

Caracterización de Transiciones Espaciotemporales en Sistemas Químicos Mediante Herramientas Fractales y Dinámicas

Luis Javier Ontañón García Pimentel^a, Ricardo Eliu Lozoya Ponce^b y Eduardo Jiménez López^{c*}.

^a Coordinación Académica Región Altiplano Oeste, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera Salinas-Santo Domingo km 200, Salinas, S.L.P., México. luis.ontanon@uaslp.mx. 0000-0002-6042-6893.

^b Tecnológico Nacional de México - Campus Chihuahua, Av. Tecnológico 2909, Tecnológico 31200, Chihuahua, Chihuahua, México. ricardo.lp@chihuahua.tecnm.mx. 0000-0001-9927-2011.

^c Centro de Investigación y Estudios Avanzados de la Población, Universidad Autónoma del Estado de México, Paseo Tollocan S/N. Zona Universitaria, Toluca. México. 0000-0002-1883-3890.

* ejimenezl@uaemex.mx.

Recibido 17 de marzo de 2025, Aceptado 15 de abril de 2025

Resumen

En este trabajo se caracteriza el comportamiento espaciotemporal emergente en sistemas químicos no lineales fuera del equilibrio termodinámico, mediante el uso combinado de herramientas fractales y dinámicas. Se analiza primero la reacción oscilante de Belousov-Zhabotinsky (BZ), un ejemplo paradigmático de sistema químico que presenta oscilaciones temporales y fenómenos de caos determinista, modelado mediante sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias. A partir de este enfoque, se complementa el análisis con el modelo sintético de Gray-Scott, el cual describe interacciones de tipo reacción-difusión entre dos especies químicas en un medio bidimensional, permitiendo la generación de patrones espaciales autoorganizados. A través de simulaciones numéricas, se estudian bifurcaciones, atractores caóticos y patrones de Turing, mientras que se emplea el método de conteo de cajas para estimar la dimensión fractal de las imágenes generadas. Esta metodología permite distinguir entre comportamientos periódicos, cuasi-periódicos y caóticos, proporcionando una visión integral del caos químico tanto en el dominio temporal como espacial.

Palabras clave: Sistema no lineal, oscilador Belousov-Zhabotinsky, Gray-Scott, oscilador químico, análisis caótico, simulación numérica.

Abstract

In this work, we characterize the emergent spatiotemporal behavior of nonlinear chemical systems outside thermodynamic equilibrium by using fractal and dynamical tools. We first analyze the Belousov-Zhabotinsky (BZ) oscillating reaction, a paradigmatic example of a chemical system exhibiting temporal oscillations and deterministic chaos phenomena, modeled by systems of ordinary differential equations. This approach complements the analysis with the synthetic Gray-Scott model, which describes reaction-diffusion interactions between two chemical species in a two-dimensional medium, allowing the generation of self-organizing spatial patterns. Through numerical simulations, we study bifurcations, chaotic attractors, and Turing patterns, while the box-counting method estimates the fractal dimension of the generated images. This methodology distinguishes between periodic, quasi-periodic, and chaotic behaviors, providing a comprehensive view of chemical chaos in both the temporal and spatial domains.

Keywords: Nonlinear system, Belousov-Zhabotinsky oscillator, Gray-Scott, chemical oscillator, chaotic analysis, numerical simulation.

1. Introducción

El estudio del comportamiento autooscilatorio en sistemas que salen del equilibrio termodinámico constituye una herramienta de particular interés en la termodinámica no lineal. Los sistemas acoplados de fluidos, que cristalizan y tratan de aproximarse al equilibrio termodinámico, se han desarrollado con un esfuerzo experimental, dirigido a estudiar las propiedades no lineales y a modelar matemáticamente las estructuras de las ondas perpetuas que encontramos en los modelos. La metodología para un estudio experimental ha de realizarse buscando una mezcla química que desencadene un aumento masivo de concentración natural en un proceso oscilatorio. El ejemplo más citado es el denominado oscilador de Belousov-Zhabotinsky (BZ). Estos resultados se obtuvieron experimentalmente de

forma relativamente sencilla, pero con una gran carga conceptual. Para entender estos procesos, se describen numerosos sistemas que producen ondas propagativas dentro de un medio [1][2].

El estudio de los fenómenos no lineales experimentó un gran impulso debido, en gran medida, al desarrollo de computadoras. Dichos fenómenos, con la excepción de algunas áreas de la física, no tenían mucha explotación ni grandes aplicaciones científicas. Una nueva rama de la matemática aplicadas es la dinámica de sistemas, que derivan en gran parte ciertos campos de estudio en biología, ecología y algunos procesos económicos. Un problema típico dentro de un sistema no lineal son las oscilaciones que pueden surgir en las soluciones de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias [3].

Diferentes ramas de la ciencia han reforzado y desarrollado el interés de los científicos en el estudio de

las reacciones oscilantes. Todos los sistemas descritos se basan en reacciones químicas complejas que implican más de dos especies, pero donde también participa uno o más compuestos intermedios. Un caso especial es la reacción del sistema BZ donde aparece el fenómeno de escape de concentración convirtiendo su salida en una onda de desfase que se aleja del punto de donde surgió y viaja a través del reactor. En la trayectoria recorre diferentes estados intermedios: ondas o vértices de desfase. De esta manera, lleva el sistema hacia la descarga de entropía y proceso irreversible cuya regulación se logra inyectando una parte de la energía fuera del sistema [4].

En algunas de estas reacciones es posible obtener la zona de bifurcación, los ciclos estables y oscilantes. Esto nos lleva a utilizar técnicas donde encontramos bifurcaciones, estabilidad y sistemas complejos en general. La belleza y utilidad de los sistemas con reacciones oscilantes radica en que puede abordarse desde diferentes perspectivas: teoría de control, teoría del caos, sistemas de ecuaciones diferenciales, entre otras [5].

El modelo BZ parte de las ecuaciones que describen una cantidad infinitesimal suplementaria que se descompone a una velocidad constante, lo que aporta un nuevo modelo con soluciones tipo ciclo-límite con un único atractor y que deja de tener oscilaciones homogéneas. Tomando las ideas sobre el fenómeno de oscilaciones químicas que se generan por la formación de complejos, con consecutivas descomposiciones y recomposiciones lentas, se introducen dos funciones que describen la cinética de formación y decaimiento de los complejos intermedios y se prueban muchas otras formas funcionales [6].

Las ecuaciones son cuatro ecuaciones diferenciales que describen las evoluciones temporales y espaciales de dos fenómenos continuos y dos variables discretas. En la traducción química, son la cantidad de los elementos químicos implicados en la reacción, en el caso de un compartimento continuo, sus concentraciones. La ecuación de difusión de elementos químicos representa la forma más simple de expresar las variables continuas en un medio. Dada la simpleza del sistema, existe una sola variable interna detrás y la ecuación depende de un solo parámetro, además del espacio, variables estáticas y el tiempo. La otra ecuación de variables continuas es de evolución de los productos de la reacción. Por último, el sistema incluye dos variables continuas adicionales. Una es la concentración, valores que pueden variar de acuerdo con la posición o a lo largo del tiempo en un continuo. En este caso son las concentraciones de algunas especies químicas, solo es necesario su valor en la posición en el continuo que varía [7][8].

Todas las reacciones consideradas termodinámicamente posibles tendrán lugar en la dirección media en la que la energía libre del sistema decrezca, es decir, en la práctica todas las reacciones son de tipo irreversible. Sin embargo, al examinar la velocidad de reacción se comprueba que no se comportan de esta manera, no asumiendo todos los valores que la termodinámica considera posibles, sino que oscilan alrededor de ellos. Aunque la velocidad de reacción es

continua como modelo general, en un ámbito generalizado corresponde a la de un proceso aislado, que da origen a ejemplos de oscilaciones de tipo elemental. Para las variables termodinámicas, prácticamente no existen reacciones químicas que oscilen periódicamente en un solo sentido, como es elaborado en la teoría de los sistemas dinámicos. Sin embargo, existe una excepción significativa en el caso de los procesos irreversibles, al menos en el sentido de tipo estacionario, en los que oscilan en las variables espaciales o espacio-temporales, pero de forma global o integral en el ámbito del sistema considerado [9]. En este contexto, resulta pertinente complementar el estudio del sistema BZ con modelos sintéticos como el de Gray-Scott, el cual permite simular la dinámica de formación de patrones espaciales mediante ecuaciones de reacción-difusión. A través de este enfoque computacional, se pueden analizar estructuras autoorganizadas que emergen de procesos similares a los observados experimentalmente en reacciones oscilantes reales, lo que brinda una perspectiva ampliada sobre los mecanismos de complejidad en sistemas químicos no lineales.

2. Reacciones Químicas Oscilantes

Una reacción oscilante es un sistema que cambia de forma periódica. Para que haya cambio periódico se debe dar un cambio temporal en el sistema, lo que significa que, en el sentido químico, el sistema se encuentra abierto. En una reacción oscilante, la dependencia temporal de uno o varios compuestos se debe a que podemos encontrar efectos colaterales en la reacción que mantienen dicho sistema abierto y presentando cambios temporales [10].

Un sistema oscilante u oscilador es un sistema no lineal caracterizado por su tendencia mantenida a autoexcitarse y que produce así un fenómeno oscilatorio. Son sistemas que pasan por valores repetidos a intervalos regulares, es decir, son sistemas que de alguna manera repiten cíclicamente una determinada trayectoria. Cuando se produce un cambio en el medio se dice que el sistema ha experimentado una perturbación. Al actuar dicha perturbación sobre el sistema se produce el fenómeno conocido como régimen transitorio [11].

Durante un intervalo de tiempo característico, los estados del sistema cambian con gran rapidez hasta converger en un régimen de variación lenta, el régimen permanente o estacionario. Una vez transcurrido este tiempo, sabemos que el sistema estará en su estado final o estacionario y no varía ante la presencia de la perturbación. Los sistemas oscilatorios no son causales, no procuran la aparición del fenómeno oscilatorio, sin embargo, intentan mantenerse en un determinado punto del espacio de fase. Si el sistema es perturbado, tiene la capacidad de estabilizarse produciendo la oscilación, retornando, después de algún tiempo, a su estado original [12].

El modelo simplificado Belousov-Zhabotinsky, también llamado de doble reacciones, es uno de los

modelos más sólidos y con mayor número de investigaciones en el campo de las reacciones oscilantes químicas. El fenómeno químico complejo consiste en la oxidación de ácido malónico por iones bromato catalizada por iones de cerio en medio ácido. Esta respuesta se lleva a cabo mediante dos grupos de procesos monótonos inorgánicos alternados, apoyados por un tercer grupo de reacciones orgánicas. Esto, a nivel macroscópico, implica la variación en la concentración de ciertas especies químicas mediante oscilaciones en un medio uniforme o creando patrones en un medio diverso [13].

En 1955, el físico y fisicoquímico belga Ilya Prigogine, autor de la teoría de la termodinámica de los procesos irreversibles, demostró que, en un sistema abierto cerca de un estado estacionario, alejado del equilibrio químico, son posibles las oscilaciones químicas. Fue él quien llamó la atención de la comunidad científica occidental sobre el trabajo de los científicos soviéticos. Como resultado, algunas reacciones químicas heterogéneas oscilatorias, abiertas a finales del siglo XIX, recibieron amplio reconocimiento. Fueron considerados como análogos de una serie de procesos periódicos, como los relojes biológicos [14].

Los investigadores se dieron cuenta de que la segunda ley de la termodinámica no se viola en los sistemas vivos y no obstaculiza su comportamiento y evolución complejos. Pero para que exista la vida o cualquier modelo físico o químico de ella, es necesario que el sistema permanezca lo suficientemente alejado del equilibrio termodinámico durante un tiempo prolongado. Y los sistemas químicos homogéneos podrían convertirse en un modelo conveniente para estudiar dichos procesos [15].

El trabajo de Ilya Prigogine y sus colaboradores formularon y analizaron un modelo para la reacción de Belousov-Zhabotinsky, que se considera un ejemplo clásico de reacción química autoorganizada.

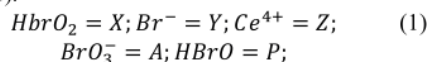
El trabajo de Prigogine, propusieron un modelo matemático denominado modelo Brusselator para explicar cómo se genera el Patrón de Turing, y su modelo también explicó por qué la creación espontánea de orden (o ruptura espontánea de la simetría) no está prohibida por la Segunda Ley de la Termodinámica [17] [18].

3. Modelado Matemático del Oscilador Químico

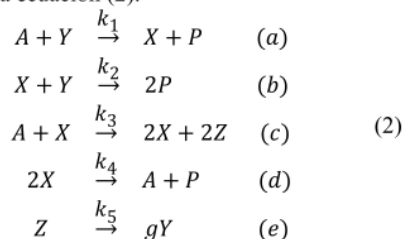
Es un modelo matemático en el que se describen las relaciones energéticas dentro del sistema, partiendo de la ecuación de Gibbs como base energética. La forma de ingeniería de toda la malla de reacciones nos proporciona la dependencia de la energía libre de Gibbs con las distintas condiciones del sistema, a su vez, por otras leyes fisicoquímicas, a las velocidades de avance de las diversas reacciones. Para simplificar las formulaciones, se irán exponiendo los conceptos probados en el caso de reacciones simples y a partir de esa base se obtendrán modelos más complejos [19].

Se realiza un tratamiento cinético del proceso oscilante en la reacción BZ por Field-Körös-Noyes (FKN), a través

del cual se disminuye la cantidad de reacciones a trabajar en el procedimiento a cinco, a las que se les puede asignar un valor estimado de la constante cinética de reacción. Los componentes y sustancias que participan en las cinco reacciones fundamentales del proceso se muestran en la ecuación (1).



Las reacciones cinéticas que ocurren en el proceso se muestran en la ecuación (2).



Donde k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 son constantes cinéticas. $g = 0.5$ es un factor estequiométrico. El proceso de reacción puede segmentarse en dos secciones, en las que la concentración $[Br^-]$ domina que parte del proceso. La primera parte correspondiente a las reacciones (a) y (b), ocurre a altas concentraciones de Br^- . En el transcurso de esta parte se consume Br^- , el cerio se encuentra en forma de $Ce(III)$. La concentración de Br^- desciende hasta llegar a un nivel mínimo.

La concentración de Br^- a partir del cual decrece rápidamente alcanzando un mínimo de concentración. En este tiempo suceden las reacciones (c), (d) y (e), donde el $Ce(III)$ se oxida a $Ce(IV)$, generando Br^- y revirtiendo a $Ce(III)$. Aumentar de nuevo los niveles de concentración de Br^- la primera parte vuelve a dominar la reacción. Esta secuencia se repite continuamente dando lugar a las oscilaciones.

Mostramos el tratamiento cinético de las reacciones observadas en la ecuación (2), las letras minúsculas hacen referencia a la concentración de la especie representada por la misma letra en mayúscula, por ejemplo:

$$a = [A] = [BrO_3^-]; b = [B] = CH_2(COOH)_2;$$

y k_5 corresponde a una etapa global. Además, (03) constituye una etapa autocatalítica en X [20]. Las ecuaciones cinéticas rescaladas resultantes constituyen un sistema de ecuaciones mostradas en la ecuación (3).

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = k_1ay - k_2xy + k_3ax - k_4x \\ \frac{dy}{dt} = -k_1ay - k_2xy + gk_5z \\ \frac{dz}{dt} = 2k_3ax - k_5z. \end{cases} \quad (3)$$

La única forma de examinar el sistema para lograr resultados útiles es de manera adimensional. Para lograrlo, emplearemos la aproximación de Tyson, que proporciona valores calculados a las constantes de velocidad del sistema de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\epsilon &\approx \frac{k_5}{k_3 a} \approx 5 \times 10^{-5} \\ \delta &\approx \frac{k_4 k_5}{k_2 k_3 a} \approx 2 \times 10^{-4} \\ q &= \frac{k_1 k_4}{k_2 k_3} \approx 8 \times 10^{-4}\end{aligned}$$

De esta manera se introducen los valores al sistema mostrado en la ecuación (4).

$$\begin{aligned}\epsilon \dot{x} &= qy - xy + x(1 - x) \\ \delta \dot{y} &= -qy - xy + 2gz \\ \dot{z} &= x - z\end{aligned}\quad (4)$$

Ya obtenido el sistema de ecuaciones realizamos un análisis de estabilidad de las ecuaciones mostradas en (5). Para lograrlo, determinaremos los distintos estados estacionarios donde ocurre el ciclo, obtenemos los valores propios de la matriz de estabilidad lineal.

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \epsilon^{-1}(qy - xy + x(1 - x)) \\ \dot{y} &= \delta^{-1}(-qy - xy + 2gz) \\ \dot{z} &= x - z\end{aligned}\quad (5)$$

Donde x, y, z son variables de estado del sistema, q, g, ϵ y δ son parámetros reales positivos. Los puntos de equilibrio del sistema (5) se obtienen estableciendo el lado izquierdo del sistema igualándolos a cero, como se muestra en la ecuación (6).

$$\begin{aligned}0 &= \epsilon^{-1}(qy - xy + x(1 - x)) \\ 0 &= \delta^{-1}(-qy - xy + 2gz) \\ 0 &= x - z\end{aligned}\quad (6)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones (6), se muestran la existencia dos puntos de equilibrio, ubicado en $(\frac{q}{\epsilon}, -\frac{q}{\delta}, 0)$. Al analizar el sistema, se encuentran tres no linealidades (es decir, la multiplicación de dos estados), cuya relación actúa como parámetro de control. Esta situación facilita la creación de un sistema ordenado con dos puntos de equilibrio.

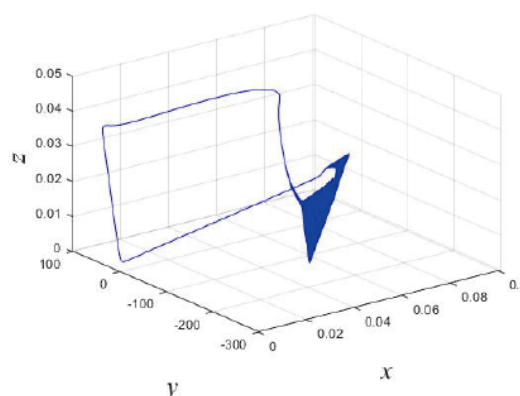
Para analizar numéricamente el comportamiento del sistema, se establecen los parámetros $q = 4$ y $g = 1$, se establecen las condiciones iniciales $(1, 1, 0)$ y se utiliza el algoritmo numérico de Runge-Kutta de cuarto orden con un paso de integración $h = 0,001$. La Figura 1 ilustra el atractor no caótico.

De la ecuación del sistema (5) que resulta al aplicar la descrita reacción en condiciones de flujo cerrado, se obtiene la matriz jacobiana J , mostrada en la ecuación (7).

$$J = \begin{bmatrix} \epsilon^{-1} & q\epsilon^{-1} & 0 \\ 0 & -q\delta^{-1} & 2g\delta^{-1} \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}\quad (7)$$

Analizando la matriz en la ecuación (7), para determinar los exponentes de Lyapunov tenemos los siguientes resultados: $\lambda_1 = 1.5354$, $\lambda_2 = -0.7973$, y $\lambda_3 = -0.8006$. Esto indica que el comportamiento corresponde a un atractor caótico.

Figura 1. Ciclo límite del modelo Belousov-Zhabotinsky



La suma de los tres exponentes es -0.0625 , lo que confirma que el sistema dinámico propuesto es acotado y/o atractivo. Además, la suma negativa de los exponentes sugiere que todo el volumen de la fase se contrae exponencialmente, lo que respalda la conclusión de que el sistema es caótico bajo los parámetros considerados.

4. Modelo complementario de formación de patrones: Gray-Scott y su análisis fractal

Si bien el modelo de Belousov-Zhabotinsky (BZ) ofrece una representación detallada del comportamiento oscilatorio y caótico temporal en sistemas químicos, el modelo de Gray-Scott complementa dicho enfoque desde una perspectiva espacial. El modelo de Gray-Scott es un sistema matemático de reacción-difusión que simula la interacción entre dos especies químicas, denotadas por U y V , las cuales difunden y reaccionan en un dominio bidimensional. Las ecuaciones diferenciales parciales que describen su dinámica son:

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= D_u \nabla^2 U - UV^2 + F(1 - U) \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= D_v \nabla^2 V - UV^2 - (F + k)V\end{aligned}\quad (8)$$

donde D_u y D_v representan los coeficientes de difusión F , la tasa de alimentación, y k la tasa de eliminación. Estas ecuaciones permiten la aparición de patrones como espirales, manchas estacionarias, ondas y estructuras autoorganizadas.

A diferencia de la BZ, que está basada en mecanismos químicos reales y se centra en oscilaciones temporales, el modelo de Gray-Scott es una herramienta sintética utilizada para explorar formaciones espaciales complejas. Mientras la reacción BZ se describe comúnmente mediante el modelo Oregonator (y sus derivados), el modelo de Gray-Scott proporciona un marco simplificado donde la riqueza de patrones emergentes proviene de la no linealidad local y la difusión diferencial.

Ahora, presentamos un ejemplo del comportamiento de estas formaciones espaciales complejas del modelo de la Ec. (8) con métodos de integración numérica. Consideramos los coeficientes de difusión de $D_u = 0.1$,

$D_v = 0.05$, una tasa de alimentación de $F = 0.037$ y una tasa de eliminación de $k = 0.06$. Se consideraron 2×10^4 pasos en el tiempo para la simulación y seis puntos de perturbación simultánea o condiciones iniciales. El resultado de esta simulación se puede apreciar en la Figura 2 (a). En donde los seis puntos se encuentran distribuidos en el medio, indicado en color rojo después de haber transcurrido un tiempo de 900 estados de tiempo en la simulación. Posteriormente, estas perturbaciones comienzan a expandirse en el medio como se aprecia en las Figuras 1(b-f).

Las formas oscilatorias complejas que presentan dependen fuertemente de la relación de parámetros que se utilicen en la simulación, principalmente la tasa de alimentación y la de eliminación.

De tal forma que decidimos realizar un análisis de las proyecciones finales generadas a partir de una combinación de diferentes parámetros de F , y aplicarles un estudio de análisis de fractalidad a las imágenes de la simulación resultante. Este estudio se comenta en la siguiente sección.

4.2 Estimación de la dimensión fractal en patrones del modelo de Gray-Scott

Para analizar cuantitativamente la complejidad espacial de los patrones generados por el modelo de Gray-Scott, se aplicó el método de conteo de cajas para estimar la dimensión fractal (DF) de cada imagen obtenida al finalizar la simulación, considerando los reportes presentados previamente en [21, 22].

El procedimiento consiste en:

1. Convertir la imagen en escala de grises de la concentración final de V a formato binario.
2. Superponer una rejilla de cajas cuadradas de tamaño $\epsilon \times \epsilon$.
3. Contar cuántas cajas $N(\epsilon)$ contienen al menos un píxel activado.
4. Repetir el proceso para varios valores de ϵ .
5. Ajustar una recta a la gráfica log-log de $N(\epsilon)$ contra $1/\epsilon$. La pendiente estimada corresponde a la DF:

$$DF = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\epsilon)}{\log(1/\epsilon)} \quad (9)$$

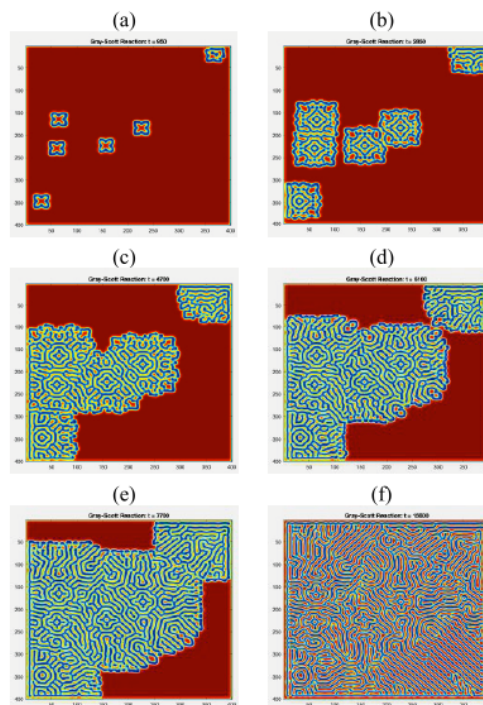
Considerando que las imágenes o sistemas que estudiamos aquí sus se encuentran en dos dimensiones, la dimensión fractal permite distinguir entre comportamientos en $DF = 1$ nos habla de una línea euclidiana convencional y $DF = 2$ de un patrón homogéneo del llenado de un área. En este sentido, y de acuerdo con el modelo aquí implementado podemos catalogar la dimensión fractal de las imágenes resultantes de la siguiente forma:

- Periódicos: $DF \leq 1.7$
- Cuasi-periódicos: $1.7 < DF \leq 1.8$
- Caóticos: $DF > 1.8$

- No definidos: Imágenes sin estructura (DF no computable)

Se realizaron simulaciones variando el parámetro $F \in [0.01, 0.06]$, mientras $D_u = 0.1$, $D_v = 0.05$, y $k = 0.062$ permanecieron constantes. Cada simulación generó una imagen que fue analizada mediante este método.

Figura 2. Experimento de la reacción del modelo de Gray-Scott dado en la Ec. (8).



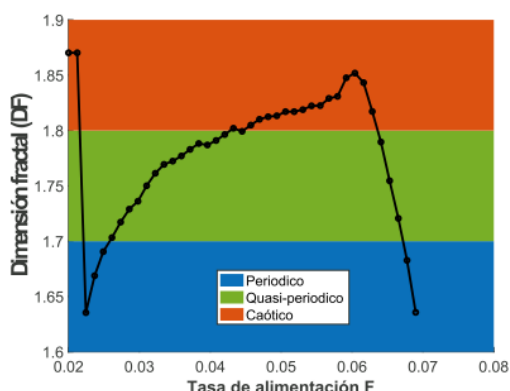
Los resultados se representan como una gráfica de la dimensión fractal contra la tasa de alimentación, permitiendo observar transiciones entre diferentes comportamientos espaciales, así como detectar puntos críticos donde ocurre una bifurcación en la Figura 3. En donde la línea punteada en color negro indica el valor obtenido de DF, y dependiendo de su valor se encuentra asignado a una franja de color que determina si su comportamiento es Periódico (color azul), Cuasi-periódico (color verde) o caótico (color rojo). Además, el resultado de las figuras de tasas de alimentación específicas se puede apreciar en la Figura 4.

Este análisis complementa el estudio dinámico del sistema BZ, al proporcionar una forma de caracterizar la complejidad espacial emergente en un sistema de reacción-difusión. Juntos, ambos modelos ofrecen una visión integral del caos químico, tanto en el espacio como en el tiempo.

5. Comprensión de la No Linealidad del Sistema

La complejidad del sistema se manifiesta en diferentes aspectos, se destaca que los resultados de la oscilación se deben, al acoplamiento de tres reacciones que evolucionan en paralelo y se retroalimentan con los productos de las reacciones subsiguientes. Por otro lado, depende fundamentalmente de la naturaleza no lineal de las reacciones involucradas. La no linealidad determina las inevitables oscilaciones en todos los iones y compuestos.

Figura 3. Dimensión fractal de las imágenes resultantes del modelo de Gray-Scott según la variación de tasa de alimentación F .



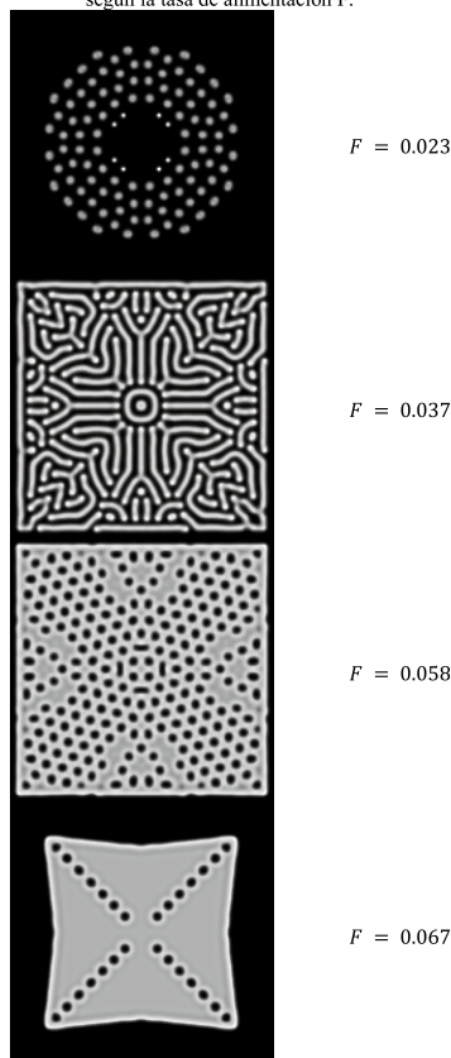
El mecanismo fundamentalmente no lineal que subyace a la oscilación de los electrones transferidos entre los iones en el ácido oxálico, el cual constituye el origen último de la complejidad que estas dos reacciones aportan al sistema. La reacción da lugar a una larga oscilación del ion en el catalizador, a medida que varía entre oxidante y reductor, determinada por el oscilador. Cada oscilación del ion es responsable de las oscilaciones en otros sectores del sistema, debido a los cambios ultrasónicos, de la aceleración de los procesos espontáneos de transferencia de electrones.

Una aplicación del uso de las reacciones del oscilador BZ para conseguir el comportamiento de onda se realiza con tres ecuaciones cinéticamente acopladas y con tiempo de caída. La última parte refiere los efectos difusores de tres sustancias conjuntamente, una es la expresión cualitativa del principio de Turing. Y como resultado, se muestra cómo, entre otras cosas, el crecimiento tumoral puede ser significativamente regulado por el manejo de dos de los parámetros del oscilador que actúan como estimuladores tumorales [16]. El estudio muestra por primera vez cómo influye claramente en el desarrollo de patologías neurológicas muy concretas un comportamiento electrotónico a nivel tanto subcelular como global. Es más, existe un estudio riguroso de los parámetros que permiten emerger al comportamiento caótico. La metodología será de predicción, permitiendo aplicar ya a los datos tanto subcelulares como a nivel nervioso de tejido con la teoría del caos.

5. Conclusiones

La reacción de Belousov-Zhabotinsky (BZ) representa uno de los primeros sistemas químicos en los que fue posible describir con claridad un comportamiento oscilatorio no lineal a través de modelos matemáticos y observaciones experimentales. En este trabajo, se analizó la dinámica del sistema BZ mediante el cálculo de exponentes de Lyapunov, lo cual permitió evidenciar regiones de comportamiento caótico a partir de trayectorias en el espacio de fases. Esta metodología resulta clave para caracterizar atractores dinámicos y transiciones no lineales en sistemas químicos oscilantes.

Figura 4. Resultado de las imágenes en escala de grises según la tasa de alimentación F .



Complementariamente, se abordó el estudio del modelo de Gray-Scott, el cual permite explorar patrones espaciales generados por un sistema de reacción-difusión sintético. A través de simulaciones numéricas, se obtuvieron imágenes de configuraciones químicas autoorganizadas que fueron

clasificadas utilizando la dimensión fractal como métrica cuantitativa. El análisis permitió distinguir entre estructuras periódicas, cuasi-periódicas y caóticas, revelando transiciones en el espacio de parámetros asociadas a bifurcaciones y aumentos en la complejidad geométrica.

Este enfoque dual —temporal mediante exponentes de Lyapunov y espacial mediante análisis fractal— ofrece una caracterización integral de los mecanismos de autoorganización y caos en sistemas químicos no lineales. Como trabajo futuro, se propone la validación experimental de estos modelos, así como su implementación en plataformas de hardware reconfigurable. También se plantea extender el análisis hacia otras herramientas dinámicas y estadísticas, con el fin de comparar diferentes sistemas de ecuaciones y validar la robustez de los comportamientos detectados.

6. Bibliografía

- [1] Wang, M. R. (2000). An introductory laboratory exercise on solution preparation: A rewarding experience. *Journal of Chemical Education*, 77(2), 249. <https://acortar.link/V19SCg>
- [2] Selfa, D. G. (2023). Autoorganización en sistemas compuestos: sincronización, Turing, fluctuaciones. USC, Universidad de Santiago de Compostela. <https://acortar.link/zrquvu>
- [3] Hale, J. K. (2015). *Oscillations in nonlinear systems*. Courier Dover Publications. <https://lc.cx/DPDml0>
- [4] Chang, K. M., de Planque, M. R., & Zauner, K. P. (2018). Towards functional droplet architectures: A belousov-zhabotinsky medium for networks. *Scientific Reports*, 8(1), 12656. <https://n9.cl/40t05>
- [5] Epstein, I. R., & Pojman, J. A. (1998). *An introduction to nonlinear chemical dynamics: oscillations, waves, patterns, and chaos*. Oxford university press. <https://n9.cl/kv95z>
- [6] Field, R. J., & Noyes, R. M. (1974). Oscillations in chemical systems. IV. Limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction. *The Journal of Chemical Physics*, 60(5), 1877-1884. <https://n9.cl/4f0t33>
- [7] Györgyi, L., & Field, R. J. (1992). A three-variable model of deterministic chaos in the Belousov-Zhabotinsky reaction. *Nature*, 355(6363), 808-810. <https://n9.cl/81c85>
- [8] Field, R. J. (2015). Chaos in the Belousov-Zhabotinsky reaction. *Modern Physics Letters B*, 29(34), 1530015. <https://n9.cl/9pmvm2>
- [9] Barentsen, W., & Nijkamp, P. (1986). Modelling non-linear processes in time and space. <https://n9.cl/mz1sa>
- [10] Ashkenasy, G., Hermans, T. M., Otto, S., & Taylor, A. F. (2017). Systems chemistry. *Chemical Society Reviews*, 46(9), 2543-2554. <https://n9.cl/apji8>
- [11] Newman, J., Lucas, M., & Stefanovska, A. (2021). Stabilization of cyclic processes by slowly varying forcing. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 31(12). <https://n9.cl/mlc1s>
- [12] Lucke, M., Chioua, M., & Thornhill, N. F. (2022). From oscillatory to non-oscillatory disturbances: A comparative review of root cause analysis methods. *Journal of Process Control*, 113, 42-67. <https://n9.cl/7ix6fy>
- [13] Szymanski, N. J., Zeng, Y., Huo, H., Bartel, C. J., Kim, H., & Ceder, G. (2021). Toward autonomous design and synthesis of novel inorganic materials. *Materials horizons*, 8(8), 2169-2198. <https://n9.cl/c7os25>
- [14] Lefever, R. (2018). The rehabilitation of irreversible processes and dissipative structures' 50th anniversary. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 376(2124), 20170365. <https://n9.cl/4ro665>
- [15] Bianca, C. (2012). Thermostatted kinetic equations as models for complex systems in physics and life sciences. *Physics of Life Reviews*, 9(4), 359-399. <https://n9.cl/v6m8sm>
- [16] Guo, T., Ren, P., Hao, S., & Wang, B. (2017). The underestimated role of mechanical stimuli in brain diseases and the related in vitro models. *Current Pharmaceutical Design*, 23(15), 2161-2176. <https://n9.cl/jc30pb>
- [17] Zhabotinsky, A. M. (2007). Belousov-zhabotinsky reaction. *Scholarpedia*, 2(9), 1435. <https://n9.cl/8jt0l>
- [18] Manz, N., Müller, S. C., & Steinbock, O. (2000). Anomalous dispersion of chemical waves in a homogeneously catalyzed reaction system. *The Journal of Physical Chemistry A*, 104(25), 5895-5897. <https://n9.cl/zxr7v>
- [19] Mikhailov, A. S., & Showalter, K. (2006). Control of waves, patterns and turbulence in chemical systems. *Physics Reports*, 425(2-3), 79-194. <https://acortar.link/1rutG1>
- [20] Nagy-Ungvarai, Z., Tyson, J. J., & Hess, B. (1989). Experimental study of the chemical waves in the cerium-catalyzed Belousov-Zhabotinskii reaction. I. Velocity of trigger waves. *The Journal of Physical Chemistry*, 93(2), 707-713. <https://acortar.link/FHnEkC>
- [21] Har-Shemesh, O., Quax, R., Hoekstra, A. G., & Sloot, P. M. (2016). Information geometric analysis of phase transitions in complex patterns: the case of the Gray-Scott reaction-diffusion model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016(4), 043301.
- [22] Huang, J. G., Christian, J. M., & McDonald, G. S. (2017). Spontaneous spatial fractal pattern formation in dispersive systems. *Journal of Nonlinear Optical Physics & Materials*, 26(01), 1750009.