power Laws*, Freeman, Nova York.
- Scott, S.K. (1991), *Chemical Chaos*, Oxford University Press, Oxford.
- Scott, S.K. (1994), *Oscillations, Waves and Chaos in Chemical Kinetics*, Oxford University Press, Oxford.
- Sieradzki, K., Corderman, R.R., Shukla, K. i Newman, R.C. (1989), *Phil. Mag. A*, **59**, 713.
- Sutter, R.M. i Wong, P.Z. (1989), *Phys. Rev. B*, **39**, 4536.
- Talbot, J.B. i Oriani, R.A. (1985), *J. Electrochem. Soc.*, **123**, 1545.
- Thompson, J.M.T. i Stewart, H.B. (1988), *Nonlinear Dynamics and Chaos*, Wiley, Nova York.
- Trethewey, K.R., Kenen, J.S., Sargeant, D.A., Haines, S. i Roberge, P.R. (1993), presentat al *32nd Annual Conference of Metallurgist*, Quebec.
- Trethewey, K.R., Keenen, J.S., Sargeant, D.A., Haines, S. i Roberge, P.R. (1993b), *Proceedings of 12 ICC*, NACE, Houston.
- Vicsek, T. (1989), *Fractal Growth Phenomena*, World Scientific, Singapor.

- Vidal, C. i Lemarchand, H. (1988), *La réaction créatrice*, Hermann, Paris.
- Vilarrasa, M. i Costa, J.M. (1996), *Eurocorr'96*, Niça, 1996.
- Vilarrasa, M. i Costa, J.M. (1996b), *13th International Corrosion Congress*, Melbourne, 1996.
- Wang, Y., Hudson, J.L. i Jaeger, N.I. (1990), *J. Electrochem. Soc.*, **137**, 485.
- Wells, D.B., Stewart, J. Herbert, A.W., Scott, P.M. i Williams, D.E. (1989), *Corrosion*, **45**, 649.
- Witten, T.A. i Sander, L.M. (1981), *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 1400.
- Witten, T.A. i Sander, L.M. (1983), *Phys. Rev. B*, **27**, 5686.

DISCURS DE CONTESTACIÓ
PER L'ACADÈMIC NUMERARI

EXCM. SR. DR. JOAN TRAYTER i GARCIA

Excm. Sr. President
Excms. i Il·lms. Senyors
Excms. Srs. Acadèmics
Senyores i Senyors

En nom de la Reial Acadèmia tinc l'honor de contestar el discurs d'ingrés del Dr. Josep Maria Costa a aquesta Institució.

Sempre s'ha dit, en aquestes circumstàncies i pel qui contesta com jo, en nom de la Reial Acadèmia, que és un gran honor la tasca de fer-ho, de rebre el nou membre d'aquesta acadèmia, tant com ressaltar la seva personalitat, com contestar la lliçó magistral amb la qual ens ha obsequiat. Aquest honor per mi és evident ja que fa més de 30 anys que conec el Dr. Costa i sóc un admirador seu com a pare de família, que em confià fa tants anys compartir l'educació dels seus fills.

Em complau significar tals circumstàncies per reflectir en aquests moments la vida d'un indiscutible gran científic i un

exemple de vida familiar en aquests moments tan socialment malmesa.

No solament s'ha distingit per les seves profundes investigacions i grans resultats científics, sinó també per la incontestable categoria com a professor universitari.

El seu curriculum-vitae es distingeix pel seu ingrés com a ajudant de classes pràctiques el 1956 a la Universitat de Barcelona.

Investigador distingit per les universitats de Cambridge (Anglaterra) i Michigan (Estats Units) (1962-63).

El 1971 va ingressar com a catedràtic numerari a la Universitat Autònoma de Barcelona, i el 1982 va passar a ser catedràtic de la Universitat de Barcelona.

És notable el nombre de publicacions que al llarg d'aquests anys ha realitzat, entre les quals destaquen més de cent articles científics i sis llibres.

Les seves línies de recerca principals són: reaccions de ions complexos, fenòmens de solvatació en dissolvents mixtos, comportament anòdic de metalls, electroquímica de compostos orgànics, corrosió atmosfèrica, i fenòmens de no-equilibri: estructures fractals.

Pertany i dirigeix diverses institucions nacionals i estrangeres de reconegut prestigi investigador.

Pel que fa a l'ordre de sistemes desordenats, que és el motiu del tema d'ingrés en aquesta Acadèmia, es conjuga plenament una profunda investigació científica amb una didàctica exemplar. La capacitat de predir el futur d'un sistema físic té una importància capital a la ciència. El camp del caos és un dels més joves i dels que més ràpidament es desenvolupen en la física d'avui. Ell, com a bon pedagog, ens fa anar de la realitat

quotidiana amb exemples econòmics, socials, de medicina..., a les més profundes entranyes del pensament humà causa-efecte i fa que siguin aquestes grans línies de la pedagogia, passant de la més important investigació científica a la realitat.

És a dir, en una nova manera de veure el món.

La capacitat de predir el futur d'un sistema físic té una importància capital en la ciència.

Donades les condicions inicials, és possible de calcular la trajectòria d'una pilota, l'òrbita d'un satèl·lit o el moviment d'un rellotge de pèndol.

Tan oblic és aquest tipus d'anàlisi en la física, que de vegades resulta temptador repetir l'afirmació del matemàtic francès del segle XVIII Pierre Simon de Laplace segons la qual: "*Donades les condicions inicials de l'univers, hom podria predir tot el seu futur en qualsevol instant*".

Deixant de banda altres tipus de consideracions, encara mancaria, malgrat tot, un obstacle fonamental per a la predicció del futur: *El caos*.

El significat adscrit al caos en física i en matemàtiques és anàleg en esperit, però més precís. Per exemple, un sistema que experimenta un moviment caòtic mai no es repeteix, sinó que, al contrari, fa contínuament alguna cosa diferent; així, el moviment pot semblar força aleatori i desordenat. Tanmateix, el moviment caòtic dista força de ser totalment desordenat i, en lloc d'això, presenta una estructura definida que resulta aviat aparent.

Un altre aspecte del caos, tal i com es presenta en física, és una sensibilitat extrema a les condicions inicials, de manera que fins i tot els més mínims errors en el mesurament de les condicions inicials d'un sistema caòtic duen a enormes errors en temps posteriors.

El camp del caos és un dels més joves i dels que més ràpidament es desenvolupen en la física d'avui. Hi ha molts nous aspectes del caos que esperen ser descoberts, però ja s'ha progressat molt.

La impredictibilitat inherent del temps atmosfèric és reconeguda com un exemple de moviment caòtic associat amb la transferència de calor en l'atmosfera. Mentre que les prediccions detallades a llarg termini resulten impossibles, les característiques generals de la meteorologia –el clima– estan ben representades per una *estructura caòtica* subjacent.

També sabem que molts mecanismes físics, que van des d'exemples tan banals com la caiguda de les gotes d'aigua d'una aixeta que perd, a casos més exòtics, com el moviment en tombarelles d'Hiperió, una lluna de Saturn, presenten aspectes caòtics. A més, es presenta caos en les fluctuacions de les poblacions animals de generació en generació, en circuits elèctrics, i fins i tot en els nostres propis cossos; sistemes com el cor i fins i tot el cervell mostren indicacions de comportament caòtic.

Malgrat que aquesta exposició ha estat una introducció molt breu a algunes de les característiques inusuals o extraordinàries del desordre ordenat conegut com a caos, resulta clar que la capacitat de predir el futur d'un sistema físic és quelcom que no es pot donar per descomptat.

I no només el caos proporciona als científics una nova manera de veure el món, i de descriure el comportament d'una àmplia varietat de sistemes, sinó que, a més a més les formes geomètriques fantàsticament complicades associades amb aquests sistemes tenen un gran atractiu estètic.

Finalment caldria recordar les paraules de l'estudiós francès del caos Dr. Ruelle:

“Aquests sistemes de corbes, aquests núvols de punts, de vegades evoquen galàxies o castells de focs, altres vegades es transformen en

floracions estranyes i torbadores. Hi ha tot un món de formes per explorar i d'harmonies per descobrir".

Evidentment, aquesta exploració està oberta a tots nosaltres.

Per tot això, aquesta Acadèmia es dignifica i se sent molt honrada en rebre-us com a un nou membre i us felicita esperant que la vostra col·laboració tingui dintre de l'Acadèmia un prestigiós contingut.

ÍNDIX

L'ORDRE DELS SISTEMES DESORDENATS

Introducció	9
Evolució dels sistemes	14
Predictibilitat. Comportament lineal.	
Comportament no-lineal.	
Sistemes dinàmics	21
Conceptes generals. Anàlisi de sistemes dinàmics.	
Caos.	
Fractals	28
Fractals deterministes. Fractals aleatoris. Dimensió fractal. Auto-semblança i auto-afinitat.	
Fractals naturals	37
Estructures fisicoquímiques. Aspectes cinètics.	
Models de sistemes fractals	47
Model d'Eden. Camí aleatori. Agregació limitada per difusió. Percolació. Altres models.	
Comentari final	54
Bibliografia	57
Discurs de contestació, per l'acadèmic	
Excm. Sr. Joan Trayer i Garcia	65

NOVES PUBLICACIONS DE LA REIAL ACADÈMIA DE DOCTORS

Directori 1991.

Los tejidos tradicionales en las poblaciones pirenaicas (Discurs de promoció a acadèmic numerari de l'Excm.Sr. Eduardo de Aysa Satué, Doctor en Ciències Econòmiques, i contestació per l'Excm.Sr. Josep Antoni Plana i Castellví, Doctor en Geografia i Història), 1992.

La tradición jurídica catalana (Conferència magistral del acadèmic de número Excm.Sr. Josep Joan Pintó i Ruiz, Doctor en Dret, en la Solemne Sessió d'apertura de curs 1992-93, que fou presidida per SS.MM. el Rei Joan Carles I i la Reina Sofia), 1992.

La identidad étnica (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Angel Aguirre Baztan, Doctor en Filosofia i Lletres, i contestació per l'Excm.Sr. Josep M. Pou d'Avilés, Doctor en Dret), 1993.

Es laboratoris d'assaig i el mercat interior; Importància i nova concepció (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Pere Miró i Plans, Doctor en Ciències Químiques, i contestació per l'Excm.Sr. Josep M^a Simón i Tor, Doctor en Medicina i Cirurgia), 1993.

Contribución al estudio de las Bacteriemias (Discurs d'ingrés de l'acadèmic corresponent Il.lm.Sr. Miquel Marí i Tur, Doctor en Farmàcia, i contestació per l'Excm.Sr. Manuel Subirana i Cantarell, Doctor en Medicina i Cirurgia), 1993.

Realitat i futur del tractament de la hipertròfia benigna de pròstata (Discurs de promoció a acadèmic numerari de l'Excm.Sr. Joaquim Gironella i Coll, Doctor en Medicina i Cirurgia, i contestació per l'Excm.Sr. Albert Casellas i Condom, Doctor en Medicina i Cirurgia i President del Col.legi de Metges de Girona), 1994.

La seguridad jurídica en nuestro tiempo. ¿Mito o realidad? (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. José Méndez Pérez, Doctor en Dret, i contestació per l'Excm.Sr. Angel Aguirre Baztán, Doctor en Filosofia i Lletres), 1994.

La transició demogràfica a Catalunya i a Balears (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Tomàs Vidal i Bendito, Doctor en Filosofia i Lletres, i contestació per l'Excm.Sr. Josep Ferrer i Bernard, Doctor en Psicologia), 1994.

L'art d'ensenyar i d'aprendre (Discurs de promoció a acadèmic numerari de l'Excm.Sr. Pau Umbert i Millet, Doctor en Medicina i Cirurgia, i contestació per l'Excm.Sr. Agustín Luna Serrano, Doctor en Dret), 1995.

Sessió necrològica en record de l'Excm.Sr. Lluís Dolcet i Buxeres, Doctor en Medicina i Cirurgia i Degà emèrit de la Reial Acadèmia de Doctors, que morí el 21 de gener de 1994. Enaltíren la seva personalitat els acadèmics de número Excms.Srs.Drs. Ricard García Vallès, Josep M^a Simón i Tor i Albert Casellas i Condom. 1995.

La Unió Europea com a creació del geni polític d'Europa (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Jordi Garcia-Petit i Pàmies, Doctor en Dret, i contestació per l'Excm.Sr. Josep Llorit i Brull, Doctor en Ciències Econòmiques), 1995.

La explosión innovadora de los mercados financieros (Discurs d'ingrés de l'acadèmic corresponent Il.lm.Sr. Emilio Soldevilla García, Doctor en Ciències Econòmiques i Empresariales, i contestació per l'Excm.Sr. José Méndez Pérez, Doctor en Dret), 1995.

La cultura com a part integrant de l'Olimpisme (Discurs d'ingrés com acadèmic d'honor de l'Excm.Sr. Joan Antoni Samaranch i Torelló, Marquès de Samaranch, i contestació per l'Excm.Sr. Jaume Gil i Aluja, Doctor en Ciències Econòmiques), 1995.

Medicina i Tecnologia en el context històric (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Felip Albert Cid i Rafael, Doctor en Medicina i Cirurgia, i contestació per l'Excm.Sr. Angel Aguirre Baztán, Doctor en Filosofia i Lletres) 1995.

Els sòlids platònics (Discurs d'ingrés de l'acadèmica numerària Excma.Sra. Pilar Bayer i Isant, Doctora en Matemàtiques, i contestació per l'Excm.Sr. Ricard Garcia i Vallès, Doctor en Dret) 1996.

La normalització en Bioquímica Clínica (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Xavier Fuentes i Arderiu, Doctor en Farmàcia, i contestació per l'Excm.Sr. Tomàs Vidal i Bendito, Doctor en Geografia) 1996.

L'entropia en dos finals de segle (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. David Jou i Mirabent, Doctor en Ciències Físiques, i contestació per l'Excm.Sr. Pere Miró i Plans, Doctor en Ciències Químiques) 1996.

Vida i música (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Carles Ballús i Pascual, Doctor en Medicina i Cirurgia, i contestació per l'Excm.Sr. Josep M⁸ Espadaler i Medina, Doctor en Medicina i Cirurgia) 1996.

La diferencia entre los pueblos (Discurs d'ingrés de l'acadèmic corresponent Il.lm.Sr. Sebastià Trías Mercant, Doctor en Filosofia i Lletres, i contestació per l'Excm.Sr. Angel Aguirre Baztán, Doctor en Filosofia i Lletres) 1996.

L'aventura del pensament teològic (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Josep Gil i Ribas, Doctor en Teologia, i contestació per l'Excm.Sr. David Jou i Mirabent, Doctor en Ciències Físiques) 1996.

El derecho del siglo XXI (Discurs d'ingrés com acadèmic d'honor de l'Excm.Sr.Dr. Rafael Caldera, President de Venezuela, i contestació per l'Excm.Sr. Angel Aguirre Baztán, Doctor en Filosofia i Lletres) 1996.

**La Reial Acadèmia, bo i respectant
com a criteri d'autor les opinions ex-
posades en les seves publicacions, no
se'n fa responsable ni solidària.**

© Reial Acadèmia de Doctors
Disseny: Anna Bosch i Baltasar
Fotografia: David Pernas
Impressió: Impremta Baltasar 1861
Tiratge: 300 exemplars.

Dipòsit legal: B-46.169-1996



REAL ACADEMIA DE DOCTORS

—Publicacions—