



Universidad Nacional Autónoma
de México

Facultad de Ciencias

Transición de fase dinámica para la
velocidad de deriva de caminatas aleatorias
en medios desordenados bajo un campo
externo

T E S I S

que para obtener el título de

F Í S I C O

presenta :

Martín Zumaya Hernández



Director de tesis:
Dr. David Philip Sanders

2013



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Datos del alumno

Apellido paterno: Zumaya
Apellido materno: Hernández
Nombre: Martín

Teléfono: 56142282

Universidad: Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad: Facultad de Ciencias
Carrera: Física
No. de cuenta: 407093180

Tutor

Grado: Dr.
Nombres: David Philip
Apellido: Sanders

Presidente

Grado: Dr.
Nombres: Octavio Reymundo
Apellido paterno: Miramontes
Apellido materno: Vidal

Vocal

Grado: Dr.
Nombres: Denis Pierre
Apellido: Boyer

Suplente

Grado: Dr.
Nombre: Enrique
Apellido paterno: Hernández
Apellido materno: Lemus

Suplente

Grado: Dr.
Nombre: Maximino
Apellido paterno: Aldana
Apellido materno: González

Datos del trabajo escrito

Título: Transición de fase dinámica para la velocidad de deriva de caminatas aleatorias en medios desordenados bajo un campo externo

Páginas: 79pp
Año: 2013

Índice general

Resumen	1
I Antecedentes	2
1. Introducción	3
2. Percolación	7
2.1. El modelo de percolación	7
2.2. Propiedades estructurales	12
3. Caminatas aleatorias y procesos de difusión	16
3.1. Caminatas aleatorias en una red	17
3.2. Difusión anómala	19
II Desarrollo	31
4. Implementación computacional	32
4.1. Parámetros y caracterización del sistema	32

4.2. Dinámica del sistema	33
4.3. Crecimiento dinámico del sustrato percolante	35
4.4. Cantidades calculadas en el modelo	37
5. Resultados	41
5.1. En ausencia de campo externo	41
5.2. En presencia de campo externo	42
6. Conclusiones	55
Apéndices	58
A. Transiciones de fase	59
A.1. Parámetros de orden y exponentes críticos	59
B. Fractales	63
B.1. Fractales deterministas	64
B.2. Propiedades de los fractales	64
B.3. Fractales aleatorios	67
C. El algoritmo de Hoshen–Kopelman	69
Bibliografía	74

Resumen

La *percolación*, en la teoría de medios porosos, se refiere al fenómeno en el que el espacio entre los poros del medio crea un camino por el cual un fluido puede atravesar, tal como lo hace el agua en una cafetera. En su versión computacional, el modelo de percolación hace referencia a discretizaciones del espacio (redes), en las cuales cada sitio, o enlace entre sitios de la red, está disponible con probabilidad p , o prohibido con probabilidad $(1 - p)$; de tal forma que, los sitios disponibles de la red se corresponden con los espacios vacíos en la estructura de un medio poroso por los cuales un fluido puede circular.

El modelo de percolación presenta una transición de fase en función de la probabilidad p , en la que se pasa de un régimen en el que los sitios disponibles de la red forman grupos pequeños de vecinos cercanos, a otro en donde la mayoría de los sitios de la red están conectados por una red ininterrumpida de ellos; esta situación ocurre por primera vez para un valor crítico $p = p_c$, que depende de la dimensión y la topología de la red.

Es posible modelar procesos de difusión en medios desordenados bajo un campo externo, mediante caminatas aleatorias con sesgo cartesiano, i.e. en las que existe una dirección espacial privilegiada, dentro de redes con $p > p_c$, asumiendo que el movimiento queda restringido a los sitios disponibles. Se ha mostrado que, para este modelo existe una transición de fase dinámica para la velocidad de deriva para cierto valor crítico $H = H_c$ de la magnitud del campo externo H .

El presente trabajo explora, mediante simulaciones computacionales y visualizaciones, la dinámica de procesos de difusión en medios desordenados bajo un campo externo, y aproxima el valor de H_c para valores de $p > p_c$.

Parte I

Antecedentes

Capítulo 1

Introducción

La *percolación*, en la teoría de medios porosos, se refiere al fenómeno en el que el espacio entre los poros del medio crea un camino por el cual un fluido puede atravesar, tal como lo hace el agua en una cafetera. Sin embargo, el modelo no está restringido a este tipo de fenómenos y puede ser utilizado para modelar procesos de gelación, crecimiento de superficies, incendios forestales, propagación de enfermedades y en general, sistemas con transiciones de fase críticas y fenómenos de transporte en medios desordenados [4, 5, 7, 15, 16, 17]. Dicha versatilidad, a pesar de poder ser definido y entendido en términos geométricos simples, lo hace un modelo importante y sujeto de investigación actual desde puntos de vista tanto puramente matemáticos como físicos [2, 5, 6, 8].

El modelo de percolación ha sido útil [1, 4, 21] para la descripción de distintos tipos de sistemas y fenómenos físicos para cuyo estudio, debido a la variedad de propiedades que presenta, para su estudio hacen falta herramientas tales como la teoría de transiciones de fase, puntos críticos y la geometría fractal.

Si realizamos una discretización del espacio por medio de una red (cuadrada o cúbica simple, triangular), haciendo uso del modelo de percolación de sitio, podemos simular la porosidad del medio con la probabilidad de ocupación p , con la cual cada sitio de la red está presente, o ausente con probabilidad $(1 - p)$. Los sitios de la red pueden ser organizados en *clusters*: conjuntos de sitios conectados por medio de sus vecinos cercanos; la conectividad de dichos clusters en el medio depende de la probabilidad p . Un valor pequeño representa un medio poco poroso, sólo hay clusters finitos y desconectados entre sí y por lo tanto no hay un camino por el cual el líquido puede percolar el medio; por otro lado, para valores may-

ores de p , la conectividad del medio aumenta y el líquido puede encontrar un camino que conecte dos lados opuestos del sistema. Esto sucede por primera vez para un valor crítico de la probabilidad de ocupación $p = p_c$ para el cual hay una transición de fase (ver apéndice A) geométrica del sistema, en la que se pasa de un régimen de clusters finitos aislados a otro en el que el sistema está conectado en su mayoría por medio de un *cluster percolante* (Fig. 1.1), i.e. un cluster que conecta dos lados opuestos de una red de tamaño L y cuyo tamaño aumentaría indefinidamente al $L \rightarrow \infty$. En este régimen, $p = p_c$, el sistema presenta una geometría fractal (ver apéndice B).

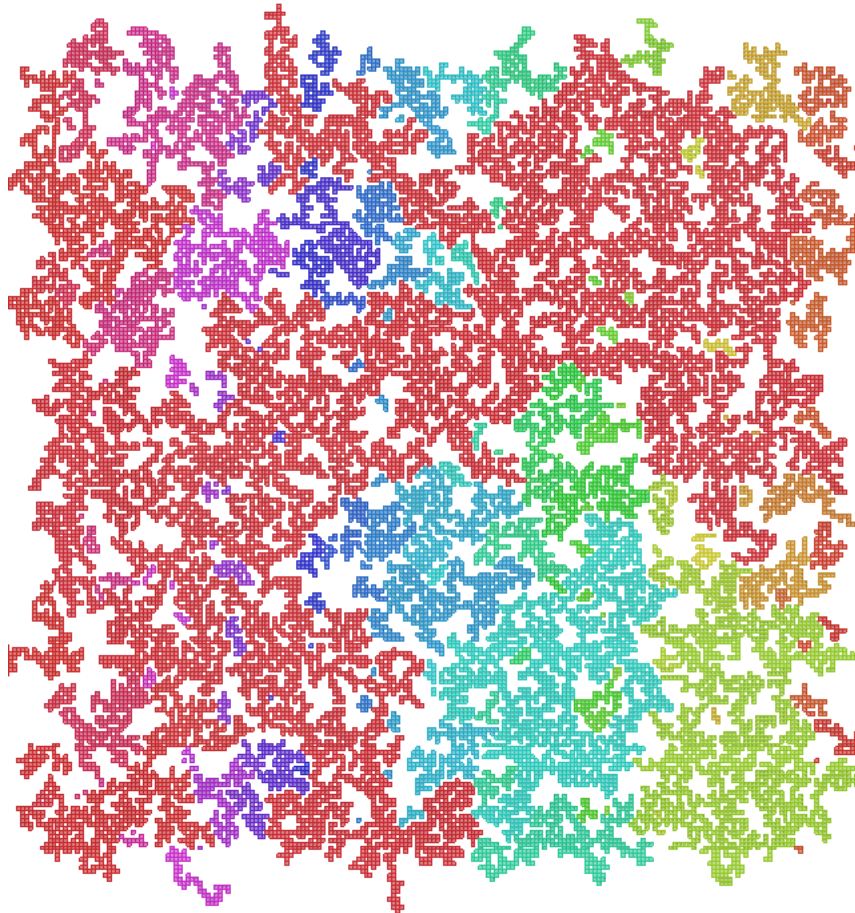


Figura 1.1: Percolación de sitio en una red cuadrada de tamaño $L = 200$ en $p = p_c$, el cluster percolante se muestra en color rojo

Una *caminata aleatoria* es un proceso estocástico que puede ser definido en los puntos de una red, en el que es posible considerar a la variable temporal como discreta, en el cual a

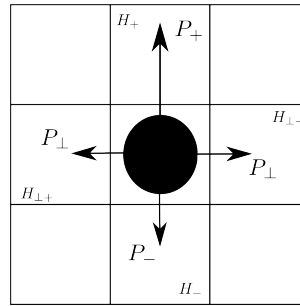


Figura 1.2: Caminata aleatoria con sesgo cartesiano en la red cuadrada. H_+ denota la dirección paralela al campo, H_- la anti-paralela y H_{\perp} la perpendicular al campo; las probabilidades en cada dirección se representan con la letra P .

cada paso del tiempo el *caminante* avanza de su posición actual a otro de los sitios de la red según una regla aleatoria preestablecida independiente de la historia de la caminata, es decir, es un proceso en el cual el estado actual condiciona al siguiente pero es independiente del pasado [1].

Las redes percolantes son un ejemplo de medio desordenado en el que una fracción p de los sitios de la red está disponible y el resto está prohibida. Si colocamos ahora a un caminante dentro de esta red y asumimos solo puede ocupar los sitios disponibles, su movimiento quedará restringido al cluster al que pertenece el sitio inicial de la caminata.

Para el caso de ausencia de campo se utilizan caminatas aleatorias simples en las que todas las direcciones posibles de movimiento tienen la misma probabilidad de ser elegidas en cada paso del tiempo. Por otro lado, al introducir un campo externo, la dirección en la que se aplica es privilegiada en el sentido de que la probabilidad para ser elegida es mayor que la de las direcciones restantes (Fig. 1.2).

En este trabajo se realizan procesos de difusión dentro de redes percolantes, modelados con caminatas aleatorias simples y con sesgo cartesiano para el caso de ausencia de campo y en presencia del mismo respectivamente.

Para la determinación de las cantidades relevantes del modelo (ver sección (4.4)), utilizamos *promedios de ensemble* de caminatas aleatorias independientes sobre una muestra representativa de realizaciones del medio desordenado (redes de percolación de sitio supercríticas); que consideramos nos ha permitido observar algunas características importantes del comportamiento del sistema.

Estructura de la tesis

En el capítulo 2 se introduce el modelo de percolación, y se describen algunas de sus propiedades estructurales y dinámicas. En el capítulo 3 se hace una breve revisión de las caminatas aleatorias simples y con sesgo, así como de su utilidad para modelar procesos de difusión.

El presente trabajo se enfoca en la exploración numérica del modelo de Sznitman para el campo externo, el cual ha sido tratado recientemente de forma analítica en [8], en donde se demuestra la existencia de una transición de fase dinámica para la velocidad de deriva de procesos de difusión en redes percolantes supercríticas bajo un campo externo, en función de la magnitud del mismo; el principal objetivo del trabajo es intentar determinar, haciendo uso de simulaciones y visualizaciones de procesos de difusión en redes percolantes, el punto crítico de la transición de fase.

La implementación computacional del modelo se describe en el capítulo 4, los resultados y conclusiones obtenidas se presentan en los capítulos 5 y 6, respectivamente.

Capítulo 2

Percolación

El modelo de *percolación* genera medios desordenados que, en el umbral pueden ser descritos como fractales aleatorios. A continuación se describe el modelo de percolación y algunas de sus propiedades más importantes que serán útiles para la implementación computacional del modelo.

2.1. El modelo de percolación

El término percolación se refiere al proceso en el cual un fluido puede atravesar un medio poroso. Para que esto sea posible, en la estructura del medio debe existir un camino por el cual el fluido pueda *percolar*, es decir, fluir de un lado al otro del medio.

El que esto se presente depende de la *porosidad* del sistema. Si tomamos una muestra de un medio poroso y la discretizamos en una red, la porosidad es la fracción de lugares vacíos (o disponibles) de la red¹. Entre más poroso sea el medio, más espacio habrá disponible para que el líquido pueda fluir a través de él.

El modelo de percolación puede ser implementado en distintos tipos de red y en relación a distintos elementos topológicos; el caso en el que se consideran los sitios de la red se conoce como *percolación de sitio* y es la que se utiliza en este trabajo. En la *percolación de enlaces*,

¹La denominación de sitios ocupados o vacíos es totalmente convencional, lo importante es la distinción entre dos estados posibles de los sitios de la red. En el presente trabajo, dado que se realizan caminatas aleatorias sobre la estructura de la red, conviene considerar a los sitios de la red vacíos como disponibles o susceptibles de ser ocupados y a los ocupados como prohibidos.

en vez de considerar los sitios de la red se toman en cuenta los enlaces entre ellos. Por otro lado, también es posible considerar un medio continuo en vez de uno discreto, en cuyo caso hablamos de *percolación continua*, en donde los elementos percolantes son círculos o esferas colocadas aleatoriamente en el espacio, y que se traslapan entre sí [1, 21] .

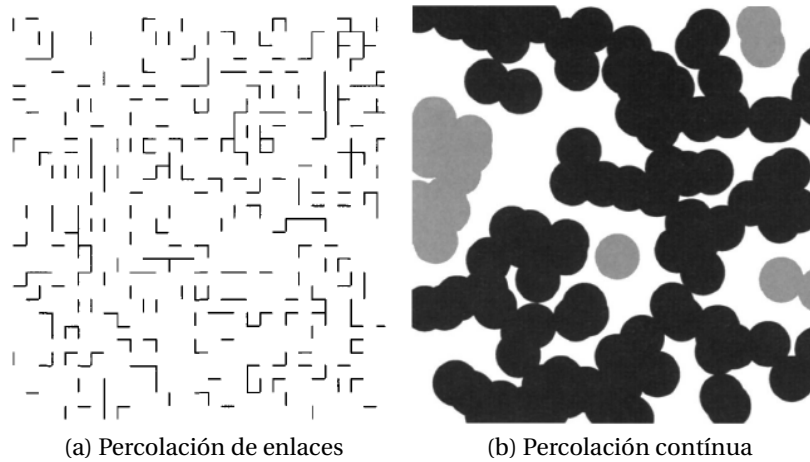


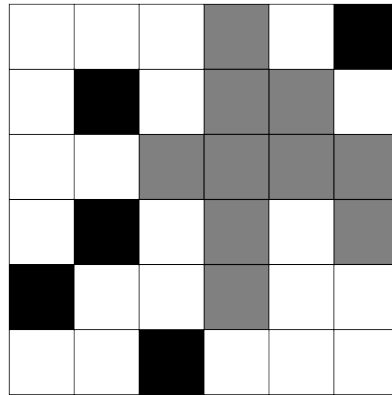
Figura 2.1: Otros tipos de percolación. Tomada de [3]

Consideremos percolación de sitio en una red cuadrada. Cada sitio de la red está libre de manera *aleatoria* e independiente del estado de ocupación de sus vecinos, con cierta probabilidad p , análoga a la porosidad del medio, o prohibido con probabilidad $(1 - p)$. Observamos que conforme crece la probabilidad p , la densidad de los lugares disponibles aumenta. Una red con N sitios, en promedio tendrá pN sitios disponibles en la red y $(1 - p)N$ sitios prohibidos, por lo cual la densidad de sitios disponibles es p .

Los sitios de la red pueden ser organizados en estructuras denominadas *clusters* (Fig. 2.2), definidas como conjuntos de lugares disponibles de la red conectados por una cadena ininterrumpida de vecinos cercanos².

El tamaño y distribución de los clusters en el sistema depende del valor de la probabilidad de ocupación p ; para valores bajos, estos son pequeños; al aumentar p el tamaño promedio de los clusters crece, y la conectividad del medio aumenta, i.e. los clusters cubren una mayor superficie de la red.

²La definición de vecinos cercanos depende de la vecindad considerada en la red, en este trabajo se usa una vecindad de Von Neumann en la red cuadrada simple, en donde los vecinos cercanos son sitios adyacentes por un lado pero no por una esquina.



(a) Cluster en una red cuadrada (gris), los sitios prohibidos se muestran en color blanco

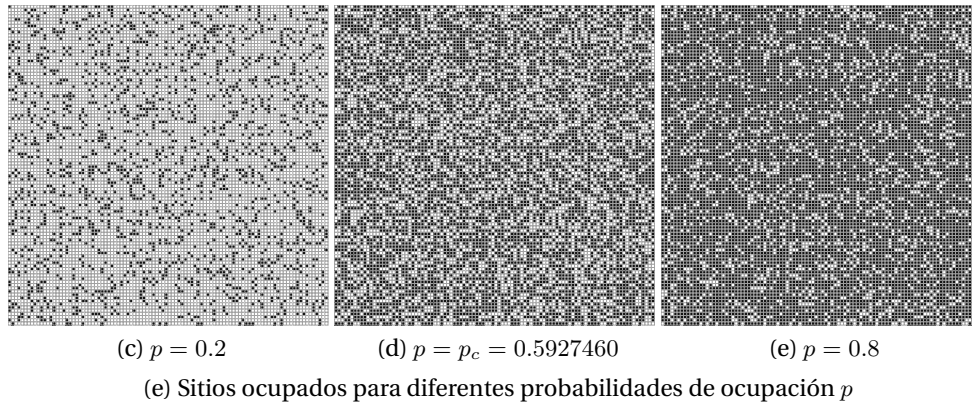


Figura 2.2: Percolación de sitio en la red cuadrada simple

Cuando uno de estos clusters conecta dos lados opuestos de la red, se dice que el cluster *percola* a través del sistema y se le denomina *cluster percolante o infinito*; dado que idealmente, en una red infinita, éste abarcaría todo el sistema; este fenómeno se presenta por primera vez para cierto valor umbral crítico, $p = p_c$, en el cual el modelo de percolación presenta una transición de fase (ver apéndice A) en función de la probabilidad de ocupación p , pasando de un régimen en el que sólo se tienen clusters finitos y separados por distancias grandes, a otro en el que el sistema está conectado en su mayoría a través del cluster infinito o percolante [21].

Por lo tanto, podemos ahora pensar en la probabilidad P_∞ de que un lugar dado de la red pertenezca al cluster percolante. Esta probabilidad exhibe una transición de fase (Fig. 2.3):

es cero para $p < p_c$ y aumenta continuamente cuando $p \geq p_c$.

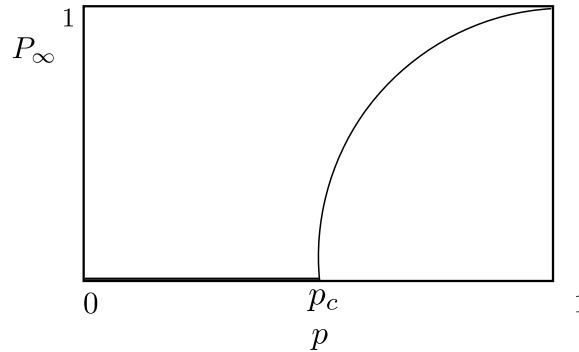


Figura 2.3: Representación esquemática de la transición de fase de la probabilidad P_∞ en el modelo de percolación de sitio en una red cuadrada.

Por arriba y cerca del punto de transición, P_∞ sigue la ley de potencias

$$P_\infty \sim (p - p_c)^\beta. \quad (2.1)$$

Este fenómeno se conoce como *transición de percolación*; la cual es una transición continua de segundo orden. P_∞ juega el papel de *parámetro de orden* cuyo comportamiento está descrito por el *exponente crítico* β .

El valor de P_∞ describe el estado del sistema, mientras $P_\infty = 0$ el sistema se encuentra en el régimen fragmentado y cuando $P_\infty \neq 0$ existe un cluster percolante.

El valor crítico de la probabilidad de ocupación p_c ha sido calculado analíticamente y numéricamente para distintos tipos de redes [1]; en la Tabla (2.1) se muestran los valores reportados en la literatura.

Cabe mencionar que los sistemas finitos simulados computacionalmente generalmente no tienen un umbral de transición bien definido, debido principalmente a los efectos de frontera; por lo tanto, los valores obtenidos numéricamente deben ser extrapolados cuidadosamente al límite termodinámico. Los valores obtenidos analíticamente para p_c pueden ser utilizados para validar resultados obtenidos numéricamente [21].

El umbral de percolación se modifica con la dimensión y topología de la red (en el caso bidimensional, $p_c = 0.5$ para la red triangular y $p_c = 0.5927460$ para la red cuadrada simple) ;

Tipo de red	Percolación	
	Sitio	Enlaces
Triangular	$1/2$	$2 \sin(\pi/18)$
Cuadrada	0.5927460	$1/2$
Panal de abejas	0.697043	$1 - 2 \sin(\pi/18)$
Cúbica centrada en la cara	0.198	0.1201635
Cúbica centrada en el cuerpo	0.254	0.1802875
Cúbica simple (primeros vecinos cercanos)	0.311605	0.24812
Cúbica simple (segundos vecinos cercanos)	0.137	-
Cúbica simple (terceros vecinos cercanos)	0.097	-
Árbol de Cayley	$1/(z-1)$	$1/(z-1)$
Percolación continua $d = 2$ (círculos traslapados)	0.312 ± 0.005	-
Percolación continua $d = 3$ (esferas traslapadas)	0.2895 ± 0.0005	-

Tabla 2.1: Umbrales de percolación para distintas redes en 2 y 3 dimensiones. Tomado de [1]

en cambio los exponentes críticos no dependen de los detalles estructurales (p.e. cuadrada, triangular) o del tipo de percolación (sitios, enlaces, continua), sino sólo de la dimensión d del espacio [21].

Esta insensibilidad a detalles del sistema se denomina *universalidad* [1]; dicha situación nos indica que los exponentes críticos captan algo esencial de la naturaleza del modelo y se utilizan para clasificar transiciones de fase en *clases de universalidad*. Esta propiedad es una característica general de las transiciones de fase donde el parámetro de orden desaparece continuamente en el punto crítico (transición de fase de segundo orden, o continua). Por ejemplo, la magnetización en los materiales magnéticos tridimensionales se describe con el mismo exponente β independientemente de su estructura cristalina o del tipo de interacciones entre spins, mientras que éstas sean de corto alcance [21].

2.1.1. Cantidades características del modelo de percolación

Existen diferentes cantidades que caracterizan el fenómeno de percolación. Su comportamiento puede ser descrito mediante leyes de potencias de la forma (2.1).

La longitud promedio entre dos sitios dentro de un cluster finito se caracteriza con la *longitud de correlación* ξ , la cual es la única longitud característica del sistema [21]. Esta cantidad diverge cuando p se acerca a p_c como

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}, \quad (2.2)$$

con el mismo exponente crítico ν por encima y debajo del punto de transición. ξ es una medida del tamaño del cluster de sitios prohibidos más grande en el cluster percolante y decrece al incrementar p por encima de p_c [1].

Otra cantidad útil para la caracterización de los clusters percolantes es la *distancia química o topológica* l , que es la longitud del camino más corto a través del cluster percolante entre dos sitios distintos del mismo. Por otro lado, la *dimensión química o topológica* d_t es la que describe el escalamiento de la masa S con la distancia química l :

$$S(l) \sim l^{d_t}. \quad (2.3)$$

El número de sitios promedio de los clusters finitos o masa S , diverge cerca de p_c como

$$S \sim |p - p_c|^{-\gamma}, \quad (2.4)$$

con el mismo exponente γ en ambos lados de la transición.

Los exponentes β, ν y γ no son los únicos exponentes críticos que caracterizan la transición de percolación. La distribución del tamaño de los clusters de percolación, por ejemplo, se describe por otros exponentes α, τ y σ [1]. Sin embargo, existen relaciones entre estos exponentes y todos pueden ser obtenidos a partir de sólo dos de ellos [3].

2.2. Propiedades estructurales

La estructura de los clusters percolantes puede ser descrita con conceptos fractales. Justo en el punto crítico $p = p_c$, se observa que el cluster infinito tiene agujeros en todas las escalas y es auto-similar a escalas mayores que el espaciamiento de la red y menores que el tamaño total del sistema [1]. Por lo tanto, puede ser tratado como fractal dentro de este régimen.

La dimensión fractal d_f describe cómo escala la masa S del cluster percolante en función de la escala considerada, en particular dentro de una esfera de radio r :

$$S(r) \sim r^{d_f}. \quad (2.5)$$

$S(r)$ se obtiene promediando sobre varias realizaciones del cluster percolante o, de manera equivalente, promediando sobre diferentes posiciones del centro de la esfera en el mismo cluster percolante.

Por otro lado, considerando el comportamiento subcrítico del sistema, es decir cuando $p < p_c$, se observa que el tamaño de los clusters es finito, del orden de la longitud de correlación ξ , y por lo tanto auto-similares sólo hasta esta escala, lo cual corresponde a una cota de longitud superior natural del sistema.

Cuando $p > p_c$, la longitud de correlación ξ sigue siendo una medida del tamaño promedio de los clusters finitos del sistema y también de los “hoyos” más grandes. Es decir que para escalas de longitud menores que la longitud de correlación ξ , el sistema es auto-similar y puede ser tratado como fractal, mientras que para escalas de longitud mayores el sistema se percibe como homogéneo.

Esta estructura del cluster percolante implica que la masa escala de diferente forma para longitudes menores y mayores que ξ :

$$S(r) \sim \begin{cases} r^{d_f}, & r < \xi \\ r^d, & r > \xi \end{cases}, \quad (2.6)$$

donde d es la dimensión del espacio en el que se encuentra la red.

Esto permite obtener la dimensión fractal d_f al relacionarla con otros exponentes críticos. Un sitio arbitrario de la red en una región de volumen V pertenece al cluster percolante con probabilidad S/V (con S la masa del cluster infinito encerrado en V), por lo que si el tamaño lineal de la región es menor que ξ , el cluster es autosimilar y por lo tanto

$$P_\infty \sim \frac{r^{d_f}}{r^d} \sim \frac{\xi^{d_f}}{\xi^d}, \quad r \leq \xi. \quad (2.7)$$

Expresando ambos lados de la ecuación como potencias de $(p - p_c)$, tenemos

$$(p - p_c)^\beta \sim (p - p_c)^{-\nu(d_f - d)}, \quad (2.8)$$

y por lo tanto

$$d_f = d - \frac{\beta}{\nu}. \quad (2.9)$$

La dimensión fractal del cluster infinito depende de los exponentes críticos β y ν y dado que estos son universales, d_f también lo es. La ecuación anterior también aplica para los clusters finitos en p_c y por debajo de p_c , mientras que su tamaño lineal sea menor que ξ .

Es posible relacionar a la distancia euclidiana r con la química o topológica l de la siguiente manera:

$$r \sim l^{d_1/d_f} = l^{\nu_1}. \quad (2.10)$$

Esta relación puede escribirse como $l \sim r^{d_{\min}}$, donde el exponente $d_{\min} \equiv 1/\nu_1$ puede considerarse como la dimensión fractal del camino más corto entre dos sitios del cluster percolante y se obtiene principalmente por medio de simulaciones numéricas [1].

La dimensión fractal no es suficiente para caracterizar los clusters percolantes [1, 21] y pueden ser necesarias distintas propiedades geométricas, según la aplicación física que se le dé al modelo de percolación.

2.2.1. Elementos estructurales

Si suponemos que aplicamos una diferencia de voltaje entre dos sitios de un cluster percolante metálico, podemos identificar distintos elementos en su estructura según como transmiten la corriente eléctrica. En la Fig. (2.4) se muestra la estructura de un cluster percolante para el caso de percolación de enlaces.

Se denomina *backbone* a todos los enlaces (o sitios) que conducen la corriente eléctrica, mostrados en la Fig.(2.4) con líneas continuas. Las partes restantes del cluster, en las que se llega a una parte desconectada de la red, y la corriente es cero, se les denomina *dangling*

ends, mostrados con líneas punteadas en la figura. Estos sitios están conectados al backbone por un sólo sitio o enlace.

Se denominan como *red bonds* a los sitios que llevan la corriente total, mostrados con líneas gruesas continuas, y el quitar uno de estos interrumpiría el flujo de la corriente. Si se removieran todos los *red bonds* de un cluster percolante solamente quedarían clusters finitos que se conocen como *blobs* [3].

Dado que los clusters percolantes críticos son objetos autosimilares y tienen hoyos en todas las escalas, podemos hablar del perímetro exterior, denominado *hull*, el cual consiste de los clusters conectados al infinito por una cadena ininterrumpida de sitios vacíos. El perímetro total del sistema incluye los bordes de los hoyos internos.

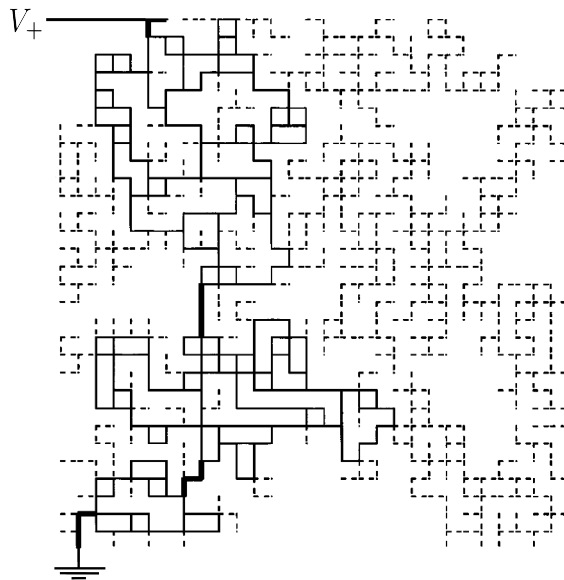


Figura 2.4: Elementos estructurales del cluster percolante. Las líneas continuas muestran el *backbone* del cluster percolante, las líneas punteadas los *dangling ends* y las líneas gruesas continuas los *red bonds*. Tomada de [3]

Capítulo 3

Caminatas aleatorias y procesos de difusión

Una *caminata aleatoria* es un proceso estocástico que puede ser definido en los puntos de una red, en el que es posible considerar a la variable temporal como discreta. A cada paso del tiempo, el *caminante* avanza desde su posición actual hacia otro de los sitios de la red, según una regla aleatoria preestablecida independiente de la historia de la caminata, es decir, es un proceso Markoviano en el cual, el estado actual condiciona al siguiente pero es independiente del pasado [1].

Las *caminatas aleatorias* pueden modelar una gran cantidad de fenómenos y han encontrado aplicación en prácticamente todas las ciencias [1, 11, 18]. Pueden ser utilizadas para modelar el movimiento Browniano de una partícula en un fluido, el movimiento de los electrones en un metal, de bacterias o de ciertos tipos de animales en búsqueda de alimento o el cambio de los índices de precios en la bolsa de valores [15, 16]. En general han sido empleadas para modelar sistemas o procesos que presentan un comportamiento o características estocásticas.

Cabe mencionar que no existe un solo tipo de caminatas aleatorias. Su formulación más sencilla, la caminata aleatoria simple, puede ser modificada para tratar con problemas específicos. En este capítulo revisaremos algunas de las características de las caminatas aleatorias, del espacio en que se llevan a cabo y de su utilidad para modelar procesos de difusión.

3.1. Caminatas aleatorias en una red

Las caminatas aleatorias a menudo se llevan a cabo en discretizaciones del espacio, denominadas redes, las cuales pueden tener distintas configuraciones. Por ejemplo, en dos dimensiones podemos discretizar al plano en una red cuadrada o triangular, donde los sitios de la red corresponden a los vértices de un cuadrado o de un triángulo respectivamente. En el caso tridimensional podemos discretizar al espacio en una red cúbica simple, en donde los sitios de la red corresponden ahora a los vértices de un cubo o en una centrada en el cuerpo, en la que también el centro del cubo es considerado como un sitio de la red.

En el presente trabajo trataremos solamente el caso de la red cuadrada para discretizar el plano. La red cuadrada y la cúbica simple son ejemplos de redes *hipercúbicas simples*. Una red de este tipo, de dimensión d , es un espacio discreto en el que cada punto queda definido por un vector d -dimensional de entradas enteras (\mathbb{Z}^d). En este espacio, cada sitio de la red tiene exactamente $2d$ vecinos cercanos: por ejemplo, en una red cuadrada en $d = 2$, cada sitio tiene 4 vecinos cercanos, mientras que en una red cúbica simple se tiene $d = 3$ y cada sitio tiene exactamente 6 vecinos cercanos. A este número también se le conoce como *número de coordinación de la red* y se denota con la letra z .

Usamos $\langle \cdot \rangle$ para denotar *promedio de ensemble* [18], i.e. se promedia sobre todas las realizaciones o posibilidades del argumento de $\langle \cdot \rangle$, por ejemplo, en el caso de una caminata aleatoria simple unidimensional se tienen $z = 2$ vecinos cercanos, cada uno con probabilidad de transición $p = 1/2$, y los desplazamientos posibles están dados por $e_i = \pm 1$. Por lo tanto, para una caminata de n pasos, dado que en cada uno de los pasos se tienen 2 posibilidades, en total tenemos 2^n secuencias de pasos posibles, promediando sobre todas estas posibles secuencias, tenemos que el desplazamiento promedio es

$$\langle r(n) \rangle = \sum_{i=1}^n \langle e_i \rangle = 0 . \quad (3.1)$$

Si ahora consideramos una caminata aleatoria simple en una red de dimensión $d \geq 2$, y suponemos que el caminante tiene la misma probabilidad, $p = 1/z$, de brincar en cada dirección en el siguiente paso del tiempo, el desplazamiento neto después de n pasos será:

$$\mathbf{r}(n) = \sum_{i=1}^n \mathbf{e}_i, \quad (3.2)$$

donde \mathbf{e}_i es un vector aleatorio unitario que apunta al lugar del vecino más cercano representando el paso i -ésimo de la caminata.

Dado que en una caminata aleatoria simple todas las direcciones de movimiento tienen la misma probabilidad, entonces tenemos que todas las secuencias de desplazamientos \mathbf{e}_i son equivalentes y por lo tanto, $\langle \mathbf{e}_i \rangle = 0$; entonces, el desplazamiento promedio (sobre un ensemble de caminatas), para cualquier n es

$$\langle \mathbf{r}(n) \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \mathbf{e}_i \rangle = 0. \quad (3.3)$$

Por otro lado, dado que los pasos de la caminata son independientes tenemos que $\langle \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i \rangle = 1$, y $\langle \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_i \rangle = 0$ para $i \neq j$, y el desplazamiento cuadrático medio es [1]

$$\langle r^2(n) \rangle = \left\langle \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{e}_i \right)^2 \right\rangle = n + 2 \sum_{i < j} \langle \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j \rangle = n. \quad (3.4)$$

De manera general, si el espaciamiento de la red es a y el tiempo para cada paso τ , entonces el tiempo total transcurrido en una caminata de n pasos es $t = n\tau$ y tenemos que

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{a^2}{\tau} t = 2Dt, \quad (3.5)$$

donde se ha definido al término $D = a^2/2\tau$ como el *coeficiente de difusión*. A este tipo de procesos, en los que el desplazamiento cuadrático medio crece linealmente con la variable temporal, se les denomina de *difusión normal*.

La trayectoria de una caminata aleatoria es un objeto aleatorio que a diferentes escalas tiene la misma estructura y puede ser tratado como un fractal.

La dimensión fractal de una caminata aleatoria se denomina *dimensión de camino* [1, 21] y se denota por d_w . Si pensamos en los sitios visitados por el caminante como una *masa*, ésta

es proporcional al tiempo [1] y se tiene que

$$M \sim t \sim r^{d_w}, \quad (3.6)$$

donde r es la distancia recorrida después de un tiempo t . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático cumple la relación:

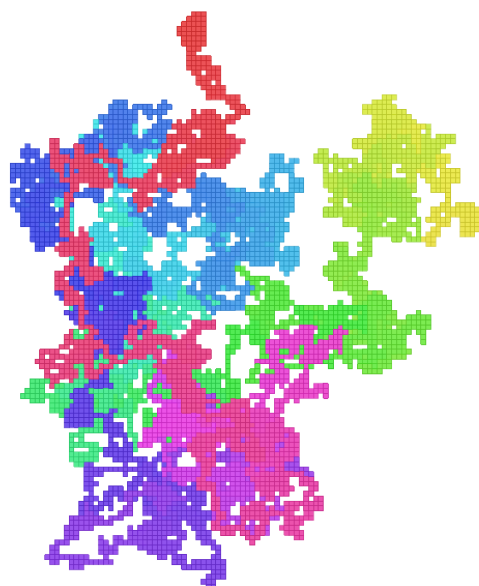
$$\langle r^2(t) \rangle \sim t^{2/d_w}. \quad (3.7)$$

Para el caso de difusión normal, se tiene que $d_w = 2$ y recuperamos la dependencia lineal con el tiempo. En un proceso de difusión en un fractal se tiene $d_w \neq 2$ y se habla de *difusión anómala*. En las siguientes secciones se muestran casos en los que se presenta este tipo de comportamiento.

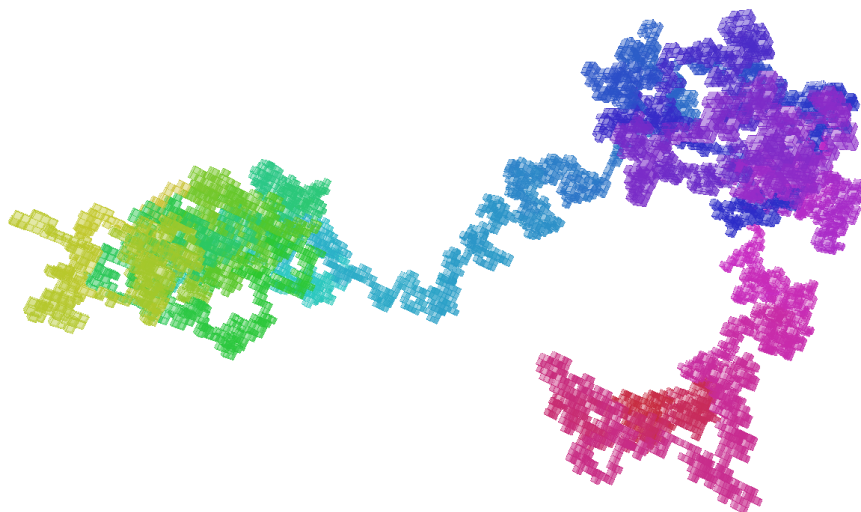
3.2. Difusión anómala

En una caminata aleatoria simple, dado que no se imponen restricciones sobre los sitios de la red, el caminante puede visitar libremente todos los sitios de la misma, es decir, el proceso se lleva a cabo en un medio *homogéneo*. Esta característica del medio y el que todas las direcciones de transición tengan la misma probabilidad, hacen que la caminata aleatoria simple modele un proceso de difusión normal. Estas son las características que pueden ser modificadas para obtener procesos de *difusión anómala*.

Un medio *heterógeno* o *desordenado*, es uno en el que su estructura no es homogénea, como en un fractal, o a una red en la que no todos los sitios están disponibles, como en el modelo de percolación. Por otro lado, también se puede considerar el caso en el que las probabilidades de transición no son las mismas para todos los vecinos cercanos de un sitio en la red, como en las caminatas aleatorias con sesgo, en las que cierta dirección tiene mayor probabilidad que las demás. En ambos casos existe cierta heterogeneidad en el proceso y, bajo ciertas condiciones, se presenta difusión anómala.



(a) Trayectoria de una caminata aleatoria simple en una red cuadrada simple.



(b) Trayectoria de una caminata aleatoria simple en una red cúbica simple.



(c) El color indica el paso de tiempo en la caminata

Figura 3.1: Trayectorias de caminatas aleatorias simples en (a) y (b) durante $t_f = 15 \times 10^3$ pasos. El empalme de colores muestra sitios revisitados por el caminante.

3.2.1. Difusión en medios desordenados

Consideremos un caminante que se encuentra inicialmente en un sitio disponible de la red y en cada paso del tiempo intenta moverse de su sitio actual, eligiendo aleatoriamente entre los sitios de sus vecinos cercanos; si el sitio está disponible lo ocupa; en el caso contrario, el caminante se queda en su sitio actual. En ambas situaciones el tiempo t se incrementa en una unidad.

Si ahora después de cierto tiempo t calculamos el desplazamiento cuadrático medio $\langle r^2(t) \rangle$, promediado ya sea sobre distintas caminatas en la misma red o realizaciones de la red con la misma probabilidad p , y lo graficamos con respecto del tiempo, encontramos distintos comportamientos.

Para el caso $p = 1$, tenemos una caminata aleatoria simple; todos los sitios de la red están disponibles, y se presenta difusión normal, es decir, el desplazamiento cuadrático medio crece linealmente con el tiempo $\langle r^2(t) \rangle = t$.

Por otro lado, cuando $p < 1$ los lugares disponibles de la red se distribuyen en clusters dependiendo de la probabilidad, es decir, el medio no es homogéneo.

El comportamiento del desplazamiento cuadrático medio resulta ser el de una ley de potencias de la forma $\langle r^2(t) \rangle = ct^k$ con c una constante y por lo tanto al tomar el logaritmo, tenemos que

$$\log \langle r^2(t) \rangle = \log c + k \log t. \quad (3.8)$$

Por lo tanto, al graficar de forma doble logarítmica, obtenemos líneas rectas con la pendiente correspondiendo al exponente k de la ley de potencias y de esta forma es posible clasificar el comportamiento asintótico en difusión normal y anómala.

El comportamiento para tiempos largos corresponde a difusión normal ($k = 1$) para concentraciones supercríticas $p > p_c$, por otro lado cuando $p < p_c$, el desplazamiento cuadrático medio $\langle r^2(t) \rangle$ se acerca asintóticamente a un valor constante, es decir $k = 0$. Justo en el punto crítico, $p = p_c$, el exponente k toma un valor intermedio entre estos dos extremos, y se presenta difusión anómala debido a la estructura autosimilar a todas las escalas del cluster percolante. Este comportamiento se muestra en la Fig. 3.2 .

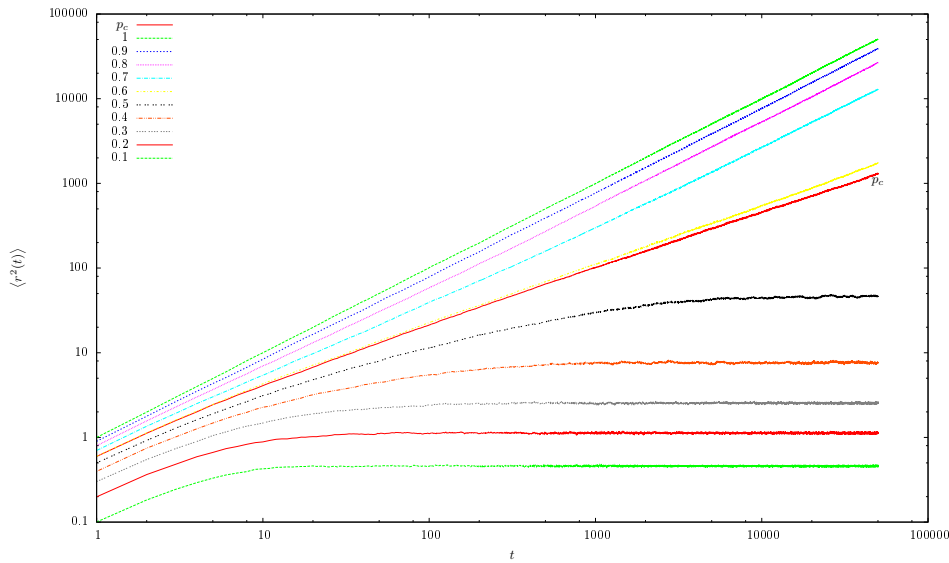


Figura 3.2: $\langle r^2(t) \rangle$ vs t para distintos valores de p (Gráfica log-log).

Esta diferencia de comportamiento se puede entender de la siguiente manera: para $p < p_c$, sólo hay clusters finitos dispersos y el movimiento del caminante queda restringido dentro de ellos. Por lo tanto, $\langle r^2(t) \rangle$ se aproxima asintóticamente a un valor constante relacionado con el tamaño promedio de los clusters para cada valor de la probabilidad p , medido por la longitud de correlación ξ .

Cuando $p > p_c$, existen ciertos hoyos en la red, pero para distancias mayores que la longitud de correlación ξ definida en la Sección (2.1.1), el caminante sólo siente el promedio de estos. Por lo tanto, el desorden del medio actúa como una fuerza de fricción que retrasa el proceso de difusión normal, pero no lo evita.

3.2.2. Caminatas aleatorias con sesgo

Decimos que una caminata aleatoria tiene sesgo si hay una dirección espacial en la que la probabilidad de transición es mayor que en las demás. Estas pueden ser utilizadas para modelar fenómenos de transporte fuera de equilibrio en medios homogéneos o heterogéneos en respuesta a un campo externo, tales como la difusión de iones en geles cromatográficos y la conducción de electrones en semiconductores dopados en presencia de un campo eléctrico fuerte. [5]

El sesgo puede ser *cartesiano* [1], en donde se aplica en una dirección fija en el espacio, o *topológico*, en donde se aplica en la dirección en que aumenta la distancia química definida en la Sección (2.1.1). En el presente trabajo trabajamos con *sesgo cartesiano* y presentamos tres modelos diferentes para el campo externo, los cuales hemos nombrado en referencia a los autores del libro o artículo donde son presentados.

El problema de difusión en redes percolantes bajo un campo externo ha sido tratado por distintos autores haciendo uso de métodos numéricos y analíticos [2, 4, 5, 6, 8, 12, 19, 22]; en la mayoría de dichos trabajos se toma principalmente como base y referencia el trabajo desarrollado por Dhar y Stauffer en [6], sobre todo en lo referente al método de aproximación de H_c dado por la Ec. 3.26 y al modelo del campo externo.

Modelo de ben-Avraham – Havlin

En [1], ben-Avraham y Havlin modelan un campo externo de magnitud y dirección constante H asignando una probabilidad $P_+(H)$ de moverse en la dirección del campo y una probabilidad $P_-(H)$ de moverse en sentido contrario, definidas por

$$P_{\pm}(H) = A(1 \pm H), \quad (3.9)$$

donde H es la magnitud del campo y A es un factor de normalización apropiado. La probabilidad de transición en la dirección perpendicular al campo es independiente del mismo y está dada por

$$P_{\perp} = \frac{1}{z} \quad (3.10)$$

donde z es el número de vecinos cercanos de cada sitio de la red en \mathbb{Z}^d . Sumando las probabilidades en cada dirección i , de la condición de normalización tenemos que

$$\sum_i p_i = P_+ + P_- + (z-2)P_{\perp} = A(1+H) + A(1-H) + \frac{z-2}{z} = 1.$$

Por lo tanto $\sum_i p_i = 2A + \frac{z-2}{z} = 1$, y entonces $A = \frac{1}{z}$

La magnitud del campo es un número real en el intervalo $[0, 1]$. Cuando $H = 0$ no hay campo y se recupera la caminata aleatoria simple. El caso $H = 1$ representa el caso de magnitud máxima del campo y se tienen las probabilidades de transición: $P_+ = \frac{2}{z}$, $P_- = 0$, $P_\perp = \frac{1}{z}$.

Modelo de Dhar – Stauffer

Dhar y Stauffer en [6] modelan el campo externo \mathbf{H} de manera que la probabilidad de transición de *todas* las direcciones de movimiento están determinadas por la magnitud del campo. En este caso, en una red con número de coordinación z , cada uno de ellos tiene probabilidad de transición igual a

$$P(H) = \frac{1 - H}{z}; \quad (3.11)$$

excepto la dirección paralela al campo la cual, además de tener la probabilidad anterior, se le asigna una probabilidad de sesgo igual a la magnitud del campo H . Por lo tanto el valor de la magnitud del campo es un número real en el intervalo $[0, 1]$ y la probabilidad total de moverse en la dirección del campo es

$$P_+(H) = H + \frac{1 - H}{z} = \frac{1 + (z - 1)H}{z}. \quad (3.12)$$

Modelado de esta manera, a diferencia del caso anterior, cuando la magnitud del campo es máxima ($H = 1$), el caminante se mueve en la dirección paralela al campo, ignorando las $z - 1$ restantes.

Modelo de Sznitman

Alain Sznitman en [22] investiga el comportamiento asintótico de caminatas aleatorias anisotrópicas en clusters supercríticos en el modelo de percolación de enlaces en \mathbb{Z}^d con $d \geq 2$.

Sznitman denota por B_d al conjunto de vecinos cercanos de cada sitio, por $\Omega = \{0, 1\}^{B_d}$ al conjunto de configuraciones y utiliza la relación $\mathbf{y} \sim \mathbf{x}$ para denotar que el sitio \mathbf{y} es un vecino cercano del sitio \mathbf{x} . Define a un enlace (o sitio) $b \in B_d$ como *abierto* o *disponible* en la configuración $\omega \in \Omega$ cuando $\omega(b) = 1$ y *cerrado* o *prohibido* cuando $\omega(b) = 0$. La dirección del

sesgo de la caminata aleatoria es la del vector unitario $\hat{\mathbf{l}} \in S^{d-1}$, donde S^{d-1} es la $d-1$ -esfera correspondiente al espacio considerado, con magnitud $H > 0$, lo cual determina el vector del campo $\mathbf{H} = H\hat{\mathbf{l}}$.

La probabilidad de transición $P_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}}$ con $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d$ es tal que:

$$\begin{aligned} P_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}} &= 1, \text{ si todos los vecinos adyacentes son sitios prohibidos de la red,} \\ P_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}} &= \frac{e^{\mathbf{H} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x})}}{n_{\omega}(\mathbf{x})}, \text{ si } \mathbf{y} \sim \mathbf{x} \text{ y } \omega(\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\}) = 1, \\ P_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}} &= 0, \text{ en todos los demás casos,} \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde el denominador $n_{\omega}(\mathbf{x})$ está dado por

$$n_{\omega}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{z} \sim \mathbf{x}, \omega(\{\mathbf{x}, \mathbf{z}\})=1} e^{\mathbf{H} \cdot (\mathbf{z} - \mathbf{x})}. \quad (3.14)$$

Por lo tanto, la probabilidad de transición para una partícula en difusión, corresponde a una distribución de probabilidad de Boltzmann.

En dos dimensiones, si suponemos que, en principio, todos los vecinos cercanos de un sitio \mathbf{x} están disponibles, i.e. $\omega(\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\}) = 1 \forall \mathbf{y} \in B_d$, y el vector del campo es $\mathbf{H} = (0, H)$, entonces $n_{\omega}(\mathbf{x}) = 2 + e^H + e^{-H}$ y la probabilidad de transición en la dirección del campo es

$$P_+(H) = \frac{e^H}{2 + e^H + e^{-H}} = \frac{e^H}{2[1 + \cosh(H)]}, \quad (3.15)$$

en la dirección antiparalela

$$P_-(H) = \frac{e^{-H}}{2[1 + \cosh(H)]} \quad (3.16)$$

y en la perpendicular en ambos sentidos

$$P_{\perp}(H) = \frac{1}{2[1 + \cosh(H)]}. \quad (3.17)$$

Este modelo para el campo externo permite que la magnitud del campo H pueda ser cualquier

número real y sólo considera transiciones a vecinos cercanos.

3.2.3. Velocidad de deriva

La incorporación de un campo externo en el proceso de difusión, ya sea en un medio homogéneo o en uno desordenado, induce un desplazamiento medio no cero en la dirección del campo. En un medio homogéneo se obtiene un comportamiento lineal de la forma

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle \simeq vt$$

con $v = \text{cte}$. Por otro lado, en el caso de un medio desordenado, para valores pequeños del campo este se incrementa de manera lineal con el tiempo [6], mientras que para valores mayores del campo el desplazamiento promedio $\langle \mathbf{r}(t) \rangle$ sigue una ley de potencias de la forma

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle \propto t^\gamma, \quad (3.18)$$

donde $\gamma < 1$ es un exponente no-universal, dependiente del campo [5]. Para todos los valores del campo, en la dirección perpendicular a éste, el desplazamiento promedio es cero [2].

La *velocidad de deriva* puede ser definida [2, 5, 6] como el límite para tiempos largos del cociente entre el desplazamiento promedio $\langle r(t) \rangle$ y el tiempo, es decir,

$$v(t) = \frac{\langle \mathbf{r}(t) \rangle}{t} \implies v_{\text{deriva}} = \lim_{t \rightarrow \infty} v(t) \quad (3.19)$$

La velocidad de deriva presenta una transición de fase dinámica en función de la magnitud del campo externo [1, 2, 4, 5, 6, 8, 12, 22]; para $d \geq 2$ y $p \geq p_c$, existe un valor crítico $H_c(p)$, tal que para $H < H_c(p)$, la velocidad de deriva asintótica alcanza un valor constante y sólo cuando $H \geq H_c(p)$ la velocidad de deriva es nula (Fig. 3.3).

En el régimen subcrítico, para valores pequeños del campo ($H \ll H_c(p)$), $v(t)$ alcanza el valor asintótico de la velocidad de deriva rápidamente y es proporcional al valor del campo. Por otro lado, para valores del campo menores y cercanos a $H_c(p)$, $v(t)$ aumenta hasta un valor máximo, durante un transiente, para después disminuir lentamente en el tiempo hasta

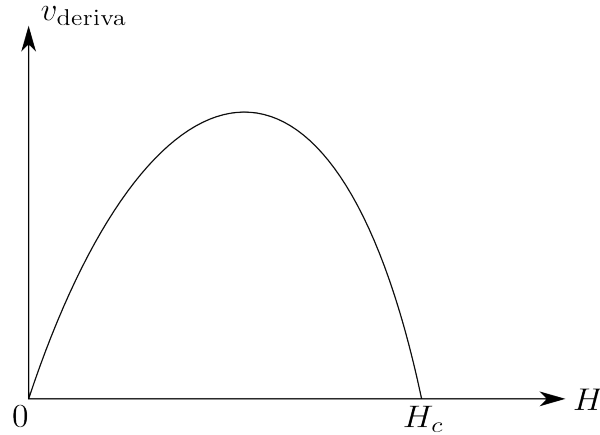


Figura 3.3: v_{deriva} presenta una transición de fase en función de la magnitud del campo, para $H < H_c(p)$, la velocidad de deriva alcanza un valor constante y sólo cuando $H \geq H_c(p)$ es nula.

alcanzar un valor asintótico positivo.

La transición de fase de la velocidad puede ser entendida en términos de *trampas*: el caminante, al ser empujado hacia nuevos territorios por el campo aplicado, debido a la naturaleza desordenada del medio, algunas veces es dirigido hacia *callejones sin salida* que actúan como pozos de potencial que retardan notoriamente el proceso de difusión [4]. Este mecanismo se hace más fuerte con la intensidad del campo y es la razón por la cual se presenta la transición de fase en la velocidad de deriva.

Para una trampa de profundidad l (Fig. 3.4), el tiempo de retraso τ varía como $\tau \propto \lambda^l$, donde λ es el cociente entre las probabilidades de transición a favor y en contra del campo, i.e.

$$\lambda = \frac{P_+(H)}{P_-(H)}. \quad (3.20)$$

Por otro lado, la densidad de las trampas de profundidad l disminuye exponencialmente con l , es decir que la probabilidad de encontrar una trampa de profundidad l es de la forma $\text{Prob}(l) = \exp(-Al)$ [5], donde A es una constante que depende de la probabilidad de ocupación p . Por lo tanto el tiempo de retraso promedio $\langle \tau \rangle$ está dado por

$$\langle \tau \rangle \sim \sum_{l=0}^{\infty} \text{Prob}(l) \lambda^l = \sum_{l=0}^{\infty} (\lambda e^{-A})^l \quad (3.21)$$

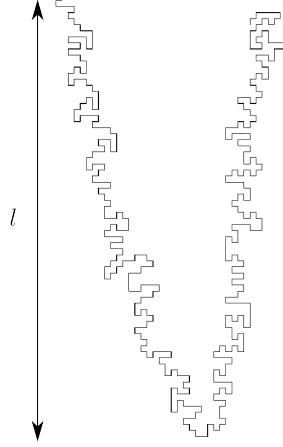


Figura 3.4: Trampa de profundidad l en un medio desordenado bidimensional. Tomada de [8]

Para $H < H_c$, el tiempo de retraso promedio es finito, i.e. la serie converge y se tiene

$$\langle \tau \rangle \sim \sum_{l=0}^{\infty} (\lambda e^{-A})^l = \frac{1}{1 - \lambda e^{-A}} ; \quad (3.22)$$

en consecuencia, el valor asintótico de la velocidad de deriva es finito y disminuye a cero cuando H tiende a H_c .

Para $H > H_c$ la suma anterior diverge y la velocidad de deriva, que varía de manera inversa al tiempo de retraso, es cero. Considerando las condiciones de convergencia de la serie, el valor crítico puede ser determinado a través de λ por la ecuación

$$\lambda_c e^{-A} = 1 , \quad (3.23)$$

para valores supercríticos del campo el caminante se mueve una distancia R del orden $1/\text{Prob}(l)$ antes de encontrar la primer trampa de profundidad l , y el tiempo para escapar de la misma es de orden λ^l . Por lo tanto, de la Ec. 3.23 tenemos que

$$R \propto \exp(A l) = \exp(A \ln t / \ln \lambda) = \exp(\ln t \ln \lambda_c / \ln \lambda) = t^{\ln \lambda_c / \ln \lambda} = t^{1-\alpha} , \quad (3.24)$$

donde

$$\alpha = 1 - \frac{\ln \lambda_c}{\ln \lambda} . \quad (3.25)$$

Cuando $H = H_c$, el comportamiento de la velocidad de deriva en función del tiempo es de la forma

$$v(t) \simeq \frac{1}{\log t} . \quad (3.26)$$

En el caso $H < H_c$, $v(t)$ tiende a una constante proporcional a $(H_c - H)$ para tiempos largos. Varía como $t^{-\alpha}$ para $H > H_c$, con α determinada por la Ec. 3.25. Estos comportamientos pueden incorporarse en la expresión [6]

$$v(t) = \frac{K\alpha}{(t/t_0)^\alpha - 1} , \quad (3.27)$$

donde K es una constante, independiente de t , pero ligeramente dependiente de H . Para $H = H_c - \epsilon$ con ϵ pequeño y $\epsilon > 0$, inicialmente, hasta cierto tiempo de relajación T , dado por

$$T \sim \exp(\text{const}/\epsilon) \quad (3.28)$$

la velocidad decrece como $1/\log t$ pero para $t > T$ alcanza un valor asintótico proporcional a ϵ .

En [5, 6, 8] se ha propuesto que, el valor asintótico de la velocidad de deriva v_∞ presenta un comportamiento no-monótono y unimodal en función del sesgo H y se hace cero para el valor crítico del campo H_c ; este comportamiento no había sido mostrado, para el modelo de Sznitman, hasta el presente trabajo.

La dependencia de $H_c(p)$ resulta de que un incremento en p aumenta la conectividad de los clusters, y en consecuencia la profundidad promedio de las trampas disminuye, por lo tanto es necesario un campo más intenso para lograr la divergencia en el tiempo de retraso promedio, $\langle \tau \rangle$ [4].

Sin embargo, a pesar de que en la literatura se reconoce la existencia de la transición de fase para la velocidad de deriva, no se ha logrado obtener una verificación numérica clara, principalmente debido a las limitaciones inherentes de una simulación computacional, (principalmente, la inevitabilidad de tratar con sistemas finitos y efectos de frontera) , y a la observación de oscilaciones a escalas logarítmicas del exponente efectivo definido por

$$k_{\text{eff}} = \frac{d \log_{10} \langle r^2(t) \rangle}{d \log_{10} t}, \quad (3.29)$$

el cual describe la variación con el tiempo de la ley de potencias efectiva. Esta definición no es equivalente a la ley de potencias $\langle r^2(t) \rangle \propto t^k$ con $k = k_{\text{eff}}$. El exponente efectivo sólo representa la tasa de variación de $\log_{10} \langle r^2(t) \rangle$ con respecto a $\log_{10} t$.

Las oscilaciones en k_{eff} han sido reportadas en [6, 12, 19] para valores de H y p cercanos a 1, utilizando el modelo del campo de Dhar y Stauffer y percolación de enlaces en una red cuadrada simple. Se considera que este comportamiento es provocado por una oscilación general en el proceso de difusión a escalas logarítmicas que se superpone al proceso de deriva [12] y enmascara la transición de fase [6].

Parte II

Desarrollo

Capítulo 4

Implementación computacional

En este capítulo, se describe la implementación computacional de caminatas aleatorias en estructuras percolantes bajo un campo externo utilizando el modelo de Sznitman y las cantidades relevantes que son útiles para determinar algunas de sus propiedades.

4.1. Parámetros y caracterización del sistema

Para la simulación de procesos de difusión en medios desordenados bajo un campo externo, hemos utilizado caminatas aleatorias con sesgo cartesiano en redes supercríticas del modelo de percolación de sitio, haciendo uso del modelo de Sznitman para el campo externo. Los parámetros del sistema son la probabilidad de ocupación p y la magnitud H del campo externo constante. Estos parámetros definen la estructura y la dinámica del sistema, respectivamente.

La caracterización del sistema se realiza utilizando el desplazamiento medio, el desplazamiento cuadrático medio, la velocidad de deriva y visualizaciones de la red. Cabe mencionar que el presente trabajo incluye tanto el desarrollo de simulaciones computacionales del sistema, como visualizaciones del mismo, por lo cual es posible observar el proceso de difusión y caracterizar cualitativamente el comportamiento del sistema en función de los parámetros definidos anteriormente.

4.2. Dinámica del sistema

Hemos implementado un modelo dinámico o “cinético” [23] de percolación en el que la estructura de la red se genera de manera simultánea con la dinámica de las partículas en difusión.

4.2.1. Modelación de procesos de difusión

Procedemos a describir la implementación computacional que se ha utilizado para la modelación de procesos de difusión en presencia y en ausencia de un campo constante externo.

Difusión en ausencia de campos externos

Para la modelación de procesos de difusión en ausencia de campos externos, implementamos caminatas aleatorias simples a vecinos cercanos en la red. En este caso, todas las direcciones i son equivalentes, con la misma probabilidad de transición p_i .

En la red cuadrada simple, cada sitio tiene $z = 2d = 4$ vecinos cercanos y por lo tanto $p_i = p = 1/4$ para cada una de las direcciones posibles.

A partir de las probabilidades de transición, se definen subintervalos de $[0, 1]$ de tal forma que en cada paso del tiempo se genera un número aleatorio $r_d \in [0, 1]$ el cual, según pertenezca a alguno de los subintervalos definidos, permitirá elegir la dirección de movimiento. En la fig. (4.1b) se muestran de manera esquemática los subintervalos de decisión.

Por lo tanto si $r_d \in [0, p]$ el caminante se moverá en la dirección 1, si $r_d \in [2p, 3p]$ en la dirección 3 y así respectivamente para cada uno de los subintervalos y direcciones posibles.

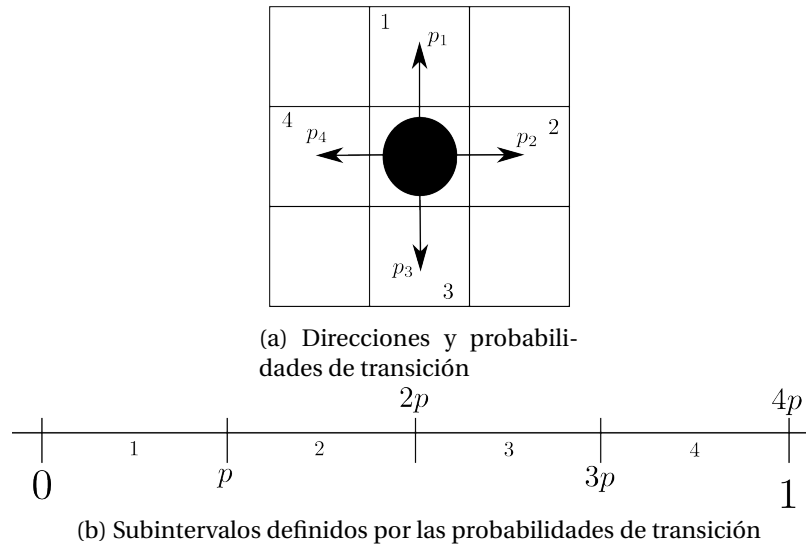


Figura 4.1: Caminata aleatoria simple en la red cuadrada.

Difusión en presencia de un campo constante externo

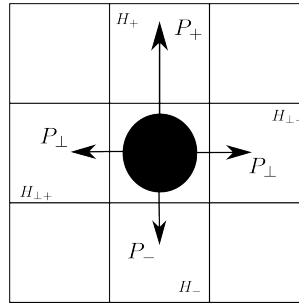
Para la realización de simulaciones de procesos de difusión en presencia de un campo externo, utilizamos caminatas aleatorias con sesgo cartesiano¹ y los modelos discutidos en la sección (3.2.2). En dichos modelos se tiene probabilidad $P_+(H)$ de moverse en la dirección del campo, $P_-(H)$ de moverse en contra y $P_\perp(H)$ para la dirección perpendicular (en el modelo de Dhar-Stauffer se tiene $P_\perp(H) = P_-(H)$).

La magnitud del campo es un número real ($H \in \mathbb{R}$), donde $H = 0$ corresponde a la ausencia de campo y se recupera el caso de la caminata aleatoria simple para todos los modelos considerados. Por otro lado, salvo para el modelo de Sznitman, en donde se permiten valores $H > 1$, la magnitud máxima de H es 1, los valores de las probabilidades y el comportamiento del sistema dependen del modelo del campo considerado.

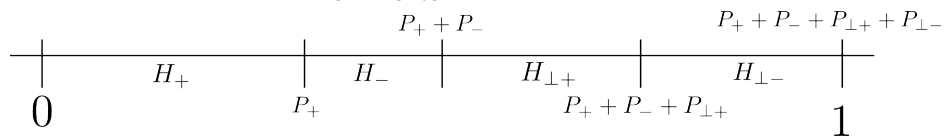
De la misma forma que en el caso en ausencia de campo se toma un número aleatorio $r_d \in [0, 1]$ y los subintervalos de decisión definidos por las probabilidades de transición que se muestran en la fig. (4.2b). Denotamos con H_+ a la dirección paralela al campo, a la antiparalela con H_- , a la dirección 2 con $H_{\perp+}$ y a la 4 con $H_{\perp-}$. En este trabajo se aplica el sesgo en la dirección $(0, 1)$.

¹Una caminata aleatoria con sesgo cartesiano es aquella en la cual existe una dirección preferencial en el espacio, cuya probabilidad de transición es mayor que para las direcciones restantes

Inicializamos al caminante en un sitio aleatorio de la red, y evolucionamos el sistema a cada paso del tiempo. A continuación se describe la forma en la que se genera la red percolante de manera simultánea al proceso de difusión.



(a) Probabilidades de transición y direcciones de movimiento



(b) Subintervalos y probabilidades de transición

Figura 4.2: Caminata aleatoria con sesgo cartesiano en la red cuadrada

4.3. Crecimiento dinámico del sustrato percolante

En el modelo de percolación, el parámetro que controla la estructura del sistema es la porosidad o probabilidad de ocupación p , es decir que un sitio de la red esté disponible con probabilidad p o prohibido con probabilidad $(1 - p)$; los sitios disponibles son aquéllos por los cuales el caminante puede desplazarse y los prohibidos contienen obstáculos que impiden el movimiento.

La probabilidad de ocupación p define un intervalo, análogo a los utilizados para decidir la dirección de movimiento, como se muestra en la fig. (4.3).

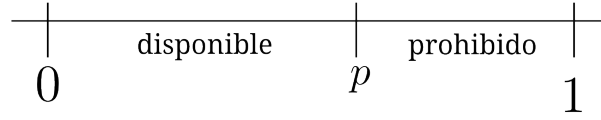


Figura 4.3: Subintervalos definidos por la probabilidad de ocupación p

La manera convencional de generar una red percolante con porosidad p es, una vez definido su tamaño $L \times L$ en el caso bidimensional, recorrer la red sitio por sitio decidiendo aleatoriamente si cada uno de ellos está ocupado o libre.

En el presente trabajo generamos la red *dinámicamente* al mismo tiempo que el movimiento de las partículas en difusión. Esto se hace mediante un *mapa*, es decir, una estructura de datos en forma de arreglo asociativo, que contiene la lista de los lugares disponibles y prohibidos de la red.

Si denotamos por Ω a la red en la que se llevan a cabo los procesos de difusión y por Ω_{ij} nos referimos al sitio con coordenadas (i, j) de la red, entonces definimos a ω_{ij} como el estado de ocupación del sitio Ω_{ij} de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \omega_{ij} &= 0, \text{ si } \Omega_{ij} \text{ es un sitio prohibido de la red;} \\ \omega_{ij} &= k, \text{ con } k > 0, \text{ si } \Omega_{ij} \text{ es un sitio disponible de la red.} \end{aligned} \quad (4.1)$$

A cada paso del tiempo, una vez que se ha decidido la dirección de movimiento, el caminante verifica si el lugar Ω_{ij} que ocupará se encuentra en el mapa, es decir si ω_{ij} ya tiene un valor definido. Si no es el caso, se genera un número aleatorio r_p en el intervalo $[0, 1]$; si $r_p < p$, el sitio está disponible, el caminante lo ocupa y se asigna $\omega_{ij} = 1$, y si $r_p > p$, el sitio es un obstáculo, el caminante permanece en su lugar y se asigna $\omega_{ij} = 0$ (Fig. 4.4a).

Por otro lado, si el sitio Ω_{ij} ya se encuentra registrado en el mapa, cuando se tiene $\omega_{ij} = 0$ el sitio Ω_{ij} corresponde a un obstáculo y el caminante permanece en su lugar, y en el caso $\omega_{ij} = k$ el caminante ocupa el sitio Ω_{ij} y se asigna $\omega_{ij} = k + 1$, lo cual representa que el sitio Ω_{ij} de la red ha sido revisitado. Cada vez que se ocupa un lugar disponible de la red se aumenta el valor de ω_{ij} en una unidad (Fig. 4.4b).

En cada paso del tiempo, el mapa se ve modificado con los sitios de la red que han sido *descubiertos* por el caminante a su paso; de esta manera, aseguramos que el proceso de difusión

se lleva acabo dentro de los clusters de la red percolante y evitamos que sean ocupados sitios que han sido marcados como prohibidos anteriormente.

Si ahora consideramos N caminantes dentro de la misma red sin interacciones entre ellos, y consideramos que el mismo mapa está disponible para todos, se tiene un mapa global en el que cada uno agrega los sitios disponibles y prohibidos de la red que va descubriendo a su paso, el medio es construido de manera colectiva y podemos utilizar un mapa de color para mostrar la frecuencia con la que han sido visitados los sitios de la red en función de su estado de ocupación ω_{ij} . En la Fig.(4.5b) , se muestra la correspondencia de colores, considerando que la frecuencia máxima corresponde al número N de caminantes dentro de la red y en la Fig. (4.5a) se muestra un ejemplo del mapa de frecuencias obtenido para un cluster percolante.

4.4. Cantidades calculadas en el modelo

Para caracterizar el sistema, calculamos distintas cantidades que reflejan el comportamiento del mismo. Cada caminante, a cada iteración, como objeto computacional dentro de la simulación, posee la información tanto de su posición inicial como de su posición actual. Esta información se utiliza para calcular el desplazamiento medio $\langle \mathbf{r}(t) \rangle$ de la forma usual

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}^i(t) - \mathbf{r}_o^i], \quad (4.2)$$

donde N es el número total de caminantes, $\mathbf{r}^i(t)$ denota la posición del caminante i en el tiempo t y \mathbf{r}_o^i la posición inicial del caminante i . De forma análoga, el desplazamiento cuadrático medio está dado por

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}^i(t) - \mathbf{r}_o^i]^2. \quad (4.3)$$

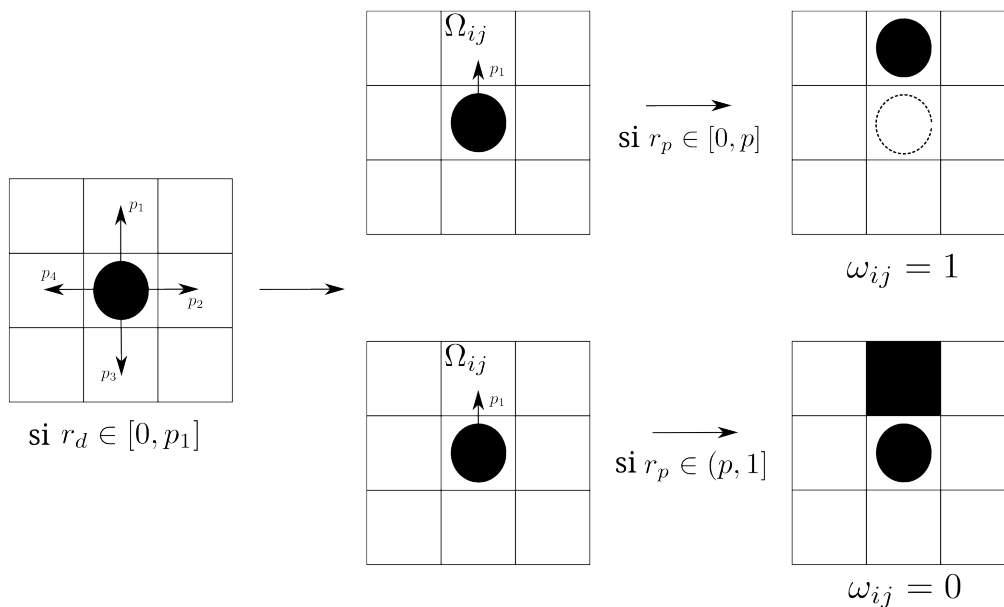
Retomando la definición de $\langle v(t) \rangle$ de la Ec. (3.19), aproximamos la velocidad promedio del sistema por medio de la expresión

$$\langle v(t) \rangle \sim \frac{\langle \mathbf{r}(t) \rangle}{t}, \quad (4.4)$$

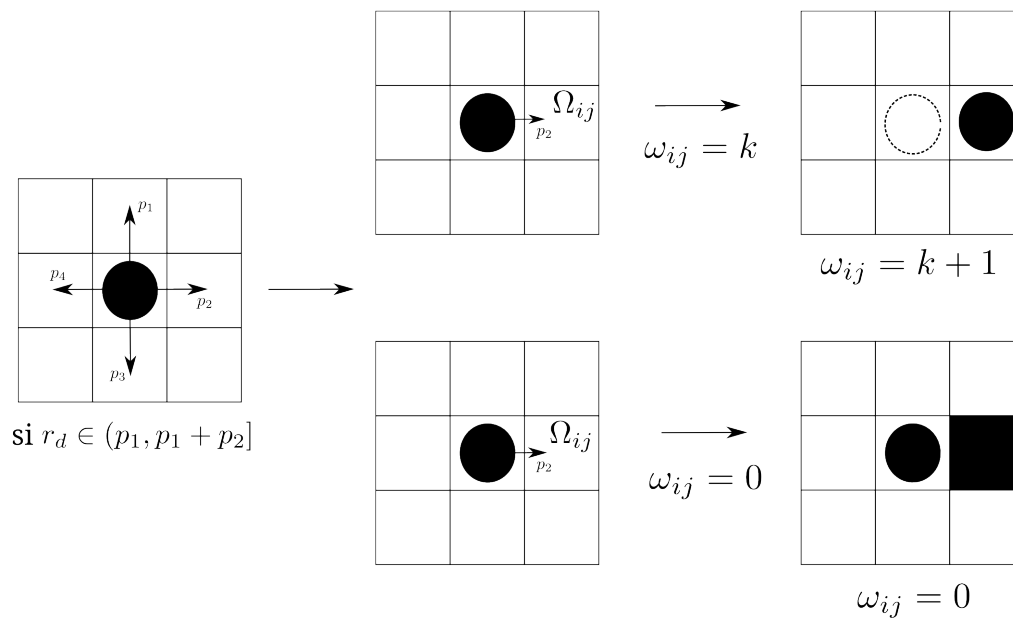
Por otro lado, es posible calcular la velocidad promedio en las direcciones paralela y perpendicular al campo de manera independiente por medio de las expresiones

$$\begin{aligned} \langle v_{\parallel}(t) \rangle &= \frac{\langle y(t) \rangle}{t} = \frac{1}{Nt} \sum_{i=1}^N [y^i(t) - y_o^i] \\ \langle v_{\perp}(t) \rangle &= \frac{\langle x(t) \rangle}{t} = \frac{1}{Nt} \sum_{i=1}^N [x^i(t) - x_o^i] \end{aligned} \quad (4.5)$$

La evolución y comportamiento de estas cantidades en función de los parámetros del sistema se muestran en el Capítulo 5.

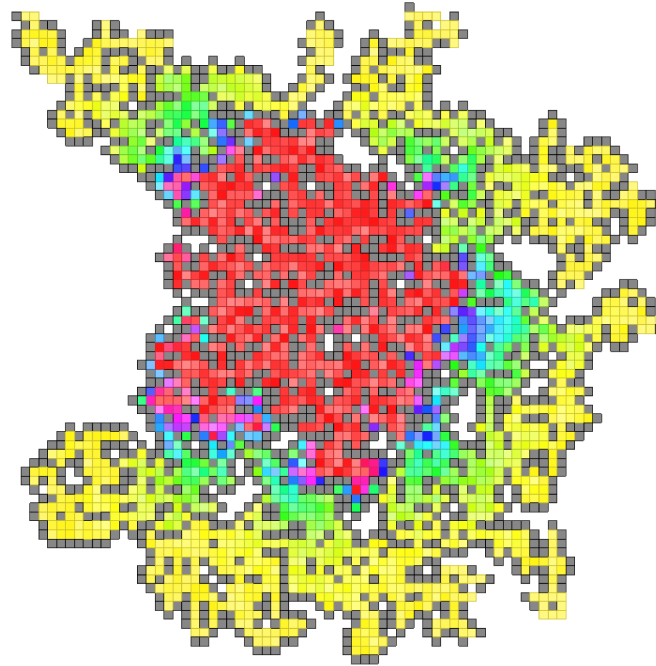


(a) Si el sitio Ω_{ij} no se encuentra en el mapa, se decide su estado ω_{ij}



(b) Si el sitio Ω_{ij} se encuentra en el mapa, dependiendo de su estado ω_{ij} el caminante lo ocupa o permanece en su lugar

Figura 4.4: Posibles dinámicas del sistema en función del estado de ocupación de los sitios de la red



(a) Cluster percolante supercrítico



(b) Correspondencia de color en el mapa de frecuencias en función del número de caminantes dentro de la red

Figura 4.5: Ejemplo de un mapa de frecuencias para un cluster percolante con $N = 80000$ caminantes aleatorios, inicializados en el origen, para $p = 0.65$ y $H = 0$, los sitios prohibidos se marcan en negro, los disponibles según la correspondencia de color de la Fig.(4.5b) .

Capítulo 5

Resultados

En este capítulo, mostramos los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas de procesos de difusión en medios desordenados en ausencia y presencia de un campo externo. Se consideran 10^4 realizaciones de un caminante aleatorio partiendo del origen, en un medio desordenado (red percolante supercrítica) diferente cada vez, de tal manera que los promedios se realizan tanto en el tiempo como sobre realizaciones de las redes. Este número de corridas se ha utilizado tanto para el caso en ausencia de campo externo como en el que éste está presente.

Para el caso en ausencia de campo se realizaron corridas de 5×10^4 pasos y de 10^7 pasos en el caso de las caminatas con sesgo cartesiano. Con esto esperamos obtener información suficiente para caracterizar el comportamiento del sistema en función de los parámetros: probabilidad de ocupación p y magnitud del campo externo H .

5.1. En ausencia de campo externo

En la Fig. (5.1a) se muestra el desplazamiento cuadrático medio $\langle r^2(t) \rangle$ en función del tiempo t para distintos valores de la probabilidad de ocupación en el intervalo $p \in [0.08, 1]$, con pasos de $\Delta p = 0.05$, en una gráfica doble logarítmica.

Observamos que para probabilidades de ocupación menores que la crítica, el desplazamiento cuadrático medio tiende a un valor constante, debido a que en estos casos la difusión se

lleva a cabo solamente en clusters finitos. Para probabilidades supercríticas, $\langle r^2(t) \rangle$ crece en el tiempo, ya que en este caso el medio está conectado en su totalidad por el cluster percolante. En la Fig. (5.2) se muestra la forma en que los caminantes, colocados inicialmente en posiciones aleatorias de la red, exploran el medio y la zona disponible de la red crece en función de la probabilidad de ocupación p .

Otra forma de interpretar la Fig. (5.2) es pensar a los caminantes como semillas de un cristal colocadas aleatoriamente en un sustrato desordenado que crecen en el tiempo; por medio del algoritmo de Hoshen-Kopelman (Apéndice C), podemos ver cómo los cristales coalescen conectando diferentes regiones del medio, o se mantienen en clusters finitos desconectados, en función del desorden presente representado por la probabilidad de ocupación p .

Cuando el desorden del medio es bajo ($p \sim 1$), el cristal crece, cubriendo la mayor parte del sustrato. Conforme el desorden aumenta, los cristales se distribuyen por la superficie del mismo, coalesciendo cuando $p \sim p_c$. En las Fig. (5.2), mostramos visualizaciones de este proceso a diferentes tiempos en una red cuadrada simple de tamaño $L = 100$ con una población de $N = 1500$ caminantes.

En la Fig. (5.1b) hemos graficado las velocidades promedio $\langle v_x(t) \rangle$ y $\langle v_y(t) \rangle$ en función del tiempo t para el mismo rango de probabilidades de ocupación en una gráfica semi-logarítmica. Podemos observar que para todos los valores de la probabilidad de ocupación p , la velocidad promedio tanto en la dirección x como en la dirección y tiende a cero.

5.2. En presencia de campo externo

Dado que el umbral de percolación de sitio para una red cuadrada simple es $p_c = 0.5927460$, realizamos simulaciones del modelo de Sznitman para probabilidades de ocupación supercríticas en el intervalo $p \in [0.65, 0.9]$. Para estos valores de la probabilidad de ocupación, el proceso de difusión no se restringe a clusters finitos y es posible observar el efecto del campo externo en el proceso de difusión.

Se realizaron 10^4 simulaciones independientes para un caminante partiendo del origen, para un medio desordenado diferente cada vez, para valores de la magnitud del campo en el intervalo $H \in [0, 2]$ durante 10^7 pasos.

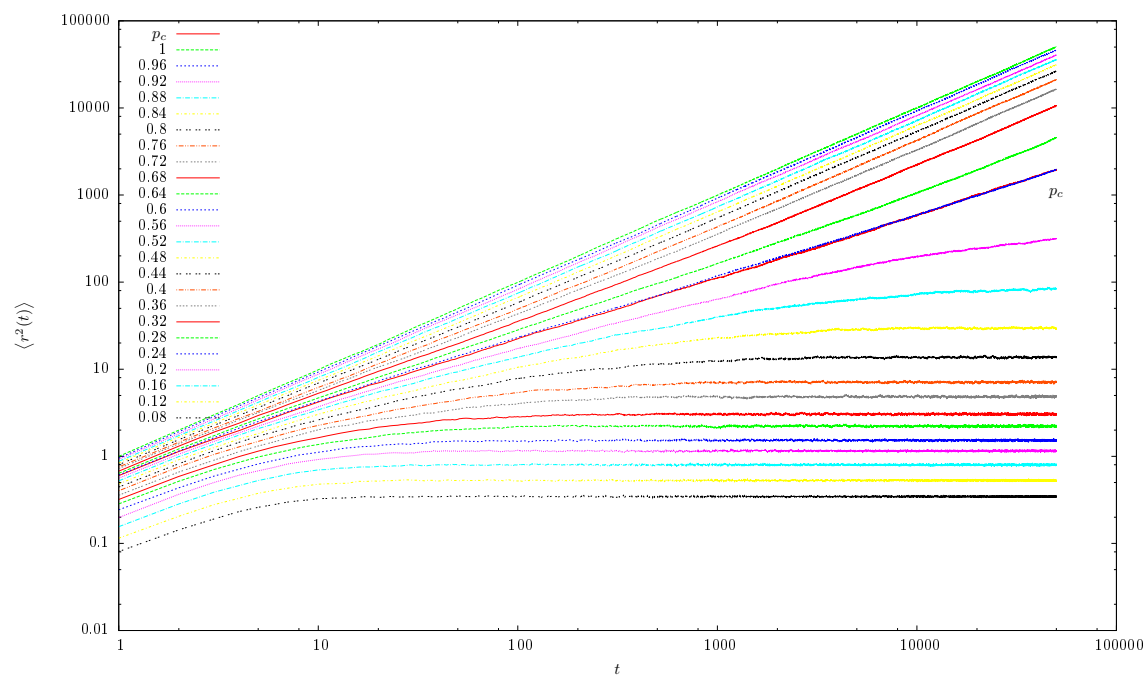
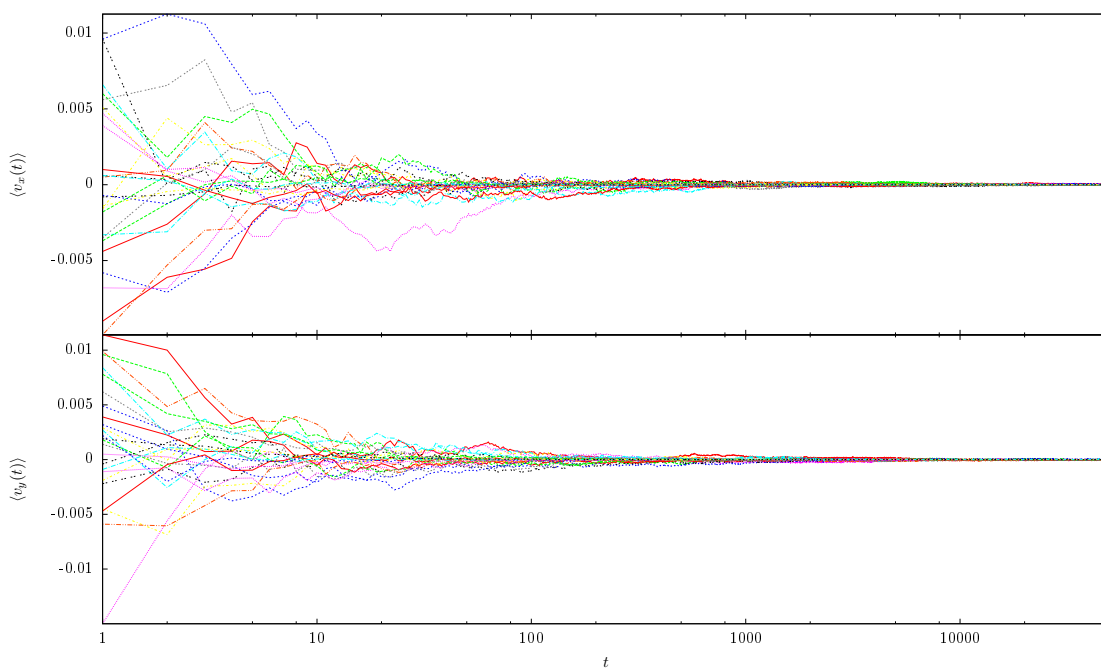
(a) $\langle r^2(t) \rangle$ vs t (Gráfica doble logarítmica) $p_c = 0.5927460$.(b) $\langle v(t) \rangle$ vs t (Gráfica semi-logarítmica) $p \in [0.08, 1]$.

Figura 5.1: Comportamiento del sistema en ausencia de campo externo

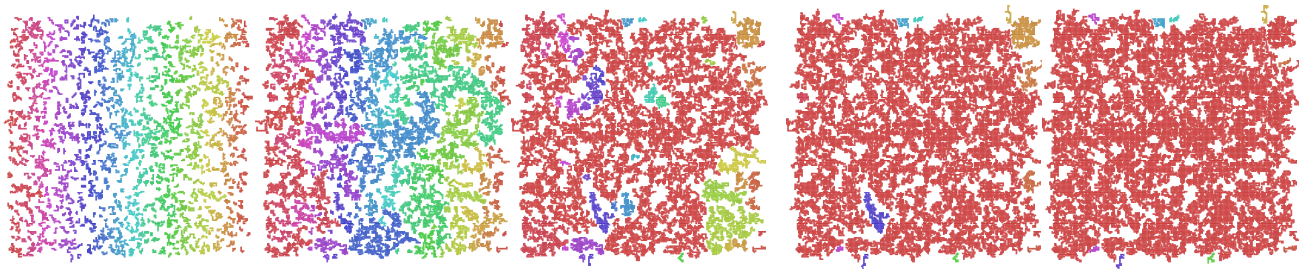
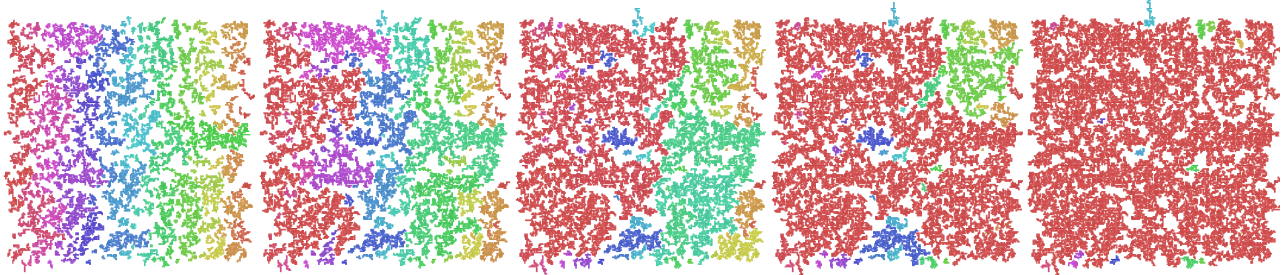
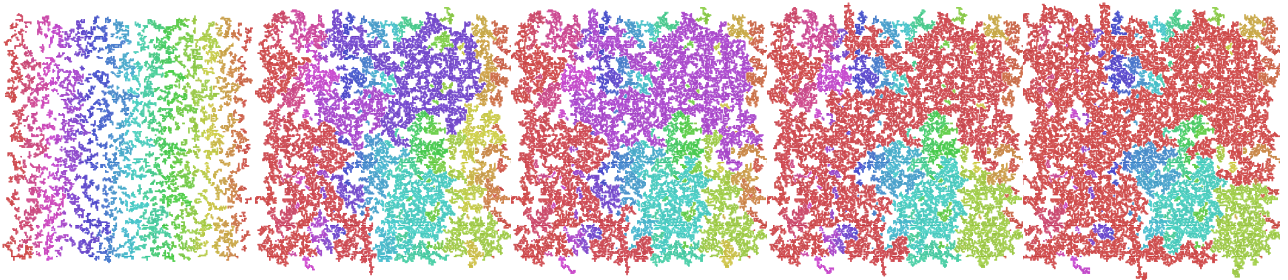
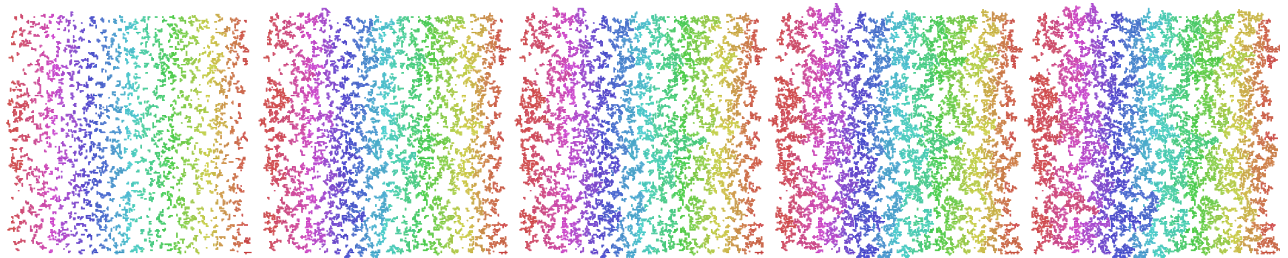
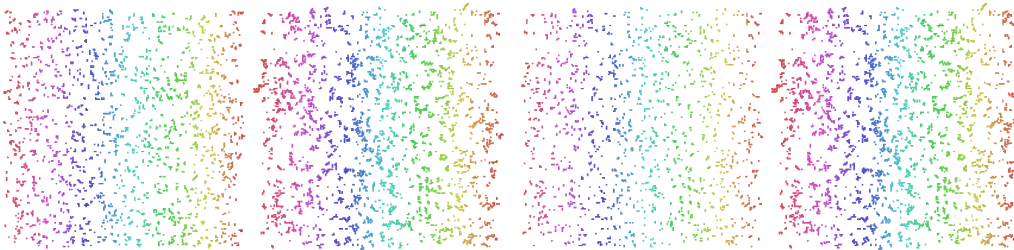
(a) $p = 1$, se muestran $t \in [10, 50]$ con pasos de $\Delta t = 10$ (b) $p = 0.8$, se muestran $t \in [30, 70]$ con pasos de $\Delta t = 10$ (c) $p = p_c = 0.5927460$, se muestran los tiempos $t \in \{50, 220, 280, 310, 500\}$ (d) $p = 0.5$, se muestran los tiempos $t \in \{30, 90, 140, 300, 500\}$ (e) $p = 0.4$, se muestran los tiempos $t \in \{10, 500\}$ (f) $p = 0.3$, se muestran los tiempos $t \in \{10, 500\}$

Figura 5.2: Capturas del crecimiento de los clusters a diferentes tiempos, para distintos valores de p , en una red de tamaño $L = 100$ con $N = 1500$ caminantes inicializados en posiciones aleatorias de la red. Los sitios que pertenecen al mismo cluster se muestran con el mismo color. Para valores pequeños de p los clusters son finitos, al aumentar p la conectividad del medio aumenta.

Del registro de la velocidad promedio en el tiempo final de la simulación,

$$\langle \mathbf{v}(t_f) \rangle = \frac{\langle \mathbf{r}(t_f) \rangle}{t_f}$$

obtuvimos las gráficas de las Figuras 5.3a y 5.3b del espacio $p - H - \langle \mathbf{v}(t_f) \rangle$ y el plano $\langle \mathbf{v}(t_f) \rangle - H$ respectivamente, en las que es posible observar el comportamiento general de la velocidad en función del campo.

Para todos los valores de la probabilidad de ocupación, se observa que, en concordancia con la literatura [6], para valores pequeños de la magnitud del campo externo la velocidad de deriva asintótica aumenta de manera proporcional al valor del campo, i.e.

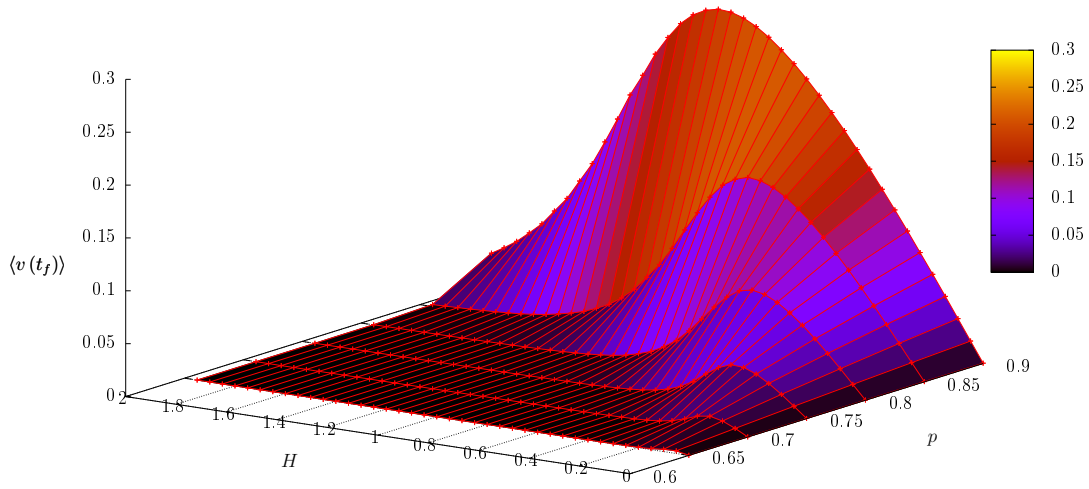
$$v_{\infty}(H) \sim k_l(p) H \quad . \quad (5.1)$$

Sin embargo, en dicha referencia no se especifica el rango de aplicabilidad de esta condición. Realizando un ajuste lineal de las gráficas de la Fig. 5.3b para valores pequeños del campo, para los distintos valores de p , se obtuvieron aproximaciones para el valor $H_l(p)$ de la magnitud del campo para el cual deja de aplicar el comportamiento lineal y la constante de proporcionalidad $k_l(p)$; los datos se reportan en la Tabla 5.1.

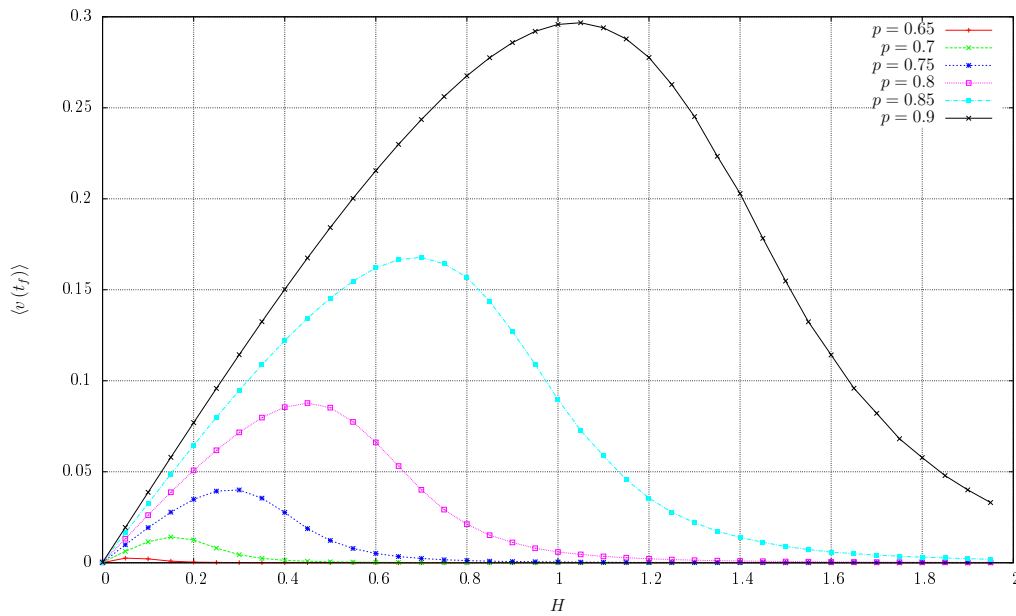
Dichos valores dependen de la probabilidad de ocupación, y probablemente también del modelo utilizado para el campo externo; sin embargo, dicha suposición falta ser verificada.

Los máximos en la Figura 5.3b para cada valor de la probabilidad de ocupación son una aproximación al valor del campo $H_{\max}(p)$, para el que la velocidad de deriva es máxima. Para valores por encima de éste, comienza a decrecer hasta llegar cero cuando $H = H_c(p)$.

A partir de la misma gráfica, podemos hacer una aproximación del valor crítico de la magnitud del campo $H_c(p)$; sin embargo, no es posible observar dicho punto crítico claramente, sino solamente es posible sugerir intervalos en los que se encuentra y es necesario utilizar otras estrategias, cómo el análisis del comportamiento supercrítico de la velocidad de deriva y su recíproco en función del tiempo, para obtener una mejor aproximación. Por otro lado, estas gráficas permiten constatar la naturaleza unimodal de la velocidad conjeturada en [8].



(a) Espacio $p - H - \langle v(t_f) \rangle$



(b) Plano $\langle v(t_f) \rangle - H$

Figura 5.3: Comportamiento de la velocidad asintótica en función del campo

Para simplificar la notación en adelante, no escribiremos explícitamente la dependencia en la probabilidad de ocupación p . Los valores obtenidos para H_l , k_l , H_{\max} y los intervalos de búsqueda de H_c se reportan en la Tabla 5.1.

p	H_l	k_l	H_{\max}	$H_c \in (\cdot, \cdot)$
0.9	0.5	0.3697	1.050	(1.35, 1.50)
0.85	0.35	0.3116	0.650	(0.90, 1.00)
0.8	0.25	0.2476	0.500	(0.55, 0.65)
0.75	0.15	0.1847	0.275	(0.50, 0.55)
0.7	0.1	0.1139	0.155	(0.30, 0.35)
0.65	0.035	0.0553	0.070	(0.15, 0.25)

Tabla 5.1: Valores de H_l , k_l , H_{\max} e intervalos para H_c

5.2.1. Comportamiento de la velocidad en función del tiempo

En [6], Dhar y Stauffer proponen que el comportamiento de la velocidad para $H > H_c$ sigue una ley de potencias de la forma

$$\langle \mathbf{v}(t; H) \rangle \sim t^{-\alpha(H)} \quad (5.2)$$

donde el exponente $\alpha(H)$ está dado por la expresión

$$\alpha(H) = 1 - \frac{\ln \lambda_c(H)}{\ln \lambda(H)}. \quad (5.3)$$

Aquí $\lambda(H)$ es el cociente de la probabilidad a favor y en contra del campo y $\lambda_c(H)$ es el mismo cociente evaluado en $H = H_c$, i.e.

$$\lambda(H) = \frac{P_+(H)}{P_-(H)}, \quad \lambda_c = \frac{P_+(H_c)}{P_-(H_c)}. \quad (5.4)$$

Para el modelo de Sznitman, tenemos que

$$\lambda(H) = \frac{P_+(H)}{P_-(H)} = \frac{e^H}{e^{-H}} = e^{2H} \quad (5.5)$$

y por lo tanto

$$\alpha(H) = 1 - \frac{\ln \lambda_c(H)}{\ln \lambda(H)} = 1 - \frac{H_c}{H}, \quad H > H_c. \quad (5.6)$$

Tomando logaritmos de ambos lados de la Ec. (5.2), tenemos que

$$\log \langle \mathbf{v}(t; H) \rangle \sim -\alpha(H) \log t. \quad (5.7)$$

Analizando el comportamiento de las gráficas en la Fig. 5.4 para los valores del campo para los que se realizaron simulaciones, observamos que para todos los valores de la probabilidad de ocupación, existe un rango de valores del campo para el cual, después de un periodo transiente del orden de 10^5 pasos, la gráfica presenta pendiente muy cercana a cero y se alcanza el valor asintótico, v_∞ , de la velocidad.

Cómo se muestra en la Fig. 5.4b, el último valor para el cual $\alpha(H) \approx 0$ corresponde al valor del campo de velocidad máxima H_{\max} ya que para todos los valores de $H > H_{\max}$, se tiene $-\alpha(H) < 0$, i.e. la velocidad promedio decrece lentamente con el tiempo. Si $H < H_c$, eventualmente alcanza un valor constante, mientras que cuando $H > H_c$, decrece hasta ser cero. Sin embargo, dada la naturaleza numérica y las limitaciones computacionales inherentes a las mismas, no es posible observar claramente dichos comportamientos asintóticos.

Por otro lado, al tomar un valor del campo mayor al punto de inflexión H_{inf} de la gráfica de $-\alpha(H)$ vs H para algún valor de p de la Figura 5.4b y, dado que el único parámetro libre al realizar un ajuste considerando la Ec. (5.6) es H_c , es posible obtener una aproximación del valor crítico del campo. Los resultados obtenidos sugieren que el valor crítico se encuentra en una vecindad del punto de inflexión de la curva. Los valores obtenidos para H_c se muestran en la Tabla 5.2, y el ajuste realizado para la gráfica $-\alpha(H)$ vs H , considerando la Ec. 5.6 para cada valor de p , se muestra en la Fig. 5.4a.

Dada la Ec. (5.6), observamos que el comportamiento asintótico de $\alpha(H)$ es de la forma

$$\alpha(H) \xrightarrow{H \rightarrow \infty} \alpha_\infty = 1, \quad \text{para } H > H_c. \quad (5.8)$$

Sin embargo al considerar valores para la magnitud del campo $H > 2$, como se muestra

en la Fig. 5.5, se observaron oscilaciones en el exponente $\alpha(H)$ para todos los valores de la probabilidad de ocupación que enmascaran el comportamiento asintótico en función del campo.

Por lo tanto, sólo nos ha sido posible realizar ajustes de los datos obtenidos para valores de la magnitud del campo en el intervalo $(H_{\text{inf}}, 2)$. De los ajustes, se observó que, dentro de este intervalo, $\alpha_{\infty} < 1$ con una diferencia aproximada del 3 %, lo cual se adjudica a la necesidad de realizar promedios sobre un número más grande de realizaciones.

p	H_{max}	H_c
0.9	0.90	1.361
0.85	0.60	0.913
0.8	0.37	0.621
0.75	0.24	0.406
0.7	0.105	0.240
0.65	0.03	0.115

Tabla 5.2: Valores para H_c .

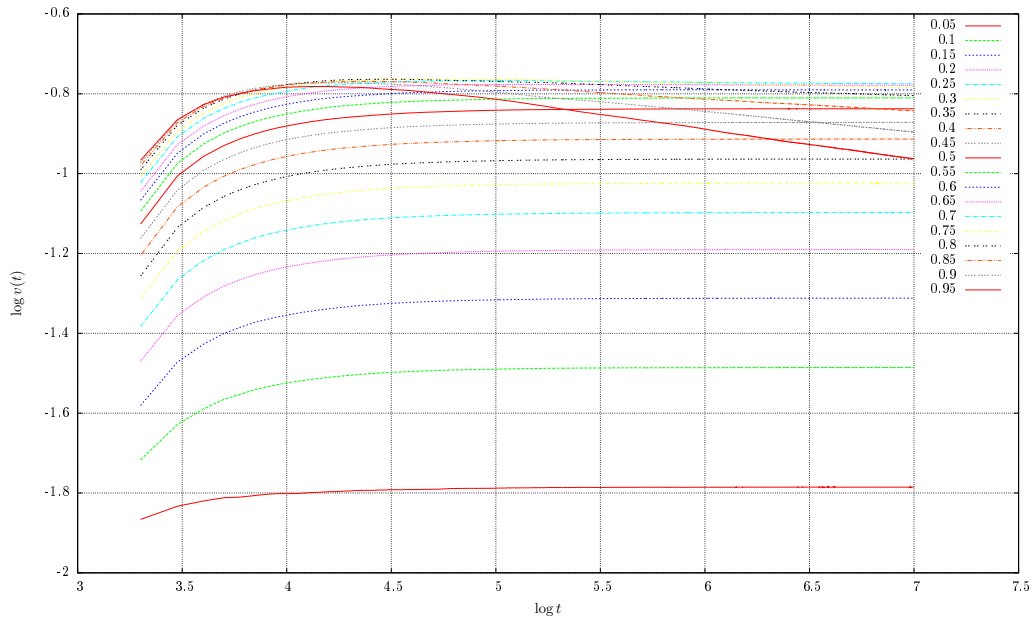
Este procedimiento se facilita para el modelo de Sznitman, debido a los términos exponenciales en la definición de las probabilidades, los logaritmos en la definición del exponente $\alpha(H)$ y la dirección del campo considerada en el presente trabajo. Se requiere explorar más posibilidades y otros modelos para comprobar o generalizar dichas suposiciones.

5.2.2. Comportamiento del inverso de la velocidad en función del tiempo

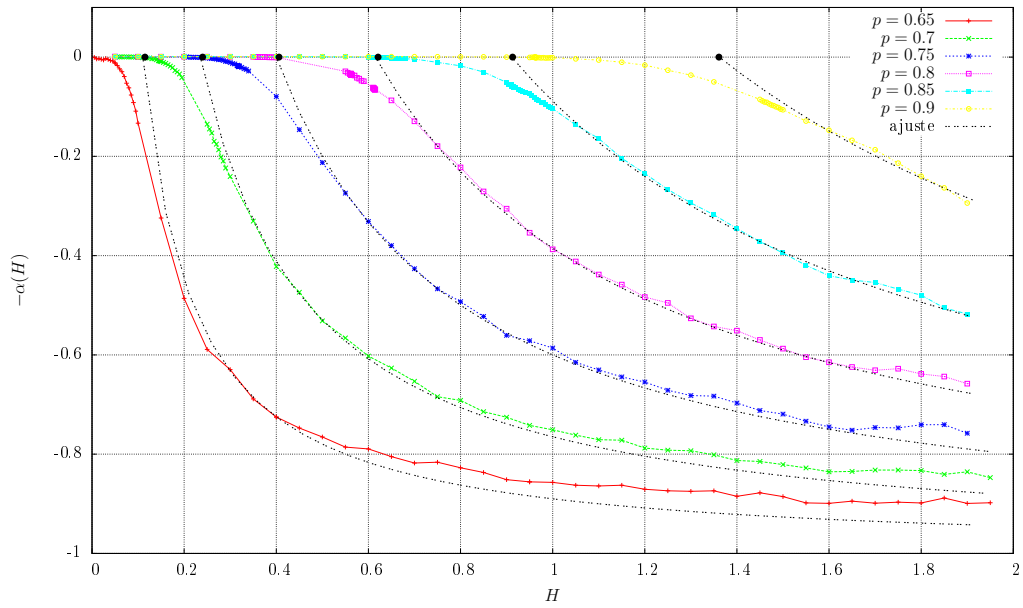
Según la teoría de Dhar y Stauffer en [6], cuando $H = H_c$ el comportamiento de la velocidad en función del tiempo es de la forma

$$\langle \mathbf{v}(t) \rangle \simeq \frac{1}{\log t}, \quad (H = H_c) \quad (5.9)$$

y por lo tanto para el inverso de la velocidad tenemos que



(a) $\log \langle v(t; H) \rangle$ vs $\log t$ para distintos valores de H para $p = 0.85$



(b) $-\alpha(H)$ vs H para distintos valores de p

Figura 5.4: Comportamiento de v en función de t

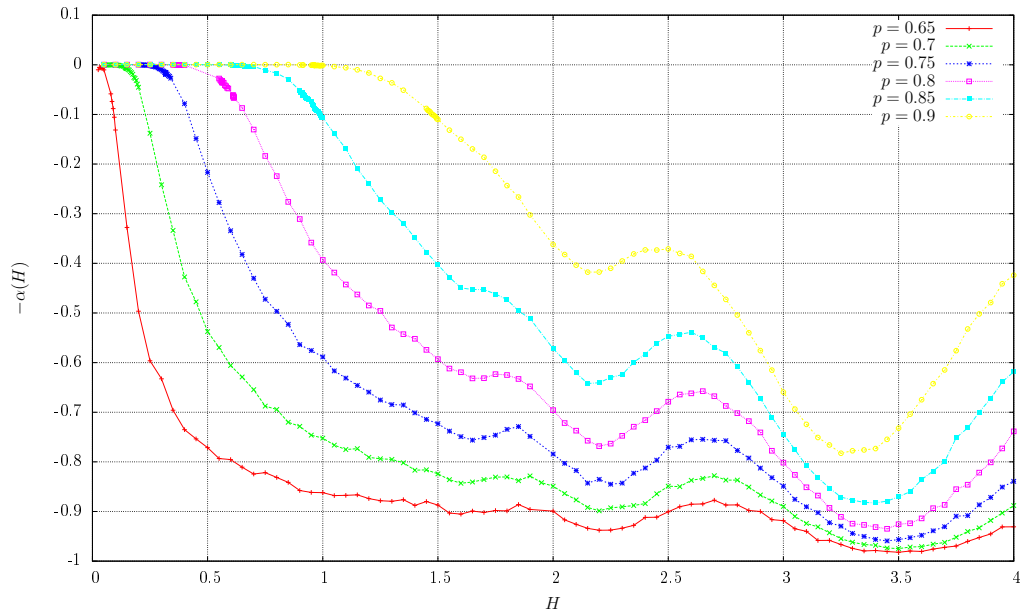


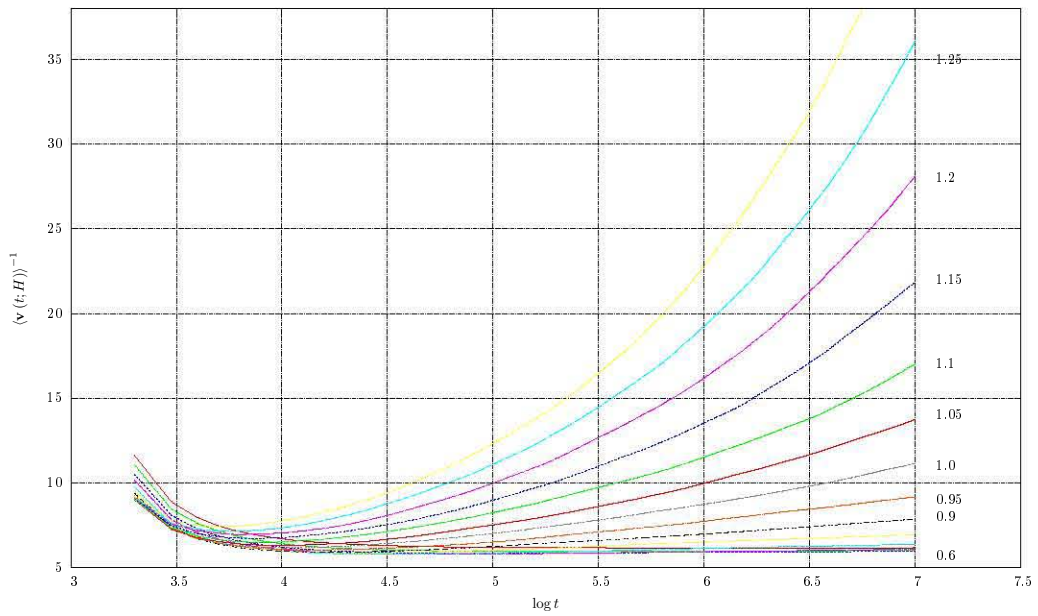
Figura 5.5: Oscilaciones de $-\alpha(H)$ en función de H para distintos valores de p .

$$\frac{1}{\langle \mathbf{v}(t; H) \rangle} \simeq \log t, \quad (H = H_c) \quad (5.10)$$

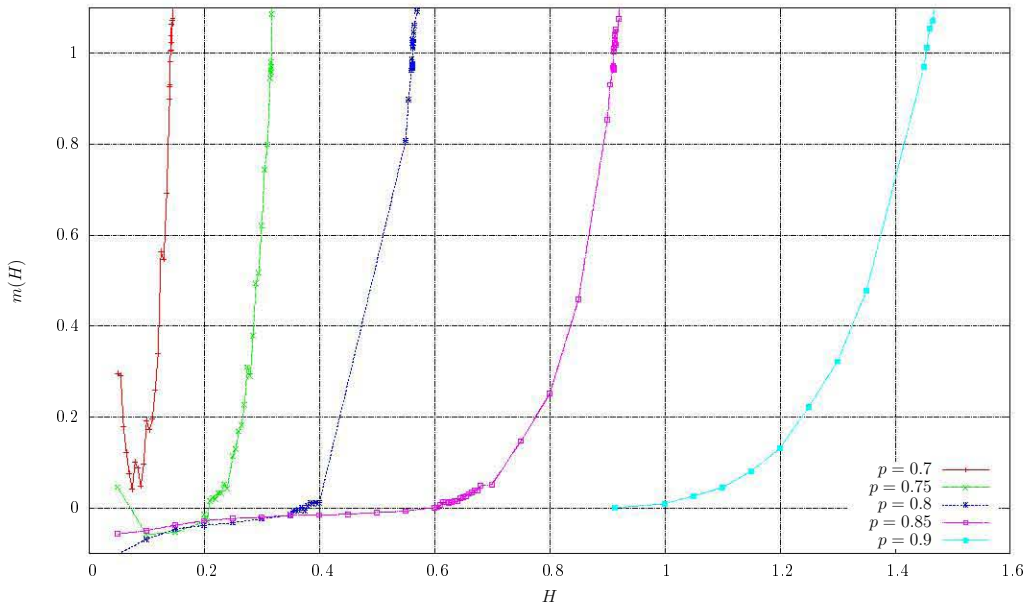
y por lo tanto al graficar el inverso de la velocidad contra el logaritmo del tiempo se presenta un comportamiento lineal cuando $H = H_c$, la pendiente disminuye hasta alcanzar un valor finito cuando $H < H_c$ y crece indefinidamente para valores supercríticos del campo.

En la Fig. (5.6a) mostramos las gráficas del recíproco de la velocidad de deriva en función del logaritmo del tiempo para $p = 0.85$. Se puede apreciar el cambio de curvatura de la gráfica en función de la magnitud del campo, el cual se presenta entre los valores $H = 0.85$ y $H = 1.0$; por lo tanto, $H_c \in (0.85, 1.0)$.

Al realizar un ajuste lineal a las gráficas para diferentes valores del campo cerca del cambio de curvatura, observamos que existen diferentes valores del campo para los cuales se obtienen buenos ajustes lineales, es decir que el comportamiento del inverso de la velocidad es de la forma



(a) $\langle v(t; H) \rangle^{-1}$ vs $\log t$ para distintos valores de H para $p = 0.85$



(b) $m(H)$ vs H para distintos valores de p

Figura 5.6: Comportamiento del inverso de la velocidad en función de $\log t$

$$\frac{1}{\langle \mathbf{v}(t; H) \rangle} \simeq m(H) \log t . \quad (5.11)$$

Si consideramos que la expresión $f(t) \sim g(t)$ significa que

$$f(t) \simeq g(t) \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{f(t)}{g(t)} = 1 , \quad (5.12)$$

y lo aplicamos a la Ec. (3.26) podemos concluir que en el valor crítico del campo, además de un comportamiento lineal para el inverso de la velocidad en función del logaritmo del tiempo, se espera que la pendiente sea $m(H_c) = 1$.

Por lo tanto, se espera que el comportamiento de $m(H)$ sea de la forma

$$m(H) \begin{cases} < 1 & \text{si } H < H_c \\ 1 & \text{si } H = H_c \\ > 1 & \text{si } H > H_c \end{cases} \quad (5.13)$$

En la Fig. 5.6b se muestran los resultados obtenidos para $m(H)$ en función del campo para distintos valores de p y los valores de $H_c(p)$ se reportan en la Tabla 5.3

p	H_c
0.9	1.455
0.85	0.911
0.8	0.562
0.75	0.317
0.7	0.141
0.65	— — —

Tabla 5.3: Valores para H_c

5.2.3. Diagrama de fase dinámico

El análisis de la velocidad realizado en las secciones anteriores resulta en el diagrama de fase mostrado en la Fig. 5.7 para la velocidad promedio en procesos de difusión en redes percolantes supercríticas con el modelo de Sznitman.

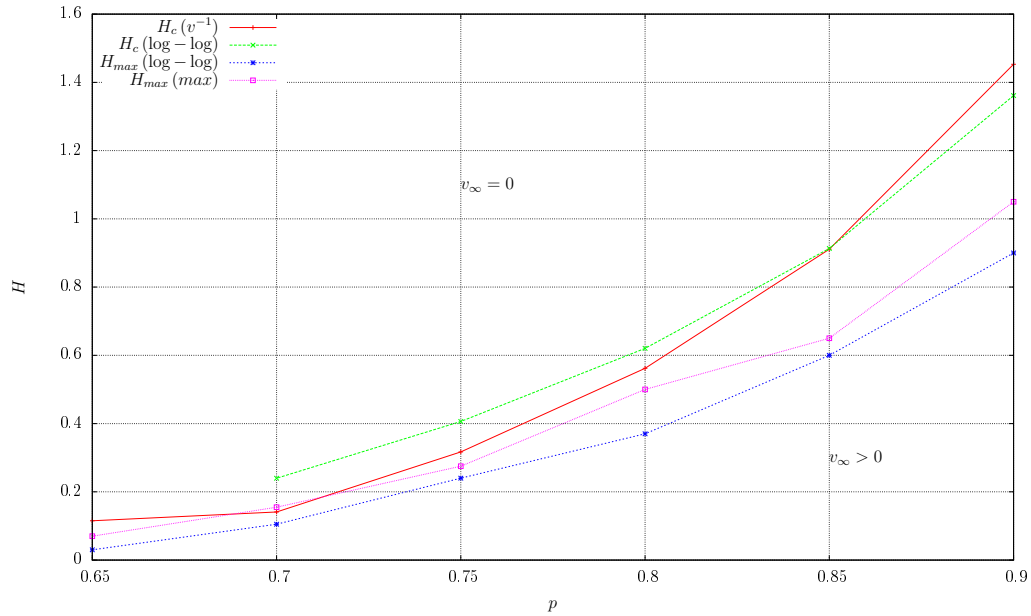


Figura 5.7: Diagrama de fase para el modelo de Sznitman

Para $H > H_c$, se tiene velocidad de deriva nula, mientras que para valores por debajo de éste la velocidad de deriva es finita y positiva. La curva H_{max} indica los valores del campo para los cuales la velocidad de deriva del sistema es máxima. La velocidad de deriva aumenta con el campo para campos $H < H_{max}$ y disminuye para campos en el intervalo $H_{max} < H < H_c$.

Los resultados presentan una diferencia promedio del 15 % entre los valores de H_c obtenidos mediante la búsqueda del comportamiento lineal del inverso de la velocidad en función del logaritmo del tiempo y del coeficiente del ajuste de la Ec. (5.6)

En el caso de H_{max} se obtuvo una diferencia promedio del 24 % entre los valores obtenidos de los máximos de las gráficas para cada valor de p de la Fig. 5.3b y del cambio del comportamiento de las gráficas de la Fig. 5.4b.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo, se han estudiado procesos de difusión en medios desordenados bajo un campo externo, por medio de la implementación computacional de caminatas aleatorias con sesgo cartesiano, con el modelo de Sznitman, en redes cuadradas simples supercríticas del modelo de percolación de sitio.

La implementación que se ha realizado permite explorar y modificar el modelo de manera sencilla y así obtener información cuantitativa y cualitativa del mismo por medio de las simulaciones y visualizaciones desarrolladas.

Consideramos que la visualización de la dinámica y estructura del sistema es útil para su descripción y entendimiento: por ejemplo, gracias a estas herramientas es posible desarrollar un estudio de la geometría de las trampas que detienen a los caminantes en el sistema y comprobar la propuesta para el caso bidimensional realizada en [8].

Por otro lado, dado que en principio ha sido posible evitar problemas de frontera en el sistema y a que no ha sido posible observar una transición de fase abrupta para la velocidad, como se ha demostrado que ocurre en [8], adjudicamos la diferencia en los valores obtenidos para H_c y H_{\max} a la necesidad de promediar sobre un número mayor de realizaciones.

Para poder mejorar los resultados y la precisión del modelo es necesario un mayor poder de cómputo que el que se tuvo disponible para el desarrollo del presente trabajo, y explorar otras técnicas para realizar las simulaciones de manera más eficiente.

Además de los problemas y limitantes técnicos, nos encontramos con que, a pesar de que el

sistema ha sido estudiado por distintos autores [2, 3, 4, 5, 6, 12], la mayoría no es clara con la forma en la que trabaja con conceptos tales como la velocidad de deriva y los métodos numéricos utilizados para su determinación. De igual forma en algunos casos los resultados obtenidos se presentan de manera parcial o incompleta; esta falta de información dificulta la reproducción de los resultados presentes en la literatura. Por otro lado, esta situación fomentó la búsqueda de otros medios para la determinación del punto crítico y un análisis distinto del comportamiento del sistema.

No fué posible aproximar el valor de H_c para $p = 0.65$ con el inverso de la velocidad de deriva, debido a que no se obtuvieron buenos ajustes lineales en función de $\log t$. Por otro lado, con el método propuesto derivado de la Ec. (5.6) si se obtuvo una aproximación de H_c . Proponemos que esta situación se debe a la proximidad con el valor crítico de percolación p_c y a que al analizar el comportamiento de $\log |\langle v(t; H) \rangle|$ en función de $\log t$, se toma en cuenta un rango mayor de valores de H , y por lo tanto al sistema de una manera más amplia.

Cabe mencionar que para $p = 0.85$ obtuvimos una diferencia de sólo el 0.24 % entre los valores obtenidos de H_c con los dos métodos utilizados. Esto nos hace pensar que la teoría desarrollada en [6] es útil para la descripción del sistema y lo suficientemente general para poder ser aplicada a distintos modelos del campo externo. Este hecho nos invita a explorar la hipótesis de la identificación del punto de inflexión de las gráficas en la Fig. 5.4b con el valor crítico del campo. Asimismo, según nuestro conocimiento, el presente trabajo es el primero que explora numéricamente el modelo de Sznitman para el campo externo y los resultados analíticos de [8], i.e. se ha dado una verificación numérica del carácter unimodal de la velocidad en función del campo y un método de aproximación del valor del campo de velocidad máxima el cual hemos denotado por H_{\max} [8, comunicación privada].

Los resultados obtenidos corresponden a una configuración específica del sistema, i.e. se utilizaron redes cuadradas simples y el modelo de Sznitman del campo, y hace falta trabajo tanto analítico como numérico para la generalización de los mismos. Por ejemplo, con respecto al modelo de Sznitman propongo el ampliar la vecindad del caminante a sus 8 vecinos cercanos (vecindad de Moore), como se muestra en la Fig. 6.1, para que sea posible considerar distintas direcciones para el campo externo.

Si $\vec{H} = H\hat{l} = H(l_x, l_y)$, según la Ec. (3.13) las probabilidades de transición para las direcciones posibles en esta red serán

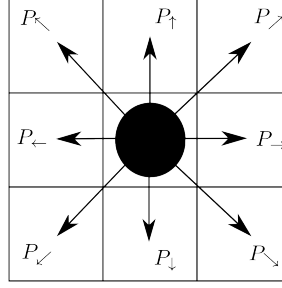


Figura 6.1: Vecindad de Moore en la red cuadrada simple.

$$\begin{aligned}
 P_{\swarrow} &= \frac{e^{-H(l_x - l_y)}}{n_\omega} & P_{\uparrow} &= \frac{e^{Hl_y}}{n_\omega} & P_{\nearrow} &= \frac{e^{H(l_x + l_y)}}{n_\omega} \\
 P_{\leftarrow} &= \frac{e^{-Hl_x}}{n_\omega} & & & P_{\rightarrow} &= \frac{e^{Hl_x}}{n_\omega} \\
 P_{\swarrow} &= \frac{e^{-H(l_x + l_y)}}{n_\omega} & P_{\downarrow} &= \frac{e^{-Hl_y}}{n_\omega} & P_{\searrow} &= \frac{e^{H(l_x - l_y)}}{n_\omega} ,
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

donde $n_\omega = 2 [\cosh(Hl_x) + \cosh(Hl_y) + \cosh(H(l_x + l_y)) + \cosh(H(l_x - l_y))]$.

Si se definen a las probabilidades P_+ y P_- como

$$\begin{aligned}
 P_+ &= \text{máx}(\{P_{\uparrow}, P_{\downarrow}, P_{\swarrow}, P_{\nearrow}, P_{\swarrow}, P_{\searrow}\}) , \\
 P_- &= \text{mín}(\{P_{\uparrow}, P_{\downarrow}, P_{\swarrow}, P_{\nearrow}, P_{\swarrow}, P_{\searrow}\}) ,
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

entonces λ (Ec. (3.20)) y el exponente $\alpha(H)$ están bien definidos y dado que la Ec. (5.6) no cambia de forma, el valor de H_c es independiente de la dirección en la que se aplica el campo y por lo tanto sólo depende de la probabilidad de ocupación p y la topología de la red.

Al realizar esta modificación al modelo, también será posible investigar la dirección asintótica del movimiento y la modificación de la distribución de las trampas en el sistema en función de la dirección del campo [8, comunicación privada].

El sistema que se ha tratado en el presente trabajo presenta comportamientos interesantes que dejan un abanico amplio de posibilidades para profundizar su estudio, tanto desde el punto de vista numérico como analítico.

Apéndices

Apéndice A

Transiciones de fase

Las transiciones de fase son fenómenos cotidianos; es una experiencia y conocimiento común el que la materia puede presentarse en diferentes estados de agregación (sólido, líquido y gas) y que puede pasar de uno a otro bajo ciertas condiciones especiales. Al ocurrir esto, algunas de sus propiedades físicas sufren un cambio significativo y la percibimos como cualitativamente distinta en cada uno de ellos (el hielo es frío y sólido, el vapor de agua un gas).

Cuando hablamos de transiciones de fase y estados no estamos restringidos a pensar en estados de agregación de la materia, también podemos considerar otro tipos de sistemas (magnéticos, superfluidos, superconductores) en los cuales se presentan cambios significativos en el comportamiento o propiedades del mismo como respuesta a estímulos externos.

Por lo tanto podemos definir a una *fase* como un *estado macroscópico* particular en el cual el sistema posee cierta *forma* o *estructura* característica y a una *transición de fase* como un cambio abrupto en las propiedades del mismo al pasar por un *punto crítico*.

A.1. Parámetros de orden y exponentes críticos

El que exista una cantidad que sea distinta de cero en un lado de un punto crítico y distinta de cero en el otro, es una característica común de los fenómenos críticos. A dicha cantidad se le denomina *parámetro de orden*[20].

En los sistemas magnéticos, los parámetros H y M , campo magnético externo y magne-

tización, respectivamente, junto con la temperatura T , definen la superficie de equilibrio HMT de un sistema magnético. En este caso, la cantidad M es la que juega el papel del parámetro de orden, ya que es la variable que describe el estado del sistema [18]. La forma en la que $M \rightarrow 0$ cuando $T \rightarrow T_c$ está dada por una ley de potencias de la forma

$$M \sim (T_c - T)^\beta \quad \text{cuando } T \rightarrow T_c \text{ desde abajo.} \quad (\text{A.1})$$

El exponente β es el *exponente crítico* que describe el comportamiento del parámetro de orden cerca de una transición de segundo orden [18]. Los exponentes críticos son importantes, ya que resultan ser *universales*, es decir que toman los mismos valores para diferentes tipos de sistemas, sin importar detalles específicos de cada uno de ellos [18].

El modelo de percolación (capítulo 2), cerca del punto crítico, p_c , presenta un comportamiento de ley de potencias y los exponentes dependen sólo de la dimensión y no de la topología específica de la red. En este sentido los exponentes críticos para el problema de percolación son universales.

En general si tomamos un sistema que presente criticalidad para cierta temperatura crítica T_c y definimos ϵ de la siguiente manera:

$$\epsilon = \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1, \quad (\text{A.2})$$

entonces ϵ es una variable que mide la diferencia adimensional en temperatura con la temperatura crítica. Si consideramos una función $f(\epsilon)$ que se supone positiva y continua, en el caso que exista el límite

$$\lambda = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\epsilon)}{\ln \epsilon}. \quad (\text{A.3})$$

lo denominamos el exponente crítico asociado con la función $f(\epsilon)$; es decir, $f(\epsilon)$ se comporta como $f(\epsilon) \sim \epsilon^\lambda$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Cabe mencionar que esto no implica que

$$f(\epsilon) = A\epsilon^\lambda, \quad (\text{A.4})$$

exactamente ya que, en general, una función termodinámica tiene una expresión funcional de la forma

$$f(\epsilon) = A\epsilon^\lambda (1 + B\epsilon^\mu + \dots) \quad \text{con } \mu > 0. \quad (\text{A.5})$$

Nótese que la definición que hemos hecho para el exponente crítico no distingue entre las formas funcionales (A.4) y (A.5).

Sin embargo, nos interesa más el exponente crítico que la forma funcional completa, debido al hecho experimental de que suficientemente cerca del punto crítico el término principal domina el comportamiento del sistema. Por lo tanto, dado que en una gráfica $\log - \log$, $f(\epsilon)$ mostrará un comportamiento lineal cerca del punto crítico, el exponente podrá ser identificado con la pendiente y ser estimado de esta manera.

El exponente λ es un número real y el comportamiento del sistema cerca del punto crítico $\epsilon \equiv 0$ depende del signo del mismo. Si $\lambda < 0$ la función $f(\epsilon)$ diverge a infinito en el punto crítico, mientras que si $\lambda > 0$, $f(\epsilon)$ converge a cero. Por otro lado, la magnitud de λ modifica la forma en la que se presentan los comportamientos antes mencionados: entre más pequeña sea la magnitud de λ , la divergencia a infinito es más repentina o la convergencia a cero más rápida.

El caso en el que $\lambda = 0$ puede corresponder a una divergencia logarítmica o a una singularidad en la que en el punto crítico la función no tiene una derivada definida. Para distinguir esta singularidad introducimos un nuevo exponente crítico λ_s : primero buscamos el entero j más pequeño tal que la derivada $\partial^j f / \partial \epsilon^j \equiv f^{(j)}(\epsilon)$ presente una divergencia cuando $\epsilon \rightarrow 0$, y definimos a λ_s como [20]

$$\lambda_s \equiv j + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln |f^{(j)}(\epsilon)|}{\ln \epsilon}. \quad (\text{A.6})$$

Por ejemplo, en el caso de la Figura (A.1)(d) tenemos que $f(\epsilon) = c - \epsilon^{\frac{1}{2}}$ y la primera derivada diverge como $\epsilon^{-\frac{1}{2}}$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$, y por lo cual $\lambda_s = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$.

Los exponentes críticos describen el comportamiento de las propiedades de sistemas con transiciones de fase continuas o de segundo orden cerca del punto crítico y son útiles para la descripción del problema de percolación.

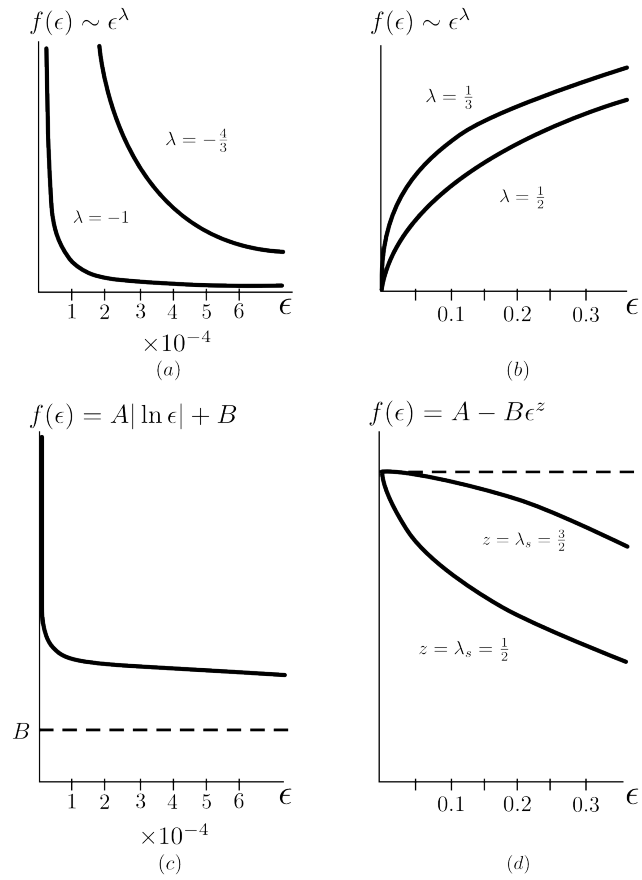


Figura A.1: Comportamiento cerca del punto crítico para distintos valores de λ .

Apéndice B

Fractales

De manera general, nos referimos como *fractales* a objetos que podríamos denominar como *ásperos* o *irregulares*, que además presentan la propiedad de *auto-similiaridad*, i.e. su estructura o apariencia general es la misma dentro de un rango de escalas de observación. Este tipo de objetos pueden ser encontrados naturalmente en vórtices, plantas, procesos de difusión, crecimientos de superficies, entre otros [15]. Por otro lado también es posible crear objetos con estas características matemáticamente a partir de ciertas reglas bien definidas, a este tipo de fractales se les denominan *deterministas*, sin embargo es posible agregar elementos estocásticos a estas reglas y en dicho caso hablamos de fractales *aleatorios*, estos últimos son los que mejor modelan algunos de los que se presentan en la naturaleza.

Los fractales aleatorios no sólo pueden ser creados agregando elementos estocásticos a las reglas del generador de un fractal determinista; existen otros mecanismos que pueden generar este tipo de objetos, uno de los cuales es el modelo de percolación cuando se tiene $p = p_c$.

Los fractales son construcciones matemáticas abstractas que pueden ser extendidas, bajo cierto rango de escalas, a objetos que se encuentran presentes en nuestro entorno, en palabras de Benoît Mandelbrot: “*Ni las nubes son esferas, ni las montañas cónicas, ni las costas circulares, ni la corteza es suave, ni tampoco el rayo es rectilíneo*” [14]. Los fractales están presentes en los árboles, en las nubes y también en nuestro sistema circulatorio, cerebro y pulmones. Por lo tanto, debido a su ubicuidad, el estudio de los fractales y los procesos en los que se involucran es una buena herramienta para la descripción y entendimiento de la naturaleza.

B.1. Fractales deterministas

Los fractales deterministas son estructuras geométricas idealizadas autosimilares. Este tipo de fractales se generan de manera iterativa comenzando con una *semilla* (un segmento de línea, un triángulo equilátero, un cubo) a la que se le aplican un conjunto de operaciones que son repetidas indefinidamente de manera recursiva. Al conjunto de operaciones aplicadas a la *semilla* se le denomina *generador*.

Se pueden generar fractales deterministas de dos maneras diferentes. En la primera, la semilla se reemplaza por réplicas más pequeñas de la misma ordenadas de cierta manera y entonces el fractal se construye hacia *adentro*, es decir hacia escalas de longitud más pequeñas. El fractal resultante tiene una cota superior de longitud determinada por el tamaño de la semilla, pero no una escala microscópica característica ya que idealmente se podría iterar indefinidamente el generador. La otra manera de construir este tipo de objetos consiste en tomar réplicas de la semilla y ensamblar un objeto más grande y por lo tanto el fractal crece hacia *afuera*. La red tiene ahora una cota inferior pero no una superior [1].

En la Fig.B.1(c) se muestra como el mismo fractal, el llamado *triángulo de Sierpinski*, puede ser generado con los métodos descritos anteriormente: en el primer caso (Fig.B.1(a)) la semilla es un triángulo equilátero, el cual se divide en triángulos equiláteros de arista igual a la mitad de la inicial y se remueve el triángulo central; este procedimiento se repite para cada uno de los triángulos resultantes de cada iteración. En este caso, la cota superior del sistema es el tamaño de la semilla original y el fractal crece hacia dentro.

Otra posibilidad es comenzar con un triángulo equilátero pequeño y ensamblar réplicas del mismo como se muestra en la Fig.B.1(b), en el paso siguiente se toma la figura resultante de esta iteración y se repite el ensamblaje en una figura más grande. Ahora el tamaño de la semilla original es la cota inferior del sistema y el fractal crece hacia afuera.

B.2. Propiedades de los fractales

Una de las características fundamentales de los fractales es que son *auto-similares*, es decir que el todo es exactamente o aproximadamente similar a sus partes. Esta peculiar simetría es la principal diferencia entre los objetos geométricos euclídeos y los de la geometría fractal: mientras que los objetos geométricos regulares son principalmente simétricos bajo trasla-

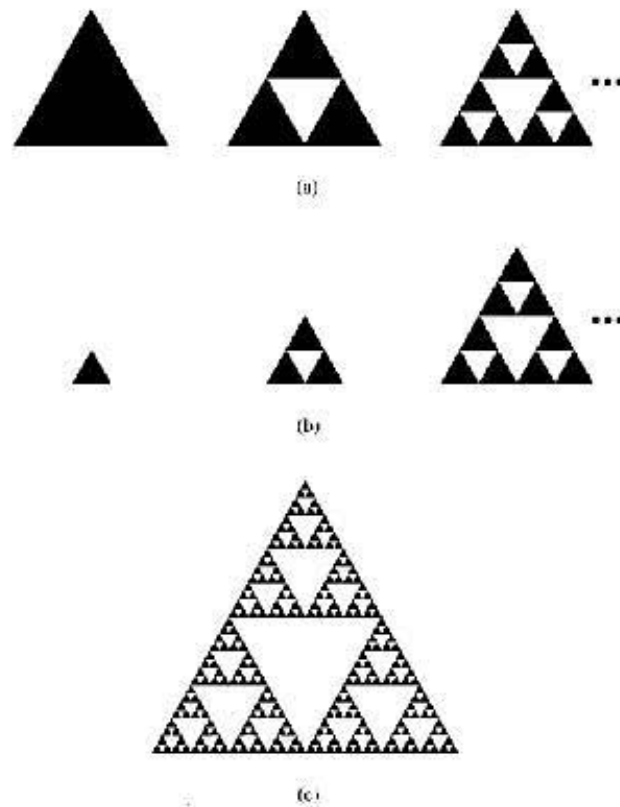


Figura B.1: Fractales deterministas y tipos de generadores [3].

ciones y rotaciones los fractales poseen una nueva simetría denominada *invarianza de escala*, en la que el objeto presenta la misma apariencia a diferentes escalas de observación. Esta característica hace a los fractales útiles en el estudio de las transiciones de fase ya que el estado de un sistema en un punto crítico de transición también está caracterizado por este tipo de simetría y por lo tanto es sujeto de ser modelado por este tipo de geometrías auto-similares [1].

Otra propiedad fundamental de los fractales es su dimensión, lo cual se puede definir en términos del comportamiento de la masa M del objeto con respecto al escalamiento de su tamaño. Por ejemplo si tomamos un cuadrado de arista l , para conseguir uno de longitud $2l$, o escalar al original en un factor de $L = 2$, necesitamos 4 del original para obtenerlo. La masa se ha cuadruplicado al doblar la longitud del objeto lo cual se expresa de la siguiente manera:

$$M(L = 2) = 4 = 2^d = L^d \quad (\text{B.1})$$

Entonces definimos a d como la dimensión del objeto en cuestión y en este caso obtenemos $d = 2$ en concordancia con nuestra intuición, de igual forma, para el caso de un cubo se requieren 8 copias y obtenemos $d = 3$. Entonces tenemos que para conseguir un hipercubo de dimensión d cuyas medidas sean el doble del hipercubo original, la masa original aumentará en un factor de $c = 2^d$. Despejando d de esta expresión obtenemos su dimensión:

$$d = \frac{\log c}{\log 2} \quad (\text{B.2})$$

En general, para multiplicar por un factor a las medidas de un hipercubo de dimensión d se necesitarán $c = a^d$ copias iguales, y de esta manera definimos a la dimensión fractal d_f como:

$$d_f = \frac{\log c}{\log a}. \quad (\text{B.3})$$

En el caso del triángulo de Sierpinski observamos que en cada iteración la masa se modifica en un factor de $c = 3$ mientras que la longitud se multiplica por un factor de $a = 2$, por lo tanto su dimensión es

$$d_f = \frac{\log 3}{\log 2} \cong 1.5849 \dots \quad (\text{B.4})$$

La dimensión fractal d_f resulta ser no entera y refleja tanto la estructura irregular del objeto como sus propiedades de escalamiento, es decir, la forma en que ocupa el espacio en el que se encuentra.

Los fractales no quedan completamente descritos por la auto-similaridad y la dimensión fractal sino que existen otras propiedades que les pueden ser determinadas y ayudan a tener una mejor descripción de los mismos, por ejemplo se puede medir su grado de homogeneidad o de simetría traslacional y otras dimensiones relacionadas con los modos de vibración del sistema y el camino más corto entre dos puntos dentro del mismo [1].

B.3. Fractales aleatorios

Las reglas de los generadores no tienen que ser deterministas. Se pueden incluir a éstas elementos estocásticos y así obtener otro tipo de fractales. Por ejemplo podemos considerar el caso de la *alfombra de Sierpinski* la cual se construye a partir de un cuadrado que se divide en nueve más pequeños, descartando el cuadrado central en cada iteración. Si ahora en lugar de tomar la celda central en cada iteración removemos una de las nueve de manera aleatoria; obtenemos un fractal aleatorio a partir de las mismas reglas modificadas. Este nuevo fractal, aunque no es exactamente auto-similar, lo es estadísticamente con la misma dimensión fractal que su contraparte determinista.

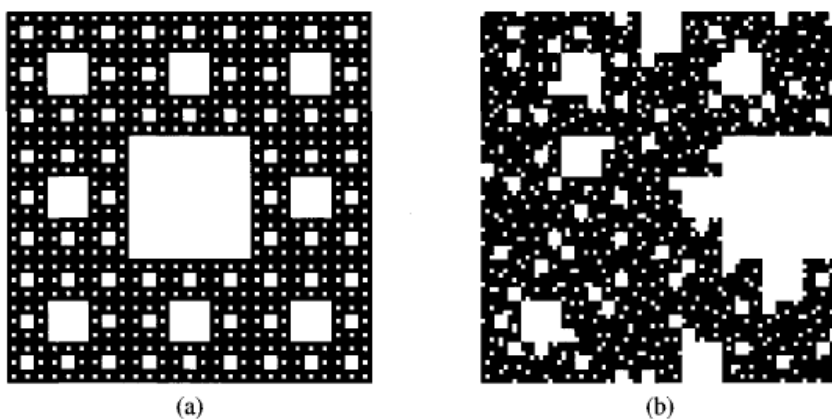


Figura B.2: Fractal aleatorio formado a partir de la modificación del generador de un fractal determinista [3].

La masa M de los fractales aleatorios se modifica bajo un cambio de escala por un factor b como

$$M(bL) = b^{d_f} M(L) \quad (\text{B.5})$$

de la misma forma que para los fractales deterministas. La solución general de esta ecuación es [1]

$$M(L) = AL^{d_f}, \quad (\text{B.6})$$

donde A es una constante.

La dimensión fractal d_f puede calcularse numéricamente a partir de algoritmos basados en estas reglas de escalamiento [1]. Por ejemplo, se puede medir la masa dentro de un radio L alrededor de un sitio perteneciente al fractal y posteriormente promediar para distintos sitios del mismo y utilizando la ec.(B.6), determinar la dimensión del objeto.

Otro algoritmo útil es el denominado *conteo de cajas*, en cuyo caso el espacio ocupado por el fractal se subdivide en una red hipercúbica de celdas de tamaño ϵ y se cuenta el número de celdas $N(\epsilon)$ que contienen parte del fractal; este número es una medida de la masa del mismo. El proceso se repite para distintos valores de ϵ y la dimensión fractal se determina haciendo uso de la relación

$$N(\epsilon) \sim \epsilon^{-d_f}. \quad (\text{B.7})$$

Los fractales aleatorios y deterministas pueden ser utilizados para modelar fenómenos naturales ya que, como hemos mencionado antes, estos se encuentran presentes en el mundo que nos rodea.

Algunos ejemplos de fractales aleatorios que ocurren en la naturaleza son la estructura de medios porosos, el proceso de gelación de ciertos materiales y el crecimiento de polímeros [15]. Estos medios y procesos pueden ser modelados computacionalmente utilizando el modelo de percolación.

Apéndice C

El algoritmo de Hoshen–Kopelman

J. Hoshen y R. Kopelman introdujeron en el año de 1976 un método eficiente de identificación de clusters para el problema de percolación; el cual denominaron como técnica de etiquetado múltiple, aunque se le conoce mejor como algoritmo de Hoshen–Kopelman. Fue desarrollado con el fin de contar con un algoritmo adecuado para simulaciones computacionales que fuera capaz de identificar clusters percolantes en sistemas finitos y determinar de manera rápida y precisa distribuciones de clusters en el sistema, concentraciones críticas y probabilidades de percolación [9].

En el artículo original [9], los autores consideran una red discreta finita como modelo de un cristal bidimensional, en el cual existen moléculas de cierto tipo A con probabilidad p y de un tipo diferente B con probabilidad $(1 - p)$. Como podemos observar, esta situación es completamente análoga al modelo de percolación discutido en el capítulo 2, en donde cada sitio o enlace de la red se encuentra ocupado con cierta probabilidad p y ausente con probabilidad $(1 - p)$.

Este método está basado en la aplicación de etiquetas alternativas a sitios distintos de la red que pertenecen al mismo cluster, con el objetivo de clasificar y contar los clusters de cierto tipo de moléculas (tipo A o B , sitios ocupados o vacíos) presentes en el sistema.

Considerando el modelo de percolación de sitio en una red cuadrada, el algoritmo asigna a cada sitio ocupado i de la red una etiqueta de cluster m_i^α , donde α es un identificador del cluster al que pertenece el sitio i . Es posible asignarle al mismo cluster α distintas etiquetas, las cuales forman el conjunto M de números naturales

$$M = \{ m_1^\alpha, m_2^\alpha, \dots, m_s^\alpha, \dots, m_t^\alpha, \dots \}. \quad (\text{C.1})$$

En este conjunto, existe un único número considerado como la etiqueta *adecuada* o *propia* del cluster, denotada por m_s^α , que corresponde al mínimo del conjunto.

Dado que el algoritmo puede asignar etiquetas distintas a sitios pertenecientes al mismo cluster, las conexiones entre dichas etiquetas del mismo cluster están dadas por el conjunto N de números enteros:

$$N = \{ N(m_1^\alpha), N(m_2^\alpha), \dots, N(m_s^\alpha), \dots, N(m_t^\alpha), \dots \}, \quad (\text{C.2})$$

en donde $N(m_s^\alpha)$ es el único entero positivo en el conjunto y denota el número de sitios pertenecientes al cluster α . Los elementos restantes del conjunto son números enteros negativos que ligam las etiquetas m_j^α a la etiqueta propia del cluster m_s^α , por medio del sistema de ecuaciones:

$$m_r^\alpha = -N(m_t^\alpha), m_q^\alpha = -N(m_r^\alpha), \dots, \dots, m_s^\alpha = -N(m_p^\alpha). \quad (\text{C.3})$$

El sistema se resuelve de izquierda a derecha y representa una gráfica de árbol donde la raíz corresponde a la etiqueta propia del cluster m_s^α , mientras que las demás etiquetas son nodos en el árbol apuntando directa o indirectamente a la raíz [10]. Según la experiencia de los autores en [9], sugieren que, en la mayoría de los casos, la jerarquía de las etiquetas consiste en uno o dos niveles, es decir, el sistema consta de una o dos ecuaciones.

El índice de los clusters se almacena en un contador k , inicializado en $k_0 = 0$. La primera vez que se encuentra un sitio ocupado en la red, se le asigna a éste la etiqueta $k_1 = k_0 + \Delta k$, con $\Delta k = 1$. Posteriormente, cada vez que el algoritmo encuentra un sitio que podría corresponder a un nuevo cluster en el sistema, se le asigna a éste la etiqueta $k_2 = k_1 + \Delta k$, y así sucesivamente.

Para implementar computacionalmente este método es necesario recorrer la red de manera ordenada, ya sea por columnas o renglones, en el presente trabajo hemos optado por recorrer la red por columnas y de izquierda a derecha.

Al recorrer la red, cada vez que se encuentra un sitio $\Omega_{i,j}$ ocupado, se inspeccionan los vecinos cercanos izquierdo $\Omega_{i-1,j}$ y superior $\Omega_{i,j+1}$. En el caso que ninguno de estos sitios se encuentren ocupados, se le asigna al sitio $\Omega_{i,j}$ la etiqueta

$$S_{ij} = m_1^\alpha = k + \Delta k, \quad (\text{C.4})$$

y además

$$N(m_1^\alpha) = 1. \quad (\text{C.5})$$

En el caso que se encuentre un vecino ocupado, se determina la etiqueta propia m_s^β del cluster al que pertenece por medio de la Ec. (C.3) y se le asigna al sitio inspeccionado, es decir

$$S_{ij} = m_s^\beta, \quad (\text{C.6})$$

y dado que se ha agregado un sitio al cluster β se asigna $N(m_s^\beta) = N(m_s^\beta) + 1$. El vecino cercano ocupado no es re-etiquetado en el proceso.

Si es el caso que ambos vecinos del sitio $\Omega_{i,j}$ están ocupados, de igual forma se determinan las etiquetas propias, m_s^γ, m_s^δ , de los clusters a los que pertenecen cada uno de ellos y al sitio inspeccionado se le asigna

$$S_{ij} = \text{mín}(m_s^\gamma, m_s^\delta) = m_s^\alpha. \quad (\text{C.7})$$

Dado que en este caso han coalescido dos clusters diferentes por medio del sitio inspeccionado, se asigna

$$N(m_s^\alpha) = N(m_s^\alpha) + N(m_s^\gamma) + N(m_s^\delta) + 1, \quad (\text{C.8})$$

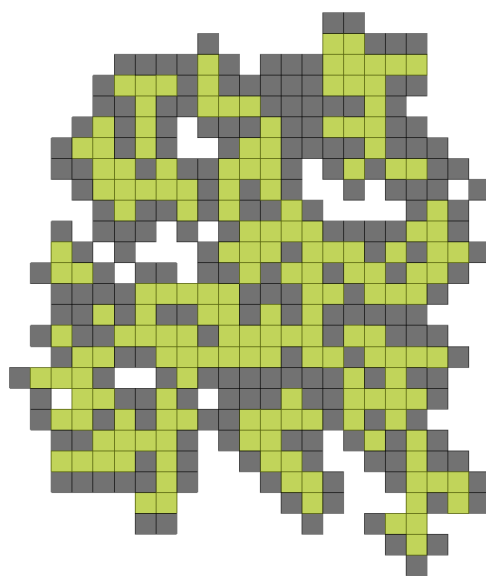
y se ligan las etiquetas m_s^γ, m_s^δ de los clusters anteriores a las del nuevo cluster m_s^α , por medio de

$$\begin{aligned} N(m_s^\beta) &= -m_s^\alpha ; \\ N(m_s^\gamma) &= -m_s^\alpha . \end{aligned} \tag{C.9}$$

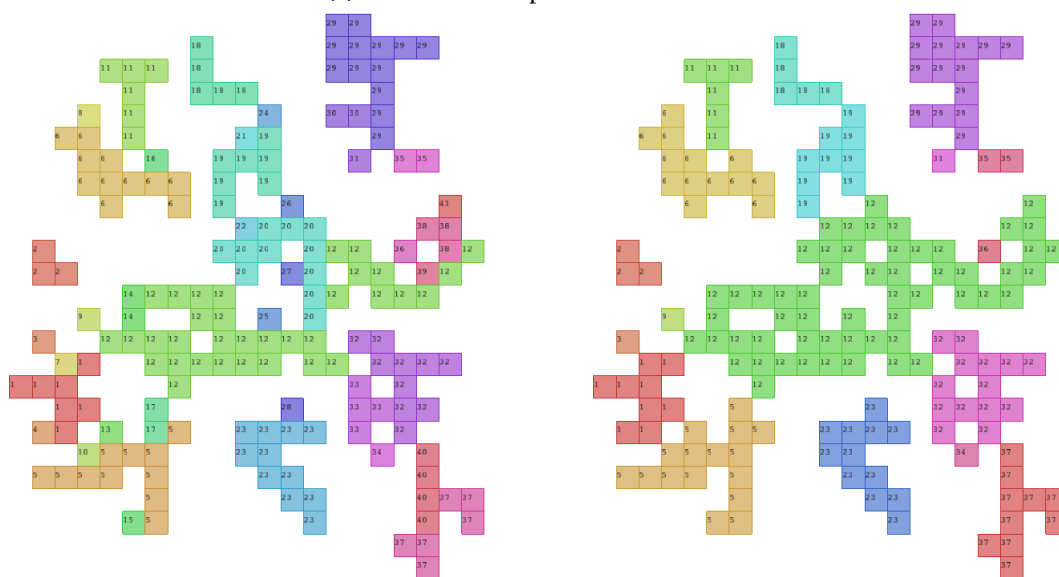
De igual forma que en el caso anterior, los vecinos no son re-etiquetados en el proceso. Por lo tanto, una vez que se ha recorrido por completo la red, los elementos positivos del conjunto N corresponderán a los clusters presentes en el sistema y su valor al tamaño de los mismos. Por otro lado, los elementos negativos del conjunto apuntarán a las etiquetas adecuadas de los clusters a los que pertenecen cada una de las m_i^α para cada uno de los clusters.

Dado que no se re-etiquetan los sitios durante el barrido de la red, en el caso de requerir que cada sitio tenga la etiqueta adecuada del cluster al que pertenece, por ejemplo con fines de visualización de los clusters, es necesario dar un segundo barrido a la red para encontrar las etiquetas adecuadas de los sitios haciendo uso de la Ec. (C.3). En la Fig. (C.1a) se muestra un ejemplo de una red desordenada susceptible de ser tratada con el algoritmo, en la Fig. (C.1b) se muestra el resultado de la aplicación del algoritmo de Hoshen-Kopelman a la red y en la Fig. (C.1c) se muestra el resultado final después de un segundo barrido para el re-etiquetado de los sitios. Estas figuras son visualizaciones del resultado de la aplicación del algoritmo a la red de la Fig. (C.1a).

Cabe mencionar que sólo es necesario recorrer una vez la red para obtener el número y tamaño de los clusters presentes en el sistema. Este hecho hace que el algoritmo no requiera muchos recursos computacionales y sea el indicado para realizar este tipo de análisis en redes de diferentes topologías y tamaños.



(a) Red inicial susceptible de ser analizada



(b) Resultado inicial del algoritmo de clusterización

(c) Clusters resultantes después de re-etiquetar los sitios de la red

Figura C.1: El algoritmo de Hoshen Kopelman

Bibliografía

- [1] ben-Avraham, Daniel y Shlomo, Havlin, *Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems*, Reino Unido, Cambridge University Press, 2000
- [2] Berger Noam, Nina Gantert y Yuval Peres, "The speed of biased random walks on percolation clusters", arXiv:math/0211303, 2008 (no publicado)
- [3] Bunde Armin y Shlomo Havlin (eds.), *Fractals and Disordered Systems*, Springer-Verlag, 1996
- [4] Bustingorry S. y E. R. Reyes, "Biased diffusion in anisotropic disordered systems", *Physical Review E*, **62**, **6**, pp 7664–7669, 2000
- [5] Dhar Deepak, "Diffusion and drift on percolation networks in an external field", *Physica A: Math. Gen.* **17** **L257**, 1984
- [6] Dhar Deepak y Dietrich Stauffer, "Drift and Trapping in biased diffusion on disordered lattices", *Int. J. Mod. Phys.*, **C9**, 349, arXiv:cond-mat/9802218, 1998
- [7] Flory P.J. , "Molecular Size Distribution in Three Dimensional Polymers I, II, III, Gelation", *J. Am. Chem. Soc.*, **63**, 3083, 3091, 3906, 1941
- [8] Fribergh Alexander y Alan Hammond, "Phase transition for the biased random walk on the supercritical percolation cluster", arXiv:1103.1371, 2011, (no publicado)
- [9] Hoshen J. y R. Kopelman, "Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm", *Physical Review B*. **14**, pp 3438-3445, 1976
- [10] Hoshen J., M. W. Berry y K. S. Minser, "Percolation and cluster structure parameters: The enhanced Hoshen-Kopelman algorithm", *Physical Review E* **56**, 1455–1460, 1997
- [11] Huang Kerson, *Introduction to Statistical Physics*, Nueva York, Taylor and Francis, 2001

- [12] Kirsch Alexander, “Phase Transition in Two-Dimensional Biased Diffusion”, *International Journal of Modern Physics C*, **9**, 07, 1998
- [13] Krapivsky Pavel L. , Sidney Redner y Eli Ben-Naim, *A Kinetic View of Statistical Physics*, Reino Unido, Cambridge University Press, 2010
- [14] Mandelbrot Benoît, *La Geometría Fractal de la Naturaleza*, trad. Josep LLos, Tusquets, 3a ed. 2009
- [15] Meakin Paul, “Fractal aggregates in geophysics”, *Reviews of Geophysics* **29**, **3**, pp 317–354, Agosto 1991
- [16] Prigogine *et al.*, “Random Walks: Theory and Selected Applications“, *Advances in Chemical Physics*, **52**, 2007
- [17] Scalas Enrico, “The application of continuous time random walks in finance and economics”, *Physica A: Statistical Mechanics and its applications*, **362**, **2** **1**, pp 225–239, Abril 2006
- [18] Sethna James P., *Entropy, Order Parameters and complexity*, Oxford University Press, 2011
- [19] Sornette Didier, “Discrete-scale invariance and complex dimensions”, *Physics Reports*, **297**, **1**, pp 239–270, 1998
- [20] Stanley H. Eugene, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, EUA, Oxford University Press, 1971
- [21] Stauffer Dietrich y Ammon Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, EUA, Taylor and Francis, 1994
- [22] Sznitman Alain-Sol, “On the Anisotropic Walk on the Supercritical Percolation Cluster”, *Communications on Mathematical Physics*, **240**, **2-3**, pp 123–148, 2003
- [23] Ziff R.M y Newman M.E, “Fast Monte Carlo algorithm for site and bond percolation”, *Physical Review E*, **64**, 2001