



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

UNIDAD IZTAPALAPA  
POSGRADO EN CIENCIAS (QUÍMICA)



DIVISIÓN DE  
CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

**“CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS:  
LA IMPORTANCIA DE SUS PROPIEDADES  
FRACTALES Y DE TRANSPORTE EN  
CINÉTICA QUÍMICA ANÓMALA  
MEDIANTE SIMULACIONES MONTECARLO”**

**T E S I S**

PARA OBTENER EL GRADO DE

**DOCTOR EN CIENCIAS (QUÍMICA)**

QUE PRESENTA EL

**M. en C. ROGELIO OMMAR CRUZ VÁZQUEZ**

MATRÍCULA: 208180173

✉ rogelio.quetzalli@gmail.com

A S E S O R

**DR. SALOMÓN CORDERO SÁNCHEZ**

LOS MIEMBROS DEL JURADO:

PRESIDENTE: **DR. JOSÉ LUIS DEL RÍO CORREA**

SECRETARIO: **DR. SALOMÓN CORDERO SÁNCHEZ**

VOCAL: **DR. ADRIÁN MAURICIO ESCOBAR RUIZ**

VOCAL: **DR. DIDIER SAMAYOA OCHOA**

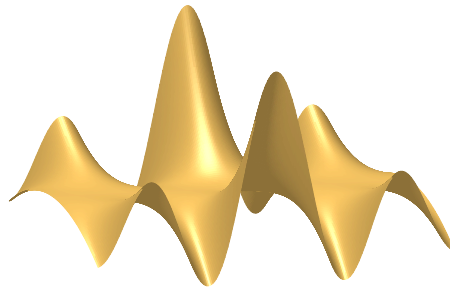
VOCAL: **DR. CARLOS FELIPE MENDOZA**

IZTAPALAPA, CIUDAD DE MÉXICO, A 9 DE DICIEMBRE DEL 2025



TESIS REALIZADA EN EL

**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**  
ÁREA DE  
**FISICOQUÍMICA DE SUPERFICIES**



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA





# AGRADECIMIENTOS

## **A toda mi familia**

Porque la familia siempre será el motor principal para el bienestar de una nación. ¡Gracias a todos sin excepción!

## **A los miembros del jurado evaluador y asesor**

Dr. José Luis del Río Correa, Dr. Salomón Cordero Sánchez, Dr. Adrián Mauricio Escobar Ruiz, Dr. Didier Samayoa Ochoa y al Dr. Carlos Felipe Mendoza por su tiempo, sus valiosas críticas y sus sugerencias que enriquecieron profundamente este trabajo. Agradecimiento especial al Dr. Salomón Cordero Sánchez porque confió en mí.

## **Al CONACYT y la UAM**

Por proporcionar los recursos económicos y el espacio para desarrollar esta investigación.

## **A amigos y colegas**

Porque con ellos siempre encuentro un momento para escuchar y ser escuchado, un momento para reír y llorar, para jugar o bromear, lo cual no tiene precio. Para los que ya no están también les dedico este humilde trabajo, siempre los llevo en mi mente y en mi corazón.

## **A las instituciones de formación básica**

Nunca voy a olvidar a mi Jardín de Niños 'Primavera', a mi Escuela Primaria 'Xicotécatl', a mi Escuela Secundaria Técnica Industrial y Comercial No. 67 'Margarita Maza de Juárez' y a mi Centro de Estudios Tecnológicos Industrial y de Servicios No. 32. A profesores y amigos que conocí en aquellos años cuando la vida para mí era mágica los recuerdo con mucha nostalgia y emoción.

## **A la comunidad del software libre**

A desarrolladores de distribuciones Linux,  $\LaTeX$  y a todos quienes crean herramientas destinadas al apoyo del trabajo académico.

## **A la madre tierra y al universo**

La asombrosa belleza del mundo en el que vivimos y la inmensidad del cosmos con su aparente quietud y brillo me hacen sentir feliz de estar vivo siempre. No he sido de los que han dejado de mirar al cielo para guiarse.



*– A la memoria del –*

**Dr. Armando Domínguez Ortiz**

(1964 - 2022)



# RESUMEN

La difusión sobre cúmulos de percolación, tanto en dos como en tres dimensiones, ha sido de interés desde hace varias décadas atrás. Puesto que la manera en que difunden partículas o especies químicas en un sistema material, como podría ser el interior de un sólido poroso o sobre una superficie heterogénea, se vincula directamente con su estructura y comportamiento, son utilizados como modelo estándar de sistemas desordenados. Sus aplicaciones abarcan desde el transporte en medios amorfos y porosos y materiales compuestos hasta las propiedades de polímeros ramificados, geles y conductores iónicos complejos.

Dichos cúmulos se distinguen por contener huecos o espacio vacío en su interior, por lo que también nos referimos a esta región como *conjunto fractal* o *medio poroso*, la cual se caracterizó por sus propiedades estáticas y dinámicas. Las propiedades estáticas aquí consideradas fueron la dimensión fractal ( $d_f$ ) y la lagunaridad ( $L$ ). La primera representa la dependencia de la “masa” con la longitud de escala (longitud de medida), mientras que la lagunaridad está relacionada con el grado de homogeneidad de un fractal; esta última puede concebirse como una medida de qué tan hueca es una estructura geométrica o de cuánto se aleja un objeto geométrico de la invarianza ante dilatación. Rutinas en Mathematica versión 10 fueron creadas para dicha caracterización; en estas se explora el entorno de distintos puntos elegidos al azar, pero a diferencia del “box counting method”, en el caso de la dimensión fractal, el cubrimiento y exploración del medio se lleva a cabo con regiones irregulares a las que llamamos cubrimientos, cuyo tamaño queda definido por la cantidad de elementos del conjunto fractal dentro de estos. Un procedimiento similar se aplicó en el caso de la lagunaridad.

Por otra parte, las propiedades dinámicas como la dimensión del caminante ( $d_w$ ) y la dimensión espectral ( $d_s$ ), las cuales surgen de los modelos físicos de los procesos de difusión, ayudan a comprender por qué la manera en que se conectan los elementos de un sistema desordenado afecta directamente las propiedades de transporte del mismo. Así, una partícula que difunde en un medio con longitud de correlación espacial ( $\xi$ ) casi nula, se caracteriza por una trayectoria con  $d_w \approx 2.8$  y el medio por una  $d_s \approx 4/3$ , y a medida que  $\xi$  crece, tanto  $d_w$  como  $d_s$  tienden a 2, lo cual indica que las dificultades de transporte de materia en el medio disminuyen; tal como lo demuestran los resultados obtenidos en

nuestras simulaciones, en las que se utilizó el modelo del caminante aleatorio clásico como partícula que difunde.

De esta manera, dado que las propiedades fractales de un cúmulo de percolación están determinadas por la geometría del mismo y sus propiedades de transporte gobiernan la dinámica de especies en su interior, resulta necesario abordar ambos aspectos de manera conjunta para dar respuesta a preguntas diversas de interés químico, lo que contribuirá a una comprensión más profunda de procesos cinéticos en medios desordenados y así avanzar hacia una teoría cinética química más general. Por consiguiente, nos hemos planteado los objetivos siguientes:

- 1** CONSTRUIR REDES BIDIMENSIONALES DE CONECTIVIDAD CUATRO CON DISTINTOS GRADOS DE CORRELACIÓN ESPACIAL.
- 2** OBTENER CÚMULOS DE PERCOLACIÓN INFINITOS A PARTIR DE REDES BIDIMENSIONALES DE CONECTIVIDAD CUATRO CON CORRELACIÓN ESPACIAL Y CARACTERIZARLOS POR SUS PROPIEDADES FRACTALES (O ESTÁTICAS) Y DE TRANSPORTE (O DINÁMICAS).
- 3** EVALUAR LA EVOLUCIÓN TEMPORAL DE REACCIONES QUÍMICAS DE ORDEN 2 Y 3 SOBRE CÚMULOS DE PERCOLACIÓN INFINITOS CORRELACIONADOS.
- 4** ESTABLECER UN MODELO CINÉTICO PARA UNA REACCIÓN QUÍMICA QUE EVOLUCIONA EN EL SENO DE UN CÚMULO DE PERCOLACIÓN INFINITO CORRELACIONADO, EN EL CUAL SE INCLUYAN LAS PROPIEDADES FRACTALES Y DE TRANSPORTE DEL MISMO.

Para el desarrollo de estos objetivos se estructura la tesis como sigue. En el capítulo 1 se presentan los fundamentos teóricos sobre los que se apoyan los conceptos que definen las características de los cúmulos de percolación infinitos y de los procesos dinámicos que sobre ellos pueden llevarse a cabo. En el capítulo 2, se describen los procedimientos para obtener y caracterizar dichos cúmulos por sus propiedades estáticas y dinámicas. Se utilizaron redes cuadradas isotrópicas de  $1000 \times 1000$  sitios con diferentes grados de correlación espacial y conectividad cuatro, construidas en base al Modelo Dual de Sitios y Enlaces, sobre las cuales se aplicó una rutina de percolación clásica a fin de obtener cúmulos de percolación correlacionados. En el capítulo 3, dichos cúmulos son utilizados como los medios de reacción en los que, mediante simulaciones Montecarlo, se llevaron a cabo las reacciones bimoleculares de aniquilación de una y dos especies,  $A + A \rightarrow 0$  y  $A + B$

→ 0, respectivamente, en las que el producto representa una especie químicamente inerte, la cual una vez que se forma no interfiere en el desarrollo subsecuente de la reacción. También se analizó la reacción de tercer orden  $2A + B \rightarrow 2C$ . En todas las simulaciones las especies reaccionantes son consideradas partículas puntuales, sin ningún tipo de interacción entre ellas, que se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico. En el caso de la reacción de una sola especie se estableció y se resolvió el modelo fractal propuesto por Kopelman [55], en el cual se sustituyen las constantes de velocidad de la cinética química clásica por funciones del tiempo del tipo  $k_f \cdot t^{-h}$ , con  $h = 1 - \frac{d_s}{2}$ . Dicha aproximación se resuelve para tres valores de  $d_s$ : 1) a partir de  $S(t) \sim t^{d_s/2}$ , en donde  $S(t)$ , como se sabe, es el número de sitios distintos que visita un caminante aleatorio, 2) a partir de  $d_s = 2 \cdot d_f/d_w$  y 3)  $d_s = 4/3$ , que establece como super-universalidad la conjetura de Alexander-Orbach, la cual resultó no ser la mejor aproximación, sobre todo cuando el medio adopta una clara correlación espacial. En los casos de las reacciones heteromoleculares se presentan las cinéticas de cada especie. Los resultados obtenidos nos permitieron establecer, de forma cuantitativa parcial, que la estequiometría y la diferencia de concentraciones iniciales de los reactivos introducen escalas adicionales que rompen la invarianza de escala simple que postula la aproximación fractal de Kopelman. Por último, en el capítulo 4 se presenta el trabajo a futuro y las conclusiones.



# ÍNDICE GENERAL

	Pág.
<b>AGRADECIMIENTOS</b> . . . . .	<b>V</b>
<b>RESUMEN</b> . . . . .	<b>IX</b>
<b>ÍNDICE DE FIGURAS</b> . . . . .	<b>XVII</b>
<b>ÍNDICE DE TABLAS</b> . . . . .	<b>XXIII</b>
<b>LISTA DE SÍMBOLOS Y ABREVIATURAS</b> . . . . .	<b>XXV</b>

---

## **I LOS ANTECEDENTES TEÓRICOS**

---

### **CAPÍTULO 1**

<b>MARCO TEÓRICO</b> . . . . .	<b>3</b>
1.1 INTRODUCCIÓN . . . . .	4
1.2 DIFUSIÓN . . . . .	7
1.2.1 CAMINATA ALEATORIA . . . . .	10
1.2.1.1 MOVIMIENTO BROWNIANO . . . . .	12
1.2.1.2 DIFUSIÓN ANÓMALA . . . . .	13
1.3 PERCOLACIÓN . . . . .	15
1.4 GEOMETRÍA FRACTAL . . . . .	18
1.4.1 PROPIEDADES FRACTALES EN CÚMULOS INFINITOS DE PERCOLACIÓN . . . . .	20

---

## **II CONSTRUCCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LOS CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS Y PROCESOS DINÁMICOS SOBRE LOS MISMOS**

---

### **CAPÍTULO 2**

<b>CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS: CONSTRUCCIÓN Y CARACTERIZACIÓN</b> . . . . .	<b>25</b>
---	-----------

2.1	EL MODELO DUAL DE SITIOS Y ENLACES . . . . .	26
2.2	CÚMULOS INFINITOS DE PERCOLACIÓN CLÁSICA . . . . .	31
2.2.1	LA DIMENSIÓN FRACTAL . . . . .	37
2.2.2	LA LAGUNARIDAD . . . . .	42
2.2.3	LA DIMENSIÓN DEL CAMINANTE . . . . .	45
2.2.4	LA DIMENSIÓN ESPECTRAL . . . . .	47

### CAPÍTULO 3

#### CINÉTICA QUÍMICA ANÓMALA EN CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS 53

3.1	REACCIONES QUÍMICAS EN CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS . .	54
3.1.1	LA REACCIÓN DE ANIQUILACION UNIMOLECULAR: $A + A \rightarrow 0$ . . . . .	56
3.1.2	LA REACCIÓN DE ANIQUILACIÓN BIMOLECULAR: $A + B \rightarrow 0$ . . . . .	60
3.1.3	LA REACCIÓN DE TERCER ORDEN CON DOS REACTANTES . . . . .	62

---

### III ALCANCES DEL TRABAJO Y CONCLUSIONES GENERALES

---

#### CAPÍTULO 4

#### TRABAJO A FUTURO Y CONCLUSIONES . . . . . 69

4.1	TRABAJO A FUTURO . . . . .	70
4.2	CONCLUSIONES . . . . .	71

---

### IV APÉNDICES

---

#### APÉNDICE A

#### CAMINANTE ALEATORIO Y ECUACIÓN DE DIFUSIÓN: COMPARACIÓN NUMÉRICA . . . 75

A.1	DEL CAMINANTE ALEATORIO A LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN . . . . .	76
A.1.1	Comparación numérica entre los modelos . . . . .	78

#### APÉNDICE B

#### DISTRIBUCIONES $\alpha$ -ESTABLES Y PROCESOS DIFUSIVOS . . . . . 81

B.1	DISTRIBUCIÓN $\alpha$ -ESTABLES . . . . .	82
B.1.1	Teorema del límite central clásico . . . . .	84
B.1.2	Teorema del límite central generalizado . . . . .	86

B.2 APLICACIONES A PROCESOS DIFUSIVOS . . . . .	89
<b>REFERENCIAS . . . . .</b>	<b>91</b>
<b>ÍNDICE ALFABÉTICO . . . . .</b>	<b>101</b>



# ÍNDICE DE FIGURAS

## Capítulo 1

- 1.1 Representación de los anillos de Liesegang. Una pequeña gota de  $\text{AgNO}_3$ , región en color rojo, es colocada sobre una película delgada de gelatina que contiene  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ . Conforme el  $\text{AgNO}_3$  difunde al interior de la película y se aleja del punto de origen, reacciona con el  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  que encuentra a su paso para formar anillos concéntricos periódicos de  $\text{Ag}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  insoluble. Los anillos concéntricos llegan a ser más delgados que un cabello humano . . . . . 4
- 1.2 Representación esquemática de una paseo aleatorio en el plano. En (a) se muestra la trayectoria (línea punteada) que describe el caminante después de tres unidades de tiempo con posición inicial el punto rojo. En (b) se muestran los vectores desplazamiento para cada tiempo del recorrido. El desplazamiento cuadrático medio implica realizar una cantidad grande de trayectorias y promediar el valor del módulo al cuadrado de cada vector de desplazamiento para cada instante de tiempo. . . . . 9
- 1.3 Una red cuadrada de  $10 \times 10$  sitios con siete cúmulos ilustrados en distintos colores, siendo el negro espacio vacío. En rojo se muestra el cúmulo percolante. La teoría de la percolación explica, entre otras cosas, cual es la probabilidad de que dados dos sitios, separados una distancia  $r$ , pertenezcan al mismo cúmulo. . . . . 15
- 1.4 Ejemplos de redes en el plano y en el espacio. Los puntos representan sitios y las líneas enlaces. En cualquier caso un sitio dado interacciona o se rodea de un número fijo de vecinos al que se le llama conectividad, simbolizado con la letra  $z$ . . . . . 16
- 1.5 Cúmulos infinitos de percolación con  $z = 3$  a distintos valores de longitud de correlación  $\xi$ . . . . . 17
- 1.6 Cúmulos infinitos de percolación con  $z = 6$  a distintos valores de longitud de correlación  $\xi$ . . . . . 18

1.7	La propiedad de autosimilitud en algunos objetos fractales. En (a) ampliaciones sucesivas de porciones del objeto fractal dan como resultado la figura original, lo cual verifica la propiedad de invarianza ante escala. En (b) la autosimilitud solo es válida como una propiedad promedio. . . . .	19
1.8	Cúmulos de percolación obtenidos a partir de redes correlacionadas construidas con el MDSE. Un claro efecto sobre la topología del cúmulo se observa a medida que la longitud de correlación de la red $\xi$ aumenta. . . . .	21

**Capítulo 2**

2.1	Ejemplificación de la correlación espacial de tamaños de poro en redes cuadradas discretas con $z = 4$ . Los círculos en color rojo denotan los sitios o poros y las líneas oscuras los enlaces que los conectan. En (a) la correlación espacial nula implica que sitios grandes conviven con sitios pequeños. En (b) son características zonas amplias de sitios de tamaño similar, la red se caracteriza por una longitud de correlación espacial no nula. . . . .	27
2.2	Representación de las distribuciones de probabilidad de sitios ( $F_S$ ) y enlaces ( $F_B$ ) de acuerdo al MDSE para la construcción de redes correlacionadas con $z = 4$ . El área sombreada $\Omega$ representa el traslape geométrico entre ambas distribuciones. Cuando $\Omega = 0$ tanto sitios como enlaces se distribuyen al azar. A medida que $\Omega \rightarrow 1$ sitios y enlaces de tamaño $R$ se agrupan en extensiones amplias, lo que provoca un efecto de segregación en la red. . . . .	31
2.3	Comportamiento de la longitud de correlación respecto al área de traslape del MDSE de acuerdo a los datos de la Tabla 2.1. Se puede observar que pequeños cambios en $\Omega$ provocan incrementos significativos en $\xi$ a medida que $\Omega \rightarrow 1$ . . . . .	33
2.4	El umbral de percolación ( $\rho_c$ ) como función de la longitud de correlación ( $\xi$ ) de acuerdo a los datos de la Tabla 2.1. Se observa un claro abatimiento del umbral de percolación cuando la longitud de correlación crece. . . . .	34

2.5	Efecto de la longitud de correlación ( $\xi$ ) de la red a partir de la cual se obtiene el cúmulo infinito (en negro) sobre la morfología del mismo, el cual representa la masa de nuestros medios porosos. En azul y blanco se han representado el perímetro interno y el espacio vacío o huecos, respectivamente. Se observa un efecto claro sobre el tamaño de las regiones con masa y del espacio vacío del medio, el cual crece con $\xi$ . En todos los casos se puede hablar de una distribución de tamaños de hueco no uniforme. . . . .	36
2.6	Manera en que opera el algoritmo del radar cuadrado sobre un elemento de un conjunto fractal para el cálculo de su dimensión fractal. La masa, los huecos y el espacio exterior del conjunto se han representado en negro, amarillo y gris, respectivamente. En ambos casos el total de elementos del subconjunto fractal dentro de la última exploración excede al número de elementos buscado, en cuyo caso se procede a una selección aleatoria que los contenga. . . . .	39
2.7	La dimensión fractal de los medios porosos como función de la longitud correlación de acuerdo a los datos de la Tabla 2.2. El mínimo corresponde al punto (3.32, 1.812). . . . .	41
2.8	Porcentaje promedio en masa $\eta$ de los medios porosos a los distintos valores de $s$ . En todos los casos la presencia de huecos provoca una disminución en el porcentaje promedio de masa a medida que se exploran regiones de mayor tamaño en los medios. Una dimensión fractal más baja no necesariamente se traduce en una menor cantidad de masa promedio al variar el tamaño de la región explorada. . . . .	41
2.9	Comportamiento de la lagunaridad $L(s)$ como función del tamaño de cubrimiento $s$ en escala logarítmica. Cada punto es el promedio de cincuenta valores. Una lagunaridad mayor indica que los tamaños de hueco del medio se distribuyen en intervalos más amplios. . . . .	44
2.10	Comportamiento de la lagunaridad $L(s)$ como función del tamaño de cubrimiento $s$ en escala logarítmica para valores de $d_f \neq 1.866$ . En (a) se observa que las siete curvas de mayor lagunaridad mantienen una concavidad hacia arriba en todo el intervalo; mientras que en (b) se pueden apreciar puntos de inflexión en los casos $d_f \in \{1.812, 1.867\}$ cuando $\ln(s) > 3$ . Las curvas con la menor lagunaridad su muestran cóncavas hacia abajo en todo el intervalo. . . . .	44

2.11	La dimensión del caminante como función de la longitud de correlación. Cada punto es el promedio de 50 valores en los que se evalúan 2100 trayectorias de 1500 pasos de montecarlo cada una de un caminante aleatorio clásico como partícula que difunde sobre los medios porosos. . . . .	46
2.12	Evolución temporal de los sitios distintos que visita el caminante y de los sitios de crecimiento. En ambos casos cada curva es el promedio de diez y el efecto de la correlación es más evidente cuando $\xi > 0.571$ . . . . .	47
2.13	La dimensión espectral de los medios porosos como función de la longitud de correlación de la red a partir de la cual se obtienen. Los puntos verdes se obtienen a partir de la ecuación (2.20) y los cuadrados rojos a partir de la ecuación (1.17). En este último caso la conjetura de Alexander y Orbach se cumple para $\xi < 5.07$ . El incremento en $d_s$ se traduce en un transporte de materia más eficiente. . . . .	50
2.14	Condición de Ramal y Toulouse a distintos grados de correlación de la red a partir de la cual se obtienen los medios porosos. La curva de color azul representa el lado izquierdo de la ecuación (2.22); los puntos son el cociente de las simulaciones mostradas en la Figura 2.12. En todos los casos $S'(t) \sim G(t)/S(t)$ . . . . .	51

**Capítulo 3**

3.1	Cinética de la reacción de aniquilación unimolecular sobre los cúmulos de percolación en escla log-log a distintos valores de $\xi$ . La simulación se lleva a cabo con $C_A^0 = 15000$ distribuidas aleatoriamente, las cuales se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo. Todos los encuentros son efectivos y dos especies se anulan cuando ocupan la misma posición, en la que puede haber cualquier cantidad de partículas. Se observa que la reacción se ve favorecida en los casos más correlacionados. . . . .	57
3.2	Comparación entre la simulación de la reacción de aniquilación unimolecular (círculos negros), sobre los cúmulos de percolación, con el modelo fractal resuelto para tres valores de $d_s$ (curvas amarilla, azul y anaranjada) y el modelo de la cinética química clásica (curva verde), ecuaciones (3.3) y (3.4), respectivamente. Los valores $d_s^{(a)}$ y $d_s^{(b)}$ se reportan en la Tabla 2.4 y $d_s^{AO}$ es el valor de $d_s$ de la conjetura de Alexander-Orbach. . . . .	59

3.3 Cinética de la reacción de aniquilación bimolecular sobre los cúmulos de percolación. La simulación se lleva a cabo con  $C_A^0 = 20000$  y  $C_B^0 = 15000$  partículas, distribuidas aleatoriamente, las cuales se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo. En (a) la evolución temporal de la especie A presenta una desaceleración debida a los pocos encuentros con la especie B la cual disminuye su cantidad de forma monótona en todo el tiempo de reacción, como se observa en (b). . . . . 61

3.4 Cinética de la reacción de tercer orden sobre los cúmulos de percolación en escala log-log. La simulación se lleva a cabo con  $C_A^0 = 20000$ ,  $C_B^0 = 15000$  y  $C_C^0 = 0$  distribuidas aleatoriamente, las cuales se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo. En todos los casos los inicios de la reacción provocan una tasa constante de producción de la especie C, pero a medida que la reacción avanza, la especie A comienza a disminuir de forma monótona en su tasa de reacción, provocando un efecto similar en las tasas de reacción y producción de las especies B y C, respectivamente. . . . . 64

3.5 Evolución temporal de la especie A en la reacción  $2A + B \rightarrow 2C$  para distintos valores de  $\xi$ . En todos los casos la población de A disminuye de forma monótona hasta el término de la reacción. El caso  $\xi = 10.08$  es el que más favorece esta reacción y en el caso  $\xi = 18.73$  se logra la menor interacción entre los reactivos. . . . . 65

3.6 Evolución temporal de la especie B en la reacción  $2A + B \rightarrow 2C$  para distintos valores de  $\xi$ . Los cambios de concavidad reflejan la transición entre regímenes cinéticos, debidos a la disminución progresiva de la especie A y a la separación entre las especies reactivas. . . . . 65

3.7 Evolución temporal de la especie C en la reacción  $2A + B \rightarrow 2C$  para distintos valores de  $\xi$ . Al principio los encuentros efectivos entre A y B mantienen una tasa de producción de C constante, pero a medida que la especie A se agota progresivamente, dicha tasa de producción también disminuye. . . . . 66

**Capítulo 4**

**Apéndice A**

A.1 Espacio discreto unidimensional en el que se puede realizar una caminata aleatoria. Cada vez que el caminante realice un movimiento, que le tomará un tiempo  $\Delta t$ , tendrá un 40 % de probabilidad de quedarse en el mismo sitio y 35 % de probabilidad de moverse a la izquierda o a la derecha. Repeticiones consecutivas de este proceso, y sobre todo a tiempos largos, quedarán descritas por las ecuaciones de la difusión unidimensional. . . . . 76

A.2 Comparación de la densidad de probabilidad entre el modelo del caminante aleatorio discreto (puntos) y la forma analítica de la ecuación de difusión (líneas continuas), ecuaciones (A.1) y (A.8), respectivamente. Se puede observar una convergencia casi inmediata al régimen de difusión continua. . . . . 80

**Apéndice B**

B.1 Histograma semilogarítmico de las sumas normalizadas de 600 mil trayectorias y un total de cien variables de la distribución de Pareto con parámetros  $\{k_p, \alpha_p\} = \{1, 1.5\}$ . La distribución exhibe colas pesadas características de una distribución  $\alpha$ -estable de Lévy. La línea roja muestra la forma esperada de una gaussiana con la misma varianza que los datos truncados; se observa claramente que los datos reales tienen muchas más ocurrencias en los extremos, característica no observada en el caso gaussiano. . . . . 88

B.2 Simulaciones de los distintos escenarios de difusión en el plano. En el primer renglón se presentan las caminatas aleatorias después de 20 mil pasos. La difusión normal y la superdifusión se realizaron con probabilidades de longitud de desplazamiento determinadas por la distribución de probabilidad  $\alpha$ -estable con parámetros  $\{\alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma}\} = \{2, 0, 0, 1\}$  y  $\{\alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma}\} = \{0.5, 1, 0, 1\}$ , respectivamente. Para la subdifusión se utilizó la distribución de probabilidad de Pareto con parámetros  $\{t_{min}, \alpha_p\} = \{0.1, 2.6\}$ . La superdifusión se realizó considerando una distribución de tiempos de espera  $\tau \in [0, 10]$  tipo Pareto ajustada de tal manera que de los 20 mil pasos de la simulación, aproximadamente en el 30 % de ellos el caminante realizó un desplazamiento. . . . . 90

# ÍNDICE DE TABLAS

## Capítulo 1

- 1.1 Algunos ejemplos en los que se presentan sistemas reacción-difusión. . . . . 6
- 1.2 Umbrales de percolación de sitios para algunas redes en el plano y en el espacio. . . . . 17

## Capítulo 2

- 2.1 Longitud de correlación de las redes construidas con el MDSE y los umbrales de percolación de los cúmulos infinitos obtenidos a partir de estas para los distintos valores de  $\Omega$  considerados. Cada valor de  $\xi$  y de  $\rho_c$  es el promedio de cien valores. . . . . 32
- 2.2 Dimensión fractal de los medios porosos a las distintas longitudes de correlación de la red de la que se obtienen. Cada valor es el promedio de diez junto con su desviación estándar. . . . . 40
- 2.3 Dimensión del caminante de los medios porosos a las distintas longitudes de correlación de la red de la que se obtienen. Cada valor es el promedio de cincuenta junto con su desviación estándar. . . . . 45
- 2.4 Dimensión espectral de los medios porosos a las distintas longitudes de correlación de la red de la que se obtienen. Cada valor es el promedio de cincuenta. En la segunda columna el error corresponde a la desviación estándar y en la tercer columna se reporta la propagación del error proveniente de los valores  $d_f$  y  $d_w$ . . . . . 49

## Capítulo 3

- 3.1 Raíz cuadrada del error cuadrático medio ( $\sqrt{ECM}$ ), la constante fractal  $k_f$  y su desviación estándar  $\sigma_{k_f}$  de los ajustes del modelo fractal resuelto para los 3 valores de  $d_s$  mostrados en la Figura 3.2. En morado se resaltan los mejores ajustes. . . . . 58

## Capítulo 4

## Apéndice A

A.1 Comportamiento de la función de probabilidad  $p(n, m)$  para algunos instantes de tiempo de acuerdo a la ecuación (A.1). Por simplicidad se considera  $\Delta x = 1$  y  $\Delta t = 1$ . . . . . 79

**Apéndice B**

# LISTA DE SÍMBOLOS Y ABREVIATURAS

Símbolo/ abreviatura	Significado	Pág.
$D$	Coefficiente de difusión	7
DCM	Desplazamiento cuadrático medio	9
$\langle r^2 \rangle$	Notación matemática del DCM	9
$\gamma$	Exponente de escala del DCM	9
TLC	Teorema del límite central	9
$\Delta X_i$	Desplazamientos espaciales a tiempos discretos $t_i$	10
$\langle X(t)^n \rangle$	$n$ -ésimo momento de la variable aleatoria $X(t)$	10
$\mathbb{E}[Y]$	Esperanza matemática de la variable aleatoria $Y$	11
FDP	Función de densidad de probabilidad	12
$P(x, t)$	FDP de la variable aleatoria $X_k(t)$	12
RCDCM	Raíz cuadrada del DCM	12
$R(t)$	Notación matemática de la RCDCM	12
$\alpha$	Índice de estabilidad o exponente característico en FDP de variables aleatorias que siguen distribuciones estables	14

<b>Símbolo/ abreviatura</b>	<b>Significado</b>	<b>Pág.</b>
$Z_N$	Suma reescalada de $N = tk$ variables aleatorias independientes para distribuciones de cola larga	14
$z$	Conectividad o número de vecinos con los que interactúa cada sitio en una red $n$ -dimensional	16
MDSE	Modelo Dual de Sitios y Enlaces	21
$d_f$	Dimensión fractal	20
$d_w$	Dimensión del caminante	21
$d_s$	Dimensión espectral	22
$\Omega$	Área de traslape entre las funciones de densidad de probabilidad de sitios y enlaces de acuerdo al MDSE	29
$\xi$	Longitud de correlación espacial de redes discretas bidimensionales en unidades de red (u.r.)	30
$R_g$	Radio de giro	37
$L(s)$	Lagunaridad para un cubrimiento de tamaño $s$	43
$S(t)$	Número de sitios distintos que visita el caminante aleatorio	46
$G(t)$	Número de sitios de crecimiento	46
$C_X^t$	Cantidad de partículas de la especie $X$ al tiempo $t$	55
$\mathbb{Z}$	El conjunto de los números enteros	78

## **Parte I**

# **LOS ANTECEDENTES TEÓRICOS**



$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}$$

$$\langle x^2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x, t) dx = 2Dt$$

$$C(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x, t) dx = 1 \quad (t \geq 0)$$

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{J}(x, t)}{\partial x}$$

## MARCO TEÓRICO



*Anónimo*

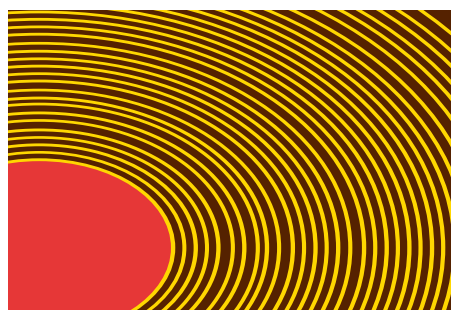
*El hombre que realiza sus funciones de nutrición, crecimiento y reproducción, se realiza sólo en calidad de vegetal y se frustra en su integralidad, mientras la moral lo impulsa a realizarse como hombre. El que desarrolla sus percepciones sensibles y sus sentimientos pasionales, se realiza sólo en cuanto a animal frustrándose en su integralidad, mientras la ética lo impulsa a realizarse en todas las dimensiones humanas.*

**RESUMEN:** Es presentada una descripción concisa de los inicios del análisis de sistemas químicos en los cuales las características del medio afectan directamente a la forma en la que se mueven las especies involucradas. Se detalla la importancia del modelo del caminante aleatorio el cual conecta el movimiento caótico microscópico con el transporte macroscópico descrito por la segunda ley de Fick. Al simplificar la difusión a una suma de pasos aleatorios independientes, permite cuantificar la propagación espacial de materia mediante el desplazamiento cuadrático medio, el cual escala linealmente con el tiempo única y exclusivamente en la difusión normal. Se incluye, también, una descripción sucinta de la teoría de la percolación y de la geometría fractal. La primera describe las propiedades emergentes relacionadas a la forma en que se conectan un gran número de objetos; por su parte, la geometría fractal permite cuantificar la complejidad estructural de dichos objetos y establecer las leyes de escala que vinculan esa estructura con sus propiedades dinámicas, tales como la difusión.

Sin duda alguna hablar de movimiento y cambio es crucial para describir todo lo que nos rodea. Las moléculas se mueven, colisionan y reaccionan para formar nuevas especies, los organismos se congregan y realizan tareas de interés colectivo, y no podemos mirar al cielo sin ser testigos del movimiento de los cuerpos celestes. Lo anterior deja claro que el mundo que nos rodea se manifiesta como lo observamos debido al movimiento de sus componentes elementales a cualquier escala. Todo cambio implica movimiento de algo y a menudo lo percibimos e identificamos por medio de patrones complejos tanto espaciales como temporales.

El estudio formal de tales patrones tuvo su origen en la química. La química como disciplina científica siempre se ha encargado de los efectos que se producen por los movimientos moleculares, lo que permitió que hacia finales del siglo XIX se establecieran las leyes básicas que describen la cinética de las reacciones químicas, así como la manera en la cual las moléculas migran a través de diferentes medios. A partir de entonces, el trabajo del químico involucraba una tarea más: pensar en cómo adaptar un sistema de reacción a los movimientos de las especies involucradas.

Para 1896, el químico alemán Rafael Liesegang observó que cuando ciertos pares de sales inorgánicas se mueven y reaccionan en una matriz de gel, se producen bandas periódicas de un precipitado [44, 59]. Este sorprendente hallazgo dejó ver que el mecanismo de la reacción no contemplaba, ni por asomo, dicho patrón espacial observado (ver Figura 1.1). Liesegang no pudo dar una explicación a la formación de las bandas, pero reconoció que dichos patrones estaban asociados a la manera en que se mueven las especies involucradas en la reacción, de modo que el hallazgo quedó como una simple curiosidad científica. A inicios del siglo XX, sistemas de reacción en los que se presentaban patrones espaciales complejos, como en la reacción de Liesegang, se volvieron algo muy frecuente. En 1910 el casi olvidado biofísico francés Stéphane Leduc escribe un libro en el que hace



**Figura 1.1.** Representación de los anillos de Liesegang. Una pequeña gota de  $\text{AgNO}_3$ , región en color rojo, es colocada sobre una película delgada de gelatina que contiene  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ . Conforme el  $\text{AgNO}_3$  difunde al interior de la película y se aleja del punto de origen, reacciona con el  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  que encuentra a su paso para formar anillos concéntricos periódicos de  $\text{Ag}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  insoluble. Los anillos concéntricos llegan a ser más delgados que un cabello humano.

una descripción de dichos sistemas, y en él también menciona que tales estructuras tenían que ser las responsables de muchos procesos biológicos [58]. De sus experimentos con sales acuosas y sus precipitados, los cuales también presentaban la formación de patrones espaciales complejos, hizo analogías entre estos y la formación de husos mitóticos (estructuras complejas que coordinan la segregación precisa de los cromosomas durante la división celular en eucariontes) y la formación de células confluentes (células que se mueven como un fluido), y aunque para la época esto parecía muy improbable, varias décadas después se comprobó que la analogía hecha por Leduc fue correcta.

La capacidad de recrear comportamientos similares a los de la vida real en un tubo de ensayo estimuló el interés en los sistemas de migración-reacción. Así, el trabajo conjunto de químicos y otros profesionales como biólogos o físicos permitió explorar este nuevo universo de reacciones en movimiento. El constante avance de la teoría facilitó la creación de nuevas ramas de la ciencia, en particular la cinética química no lineal y la teoría de sistemas dinámicos [29, 85]. Se desarrollaron herramientas matemáticas y recursos computacionales con los cuales modelar y profundizar en una amplia gama de fenómenos anteriormente desconcertantes, incluyendo la formación de patrones de piel en ciertos animales o el funcionamiento del esqueleto celular. A día de hoy, los sistemas de migración-reacción siguen siendo de mucho interés, ya que a partir de ellos se descubren una gran variedad de fenómenos nuevos que están permitiendo la creación de tecnologías a escalas que antes tan solo eran un sueño, como es el caso de los desarrollos en nanotecnología.

El crecimiento de poblaciones, la regeneración de tejidos o la formación de tumores son solo algunos ejemplos de fenómenos que involucran la dispersión y la interacción de individuos o de especies químicas dentro de una región determinada. Como se mencionó, un sistema de reacción-difusión puede estudiarse observando la evolución de la distribución de las especies en el dominio, o lo que es lo mismo, de sus patrones espacio-temporales [65]. Dichos patrones pueden presentar comportamientos estables o inestables en el tiempo y en el espacio, dependiendo de las características del sistema [97]. La evidencia rigurosa que relaciona una reacción-difusión con sistemas vivos es relativamente reciente y se remonta sólo a los descubrimientos de Alan Turing en la década de 1940 [96] y Boris Belousov en la década de 1950 [109]. Turing demostró teóricamente que debido a las llamadas *inestabilidades por difusión* o *inestabilidades de Turing*, un sistema de reacción-difusión puede generar espontáneamente patrones heterogéneos en el espacio desde un estado uniforme, en respuesta a perturbaciones infinitesimales [102].

Gracias a los trabajos de Turing, los sistemas con inestabilidades por difusión se pueden asociar con los procesos físicos y químicos que generan la formación de patrones

espacio-temporales dentro de organismos vivos y que controlan procesos biológicos complejos como la formación de extremidades [23] o la aparición de patrones de pigmentación en la piel de algunos animales [66]. En la Tabla 1.1 se describen algunos casos más que son debidos a la presencia de sistemas de reacción-difusión.

**Tabla 1.1. Algunos ejemplos en los que se presentan sistemas reacción-difusión.**

Proceso	Ejemplo y descripción
Regulación de la concentración de iones dentro de la célula	Algunos mecanismos que causan el control de la concentración de iones $\text{Ca}^{2+}$ dentro de la célula ayudan a aumentar la eficiencia del control de la expresión génica [25]. Gradientes de concentración transitorios de $\text{Ca}^{2+}$ interactúan con varios tipos de sitios de unión del mismo y dan lugar a complejos sistemas que sincronizan eventos dentro y fuera de la célula tales como la secreción pancreática, los movimientos ciliares de las bacterias y la cicatrización de heridas [30].
Metabolismo y energía celular	Oscilaciones inducidas por glucosa ayudan a coordinar el procesos de la glicólisis (romper los azúcares para producir moléculas de ATP de alta energía), inducir ondas de NADH y protones y pueden regular otras vías metabólicas [68].
Control del ritmo cardíaco	Si las ondas de excitación eléctrica (ondas de $\text{Ca}^{2+}$ ) en el tejido muscular del corazón se propagan en forma de espirales pueden provocar arritmias cardíacas, como taquicardia ventricular y fibrilación, que pueden llevar a la muerte [38].

Las moléculas son entidades altamente dinámicas, y sus movimientos pueden llegar a ser tan complejos al igual que sus efectos. Modelar matemáticamente dichos movimientos, sobre todo en sistemas biológicos, se vuelve una tarea bastante difícil; aunque, como suele hacerse en ciencia, es preferible partir de modelos simples y después modificarlos de modo que se adapten a situaciones más complejas. Por ejemplo, es bien sabido que si analizamos una pequeña porción de un fluido en movimiento partiendo de la segunda ley de Newton y sólo consideramos las fuerzas en la superficie y las debidas al campo gravitacional, llegamos hasta la expresión del gradiente de presión hidrostática; pero si, además, consideramos las fuerzas de deformación, obtenemos las ecuaciones de Navier-Stokes, que son las ecuaciones que gobiernan la mecánica de fluidos en donde no exista turbulencia.

A nivel macroscópico la teoría clásica de la difusión contempla dos cantidades físicas [41, págs. 1–10]:

- 1 La densidad molecular  $\rho(\mathbf{r}, t)$ , la cual mide el número promedio de moléculas de soluto por unidad de volumen en la posición  $\mathbf{r}$  en el momento  $t$
- 2 El flujo molecular del soluto  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ , definido como el vector cuya componente  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$  en la dirección de cualquier vector unitario  $\hat{\mathbf{n}}$  da el número promedio de moléculas de soluto por unidad de tiempo que atraviesan una unidad de área normal a  $\hat{\mathbf{n}}$ , en la dirección de  $\hat{\mathbf{n}}$ , en la posición  $r$  al momento  $t$ .

La relación empírica entre  $\rho$  y  $\mathbf{J}$ , llamada primera ley de Fick, conduce a una ecuación diferencial parcial llamada ecuación de difusión, piedra angular de la teoría clásica de la difusión. La primera ley de Fick en una dimensión se expresa como:

$$\mathbf{J}(x, t) = -D \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} \quad (1.1)$$

donde  $D$  es el coeficiente de difusión. El signo negativo del lado derecho indica que la sustancia que fluye se dirige hacia la región de menor concentración. Esta ley no toma en cuenta que el gradiente y la concentración local de la sustancia decrece conforme avanza el tiempo. El flujo de sustancia entrando en una región, en la que existe un gradiente de concentración, es diferente del flujo saliendo de la misma región. De la ley de conservación de la materia, la diferencia entre los dos flujos debe dar lugar a

un cambio en la concentración de la sustancia dentro de la región considerada. Esta es precisamente la segunda ley de Fick, que establece que el cambio en la concentración de la sustancia a lo largo del tiempo es igual al cambio en el flujo de difusión local. En términos matemáticos la segunda ley de Fick es:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{J}(x, t)}{\partial x} \quad (1.2)$$

combinando la ecuación (1.1) y (1.2), y sabiendo que la masa por unidad de volumen se puede convertir en una cantidad relacionada con la concentración  $C$  obtenemos:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.3)$$

La solución a la ecuación (1.3) tiene la forma:

$$C(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi D \cdot t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D \cdot t}\right) \quad (1.4)$$

donde  $M$  es la masa total de sustancia que atraviesa una unidad de área transversal.

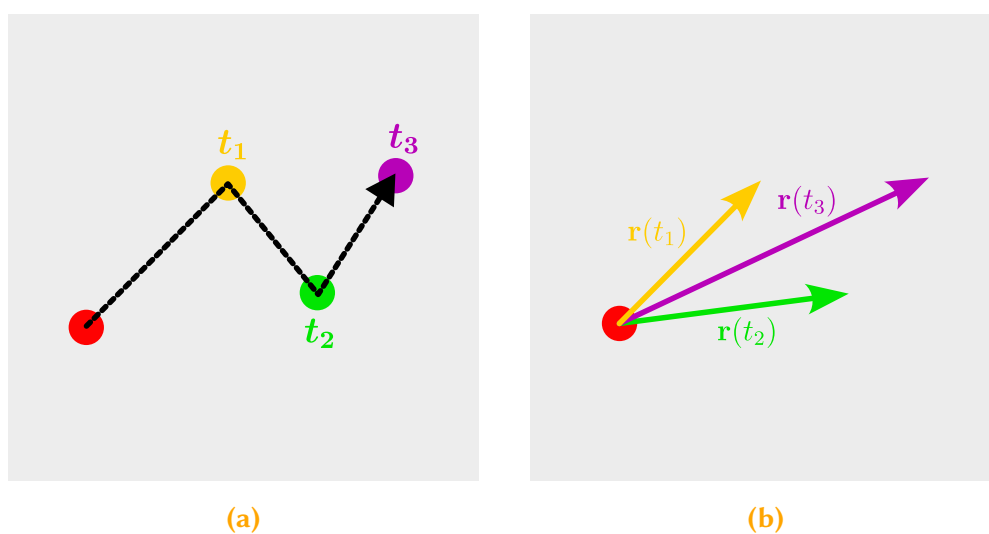
La difusión es axiomáticamente un fenómeno estadístico emergente de no equilibrio, cuya causa dinámica principal, entre otras, son las colisiones microscópicas entre entidades moleculares constituyentes dentro del sistema. Es una manifestación, no trivial, de la correlación entre la dinámica microscópica de cada especie y su comportamiento estadístico observado a escala macroscópica [43, 67, 76]. Para alcanzar este último estado, en la mayoría de los casos, el medio en el que se desarrolla dicho proceso juega un papel crucial, y las propiedades del mismo están relacionadas con el tipo de difusión que llevará a las especies de un estado al otro. Por ejemplo, las reacciones químicas en solución facilitan el encuentro entre especies, ya que incluso es posible agitar el medio; no así si nos fijamos en una reacción entre las moléculas de un fluido y las moléculas que están tanto en la superficie como al interior de un material poroso [51].

Como proceso aleatorio o estocástico, que se caracteriza por el movimiento irregular e impredecible de partículas suspendidas en algún fluido líquido o gaseoso, la difusión es la responsable de que dichas partículas se desplacen desde zonas de alta concentración a zonas de menor concentración, como lo expresan las leyes de Fick. Al movimiento irregular e impredecible de dichas partículas se le conoce comúnmente como movimiento browniano. Fue Einstein, quien en 1905 publica su trabajo titulado: *On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat* [28], en el que con la ayuda de la hipótesis atómica y la teoría de caminatas

aleatorias logra encontrar la relación entre dicho movimiento y la ecuación de difusión (ver Apéndice A).

Es precisamente en este trabajo donde Einstein establece que el desplazamiento cuadrático medio (DCM) de las partículas crece de forma lineal con el tiempo, es decir,  $\langle r^2 \rangle \sim t$  (ver Figura 1.2 para una mayor comprensión del concepto de desplazamiento cuadrático medio). Este resultado es característico de la difusión normal o gaussiana, y es, fundamentalmente, una consecuencia del *teorema del límite central* (TLC), el cual se utiliza para simplificar, mediante una aproximación, el cálculo de algunas probabilidades o la forma en que se distribuyen ciertas variables aleatorias utilizando la distribución normal.

Por otro lado, casi a inicios del siglo pasado se encontró, que para muchos sistemas físicos, dicho desplazamiento cuadrático medio no escala linealmente con el tiempo, sino que lo hace como una ley de potencias, es decir,  $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$ . De este modo se puede hablar de régimen de difusión de acuerdo al valor de  $\gamma$ . Así, para  $\gamma < 1$  se habla de subdifusión, y  $\gamma > 1$  se habla de superdifusión. Ambos casos son clasificados como *difusión anómala* la cual se discutirá en 1.2.1.2.



**Figura 1.2.** Representación esquemática de un paseo aleatorio en el plano. En (a) se muestra la trayectoria (línea punteada) que describe el caminante después de tres unidades de tiempo con posición inicial el punto rojo. En (b) se muestran los vectores desplazamiento para cada tiempo del recorrido. El desplazamiento cuadrático medio implica realizar una cantidad grande de trayectorias y promediar el valor del módulo al cuadrado de cada vector de desplazamiento para cada instante de tiempo.

## 1.2.1 CAMINATA ALEATORIA

(i) Una trayectoria formada por pasos discretos sucesivos aleatorios es lo que se conoce matemáticamente como una caminata aleatoria, aunque también pueden describirse en el límite continuo. En su versión más simple trata con desplazamientos espaciales  $\Delta X_i$  que se realizan en tiempos discretos  $t_i$ . Si  $X_0 = 0$  corresponde a la posición inicial del caminante en el tiempo  $t_0 = 0$ , entonces la posición después de  $k$  pasos está dada por la variable aleatoria

$$X(t_k) = \sum_{i=1}^k \Delta X_i \quad (1.5)$$

donde cada desplazamiento  $\Delta X_i$  es una variable aleatoria extraída de una distribución de probabilidad  $f(\Delta x)$ , y se supone que las extracciones son estadísticamente independientes. Esta  $f(\Delta x)$  puede usarse para determinar la función de densidad de probabilidad,  $P(x, t)$  para que el proceso esté en la posición  $x$  en el tiempo  $t$  que caracteriza completamente la naturaleza de la caminata y las medidas espaciales y temporales relacionadas. Por ejemplo el  $n$ -ésimo momento de la variable aleatoria  $X(t)$  se obtiene de

$$\langle X(t)^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^n P(x, t) dx \quad (1.6)$$

El DCM es, entonces, el segundo momento (no centrado) del desplazamiento de una partícula, y coincide con la varianza cuando el desplazamiento tiene media cero. En el estudio del movimiento aleatorio, ya sea en caminatas aleatorias o transporte en medios desordenados, es una de las cantidades más utilizadas. Su definición probabilística es como sigue:

Sea  $X(t)$  la posición aleatoria de una partícula en el tiempo  $t \geq 0$ , y sea  $X(0)$  su posición inicial. Definimos el *desplazamiento* como:

$$\Delta X(t) = X(t) - X(0)$$

El desplazamiento cuadrático medio en el tiempo  $t$  se define como:

$$\text{DCM}(t) = \mathbb{E}[(\Delta X(t))^2] = \mathbb{E}[(X(t) - X(0))^2]$$

(i) Comienza una adaptación al español y reorganización del contenido presentado en [6, págs. 38-40].

Esta expresión es, por definición, el **segundo momento no centrado** de la variable aleatoria  $\Delta X(t)$ . Recordemos que, para cualquier variable aleatoria  $Y$ , su segundo momento no centrado se descompone como:

$$\mathbb{E}[Y^2] = (\mathbb{E}[Y])^2 + \text{Var}(Y)$$

Haciendo la sustitución  $Y = \Delta X(t)$ , obtenemos:

$$\text{DCM}(t) = (\mathbb{E}[\Delta X(t)])^2 + \text{Var}(\Delta X(t)) \quad (1.7)$$

Entonces,

- Si el proceso es *no sesgado* (es decir,  $\mathbb{E}[\Delta X(t)] = 0$ ), entonces

$$\text{DCM}(t) = \text{Var}(\Delta X(t))$$

y el DCM coincide con el **segundo momento central** (la varianza) del desplazamiento.

- Si el proceso tiene *deriva o tendencia* (por ejemplo, un campo externo que empuja la partícula, lo que implica un movimiento con una dirección preferencial), entonces el DCM incluye tanto la varianza como el cuadrado de la media del desplazamiento.

Como ejemplo, la forma más básica de una caminata aleatoria es la caminata aleatoria simétrica discreta sobre la recta real, para la cual  $\Delta X_i = \pm 1$  con igual probabilidad. En este caso, después de un tiempo transcurrido  $t = k$  (donde  $k$  es el número total de pasos que realiza el caminante), los dos primeros momentos son  $\langle X_k \rangle = 0$  y  $\langle X_k^2 \rangle = k$ ; es decir, el desplazamiento cuadrático medio escala linealmente con el tiempo como se mencionó en el apartado anterior.

Los modelos de caminante aleatorio se han utilizado para estudiar otros fenómenos complejos, permitiendo un entendimiento mayor de los mismos. Por ejemplo, se utilizan en el estudio de fluctuaciones del precio de acciones en mercados financieros [103]; en secuencias nucleotídicas de ADN las cuales pueden convertirse en caminatas aleatorias [78], y también se ha encontrado que el azar está incluido en los números primos: cuando se estudia la distribución de los tamaños de salto entre primos sucesivos (qué tan lejos se encuentran dos primos consecutivos) se observa que sus propiedades estadísticas coinciden con las de procesos aleatorios [94], lo que justifica la imposibilidad de establecer una fórmula general para obtener toda la secuencia de números primos.

De este modo, la caminata aleatoria se convierte en una especie de patrón de medida, pues sus propiedades se puede utilizar para comparar otros procesos y hacer pronósticos de los mismos, por ejemplo.

### 1.2.1.1 MOVIMIENTO BROWNIANO

El movimiento browniano es una clase de caminata aleatoria, que como se mencionó en el apartado anterior fue desarrollada para describir el movimiento de una partícula suspendida en un fluido (líquido o gas). Matemáticamente, un movimiento browniano unidimensional es una caminata aleatoria en el espacio de los números reales  $\mathbb{R}$  con incrementos independientes y distribuidos normalmente donde la probabilidad de observar un desplazamiento de magnitud  $X$  desde la ubicación de origen después de un tiempo  $t$  tiene distribución gaussiana con media cero y varianza proporcional a  $t$ .

Este puede definirse como un límite de la caminata aleatoria simétrica discreta. Supongamos que la partícula puede dar pasos de longitud  $1/\sqrt{k}$  hacia su izquierda o derecha con igual probabilidad, y que después del tiempo  $t$  la partícula ha realizado  $N = tk$  pasos. Para una  $k$  dada, el desplazamiento de la partícula en el tiempo  $t$  está dado por

$$X_k(t) = \frac{1}{\sqrt{k}} \sum_{i=1}^{tk} \Delta X_i \quad (1.8)$$

y tomar el límite  $k \rightarrow \infty$  conduce al movimiento browniano como consecuencia del TLC. De hecho, en el límite de  $k$  grande  $X_k(t)$  tiende a  $X(t)$ , cuya FDP es

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t \sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \mu_k t)^2}{2t \sigma^2}\right) \quad (1.9)$$

donde  $\mu = \langle \Delta X \rangle$  y  $\sigma^2 = \langle \Delta X^2 \rangle$  son la media y la varianza de los desplazamientos de la caminata aleatoria. Para este caso, el primer momento es cero y  $\sigma^2 = 1$ , por lo que el DCM es directamente proporcional a  $t$  y la raíz cuadrada del desplazamiento cuadrático medio, RCDQM, escala con el tiempo de la forma  $R(t) \sim t^{1/2}$ , característico de la difusión ordinaria o gaussiana.

Usando un límite similar, se puede demostrar que una caminata aleatoria  $d$ -dimensional converge a un movimiento browniano  $d$ -dimensional, para el cual la probabilidad de que el caminante se encuentre a una distancia  $x$  de la posición inicial es

$$P(x, t) = (4\pi t)^{-d/2} e^{-\frac{x^2}{4t}} \quad (1.10)$$

y el RCDCM siempre escala como la raíz cuadrada de  $t$ ,  $R(t) \sim t^{1/2}$ .

### 1.2.1.2 DIFUSIÓN ANÓMALA

Desde el punto de vista matemático, la difusión anómala es una consecuencia directa del colapso de la hipótesis del TLC, que puede atribuirse bien a las distribuciones amplias de pasos elementales independientes, por ejemplo, los vuelos de Lévy, que se caracterizan por tener varianza infinita [91], o bien a la aparición de correlaciones de largo alcance, espaciales o temporales, entre dichos pasos.

En fenómenos de transporte, pueden surgir correlaciones espaciales si existe un fuerte confinamiento geométrico y una falta de homogeneidad debido a la presencia de desorden, obstáculos, compartimentos y sitios de captura que se pueden encontrar en materiales amorfos [87, 93] y porosos [9, 54]. También, puede suceder que en espacios muy confinados, como en el citoplasma celular y en tejidos orgánicos [15, 48, 57, 106], el movimiento de ciertas moléculas esté fuertemente correlacionado. Las correlaciones entre desplazamientos consecutivos también pueden surgir de forma dinámica [37], como en el caso de la dinámica caótica [40, 53, 101], o si las partículas son impulsadas por los movimientos del medio subyacente, como sucede cuando partículas difunden en un fluido turbulento, en el que la dispersión espacial de las partículas sigue un comportamiento superdifusivo [11, 35].

Situaciones similares se observan cuando los paseos aleatorios se restringen a estructuras topológicas tales como fractales y redes [46, 104, 105], donde las restricciones geométricas no permiten una pérdida de memoria rápida entre una serie de desplazamientos consecutivos [16]. En particular, se afirma que la transición dinámica del régimen de difusión normal al anómalo puede considerarse de forma fructífera como análoga al fenómeno de transición de fase continua en materiales magnéticos y sistemas líquido-gas [67].

Es importante señalar que, debido al tamaño finito de los entornos, es común observar que tanto en sistemas físicos como biológicos reales [36], la difusión anómala puede manifestarse como un fenómeno transitorio que, aunque de larga duración, tarde o temprano se convierte en uno estándar o incluso se detiene [16].

A diferencia del movimiento browniano, existe una clase de caminatas aleatorias llamadas vuelos de Lévy, para las cuales no se puede usar el TLC [81]. Un vuelo de Lévy

está compuesto por una serie de pequeños desplazamientos, intercalados ocasionalmente por un desplazamiento muy grande. Se define formalmente como la suma de variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas cuya FDP para un solo salto tiene un segundo momento divergente debido a una distribución de cola larga de la forma

$$f(\Delta x) \sim \frac{1}{\Delta x^{1+\alpha}} \quad (1.11)$$

con  $0 < \alpha < 2$ . Si el desplazamiento después de  $k$  pasos de tamaño  $1/k^{1/\alpha}$  se define como  $X_k(t)$ , entonces la variable aleatoria  $Z_N$  definida como la suma reescalada de  $N = tk$  variables aleatorias independientes distribuidas como la ecuación (1.11), toma la forma

$$Z_N = \frac{1}{(tk)^{1/\alpha}} \sum_{i=1}^{tk} \Delta X_i = \frac{1}{t^{1/\alpha}} X_k(t) \quad (1.12)$$

La variable reescalada satisface una generalización del TLC, conocida como el teorema de Lévy-Khintchin que establece que la FDP de  $Z_N$  en el límite  $N \rightarrow \infty$  es una distribución  $\alpha$ -estable (Lévy). Estas distribuciones no tienen una forma cerrada en el espacio real; en cambio, la función característica puede escribirse en el espacio de Fourier, y para este ejemplo particular, la cola mostraría el mismo comportamiento de ley de potencia que la ecuación (1.11) (ver por ejemplo [90]). Cambiando variables de  $Z_N$  a  $X_k$  vía la (1.12) obtenemos

$$Z_N \rightarrow f(z); \quad X_k(t) \rightarrow \frac{1}{t^{1/\alpha}} f\left(\frac{x}{t^{1/\alpha}}\right) \quad (1.13)$$

El DCM es igual al segundo momento

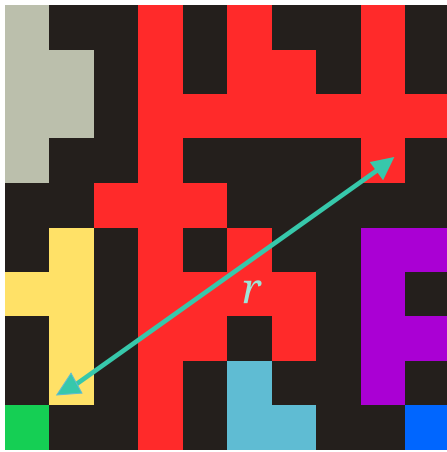
$$\langle X(t)^2 \rangle \sim \int_0^\infty x^2 \frac{1}{t^{1/\alpha}} f\left(\frac{x}{t^{1/\alpha}}\right) dx = t^{2/\alpha} \int_0^\infty y^2 f(y) dy \quad (1.14)$$

y por lo tanto la RCDCM para un vuelo de Lévy escala con el tiempo de la forma  $R(t) \sim t^{1/\alpha}$ , que corresponde a la superdifusión.

Los saltos en los vuelos de Lévy pueden ser considerables, pero ocurren dentro del mismo lapso de tiempo que uno corto (lo cual es poco realista), y por lo tanto los vuelos de Lévy pueden verse solo como una aproximación burda a las trayectorias humanas reales<sup>(iii)</sup> (ver apéndice B).

<sup>(iii)</sup>Finaliza la adaptación al español y reorganización del contenido presentado en [6].

Existe un modelo para el estudio de materiales desordenados, el cual permite una descripción de los mismos, caracterizado por su simplicidad: el modelo de la **percolación**. En este modelo se intenta describir un sistema desordenado, como podría ser un material poroso, a través del cual ciertas partículas pueden difundir (o percolar) si existen rutas o conexiones continuas entre los poros. La teoría de la percolación permite una descripción geométrica de la manera en que se distribuyen espacialmente dichos poros, en especial si son generados de forma aleatoria. En su forma más general un *proceso percolativo* involucra un flujo determinista en un medio aleatorio, mientras que un *proceso difusivo* está referido a un flujo aleatorio en un medio determinista [45].



**Figura 1.3.** Una red cuadrada de  $10 \times 10$  sitios con siete cúmulos ilustrados en distintos colores, siendo el negro espacio vacío. En rojo se muestra el cúmulo percolante. La teoría de la percolación explica, entre otras cosas, cual es la probabilidad de que dados dos sitios, separados una distancia  $r$ , pertenezcan al mismo cúmulo.

La teoría de la percolación describe las propiedades emergentes relacionadas a la conectividad de un gran número de objetos (por ejemplo partículas, sitios o enlaces). Tales objetos poseen una extensión espacial, y sus relaciones espaciales son de relevancia y estadísticamente evidenciadas. De esta manera la teoría de la percolación esta relacionada a las teorías de gráficas (de acuerdo a la terminología matemática [14]) y de redes. A grandes rasgos, la transición de percolación, o umbral, del sistema es el punto en el que un cúmulo se extiende por primera vez por el sistema, es decir, la primera aparición de conectividad de largo alcance (ver Figura 1.3, donde se puede ver que el cúmulo percolante, en color rojo, se extiende de un extremo al otro del sistema). En el límite termodinámico, el umbral de percolación es

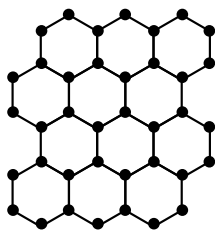
el punto en el que un cúmulo alcanza un tamaño infinito. En redes de conectividad cuatro dicho umbral corresponde a una fracción de aproximadamente 0.59 de sitios ocupados en la red. La transición de percolación es un magnífico ejemplo de *transición de fase de segundo orden* y de *fenómeno crítico* [83, 95].

Fenómenos de transporte y percolativos relacionados con una gran variedad de problemas físicos, que tienen lugar en la superficie y en el interior de la materia, se

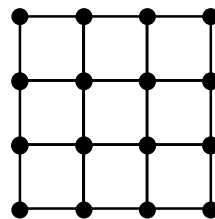
simulan con la ayuda de un espacio discreto representado por un arreglo regular de sitios o enlaces, o por una combinación de ambos, en cuyo caso hablamos de una red de simulación [60].

Muchos problemas físicos pueden abordarse asociando cada elemento de la red (sitios y enlaces) con alguna propiedad del sistema bajo estudio; por ejemplo, un sólido poroso puede ser representado por una red tridimensional de poros (sitios) conectados por canales (enlaces), donde la propiedad relevante, en este caso, es el tamaño característico del poro o del canal. Una superficie adsorptiva heterogénea puede ser representada por una red bidimensional de pozos adsorbentes (sitios) conectados por barreras de potencial (enlaces) a través de los cuales las partículas adsorbidas podrán migrar de un sitio a otro, en este caso la propiedad relevante de cada elemento es la energía. La propiedad asociada con cada elemento tiene una distribución de probabilidad [20]. En la Figura 1.4 se muestran redes con distintas conectividades en el plano y en el espacio. La conectividad,  $z$ , se refiere a la cantidad de enlaces que convergen en cada sitio; esto es, al número de vecinos con los que interacciona cada sitio en la red.

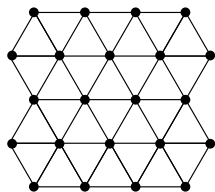
En la Tabla 1.2 se muestra el efecto de la conectividad de los sitios sobre el umbral de percolación en algunas redes en el plano y en el espacio [7, 86]. Para una visualización más detallada de la conectividad en redes cúbicas puede verse por ejemplo [108].



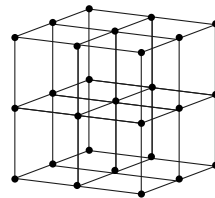
(a) Red con  $z = 3$ , conocida como panal de abeja.



(b) Red con  $z = 4$ , conocida como cuadrada.



(c) Red con  $z = 6$ , conocida como triangular.



(d) Red con  $z = 6$ , conocida como cúbica.

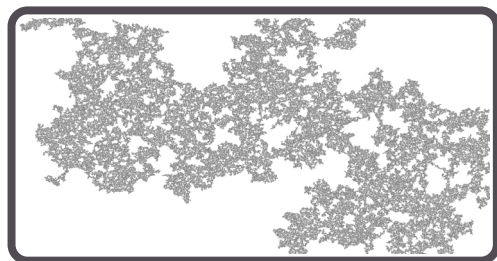
**Figura 1.4.** Ejemplos de redes en el plano y en el espacio. Los puntos representan sitios y las líneas enlaces. En cualquier caso un sitio dado interacciona o se rodea de un número fijo de vecinos al que se le llama conectividad, simbolizado con la letra  $z$ .

Tabla 1.2. Umbrales de percolación de sitios para algunas redes en el plano y en el espacio.

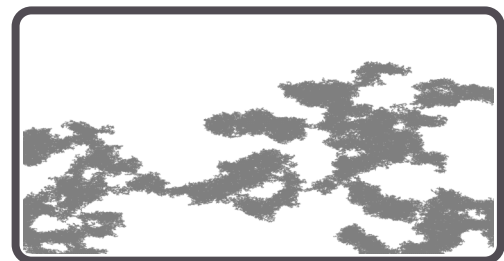
Red	$z$	Umbral de percolación
Triangular	6	0.5
Cuadrada	4	0.5927
Panal de abeja	3	0.6970
Cúbica centrada en la cara	12	0.198
Cúbica centrada en el cuerpo	8	0.254
Cúbica simple	$6^a, 12^b, 8^c$	0.3116, 0.137, 0.097

<sup>a</sup>Primeros vecinos más cercanos; <sup>b</sup>Segundos vecinos más cercanos; <sup>c</sup>Terceros vecinos más cercanos

En las Figuras 1.5 y 1.6 se muestran cúmulos infinitos de percolación con  $z = 3$  y  $z = 6$ , respectivamente. Se observa un efecto de “densificación” del cúmulo en los casos de mayor correlación espacial  $\xi$ , tal como sucede en el caso  $z = 4$  (ver Figura 2.5).

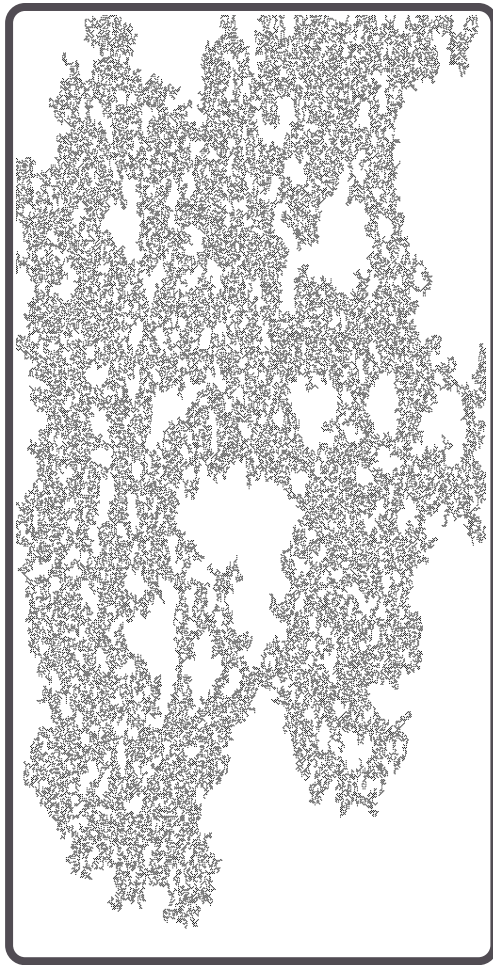
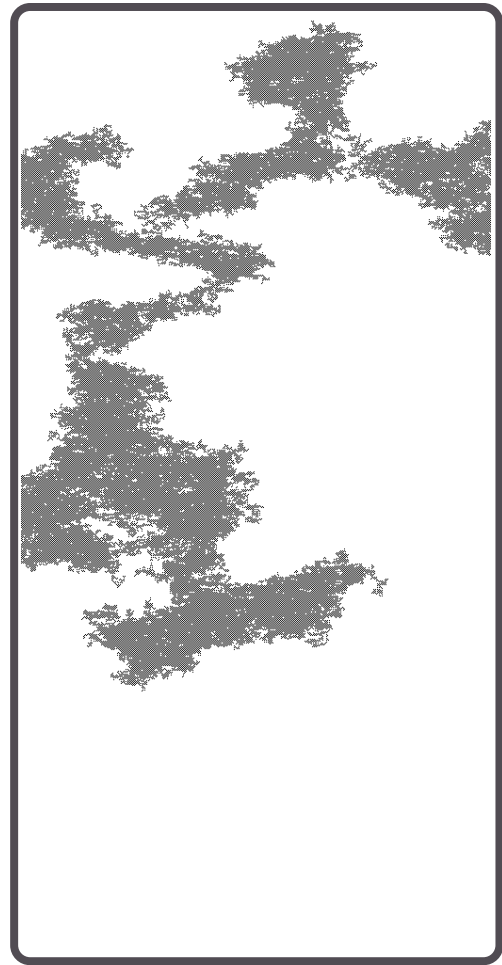


(a)  $\xi = 0.087$



(b)  $\xi = 22.59$

Figura 1.5. Cúmulos infinitos de percolación con  $z = 3$  a distintos valores de longitud de correlación  $\xi$ .

(a)  $\xi = 0.087$ (b)  $\xi = 22.59$ 

**Figura 1.6.** Cúmulos infinitos de percolación con  $z = 6$  a distintos valores de longitud de correlación  $\xi$ .

## § 1.4

## GEOMETRÍA FRACTAL

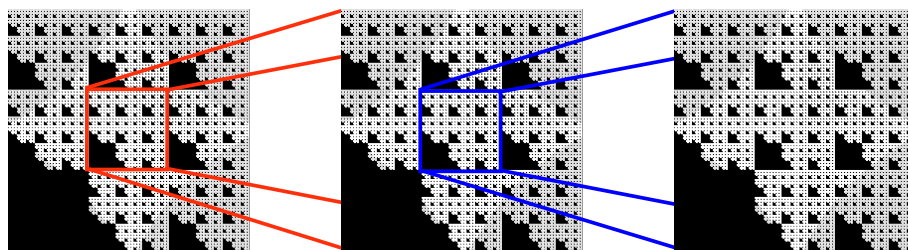
La geometría fractal provee una aproximación cuantitativa muy poderosa para el estudio de sistemas desordenados, incluyendo los procesos que conducen a la formación de dichos sistemas y su comportamiento físico. El término *fractal* fue acuñado en 1975 por Benito Mandelbrot para describir, intuitivamente, objetos tan complicados en apariencia como las nubes, las rutas de los ríos o los límites de países o islas [70].

Aunque tales objetos son distintos en apariencia, comparten propiedades en común. Por ejemplo, todos ellos se pueden representar como un conjunto de puntos en el plano, muchos de los cuales tendrán detrás un proceso matemático para su generación [31].

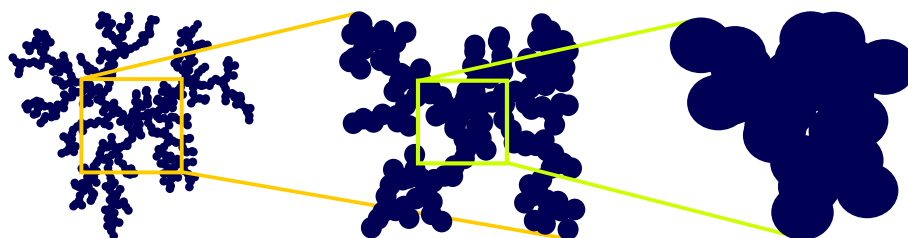
Pero más importante aún, es el hecho de que todos ellos tienen estructura detallada a infinitos niveles de amplificación (característica que no poseen los objetos básicos de la geometría euclidiana), la cual es la idea central en la geometría fractal desde la perspectiva de Mandelbrot.

Así, los fractales tratan el desorden como un fenómeno intrínseco, que se describe en términos de dimensiones no enteras con un grado de irregularidad que es independiente de la escala. En la naturaleza existe una gran número de sistemas fisicoquímicos que por su complejidad requieren ser descritos de forma cuantitativa, motivo por el cual son candidatos perfectos para ser caracterizados por medio del uso de dimensiones fractales, lo que se traduce en una mejor cuantificación y comprensión de muchas de sus propiedades físicas y químicas. Por lo que la dimensión fractal puede verse como una medida cuantitativa de la forma en que los elementos de la estructura, o sistema, bajo consideración se conectan espacialmente [89, pág. xiii].

Las estructuras fractales pueden dividirse en dos grupos: regulares e irregulares. Todas ellas exhiben una propiedad destacable: una autosimilitud o invarianza cuando se cambia la escala a la que se observa la estructura fractal. La autosimilitud, entonces, significa que si tomamos una región de la estructura bajo análisis y la amplificamos, el nuevo objeto amplificado es idéntico al inicial. En la Figura 1.7 puede observarse la propiedad de autosimilitud para los dos grupos de estructuras fractales.



(a) Objeto fractal regular o determinista.



(b) Objeto fractal irregular o aleatorio.

**Figura 1.7.** La propiedad de autosimilitud en algunos objetos fractales. En (a) amplificaciones sucesivas de porciones del objeto fractal dan como resultado la figura original, lo cual verifica la propiedad de invarianza ante escala. En (b) la autosimilitud solo es válida como una propiedad promedio.

Los fractales regulares son peculiares por la manera en que se conectan sus elementos, por lo que pueden ser generados mediante reglas deterministas e iterativas, de modo que su propiedad de invarianza ante escala es fija (ver Figura 1.7(a) donde se muestra una versión modificada de la alfombra de Sierpinski). Por el otro lado, los fractales irregulares presentan cierta aleatoriedad en la forma en la que se conectan sus elementos, lo que provoca que su propiedad de invarianza ante escala sea válida solo en promedio (ver Figura 1.7(b)).

### 1.4.1

### PROPIEDADES FRACTALES EN CÚMULOS INFINITOS DE PERCOLACIÓN

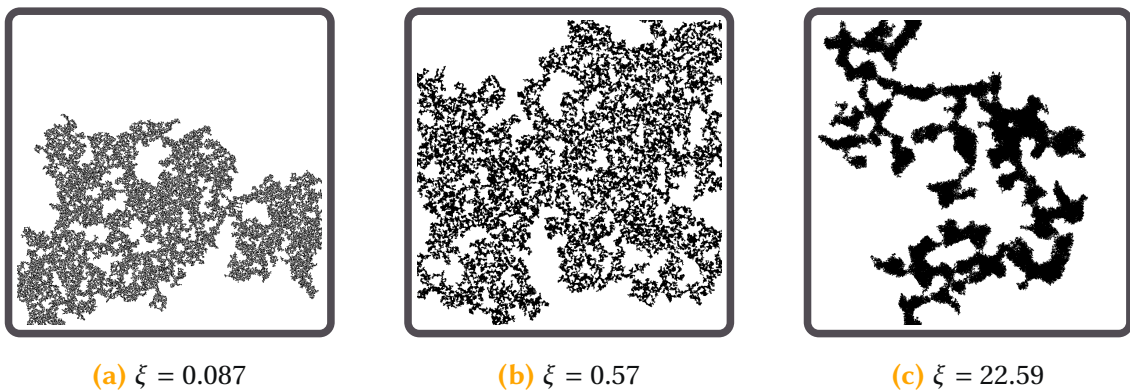
El modelado matemático del transporte de materia en medio poroso hace uso de modelos de red en los que queda bien representada la morfología del espacio vacío. Tales gráficas permiten que gran parte de la complejidad estructural de dicho espacio vacío esté incluida en el modelo, al mismo tiempo que conserva una tratabilidad matemática adecuada [71]. En este modelo los tamaños de poro se distribuyen de acuerdo a una función de densidad de probabilidad y se asocian de manera aleatoria a los elementos de la red.

Sin embargo, correlación espacial y direccionalidad se observan en medios porosos reales [26, 99], y existen evidencias de que tales variables provocan efectos significativos sobre la forma y la cinética de los fenómenos que ocurren dentro de estos medios [32, 61]. Por ejemplo, la dimensión fractal,  $d_f$ , de un cúmulo de percolación invasiva no es una cantidad universal, sino que varía con la correlación espacial [63].

La mayoría de los sistemas pueden representarse como redes en las cuales los elementos del sistema conforman nodos, y tales nodos son considerados como conectados en el caso de que exista algún tipo de interacción entre ellos. La ventaja de visualizar sistemas como redes es que la mayor parte de su comportamiento dinámico está determinado por el patrón o la topología de la red.

Esta sorprendente representación ha demostrado su eficacia indiscutible en la descripción de una gran variedad de fenómenos en los que los procesos aleatorios dinámicos se ven afectados por la topología del medio en el que se desarrollan [14], de modo que el comportamiento de un sistema se puede deducir en gran medida a partir de la topología de la red que lo representa, i.e., la secuencia precisa y estadísticamente expresada de la forma en que se distribuyen los valores numéricos que identifican a cada elemento de la red. En la naturaleza la mayoría de los sistemas observados son más desordenados que una red regular pero más organizados que una red aleatoria [33].

Existe un modelo, llamado **Modelo Dual de Sitios y Enlaces** (MDSE), el cual proporciona una manera elegante de representar la estructura de un sistema desordenado [18, 71]. Con él se pueden construir redes con diversos grados de correlación entre los elementos de la red. Un medio poroso, por ejemplo, puede modelarse mediante un cúmulo de percolación infinita sobre redes generadas con el MDSE. Los objetos percolantes tienen la ventaja de representar adecuadamente a los sistemas reales y son una herramienta básica para entender la difusión a través de materiales fractales o desordenados. Como ya se ha mencionado, la estructura de un cúmulo de percolación es función de la correlación de la red (ver Figura 1.8). En este sentido, se puede analizar por medio de la difusión de una partícula dentro del cúmulo de percolación, i.e por medio de un caminante aleatorio, cómo las propiedades de transporte del medio son afectadas [13, 52].



**Figura 1.8.** Cúmulos de percolación obtenidos a partir de redes correlacionadas construidas con el MDSE. Un claro efecto sobre la topología del cúmulo se observa a medida que la longitud de correlación de la red  $\xi$  aumenta.

Debido a que los objetos fractales pueden presentar huecos, cuellos de botella o “callejones sin salida” (una parte de la estructura fractal que está conectada al resto por un solo camino), una partícula difundiendo dentro de estos puede tornarse lenta en su movimiento, lo que trae como consecuencia que las leyes de Fick pierdan validez. Bajo este escenario, el desplazamiento cuadrático medio queda expresado por una ley de potencia más general [47]:

$$\langle x^2 \rangle \sim t^{2/d_w} \quad (1.15)$$

donde  $d_w$  es la dimensión del caminante o la dimensión de la ruta que describe un caminante aleatorio cuando difunde en el objeto fractal. Se relaciona con el exponente de difusión anómala  $\gamma$  vía  $d_w = 2/\gamma$ , y puede interpretarse como el exponente de escalamiento del tiempo con respecto a la longitud lineal  $l$ ,  $t \sim l^{d_w}$ .

Los procesos difusivos y el flujo de corriente a través de una red de resistencias adecuada están fuertemente relacionados. Incluso en el caso de que el objeto donde ocurra la difusión y la correspondiente red de resistencias sean fractales autosimilares, la ya conocida relación de Einstein entre la constante de difusión y la conductividad es ampliamente utilizada y se expresa como una relación entre exponentes de escalamiento:

$$d_w = d_f + \zeta \quad (1.16)$$

donde  $\zeta$  es el exponente de escalamiento de la resistencia  $R$  con la longitud lineal  $l$  de la red,  $R \sim l^\zeta$ . Además,  $d_f$  en la ecuación (1.16) es la dimensión fractal del objeto, y es el exponente de escalamiento que describe como escala la masa del mismo con la longitud lineal.

Por otro lado, se pueden establecer probabilidades de retorno al punto de partida del caminante aleatorio que difunde en un objeto fractal. Tal cantidad es conocida como dimensión espectral,  $d_s$ , y se relaciona con las dimensiones anteriormente descritas en la forma [88]:

$$d_s = \frac{2 d_f}{d_w} \quad (1.17)$$

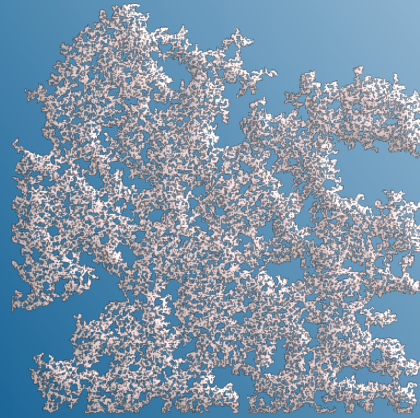
Tanto  $d_w$  como  $d_s$  surgen de los modelos físicos de los procesos difusivos y forman parte de las propiedades dinámicas que caracterizan a los objetos fractales. Ambas son dependientes de las propiedades de conectividad de los sistemas.

Cabe mencionar que existen objetos fractales que tienen la misma dimensión fractal pero diferente textura, entendiéndose esta última como una medida cuantitativa de patrones observados en objetos diferentes, como podrían ser los tamaños de huecos presentes en estos. Para este fin, la lagunaridad ( $L$ ) complementa a la dimensión fractal al ser matemáticamente una función que analiza las fluctuaciones de una distribución de frecuencias de masa asociado a un tamaño de escala  $s$ , tanto en fractales aleatorios como deterministas. Se utiliza el método de la “ventana deslizante” (gliding box) en su determinación y sus aplicaciones abarcan desde la ciencia de materiales (por ejemplo las superficies poliméricas sufren cambios cuando se dispersa oro sobre estas) hasta la biología celular (ayuda a discriminar con éxito las líneas celulares cancerosas) [1, 12, 56].

## **Parte II**

# **CONSTRUCCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LOS CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS Y PROCESOS DINÁMICOS SOBRE LOS MISMOS**





## CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS: CONSTRUCCIÓN Y CARACTERIZACIÓN



*Dmitri Ivánovich Mendeléyev*

*La ley periódica ha permitido ver lo que antes era invisible.*

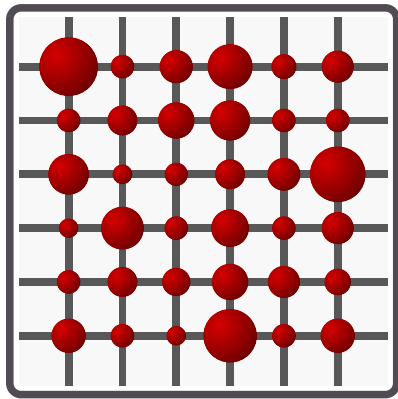
**RESUMEN:** Con el apoyo del Modelo Dual de Sitios y Enlaces se construyeron redes cuadradas isotrópicas de conectividad cuatro y distintos grados de correlación espacial. Estas redes se caracterizaron por su longitud de correlación ( $\xi$ ), la cual comienza a crecer rápidamente cuando su valor es mayor a una unidad de red. A partir de estas redes se obtuvieron los cúmulos infinitos de percolación clásica los que, junto con sus huecos, representan los conjuntos fractales cuyas propiedades estáticas y dinámicas fueron determinadas. Se encontró que el aumento de la longitud de correlación de la red a partir de la cual se obtienen dichos conjuntos provoca un aumento de la dimensión fractal ( $d_f$ ) y una disminución de la lagunaridad ( $L$ ) de los mismos. Por otro lado, la dimensión del caminante ( $d_w$ ) tiende a dos desde valores mayores y la dimensión espectral ( $d_s$ ) hace lo mismo pero a partir de valores menores que dos. Este último resultado dejó ver que la conjetura de Alexander-Orbach, que establece  $d_s = 4/3$  como una super-universalidad, no siempre se cumple si el conjunto fractal se caracteriza por una dimensión fractal elevada y una lagunaridad baja.

Para entender los procesos de transporte que pudieran llevarse a cabo en el interior de un medio poroso o sobre una superficie heterogénea, sin atender a su naturaleza química, se puede recurrir a una representación numérica del mismo lo más adecuada posible. El modelo utilizado deberá tomar en cuenta el tipo de medio que intenta describir y las limitaciones matemáticas y computacionales a enfrentar. De modo que se hace necesario que el modelo sea lo suficientemente simplificado para una eficiencia computacional y que al mismo tiempo contemple las características más sobresalientes del sistema de interés.

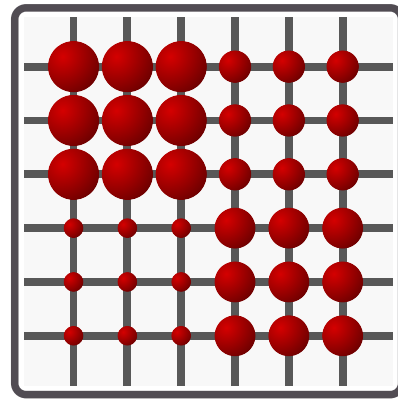
Para modelar el flujo de materia en conjuntos fractales como los medios porosos pueden identificarse tres modelos como sigue [100]:

- 1 Modelos continuos.** Se basan en la idea de representar al medio poroso como un continuo en el que se hace uso del concepto de volumen elemental representativo (VER), el cual es considerado como el volumen más pequeño en el cual los campos de saturación y presión (junto con otras características) son funciones bien comportadas; de modo que con esas características se obtiene información representativa del sistema completo. Ningún valor representativo del sistema puede definirse para volúmenes menores al VER. En este contexto, las cantidades físicas claves (saturación y presión capilar) son considerados campos escalares bien comportados que varían en tiempo y espacio continuos.
- 2 Teoría de la percolación.** Hace una abstracción del espacio poroso representándolo como una red (en la que no necesariamente se sigue un patrón regular) de nodos y enlaces. Aquí, todas las cantidades físicas (saturación, presión y tiempo) son normalmente consideradas como discretas: la saturación es ya sea un uno (poro lleno) o un cero (poro vacío) y la infiltración evoluciona en pasos de tiempo discretos.
- 3 Modelos semicontinuos.** En estos el medio poroso se representa por medio de una cuadrícula (ninguna deformación del medio es considerada) de bloques no infinitesimales los cuales mantienen el carácter de un medio poroso. Las presiones de saturación y capilaridad se asumen continuas respecto al tiempo pero se mantienen constantes dentro de cada bloque (i.e. una constante definida por intervalos en el espacio); el tiempo puede ser continuo o discreto.

Estas clases de modelos son muy útiles cuando en el sistema juega un papel central la interconectividad y cuando hay presente correlaciones (ver Figura 2.1). La idea original de representar un medio poroso a través de una red discreta tuvo su origen en la década del 50, pero recién a principios de los 80 fue cuando se desarrollaron procedimientos rigurosos que permitieron mapear, en principio, cualquier medio poroso desordenado en una red equivalente. Una vez realizado el mapeo uno puede estudiar un fenómeno dado en forma completa.



(a) Caso aleatorio o sin correlación espacial de tamaños de poro ( $\xi \approx 0$ ).



(b) Caso con correlación espacial de tamaños de poro ( $\xi \neq 0$ ).

**Figura 2.1.** Ejemplificación de la correlación espacial de tamaños de poro en redes cuadradas discretas con  $z = 4$ . Los círculos en color rojo denotan los sitios o poros y las líneas oscuras los enlaces que los conectan. En (a) la correlación espacial nula implica que sitios grandes conviven con sitios pequeños. En (b) son características zonas amplias de sitios de tamaño similar, la red se caracteriza por una longitud de correlación espacial no nula.

El MDSE pertenece al grupo de los modelos discretos y es una herramienta versátil para representar medios porosos. Algunas de las características más importantes de dicho modelo se resumen a continuación [18].

- 1** El sistema se descompone en dos tipos de elementos que lo caracterizan, los *sitios* y los *enlaces*, y cada uno de estos juega un papel claramente definido en la red. Cada sitio y enlace se colocan de tal modo que forman una configuración particular dentro de la red; en nuestro caso trabajamos con redes cuadradas en las que los sitios se colocan en los nodos y un enlace entre dos sitios adyacentes, i.e. dos sitios cualesquiera comparten un enlace en común y cada sitio tiene asociados cuatro enlaces.

**2** Para identificar una propiedad  $R$ , como por ejemplo la energía de adsorción en el caso de una superficie sólida [73] o el tamaño de poro en el caso de un medio poroso [27], se les asocia un valor a cada tipo de elemento que cumple con una distribución establecida, i.e. una distribución de tamaños de sitios ( $S(R)$ ) y otra para los enlaces ( $B(R)$ ), de este modo cada elemento de la red tiene asociado un valor que representa la propiedad en cuestión. Así, para comparar dicha propiedad entre los dos tipos de elementos se definen dos funciones que estarán asociadas a estos. Estas funciones son  $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$  definidas como las funciones de densidad de probabilidad, asociadas a la propiedad  $R_S$  y  $R_B$  de sitios y enlaces, respectivamente; de este modo, se tiene que  $F_S(R_S) dR$  y  $F_B(R_B) dR$  representan la probabilidad de encontrar un sitio o un enlace de tamaño comprendido entre  $R$  y  $R + dR$ , respectivamente. Las funciones de distribución de sitios y enlaces son entonces:

$$S(R) = \int_0^R F_S(R) dR \quad \text{y} \quad B(R) = \int_0^R F_B(R) dR$$

y representan la probabilidad de encontrar un sitio o un enlace no mayor a  $R$ .

**3** Establece un *principio de construcción*: una constante relación colindante entre la propiedad de cada sitio y la propiedad de cualquiera de sus enlaces correspondientes. La manera en la que sitios y enlaces se interconectan para formar una configuración espacial dada se expresa por una función de densidad de probabilidad conjunta,  $F(R_S, R_B)$ , de encontrar un sitio con la condición  $R_S$  conectado a un enlace con la condición  $R_B$ . Este principio de construcción se asegura mediante las dos ecuaciones siguientes:

$$B(R) - S(R) \geq 0 \tag{2.1}$$

$$F(R_S, R_B) = 0, \text{ si } R_S < R_B \tag{2.2}$$

La primera ley, ecuación (2.1), establece que sólo podrán conectarse en una red todos los sitios de una dada distribución si existe un número suficiente de enlaces de tamaño adecuado, por lo que la distribución de enlaces estará siempre a la izquierda de la distribución de sitios. Mientras que la segunda, llamada Principio de Construcción, ecuación (2.2), es de naturaleza local y expresa el hecho de que el tamaño  $R_S$  de un sitio debe ser mayor que o al menos igual al tamaño  $R_B$  de sus enlaces vecinos. Ahora, para proporcionar una noción clara de la *correlación* introducida en la red por medio de la ecuación (2.2), se establece la función de probabilidad conjunta en términos de la función de correlación entre tamaños de

sitios y de enlaces,  $\Phi(R_S, R_B)$ :

$$F(R_S, R_B) = F_S(R_S) F_B(R_B) \Phi(R_S, R_B) \quad (2.3)$$

En la ecuación (2.3) la función de correlación  $\Phi(R_S, R_B)$  engloba el proceso de asignación de sitios y enlaces dentro de la red. Esta, integrada sobre todo el espacio debe de cumplir la expresión siguiente:

$$\int_0^{R_S} \Phi(R_S, R_B) F_B(R_B) dR_B = \int_{R_B}^{\infty} \Phi(R_S, R_B) F_S(R_S) dR_S = 1 \quad (2.4)$$

El lado izquierdo de la ecuación (2.4) expresa la certeza de hallar, para un sitio dado de tamaño  $R_S$ , un enlace de tamaño menor o igual a  $R_S$ , mientras que la igualdad inmediata a la derecha expresa la certeza de hallar, para un enlace dado de tamaño  $R_B$ , un sitio de tamaño mayor o igual a  $R_B$ .

Por otro lado, la función  $\Phi(R_S, R_B)$  restringe a la función de probabilidad conjunta  $F(R_S, R_B)$ , expresada en la ecuación (2.3), de encontrar un sitio de tamaño  $R_S \in (R_S, R_S + dR_S)$  conectado a cualquiera de sus cuatro enlaces de tamaño  $R_B \in (R_B, R_B + dR_B)$  en la forma:

$$F(R_S, R_B) = F_S(R_S) F_B(R_B) \Phi(R_S, R_B) dR_S dR_B \quad (2.5)$$

de modo que la ecuación (2.5) es cero cuando  $R_B > R_S$ . La expresión de  $\Phi(R_S, R_B)$  que satisface esta última condición es [72]:

$$\Phi(R_S, R_B) = \frac{\exp\left(-\int_{R_B}^{R_S} \frac{dS}{B(R)-S(R)}\right)}{B(R_S) - S(R_S)} \quad (2.6)$$

A fin de examinar la manera en la que los elementos de la red se interconectan, se define al *área de traslape*, entre las funciones de densidad de probabilidad de sitios y enlaces, como  $\Omega$ , con las propiedades siguientes:

$$\Phi_{\Omega \rightarrow 0}(R_S, R_B) = 1, \quad \forall R_S, R_B \quad (2.7)$$

lo que significa que en esta situación tanto sitios como enlaces se distribuyen totalmente al azar, y

$$\Phi_{\Omega \rightarrow 1}(R_S, R_B) \propto \delta(R_S - R_B), \quad \forall R_S, R_B \quad (2.8)$$

indicando que sitios y enlaces de tamaño  $R$  se agrupan en extensiones amplias; es decir, existe correlación perfecta entre el tamaño de un sitio y el enlace que lo conecta con otro,  $R_S \approx R_B$ , ya que  $\delta(R_S - R_B) = 1$  cuando  $R_S = R_B$  y 0 en otro caso. De este modo el parámetro  $\Omega$  es el que describe la topología de la red en este modelo y es una medida natural de la correlación sitio-enlace [64, 82, 98]. Cuando  $\Omega \rightarrow 1$  se produce un efecto de segregación como consecuencia de una estructuración de la red, efecto que puede cuantificarse con la *longitud de correlación*,  $\xi^{(1)}$ . Esta longitud representa la extensión promedio de las regiones en las que coexisten elementos de propiedades similares. En la literatura existen propuestas que relacionan  $\xi$  con  $\Omega$  obtenidas de forma empírica, las cuales se utilizan en la construcción de redes [62]. El método de construcción empleado aquí no contempla ninguna relación entre  $\xi$  y  $\Omega$ . La forma en que se calculó  $\xi$  fue por medio de la ecuación:

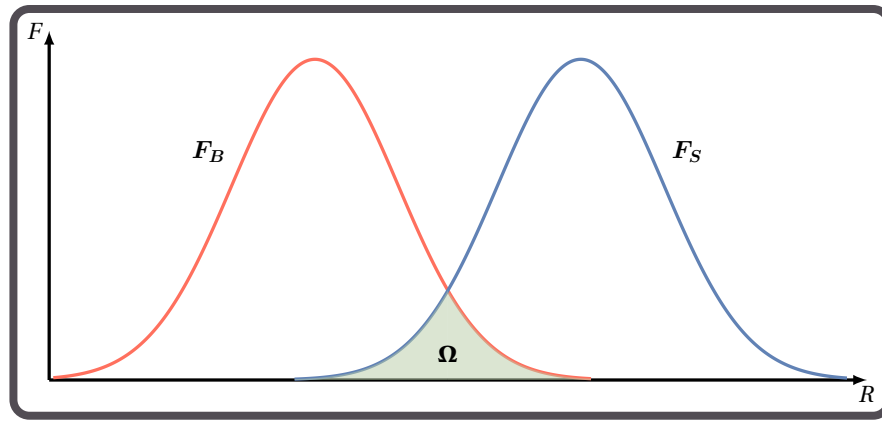
$$C(r) = e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (2.9)$$

donde  $C(r)$  es el *coeficiente de correlación* que existe entre dos sitios cualesquiera de la red, separados por una distancia  $r$  y  $\xi$  es la *longitud de correlación* típica de la red.  $C(r)$  se calcula a partir de:

$$C(r) = \frac{\langle (R_{S_i}(\vec{r}_i) - \overline{R_S})(R_{S_j}(\vec{r}_j) - \overline{R_S}) \rangle}{\sigma_S^2} \quad (2.10)$$

donde  $R_{S_i}$  y  $R_{S_j}$  son los tamaños de cualquier par de sitios separados una distancia  $r$ , cuyos vectores de posición son  $\vec{r}_i$  y  $\vec{r}_j$ , respectivamente;  $\overline{R_S}$  y  $\sigma_S$  son el tamaño medio y la desviación estándar de la distribución de tamaños de sitio, respectivamente [82].

(1) No confundir con la longitud de correlación característica de la percolación, la cual diverge en el momento en que aparece el cúmulo infinito [4].



**Figura 2.2.** Representación de las distribuciones de probabilidad de sitios ( $F_S$ ) y enlaces ( $F_B$ ) de acuerdo al MDSE para la construcción de redes correlacionadas con  $z = 4$ . El área sombreada  $\Omega$  representa el traslape geométrico entre ambas distribuciones. Cuando  $\Omega = 0$  tanto sitios como enlaces se distribuyen al azar. A medida que  $\Omega \rightarrow 1$  sitios y enlaces de tamaño  $R$  se agrupan en extensiones amplias, lo que provoca un efecto de segregación en la red.

## § 2.2

## CÚMULOS INFINITOS DE PERCOLACIÓN CLÁSICA

Los cúmulos infinitos de percolación clásica son objetos fractales cuya propiedad de autosimilitud solo es válida como una propiedad promedio (ver el apartado 1.4.1). También, como se señaló en el apartado anterior, el MDSE es la herramienta que nos sirve para representar de manera elegante la estructura de un sistema desordenado. Por sí solo nos genera una red bidimensional de sitios y enlaces interconectados en los que la correlación espacial entra en juego, pero para una representación lo más fidedigna posible a un conjunto fractal como un medio poroso o una superficie heterogénea, trabajamos sobre la red de sitios y en ella aplicamos una rutina de percolación clásica, lo que permite obtener los cúmulos infinitos de percolación, en los que, con la ayuda del modelo del caminante aleatorio, se pudieron simular fenómenos dinámicos como algunas reacciones químicas elementales. Estos cúmulos junto con sus huecos interiores representan los conjuntos fractales que caracterizaremos por sus propiedades estáticas y dinámicas. La primer tarea es, entonces, generar dichos cúmulos como se describe a continuación.

En primer lugar, con la ayuda del MDSE implementado en una rutina en lenguaje C, se creó un banco de redes de tamaño  $1000 \times 1000$  con distintos grados de correlación, lo que se logra variando el valor del parámetro  $\Omega$  en la rutina. Un total de catorce valores de  $\Omega$  fueron considerados ( $\Omega \in \{0.0, 0.104, 0.208, 0.292, 0.396, 0.50, 0.604, 0.708, 0.792, 0.833, 0.875, 0.885, 0.892, 0.896\}$ ) y se generaron cien redes por cada uno de estos valores,

de modo que se puedan obtener promedios estadísticamente representativos de las cantidades con las que se van a caracterizar las redes y los medios porosos o conjuntos fractales (los cúmulos infinitos de percolación clásica son un subconjunto de estos), como la longitud de correlación en el caso de las redes y propiedades estáticas y dinámicas en el caso de los medios porosos.

Se utilizaron las ecuaciones (2.9) y (2.10) para calcular la longitud de correlación de las redes. Los cúmulos infinitos de percolación clásica se obtuvieron utilizando la metodología reportada en [19, 20], de modo que también fue posible determinar los umbrales de percolación ( $\rho_c$ ) en todos los casos. En la Tabla 2.1 se muestran los resultados obtenidos. La longitud de correlación  $\xi$  está dada en unidades de red (u.r.).

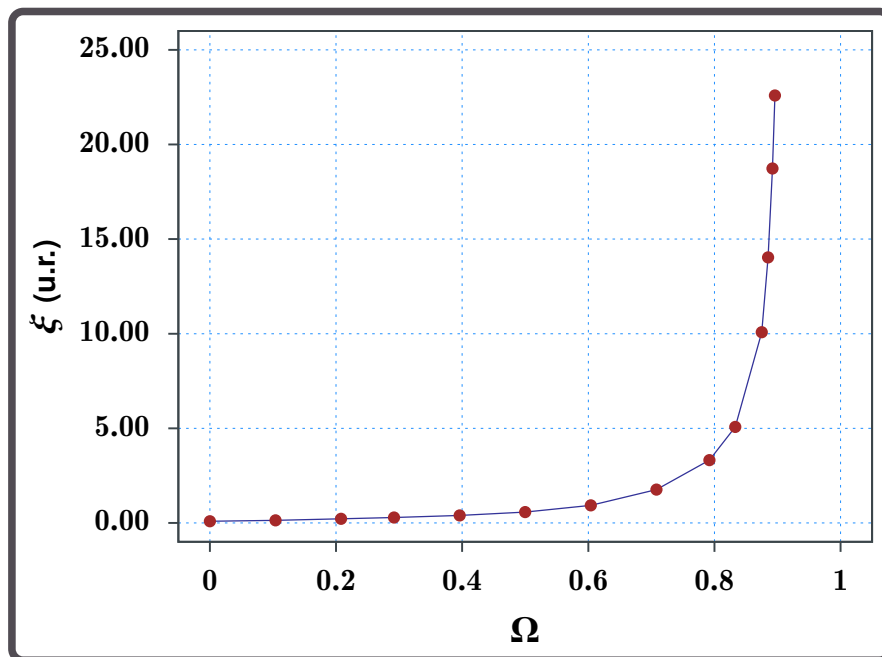
**Tabla 2.1. Longitud de correlación de las redes construidas con el MDSE y los umbrales de percolación de los cúmulos infinitos obtenidos a partir de estas para los distintos valores de  $\Omega$  considerados. Cada valor de  $\xi$  y de  $\rho_c$  es el promedio de cien valores.**

$\Omega$	$\xi$ (u.r.)	$\rho_c$
0.0	$0.087 \pm 0.061$	$0.591 \pm 2.32 \times 10^{-3}$
0.104	$0.133 \pm 0.051$	$0.591 \pm 2.69 \times 10^{-3}$
0.208	$0.217 \pm 7.21 \times 10^{-3}$	$0.591 \pm 2.28 \times 10^{-3}$
0.292	$0.283 \pm 3.66 \times 10^{-3}$	$0.590 \pm 2.78 \times 10^{-3}$
0.396	$0.392 \pm 3.12 \times 10^{-3}$	$0.586 \pm 3.08 \times 10^{-3}$
0.500	$0.571 \pm 4.01 \times 10^{-3}$	$0.579 \pm 3.43 \times 10^{-3}$
0.604	$0.926 \pm 1.50 \times 10^{-2}$	$0.562 \pm 5.84 \times 10^{-3}$
0.708	$1.760 \pm 4.98 \times 10^{-2}$	$0.544 \pm 8.88 \times 10^{-3}$
0.792	$3.320 \pm 0.120$	$0.521 \pm 1.33 \times 10^{-2}$
0.833	$5.070 \pm 0.201$	$0.513 \pm 1.60 \times 10^{-2}$
0.875	$10.080 \pm 0.964$	$0.502 \pm 2.57 \times 10^{-2}$
0.885	$14.030 \pm 1.316$	$0.499 \pm 4.07 \times 10^{-2}$
0.892	$18.730 \pm 2.599$	$0.495 \pm 3.20 \times 10^{-2}$
0.896	$22.590 \pm 2.581$	$0.488 \pm 4.32 \times 10^{-2}$

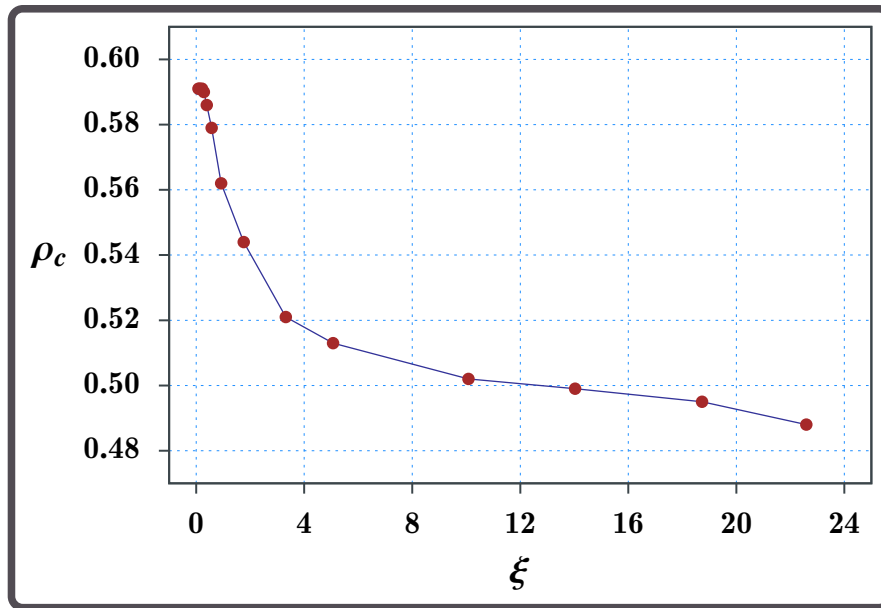
En el caso de la longitud de correlación se puede observar que  $\xi \in (0, 23)$ , con pequeñas variaciones hasta  $\Omega < 0.5$ , lo que en una representación gráfica de los puntos

$(\Omega, \xi(\Omega))$  puede apreciarse como una zona de estabilidad aparente (ver Figura 2.3). Para  $\Omega > 0.5$  el valor de  $\xi$  comienza a crecer rápidamente hasta alcanzar las 22.59 unidades de red cuando  $\Omega = 0.896$  (el caso más correlacionado). Podemos decir entonces que  $\xi \rightarrow \infty$  cuando  $\Omega \rightarrow 1$  para redes creadas con el MDSE.

El umbral de percolación también se mostró sensible a la longitud de correlación de las redes, reflejado en un abatimiento del mismo (comportamiento que ya se había observado en redes anisotrópicas [19]). En el caso menos correlacionado ( $\Omega \approx 0$ ) se obtuvo  $\rho_c = 0.591$ , el cual está en perfecta concordancia con el valor 0.597 reportado en la literatura para este tipo de redes. Este valor se mantiene hasta  $\Omega = 0.208$ , después del cual  $\rho_c$  comienza a descender hasta terminar en 0.488 cuando  $\Omega = 0.896$  (ver Tabla 2.1 y Figura 2.4), lo que puede atribuirse a la existencia de zonas amplias de sitios de tamaño similar a medida que la correlación espacial de la red crece, tal como asegura el método de construcción utilizado.



**Figura 2.3.** Comportamiento de la longitud de correlación respecto al área de traslape del MDSE de acuerdo a los datos de la Tabla 2.1. Se puede observar que pequeños cambios en  $\Omega$  provocan incrementos significativos en  $\xi$  a medida que  $\Omega \rightarrow 1$ .



**Figura 2.4.** El umbral de percolación ( $\rho_c$ ) como función de la longitud de correlación ( $\xi$ ) de acuerdo a los datos de la Tabla 2.1. Se observa un claro abatimiento del umbral de percolación cuando la longitud de correlación crece.

En la Figura 2.5 se muestra un cúmulo de percolación infinito por cada caso de longitud de correlación de las redes. En cada imagen podemos distinguir dos regiones como se describe a continuación:

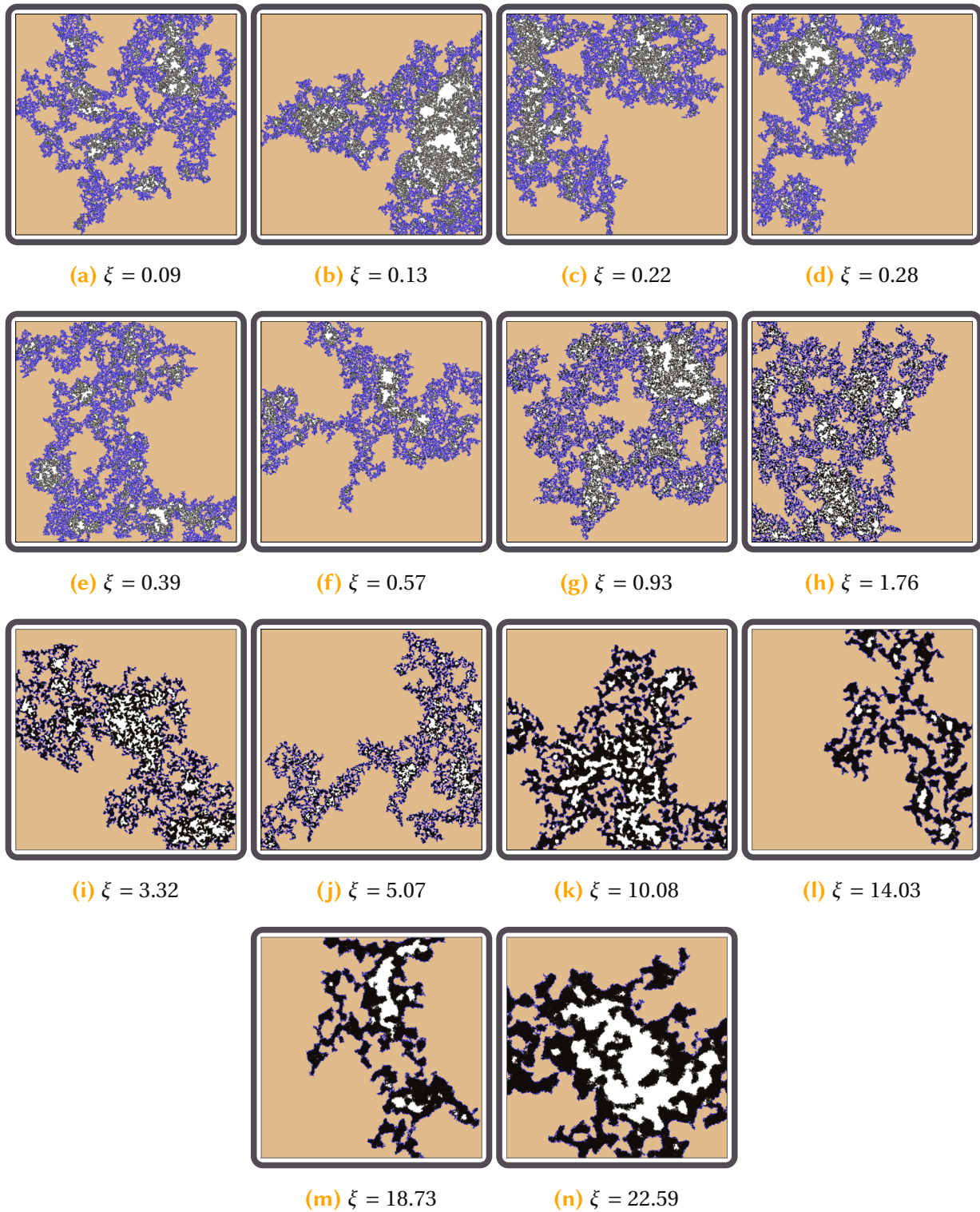
- 1 El cúmulo de percolación correlacionado.** Constituido por su masa y su espacio vacío o huecos. La masa la conforman todos los elementos del cúmulo infinito de percolación clásica (en color negro), y se han diferenciado aquellos que pertenecen a su perímetro interno (en color azul). Es la región que se caracterizó por sus propiedades estáticas y dinámicas y en la que se simularon algunas reacciones químicas elementales.
- 2 Espacio exterior del cúmulo de percolación correlacionado.** Identificado en color dorado. Esta región no es considerada para ningún cálculo realizado en la caracterización del medio. Conocerla es de suma importancia para identificar el espacio vacío real perteneciente al medio, el cual entra en juego en el cálculo de su dimensión fractal y de su lagunaridad.

Así, se logra observar que para los casos en los que  $0 < \xi < 3.32$  la mayor fracción de elementos del medio poroso la conforma el perímetro interno, destacándose las zonas con masa por su tamaño reducido y una distribución de tamaños de hueco no uniforme. Por otro lado, cuando se tiene que  $3.32 \leq \xi \leq 22.59$  la mayoría de los elementos del medio

se encuentran en su interior, reduciéndose drásticamente los elementos en el perímetro interno para destacarse ahora zonas amplias de masa, sobre todo en los dos últimos casos ( $\xi \in \{18.73, 22.59\}$ ). En todos los casos se puede hablar de una distribución de tamaños de hueco no uniforme.

La determinación del perímetro interno se logró con la implementación de un programa en el que una especie de caminante aleatorio, que inicia en una posición fuera de cualquier elemento señalado del medio poroso, explora todo su entorno (los ocho sitios en total que lo rodean) al mismo tiempo que va identificando y etiquetando con nuevos números a los elementos de la periferia y a los de la zona exterior. Estos elementos del exterior, encontrados en su exploración, son seleccionados como nuevos caminantes aleatorios que se suman a la tarea del caminante inicial. En todo momento se eliminan elementos repetidos y los que pertenecen a la periferia del medio ya no vuelven a ser considerados en la rutina como caminantes aleatorios, con lo que se evita ir más allá de la misma. Por estas características a nuestro método lo hemos denominado como “el método del virus costero”.

Teniendo bien identificados los elementos de nuestros medios porosos y los de su exterior nos fue posible la creación de programas propios para la cuantificación de propiedades estáticas del mismo, como la dimensión fractal y la lagunaridad, cuyos métodos de medición tradicionales se basan en explorar o cubrir porciones del mismo con cuadrados de distintos tamaños, “ventana deslizante” (gliding box) y “conteo de cuadros” (box counting method), respectivamente [1; 84, cap. 8]. Nuestra propuesta se basa en el mismo principio que los métodos mencionados pero ahora cubrimos y exploramos el medio con regiones irregulares, a las que llamaremos cubrimientos, cuyo tamaño queda definido por la cantidad de elementos del medio (masa y/o huecos) dentro de estas. La relación entre la masa y el radio de giro de dichos cubrimientos se utilizó para calcular la dimensión fractal de los medios porosos como se verá en el apartado siguiente.



**Figura 2.5.** Efecto de la longitud de correlación ( $\xi$ ) de la red a partir de la cual se obtiene el cúmulo infinito (en negro) sobre la morfología del mismo, el cual representa la masa de nuestros medios porosos. En azul y blanco se han representado el perímetro interno y el espacio vacío o huecos, respectivamente. Se observa un efecto claro sobre el tamaño de las regiones con masa y del espacio vacío del medio, el cual crece con  $\xi$ . En todos los casos se puede hablar de una distribución de tamaños de hueco no uniforme.

## 2.2.1 LA DIMENSIÓN FRACTAL

El radio de giro,  $R_g$ , como una medida geométrica de la distribución espacial de masa, es una cantidad útil para la descripción de patrones fractales. Se define como el radio en el que habría que colocar un punto de masa igual al de todo el patrón para tener el mismo momento de inercia. Stauffer y Aharony [92, cap. 3] sugieren que en el umbral de percolación se cumple una relación entre  $R_g$  y el tamaño,  $l$ , del cúmulo infinito de la siguiente manera:

$$R_{g,l} \sim l^{1/d_f} \quad (2.11)$$

donde  $d_f$  es la dimensión fractal del cúmulo. La ecuación (2.11) es válida también para una región finita de tamaño  $s$  del cúmulo [8].

Como se vio en el apartado anterior, nuestros medios porosos están constituidos por todos los elementos del cúmulo infinito, los que representan su masa, y sus huecos o espacio vacío, por lo que aplicaremos (2.11) a regiones finitas de tamaño  $s$  y supondremos que la dimensión fractal involucrada es la del medio poroso tal como lo hemos definido, pues ese es nuestro conjunto fractal de interés. Dichas regiones finitas estarán constituidas de masa y huecos, y  $s$  será el total de estos elementos en dichas regiones. De esta manera la dimensión fractal así calculada incluye la información del espacio vacío del medio poroso. Entonces, para poder utilizar la ecuación (2.11) aprovecharemos la dependencia de  $R_{g,s}^2$  con el centro de masa,  $\mathbf{r}_{\text{cm}}$ , como se describe a continuación [8, 69].

Denotemos como  $\mathbf{r}_i$  a la posición del  $i$ -ésimo sitio con masa en el conjunto fractal de tamaño  $s$ , su centro de masa está dado por:

$$\mathbf{r}_{\text{cm}} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \mathbf{r}_i \quad (2.12)$$

El radio de giro al cuadrado de un conjunto fractal de tamaño  $s$ ,  $R_{g,s}^2$ , se define como:

$$\begin{aligned} R_{g,s}^2 &= \langle |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\text{cm}}|^2 \rangle \\ &= \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\text{cm}}|^2 \end{aligned} \quad (2.13)$$

La primera igualdad en la ecuación (2.13) representa la distancia cuadrática media al

centro de masa, y a partir de la segunda igualdad de la misma ecuación se pueden obtener puntos  $(s, R_{g,s})$  que se utilizarán para un ajuste de regresión lineal con la ecuación (2.11) expresada en la forma  $\log(R_{g,s}) = \log(k) + \frac{1}{d_f} \log(s)$ , de modo que el inverso de la pendiente de ajuste nos da la dimensión fractal del medio poroso. Para la obtención de los puntos  $(s, R_{g,s})$  se creó una rutina que selecciona sitios del medio poroso y explora el entorno de cada uno como sigue:

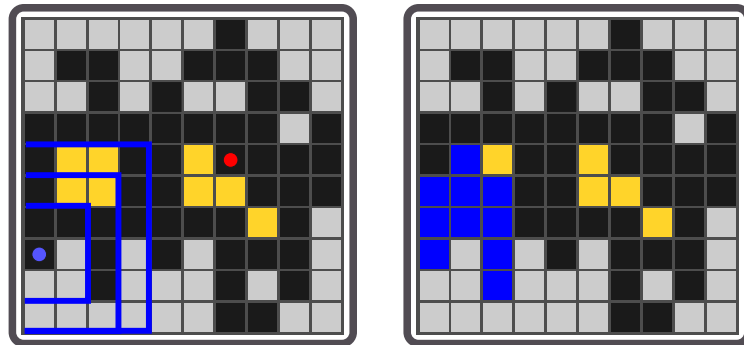
- 1 Selección de la muestra.** Se elige una muestra aleatoria uniformemente distribuida de tamaño equivalente al 70 % de los elementos con masa del medio poroso. Se consideraron 10 medios porosos por cada valor de  $\xi$  para promediar el valor de la dimensión fractal.
- 2 Exploración del entorno y cubrimientos.** Cada punto elegido en el paso 1 explora su entorno completo desplazándose, a partir de éste, tantas unidades de red se necesiten hasta que dentro del área abarcada se encuentren por lo menos  $s$  elementos fijados, en los que habrá masa y espacio vacío o huecos del medio poroso pero nunca elementos del exterior. En caso de que en el área explorada se tenga una cantidad de elementos mayor a  $s$  se procede a una selección aleatoria que los contenga. Cada una de estas regiones será un cubrimiento de tamaño  $s$  sobre el medio poroso al que se aplican las ecuaciones (2.12) y (2.13). El cuadrado del radio de giro a un determinado valor de  $s$  será el promedio de todos los calculados en la muestra.

Se consideraron ocho valores para el tamaño de los cubrimientos,  $s \in \{10, 20, 60, 120, 200, 400, 500, 900\}$ . Por la manera en que nuestro algoritmo realiza las exploraciones del entorno de los sitios para obtener dichos cubrimientos, lo hemos llamado “el algoritmo del radar cuadrado” (ver Figura 2.6). En la Tabla 2.2 se muestran los resultados obtenidos, y en la Figura 2.7 la gráfica correspondiente de los puntos  $(\xi, d_f)$ . En todos los casos los coeficientes de correlación de la recta de ajuste fueron mayores a 0.9.

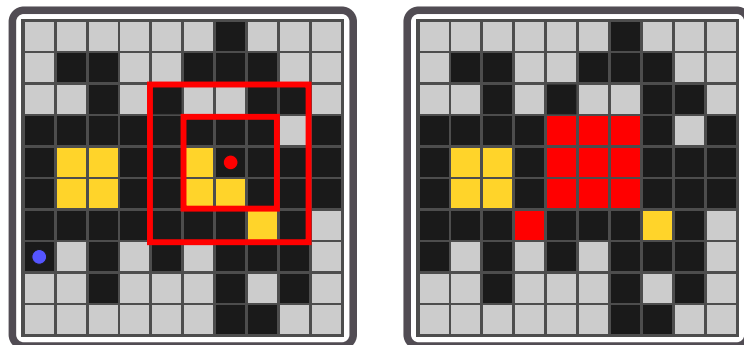
Como se puede observar en la Figura 2.7 la dimensión fractal de los medios porosos presenta pequeñas variaciones desde  $\xi = 0.09$  hasta  $\xi = 0.39$  para posteriormente llegar a un mínimo en el punto  $(3.32, 1.812)$ , a partir del cual comienza a crecer de forma continua, alcanzando el punto máximo  $(22.59, 1.973)$ . La tendencia a crecer de esta cantidad, desde  $\xi = 5.07$  hasta  $\xi = 22.59$ , puede entenderse por la presencia de zonas amplias con masa en el medio poroso (llena mejor el espacio en el que subsiste), no así el descenso observado desde  $\xi = 0.39$  hasta  $\xi = 3.32$  para el cual no se tiene una explicación.

En la Figura 2.8 se muestran los porcentajes promedio de masa,  $\eta$ , a los distintos valores de  $s$  para cada valor de dimensión fractal obtenido. Así, por ejemplo, si nos

paramos sobre un punto de los medios porosos con  $d_f = 1.828$  y nos desplazamos lo suficiente para analizar una región de 10 elementos, en promedio dicha región contendrá 91.46 % de masa, mientras que si exploramos una región en la que se encuentren 900 elementos, en promedio contendrá 79.41 % de masa, lo que representa una disminución del 12.05 % (curva con cuadrados en color café), la máxima disminución de todos los casos.



(a) A la izquierda se ilustra la forma en que se explora el entorno del sitio marcado con un círculo azul para obtener un subconjunto fractal de diez elementos, donde fue necesario moverse tres unidades de red en las cuatro direcciones (arriba, abajo, izquierda y derecha) para tal fin. A la derecha, en color azul, una posible configuración del subconjunto fractal del tamaño indicado.



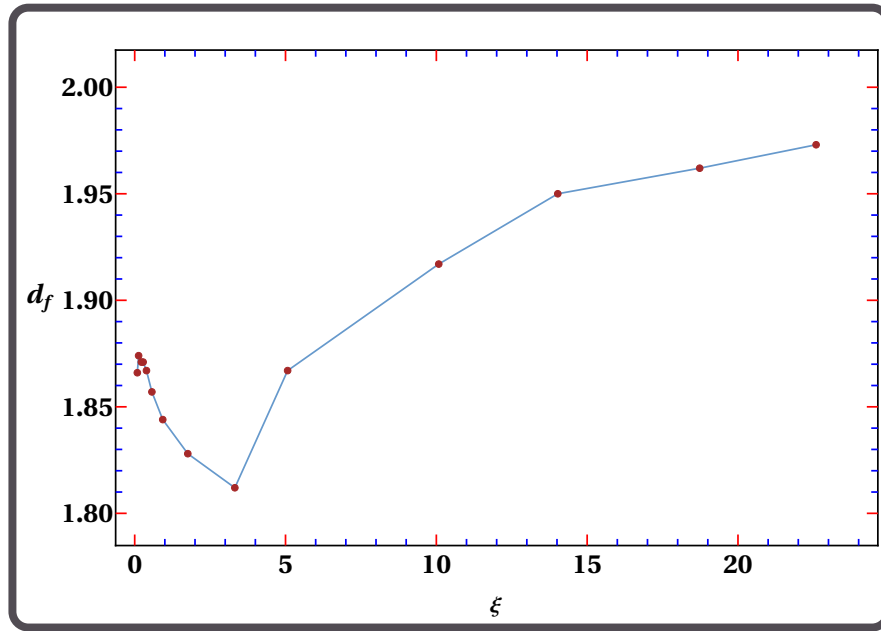
(b) A la izquierda se ilustra la forma en que se explora el entorno del sitio marcado con un círculo rojo para obtener un subconjunto fractal de diez elementos, donde fue necesario moverse dos unidades de red en las cuatro direcciones (arriba, abajo, izquierda y derecha) para tal fin. A la derecha, en color rojo, una posible configuración del subconjunto fractal del tamaño indicado.

**Figura 2.6.** Manera en que opera el algoritmo del radar cuadrado sobre un elemento de un conjunto fractal para el cálculo de su dimensión fractal. La masa, los huecos y el espacio exterior del conjunto se han representado en negro, amarillo y gris, respectivamente. En ambos casos el total de elementos del subconjunto fractal dentro de la última exploración excede al número de elementos buscado, en cuyo caso se procede a una selección aleatoria que los contenga.

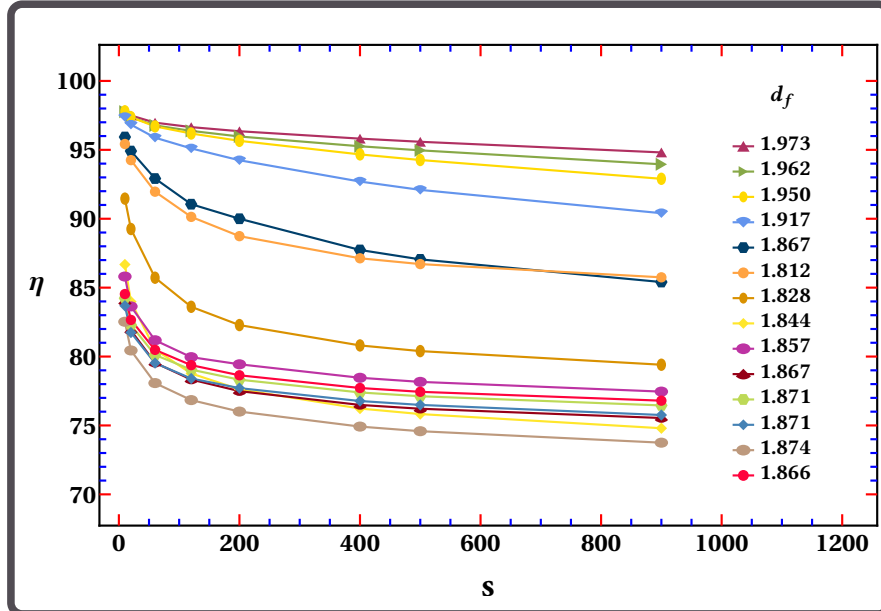
En contraste, los medios con  $d_f = 1.973$  en regiones con  $s = 10$  presentan una masa promedio del 97.87 %, y para  $s = 900$  la masa promedio es del 94.81 %, una reducción de apenas el 3.06 % (curva con círculos rellenos en color púrpura), la mínima disminución de todos los casos, lo que corrobora que llenan mejor el espacio y quede justificada su dimensión fractal mayor. Por otro lado, los medios porosos con  $d_f = 1.812$  (curva con círculos en color rojo) presentan porcentajes promedio de masa similares a los de los medios con  $d_f = 1.867$  (curva con triángulos en color morado), pero resultaron ser más masivos que los medios con  $d_f \in \{1.866, 1.874, 1.871, 1.857, 1.844, 1.828\}$ , lo que indica que una dimensión fractal más baja no necesariamente se traduce en una menor presencia de masa al explorar regiones de distinto tamaño en el medio poroso.

Tabla 2.2. Dimensión fractal de los medios porosos a las distintas longitudes de correlación de la red de la que se obtienen. Cada valor es el promedio de diez junto con su desviación estándar.

$\xi$	$d_f$	$\xi$	$d_f$
0.09	$1.866 \pm 2.230 \times 10^{-3}$	1.76	$1.828 \pm 4.850 \times 10^{-3}$
0.13	$1.874 \pm 1.023 \times 10^{-2}$	3.32	$1.812 \pm 1.570 \times 10^{-2}$
0.22	$1.871 \pm 7.850 \times 10^{-3}$	5.07	$1.867 \pm 1.631 \times 10^{-2}$
0.28	$1.871 \pm 4.367 \times 10^{-4}$	10.08	$1.917 \pm 2.182 \times 10^{-2}$
0.39	$1.867 \pm 1.872 \times 10^{-2}$	14.03	$1.950 \pm 4.980 \times 10^{-3}$
0.57	$1.857 \pm 8.886 \times 10^{-3}$	18.73	$1.962 \pm 2.130 \times 10^{-3}$
0.93	$1.844 \pm 1.326 \times 10^{-2}$	22.59	$1.973 \pm 1.110 \times 10^{-2}$



**Figura 2.7.** La dimensión fractal de los medios porosos como función de la longitud correlación de acuerdo a los datos de la Tabla 2.2. El mínimo corresponde al punto (3.32, 1.812).



**Figura 2.8.** Porcentaje promedio en masa  $\eta$  de los medios porosos a los distintos valores de  $s$ . En todos los casos la presencia de huecos provoca una disminución en el porcentaje promedio de masa a medida que se exploran regiones de mayor tamaño en los medios. Una dimensión fractal más baja no necesariamente se traduce en una menor cantidad de masa promedio al variar el tamaño de la región explorada.

### 2.2.2 LA LAGUNARIDAD

Los resultados del apartado anterior nos muestran que la dimensión fractal por sí sola no es una medida suficiente para una descripción geométrica satisfactoria cuando en el conjunto fractal están presentes huecos o lagunas [89, pág. 37], pues se presentaron situaciones en las que la dimensión fractal resultó mayor en conjuntos fractales menos masivos, principalmente en los casos en los que la longitud de correlación de la red de la cual se obtienen es menor a 5.07.

El mismo Mandelbrot señaló la necesidad de una cantidad que tomará en cuenta la distribución de huecos en conjuntos fractales donde estos estén presentes, cantidad a la que definió como “lagunaridad” [70]. La lagunaridad, a diferencia de la dimensión fractal, mejora la descripción “textural” del conjunto fractal y está relacionada con la distribución de los tamaños de hueco o espacio vacío en el conjunto. Para conjuntos fractales, tales como un medio poroso, en los que la geometría de sus poros y enlaces influye en muchas de sus propiedades, como podrían ser sus propiedades dieléctricas o de transporte, la dimensión fractal falla si se intenta relacionarla directamente con dichas propiedades, a menos que se tome en cuenta la lagunaridad [89, pág. 37].

Objetos o conjuntos fractales se dicen más lagunares si los tamaños de sus huecos o espacio vacío se distribuyen en intervalos amplios. Una definición más precisa de lagunaridad se introduce en [39], en donde describen a la lagunaridad de un conjunto fractal como una medida de la desviación de su invarianza bajo traslación. En conjuntos con lagunaridad baja, en los que los tamaños de huecos son relativamente homogéneos, diferentes regiones del conjunto tienden a ser similares unas a otras (son casi invariantes bajo traslación), mientras que en conjuntos con lagunaridad alta regiones distintas no se asemejan entre sí y no se logra que coincidan por una simple traslación. Esta característica de la invarianza bajo traslación de objetos geométricos es altamente dependiente de la escala: objetos que son heterogéneos a escalas pequeñas pueden ser homogéneos si se les observa a escalas grandes o viceversa [39; 89, pág. 37].

Para calcular la lagunaridad utilizaremos una versión modificada del método “ventana deslizante” el cual se basa en una exploración del conjunto fractal por medio de ventanas de distintos tamaños que se van desplazando hasta cubrir todo el conjunto, al mismo tiempo que registran la masa contenida en ellas [1]. Los registros de masa los realizamos de la misma manera que se hizo para la dimensión fractal, utilizando el método del radar cuadrado. Las distribuciones de frecuencia de masa y sus distribuciones de probabilidad asociadas, necesarias para calcular la lagunaridad, se obtienen como

sigue:

- 1 Un cubrimiento de tamaño  $s$  sobre el medio poroso contendrá una cantidad  $m$  de elementos con masa, lo que permite establecer una función de distribución de frecuencias de masa  $n(s, m)$ , la que nos indica cuantos cubrimientos de tamaño  $s$  contienen  $m$  elementos con masa.
- 2 Dividiendo la distribución de frecuencias por la cantidad total de cubrimientos de tamaño  $s$ ,  $N(s)$ , se obtiene la distribución de probabilidad  $P(s, m)$ , que nos da la probabilidad de encontrar un cubrimiento de tamaño  $s$  con  $m$  elementos de masa. El primer y segundo momento de esta distribución de probabilidad son:

$$M_1(s) = \sum_{m=1}^{m_{mx}} m P(s, m) \quad (2.14)$$

$$M_2(s) = \sum_{m=1}^{m_{mx}} m^2 P(s, m) \quad (2.15)$$

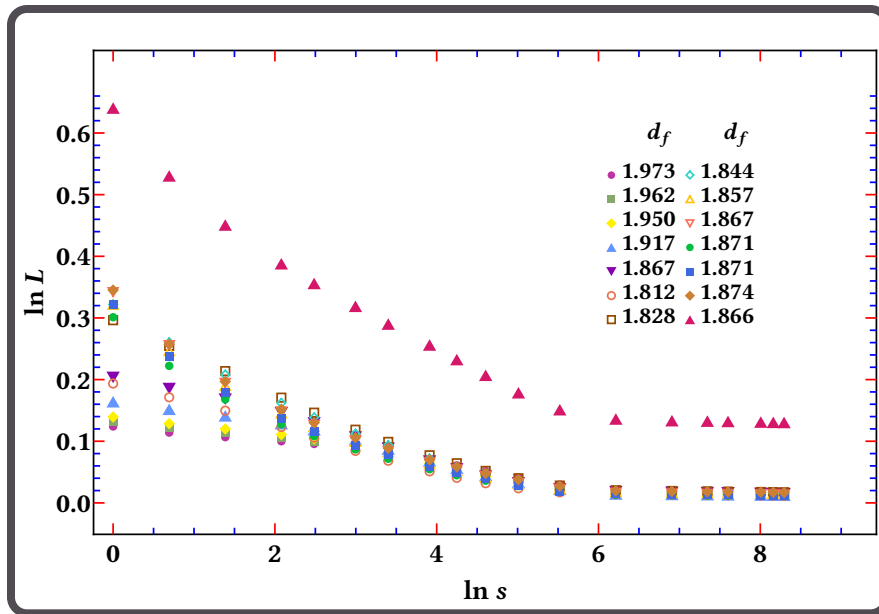
- 3 La lagunaridad para un cubrimiento de tamaño  $s$ ,  $L(s)$ , queda definida como:

$$L(s) = \frac{M_2(s)}{(M_1(s))^2} \quad (2.16)$$

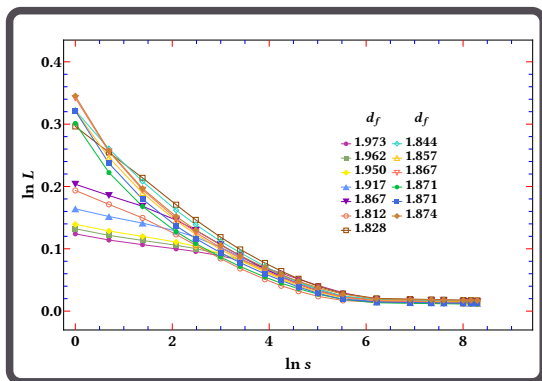
- 4 Por el carácter estadístico de  $L(s)$ , su expresión se puede reducir considerando que el primer momento es igual a la media,  $u$ , de  $P(s, m)$ , y el segundo momento es igual a la suma de la varianza,  $\sigma^2$ , y el cuadrado de la media de  $P(s, m)$ . Así, se obtiene:

$$\begin{aligned} L(s) &= \frac{\sigma^2 + u^2}{u^2} \\ &= \left(\frac{\sigma}{u}\right)^2 + 1 \end{aligned} \quad (2.17)$$

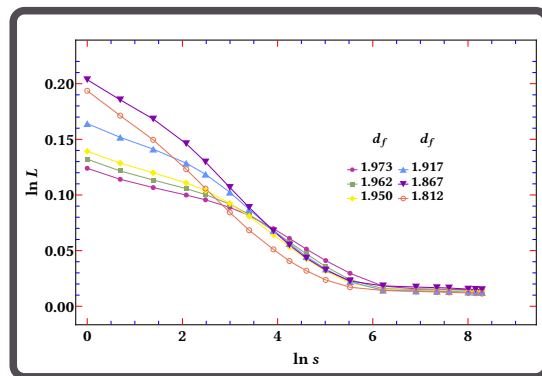
La lagunaridad de los medios porosos se determinó utilizando la ecuación (2.17), pues incluye la desviación estándar y la media de los conteos de masa a un determinado tamaño de cubrimiento  $s$ . La cantidad máxima de masa en cada cubrimiento es equivalente al tamaño de este último, por lo que  $m_{mx} = s \in \{1, 2, 4, 8, 12, 20, 30, 50, 70, 100, 150, 250, 500, 1000, 1550, 2000, 3000, 3500, 4000\}$ , fueron los tamaños de cubrimiento considerados.



**Figura 2.9.** Comportamiento de la lagunaridad  $L(s)$  como función del tamaño de cubrimiento  $s$  en escala logarítmica. Cada punto es el promedio de cincuenta valores. Una lagunaridad mayor indica que los tamaños de hueco del medio se distribuyen en intervalos más amplios.



**(a)** Curvas de lagunaridad para los casos con  $d_f \neq 1.866$ . Los siete casos más lagunares evolucionan de forma monótona en todo el intervalo.



**(b)** Las seis curvas con lagunaridad más baja en las que se aprecia una concavidad distinta respecto a las demás.

**Figura 2.10.** Comportamiento de la lagunaridad  $L(s)$  como función del tamaño de cubrimiento  $s$  en escala logarítmica para valores de  $d_f \neq 1.866$ . En **(a)** se observa que las siete curvas de mayor lagunaridad mantienen una concavidad hacia arriba en todo el intervalo; mientras que en **(b)** se pueden apreciar puntos de inflexión en los casos  $d_f \in \{1.812, 1.867\}$  cuando  $\ln(s) > 3$ . Las curvas con la menor lagunaridad su muestran cóncavas hacia abajo en todo el intervalo.

### 2.2.3 LA DIMENSIÓN DEL CAMINANTE

Un caminante aleatorio clásico se utilizó como una partícula que difunde sobre los medios porosos a fin de conocer algunas propiedades de difusión de los mismos. El proceso de difusión lo caracterizamos mediante la evolución temporal del desplazamiento cuadrático medio,  $\langle r^2(t) \rangle$ , donde  $r$  es la distancia que ha recorrido el caminante desde su punto de partida al tiempo  $t$ . La trayectoria descrita por el recorrido del caminante tiene asociada una cantidad llamada “dimensión del caminante”, representada como  $d_w$ , la cual se relaciona con el desplazamiento cuadrático medio de la siguiente manera [7]:

$$\langle r^2(t) \rangle \sim t^{2/d_w} \quad (2.18)$$

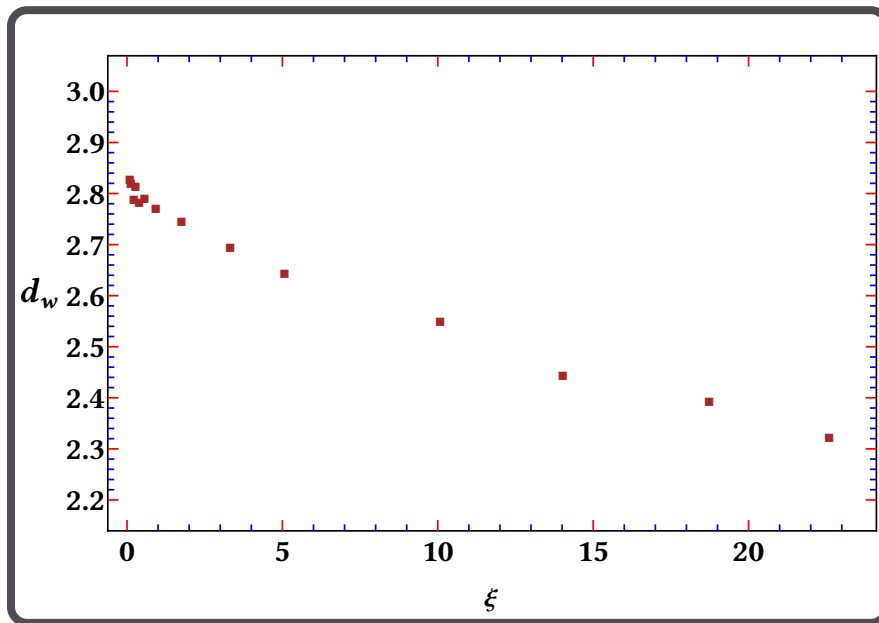
Para calcular  $d_w$  se simuló en 50 medios diferentes el recorrido de 2100 caminantes aleatorios de 1500 pasos cada uno, registrando el desplazamiento cuadrático en cada paso, eligiendo el punto inicial de forma aleatoria. En la Tabla 2.3 y en la Figura 2.11 se muestran los resultados obtenidos vía la ecuación (2.18), cada punto es el promedio de cincuenta valores. En ella se puede ver que la correlación del medio favorece el desplazamiento del caminante, ya que la disminución de  $d_w$  que se observa, indica que el caminante aleatorio encuentra menos “obstáculos” para moverse. A valores de correlación bajos la trayectoria del caminante se podría comparar a la forma de una nube, mientras que a valores altos, dicha trayectoria se asemeja a la de una línea quebrada.

**Tabla 2.3. Dimensión del caminante de los medios porosos a las distintas longitudes de correlación de la red de la que se obtienen. Cada valor es el promedio de cincuenta junto con su desviación estándar.**

$\xi$	$d_w$	$\xi$	$d_w$
0.09	$2.826 \pm 9.282 \times 10^{-2}$	1.76	$2.745 \pm 8.511 \times 10^{-2}$
0.13	$2.820 \pm 7.357 \times 10^{-2}$	3.32	$2.694 \pm 6.748 \times 10^{-2}$
0.22	$2.787 \pm 8.970 \times 10^{-2}$	5.07	$2.642 \pm 8.394 \times 10^{-2}$
0.28	$2.813 \pm 6.905 \times 10^{-2}$	10.08	$2.548 \pm 8.616 \times 10^{-2}$
0.39	$2.782 \pm 6.720 \times 10^{-2}$	14.03	$2.443 \pm 6.560 \times 10^{-2}$
0.57	$2.790 \pm 8.773 \times 10^{-2}$	18.73	$2.392 \pm 7.221 \times 10^{-2}$
0.93	$2.770 \pm 5.962 \times 10^{-2}$	22.59	$2.322 \pm 6.250 \times 10^{-2}$

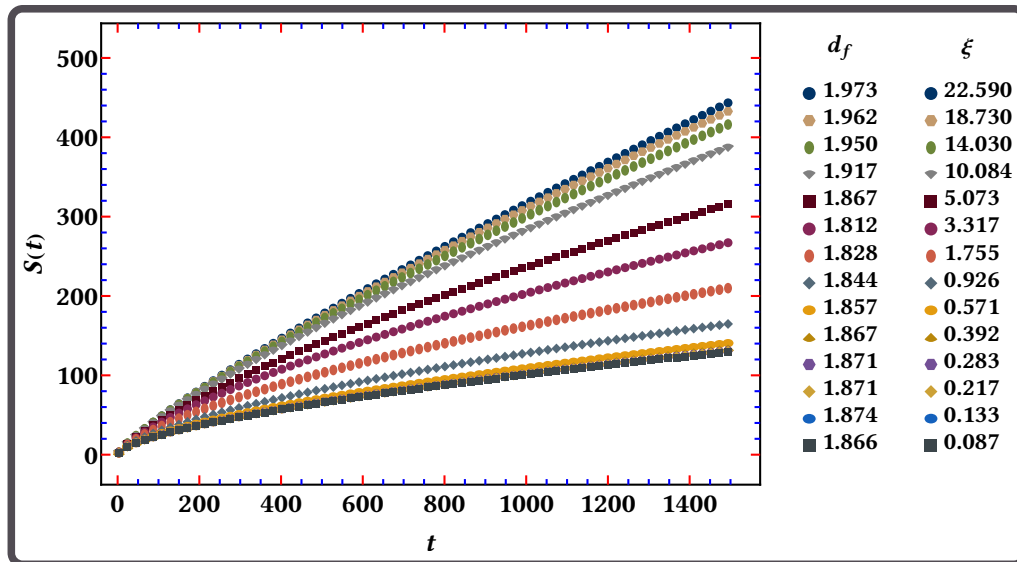
Otras cantidades asociadas con la trayectoria o recorrido del caminante aleatorio son: el *número de sitios distintos que visita el caminante*,  $S(t)$ , y el *número de sitios de crecimiento*,  $G(t)$ . Esta última, es la cantidad de sitios sobre los que todavía se puede mover el caminante y que colindan con el perímetro de la trayectoria que describe en cada instante.

Para conocer la evolución temporal de  $S(t)$  y  $G(t)$  se simularon 2000 trayectorias de 1500 pasos de Montecarlo cada una de un caminante aleatorio clásico como partícula que difunde sobre el medio poroso; se consideraron sólo 50 cúmulos por cada valor de  $\xi$ .

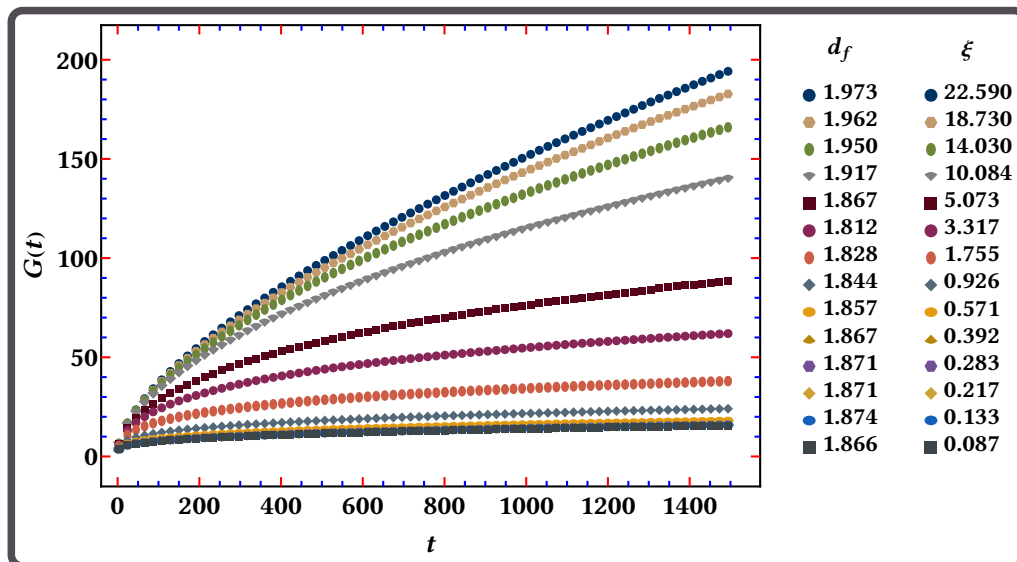


**Figura 2.11.** La dimensión del caminante como función de la longitud de correlación. Cada punto es el promedio de 50 valores en los que se evalúan 2100 trayectorias de 1500 pasos de montecarlo cada una de un caminante aleatorio clásico como partícula que difunde sobre los medios porosos.

En la Figura 2.12(a) se observa que para  $\xi \leq 0.57$  el caminante aleatorio sólo ha visitado alrededor de 150 sitios distintos después de 1500 pasos, mientras que para  $\xi > 0.57$  esta cantidad comienza a crecer hasta alcanzar mas de 400 sitios distintos cuando  $\xi = 22.59$ ; es decir, visita alrededor de 3 veces más sitios distintos en este último caso. En la Figura 2.12(b) podemos ver que la correlación del medio favorece más a los sitios de crecimiento. Cuando  $\xi \leq 0.57$  el caminante aleatorio dispone de menos de 25 sitios para acceder a ellos en 1500 pasos realizados; mientras que cuando  $\xi = 22.59$ , los sitios disponibles se elevan a casi 200, al rededor de 10 veces más que en el caso aleatorio.



(a)



(b)

**Figura 2.12.** Evolución temporal de los sitios distintos que visita el caminante y de los sitios de crecimiento. En ambos casos cada curva es el promedio de diez y el efecto de la correlación es más evidente cuando  $\xi > 0.571$ .

## 2.2.4 LA DIMENSIÓN ESPECTRAL

Como es sabido, los cúmulos de percolación son objetos fractales, y su dimensión fractal,  $d_f$ , puede expresarse en términos de la dimensión euclídea,  $d$ , y de los exponentes críticos,  $\beta$  y  $\nu$ , de la transición a la percolación:  $d_f = d - \beta/\nu$ . De este modo, la dimensión fractal aparece como una primera medida de la geometría fractal. En décadas pasadas se mostró

que problemas de la física lineal sobre fractales (como la difusión clásica, la localización cuántica, etc.), son gobernadas por otra cantidad: la dimensión espectral,  $d_s$  [77, 79].

En términos matemáticos la dimensión espectral se define como la probabilidad de que el caminante aleatorio se encuentre en su posición de partida después de haber dado  $t$  pasos. Denotando por  $P(\mathbf{0}, t)$  a la probabilidad de estar en la posición inicial al tiempo  $t$ , la dimensión espectral define el comportamiento asintótico de esta probabilidad para tiempos largos:

$$P(\mathbf{0}, t) \sim t^{-d_s/2}, \quad \text{para } t \rightarrow \infty \quad (2.19)$$

Una manera directa de medir la dimensión espectral es por medio de un caminante aleatorio, ya que, en particular, se ha demostrado que en el umbral de percolación el promedio del número de sitios distintos que visita,  $S(t)$ , durante  $t$  pasos se comporta como [7, 79]:

$$S(t) \sim t^{d_s/2} \quad (t \gg 1) \quad (2.20)$$

que se cumple para  $d_s < 2$ , lo cual caracteriza a medios fractales de baja dimensionalidad y la difusión en ellos es llamada “difusión anómala”. En el caso  $d_s = 2$  la ecuación (2.20) se transforma en  $S(t) \sim t$ , lo que conduce al caso de difusión clásica.

La difusión llevada a cabo con el modelo del caminante aleatorio está también relacionada a la densidad de estados para excitaciones armónicas del medio  $\rho(\epsilon)$  [7], a través de la probabilidad de que el caminante retorne a su posición inicial. Así, se tiene:

$$\rho(\epsilon) \sim \epsilon^{d_f/d_w - 1} \equiv \epsilon^{d_s/2 - 1} \quad (2.21)$$

donde la energía y la densidad vibracional de estados se relacionan a través de  $\rho(\epsilon) d\epsilon = g(\omega) d\omega$ . La ecuación (2.21) es similar a la bien conocida densidad de estados en espacios euclídeos, con la excepción que la dimensión  $d$  se reemplaza por la ecuación (1.17).

En medios fractales los modos de vibración son llamados *fractones* en lugar de fonones, de ahí que a la dimensión espectral también se le conoce como dimensión fracción. En la Tabla 2.4 se reportan los resultados obtenidos de la dimensión espectral obtenida vía las ecuaciones (2.20) y (1.17). En el primer caso se observa que para  $\xi < 0.93$  la dimensión espectral presenta pequeñas variaciones alrededor de 1.250, y para  $\xi \geq 0.93$  esta comienza a crecer hasta alcanzar un valor máximo de 1.682. En el segundo caso la dimensión espectral presenta pequeñas variaciones alrededor de 1.3 para  $\xi < 5.07$ , mientras que para  $\xi \geq 5.07$  crece hasta alcanzar el valor máximo de 1.699. Así, cuando la

longitud de correlación de la red, de la cual se obtienen los medios porosos, se incrementa, se tiene que  $d_s \rightarrow 2$ , es decir, la partícula que difunde encuentra menos obstáculos para desplazarse.

**Tabla 2.4.** Dimensión espectral de los medios porosos a las distintas longitudes de correlación de la red de la que se obtienen. Cada valor es el promedio de cincuenta. En la segunda columna el error corresponde a la desviación estándar y en la tercer columna se reporta la propagación del error proveniente de los valores  $d_f$  y  $d_w$ .

$\xi$	$d_s^{(a)}$	$d_s^{(b)}$
0.09	$1.247 \pm 1.501 \times 10^{-2}$	$1.321 \pm 4.496 \times 10^{-2}$
0.13	$1.250 \pm 1.258 \times 10^{-2}$	$1.329 \pm 4.194 \times 10^{-2}$
0.22	$1.254 \pm 1.121 \times 10^{-2}$	$1.343 \pm 4.885 \times 10^{-2}$
0.28	$1.248 \pm 1.112 \times 10^{-2}$	$1.330 \pm 3.296 \times 10^{-2}$
0.39	$1.256 \pm 1.748 \times 10^{-2}$	$1.342 \pm 4.589 \times 10^{-2}$
0.57	$1.250 \pm 1.502 \times 10^{-2}$	$1.331 \pm 4.822 \times 10^{-2}$
0.93	$1.273 \pm 1.131 \times 10^{-2}$	$1.331 \pm 3.823 \times 10^{-2}$
1.76	$1.316 \pm 1.500 \times 10^{-2}$	$1.332 \pm 4.482 \times 10^{-2}$
3.32	$1.395 \pm 7.433 \times 10^{-3}$	$1.345 \pm 4.536 \times 10^{-2}$
5.07	$1.469 \pm 9.694 \times 10^{-3}$	$1.413 \pm 5.724 \times 10^{-2}$
10.08	$1.586 \pm 9.174 \times 10^{-3}$	$1.505 \pm 6.802 \times 10^{-2}$
14.03	$1.637 \pm 9.761 \times 10^{-3}$	$1.597 \pm 4.696 \times 10^{-2}$
18.73	$1.668 \pm 1.109 \times 10^{-2}$	$1.640 \pm 5.128 \times 10^{-2}$
22.59	$1.682 \pm 1.238 \times 10^{-2}$	$1.699 \pm 6.453 \times 10^{-2}$

(a) Obtenido a partir de la ecuación (2.20).

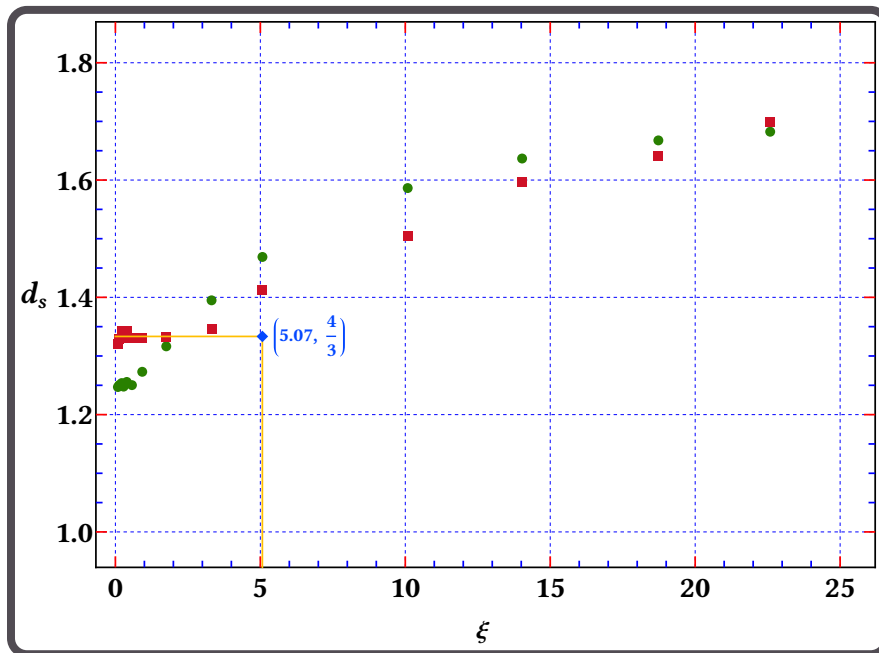
(b) Obtenido a partir de la ecuación (1.17).

En redes aleatorias ha existido un gran interés por conocer el valor exacto de  $d_s$ . Algunos autores reportan que este valor es de 2% - 3% menor al 4/3 que propusieron Alexander y Orbach para  $1 < d \leq 6$  [5], esto es, su valor en la aproximación de campo medio [4, 74]. Nuestros resultados muestran acordes con esta variación del 2% - 3% en los casos en los que  $d_s$  se obtienen a partir de la ecuación (2.20) y la longitud de correlación es menor a 0.93; mientras que cuando el  $d_s$  se obtiene a partir de la ecuación (1.17) la conjetura se cumple en los casos en los que la longitud de correlación es menor

a 3.32 (ver Tabla 2.4 y Figura 2.13).

Un interesante intento por justificar el valor  $4/3$  de Alexander y Orbach fue hecho por Rammal y Toulouse [7, 80], quienes propusieron la ecuación:

$$\frac{d S(t)}{d t} \sim \frac{G(t)}{S(t)} \tag{2.22}$$

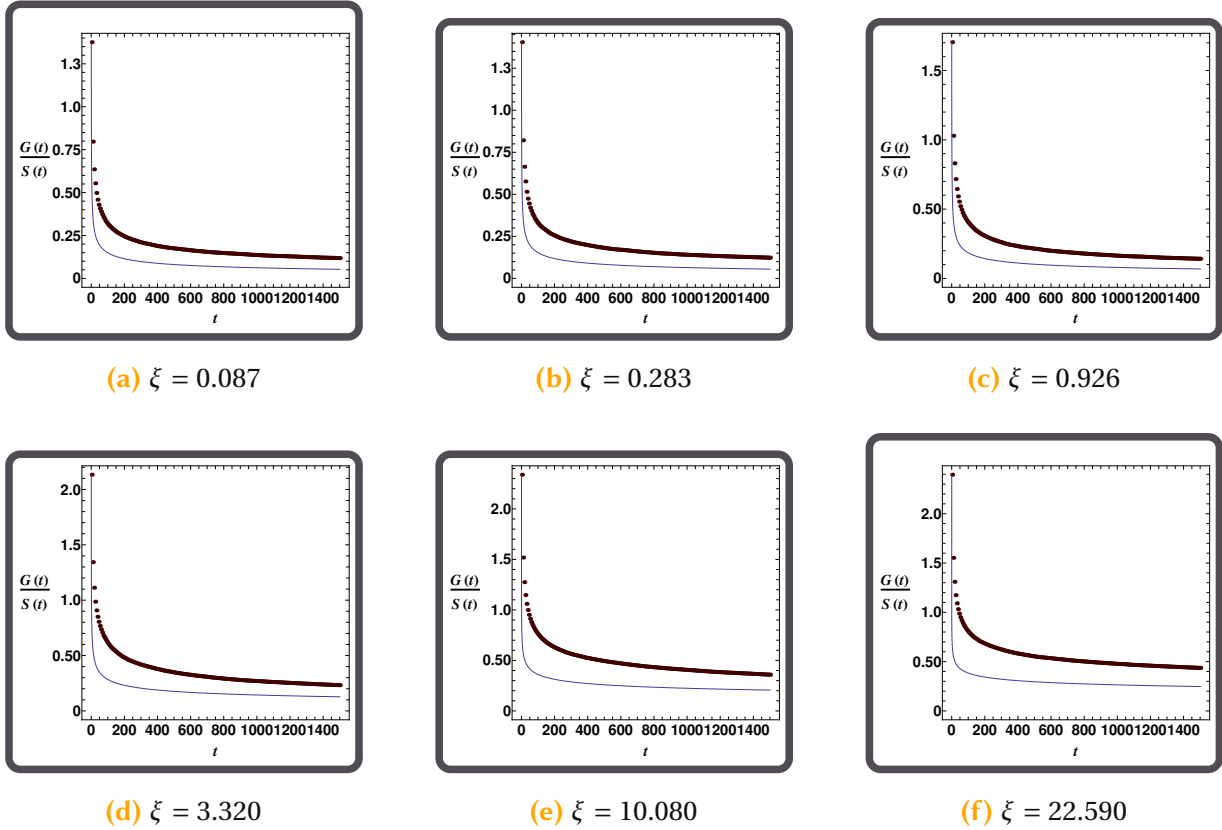


**Figura 2.13.** La dimensión espectral de los medios porosos como función de la longitud de correlación de la red a partir de la cual se obtienen. Los puntos verdes se obtienen a partir de la ecuación (2.20) y los cuadrados rojos a partir de la ecuación (1.17). En este último caso la conjetura de Alexander y Orbach se cumple para  $\xi < 5.07$ . El incremento en  $d_s$  se traduce en un transporte de materia más eficiente.

La ecuación (2.22) establece que la velocidad de crecimiento del número de sitios distintos que visita un caminante aleatorio es proporcional a la fracción de elementos con masa en el perímetro externo de la trayectoria del caminante aleatorio a cualquier momento, es decir, los sitios que rodean la trayectoria del caminante al instante  $t$  y le permitirían incrementar el valor de  $S(t)$ . Para verificar esta relación realizamos un ajuste Log-Log a las curvas de la Figura 2.12(a). La función obtenida se derivó y se comparó el comportamiento de dicha derivada con el cociente  $G(t)/S(t)$  de nuestras simulaciones, el cual representa el lado derecho de la ecuación (2.22).

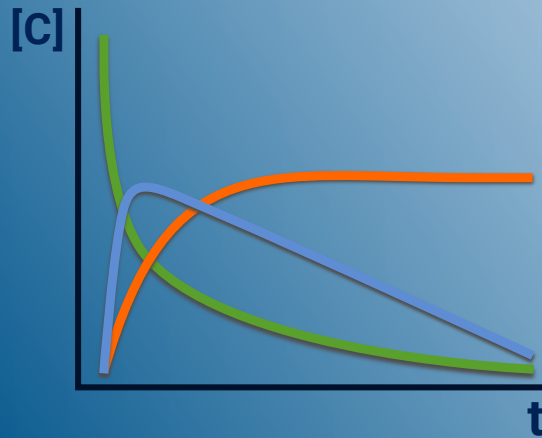
Como se observa en la Figura 2.14 la condición de Ramal y Toulouse no se ve afectada

por la correlación de la red a partir de la cual se obtienen los medios porosos: la velocidad de crecimiento de  $S(t)$  cumple la condición que establece la ecuación (2.22) en todos los casos.



**Figura 2.14.** Condición de Ramal y Toulouse a distintos grados de correlación de la red a partir de la cual se obtienen los medios porosos. La curva de color azul representa el lado izquierdo de la ecuación (2.22); los puntos son el cociente de las simulaciones mostradas en la Figura 2.12. En todos los casos  $S'(t) \sim G(t)/S(t)$ .





## CINÉTICA QUÍMICA ANÓMALA EN CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS



Vicente Leñero

*Soy hombre de infinito amor propio, de lucha, de agallas, y precisamente por eso soy buen perdedor.*

**RESUMEN:** Mediante simulaciones Montecarlo, en las que múltiples caminantes aleatorios clásicos se utilizan para representar especies químicas que difunden en el interior de los cúmulos de percolación correlacionados sin ningún tipo de interacción entre ellas, se obtienen las cinéticas de reacciones del tipo  $A+A \rightarrow 0$ ,  $A+B \rightarrow 0$  y  $2A+B \rightarrow 2C$ . En el caso de la reacción unimolecular se establece y se resuelve el modelo fractal propuesto por Kopelman [55], en el cual se sustituyen las constantes de velocidad por funciones del tiempo del tipo  $k_f \cdot t^{-h}$ , con  $h = 1 - \frac{d_s}{2}$ . Dicha aproximación se resuelve para tres valores de  $d_s$ : 1) a partir de  $S(t) \sim t^{d_s/2}$ , en donde  $S(t)$ , como se sabe, es el número de sitios distintos que visita un caminante aleatorio, 2) a partir de  $d_s = 2 \cdot d_f/d_w$  y 3)  $d_s = 4/3$ . En el caso de las reacciones bimoleculares se presentan las cinéticas de cada especie. Los resultados obtenidos nos permitieron establecer de forma cuantitativa parcial que la estequiometría y la diferencia de concentraciones iniciales de los reactivos introducen escalas adicionales que rompen la invarianza de escala simple que postula la aproximación fractal de Kopelman.

## § 3.1

## REACCIONES QUÍMICAS EN CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CORRELACIONADOS

La cinética de reacciones en sistemas de reacción-difusión en fase heterogénea es, en general, diferente a la que se observa en sistemas bien agitados y en fase homogénea. La concentración de las especies presenta fluctuaciones espaciales, en fase sólida, que junto con la difusión superficial y el proceso de reacción química impactan de manera dramática a la cinética global de la reacción. Estas limitaciones en el transporte de masa pueden conducir a una reducción de la reactividad del sistema de reacción. La cuantificación sistemática de la dinámica que conduce a dicho comportamiento es de importancia tanto científica como tecnológica en todas aquellas situaciones que involucren transformación de materia en ambientes heterogéneos [3]. En general, en todo sistema natural heterogéneo la distribución espacial de las especies reaccionantes es no homogénea debido a las características geométricas del medio, lo que implica que el mecanismo por el cual se llevan a cabo reacciones químicas en tales condiciones es una consecuencia directa de dicha geometría.

La aleatoriedad del medio en reacciones heterogéneas controladas por difusión es de suma importancia. Nuevos métodos analíticos y el incremento en la capacidad de computo, han permitido, desde hace ya varias décadas, el descubrimiento de nuevos comportamientos no esperados, entre los que se pueden mencionar las desviaciones cualitativas a las leyes de decaimiento propuestas por Smoluchowski para reacciones en geometrías confinadas, como podría ser un medio poroso [55].

Las reacciones en superficie en dos dimensiones muestran una variedad de comportamientos interesantes. Cualitativamente, la diferencia entre dos y tres dimensiones es que la mezcla difusiva es menos eficaz (transporte de masa y cinética de la reacción química) en dos (y una) dimensiones. Con menos grados de libertad espacial, las limitaciones de transporte se hacen más significativas, y esto conduce a una ruptura de la ley de acción de masas en dos dimensiones. Formalmente, el espacio que describe una superficie heterogénea posee una geometría no euclidiana. De este modo, una dimensión espacial igual a dos correspondería a la dimensión crítica superior para las reacciones superficiales bimoleculares. La ley de acción de masas, o cinética química local, es la teoría más sencilla con la que se puede predecir la concentración de un reactivo en una reacción química, pero falla en una superficie heterogénea, porque la tortuosidad dificulta el encuentro espacial de los reactivos; de este modo la reacción está limitada por la difusión superficial a tiempos largos.

El planteamiento de la ley de acción de masas no tiene en cuenta las limitaciones

de difusión, por lo que su poder predictivo es limitado. Si, además, la reacción ocurre en un medio desordenado, habrá una interacción entre los efectos del desorden y las limitaciones de difusión, y la simple ley de acción de masas no puede describir la cinética resultante. Por último, la ley clásica de acción de masas no puede describir ningún agrupamiento espacial u otro comportamiento colectivo de los reactivos, ya que supone de hecho que estos están perfectamente bien mezclados [10, 17, 55].

En las subsecciones siguientes se presentan las cinéticas de las reacciones de aniquilación de una y dos especies,  $A + A \rightarrow 0$  y  $A + B \rightarrow 0$ , respectivamente, y la reacción de tercer orden con dos reactantes  $2A + B \rightarrow 2C$ , llevadas a cabo en los conjuntos fractales, en las que, como ya se mencionó, la difusión es el mecanismo de transporte. En cada una de ellas nuevamente se utilizó el modelo del caminante aleatorio clásico para modelar a las especies químicas que difunden en el medio. La reacción se da en el momento en que dos partículas reaccionantes se encuentran en la misma posición, esto es, todos los encuentros son efectivos y cualquier cantidad de partículas pueden ocupar la misma posición en nuestras simulaciones.

En el caso de la reacción de aniquilación unimolecular se establecen las ecuaciones de velocidad de acuerdo a la ley de acción de masas pero ahora se considera que las constantes de reacción son funciones del tiempo de la forma  $k \sim t^{-h}$ , con  $h = 1 - d_s/2$ , con lo que se estaría tomando en cuenta una propiedad de transporte del medio y efectos de memoria<sup>(i)</sup> en dichos procesos dinámicos [24, 55], nunca considerados en la cinética química clásica.

En los dos casos restantes, en los que se consideraron  $C_A^0 = 20000$  y  $C_B^0 = 15000$ , se observan cambios de régimen en las especies que quedan como mayoritarias después de alcanzarse concentraciones iguales de reactivos, reflejados como puntos de inflexión en sus curvas cinéticas, por lo que la aplicación de la aproximación fractal ya no es válida, pues la evolución cinética de la especie deja de estar gobernada solo por las restricciones geométricas del medio. Seis conjuntos fractales con longitudes de correlación  $\xi \in \{0.09, 3.32, 10.08, 14.03, 18.73, 22.59\}$  se utilizaron como medios de reacción.

(i) La velocidad de reacción en un instante dado depende de la distribución espacial previa de los reactivos, por lo que tanto el estado actual del sistema como su historia pasada afectan su evolución subsecuente.

## 3.1.1

## LA REACCIÓN DE ANIQUILACION UNIMOLECULAR:



La ecuación de velocidad asociada a esta reacción de segundo orden de acuerdo a la aproximación fractal es:

$$-\frac{d C_A^t}{d t} = k_f t^{-h} (C_A^t)^2 \quad (t \geq 1) \quad (3.1)$$

donde  $C_A^t$  es la cantidad de partículas de la especie A al tiempo  $t$  y  $k_f$  es la constante fractal, equivalente al coeficiente de velocidad instantáneo a  $t = 1$ . La ecuación (3.1) se puede expresar como:

$$-\frac{d C_A^t}{(C_A^t)^2} = k_f t^{-h} d t \quad (3.2)$$

Integrando ambos lados de la ecuación (3.2) se obtiene:

$$\frac{1}{C_A^t} - \frac{1}{C_A^0} = k_f \left( \frac{t^{(-h+1)}}{-h+1} \right) \quad (3.3)$$

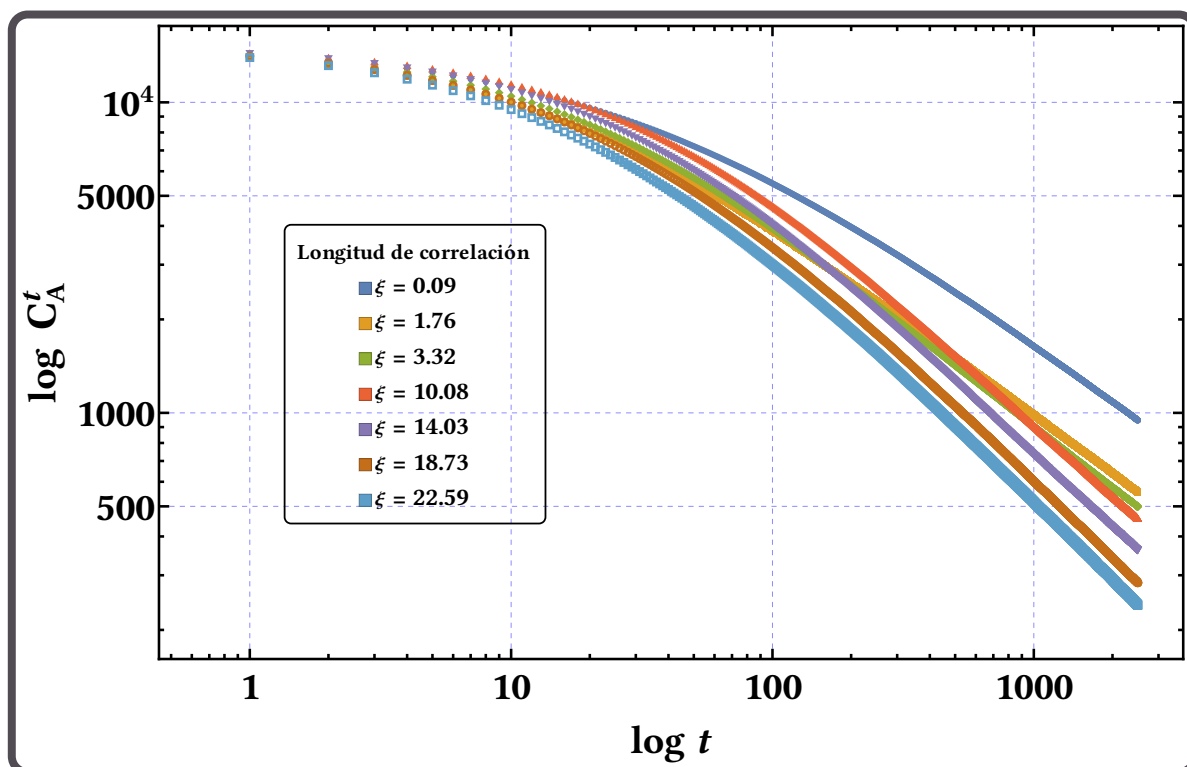
Para efectos de contraste, el equivalente de la ecuación (3.3), resuelta de manera clásica (no fractal), está dada por la ecuación siguiente:

$$\frac{1}{C_A^t} - \frac{1}{C_A^0} = k t \quad (3.4)$$

En la Figura 3.1 se muestran los resultados de la simulación Montecarlo para la reacción de aniquilación unimolecular. En todos los casos se tiene una población inicial de 15000 partículas, distribuidas aleatoriamente sobre el cúmulo de percolación. Las partículas difunden de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo y en el momento en el que dos de ellas ocupan la misma posición se considera que la reacción se lleva a cabo, es decir, todos los encuentros son efectivos y cualquier cantidad de partículas pueden ocupar la misma posición, lo que equivale a que no hay ningún tipo de fuerza de interacción entre ellas ni exclusión por volumen.

Se puede observar que la reacción evoluciona casi hasta su totalidad en el caso más correlacionado ( $\xi = 22.59$ ), con algunas diferencias apreciables en los primeros instantes de la reacción. En la Figura 3.2 se muestra la comparación entre la simulación

(círculos negros) y el modelo fractal representado por la ecuación (3.3) para tres valores de  $d_s$ . Los dos primeros reportados en la Tabla 2.4 (curvas amarilla y azul),  $d_s^{(a)}$  y  $d_s^{(b)}$ , respectivamente; y el tercero,  $d_s^{AO}$ , es el 4/3 de la conjetura de Alexander-Orbach (curva anaranjada). La curva verde representan la predicción de la cinética clásica de acuerdo a la ecuación (3.4).

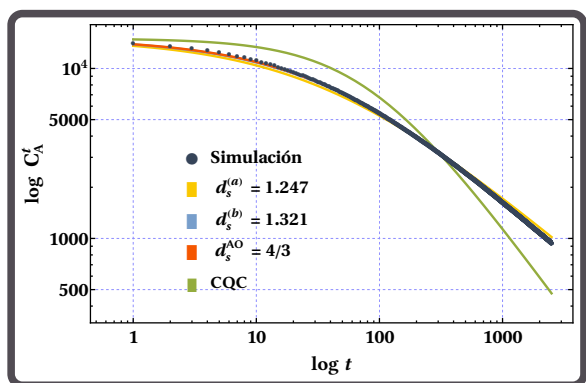
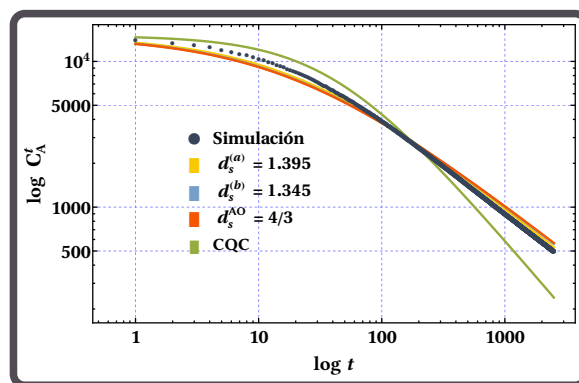
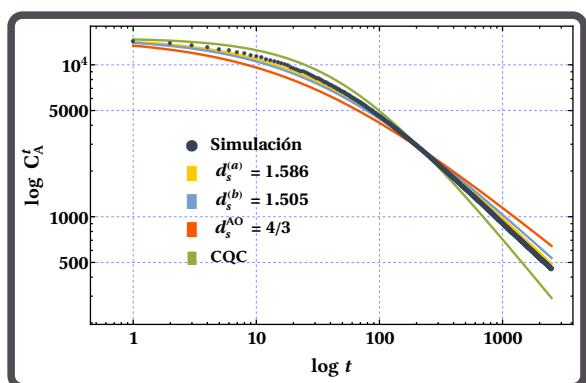
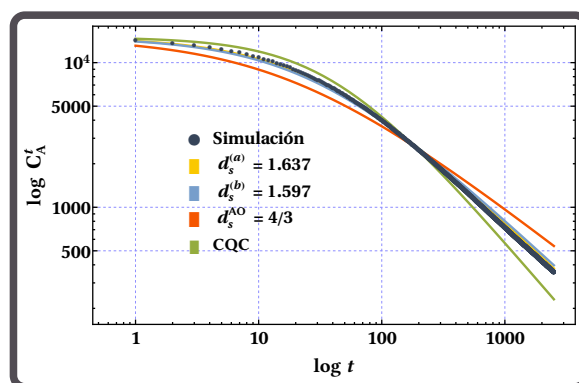
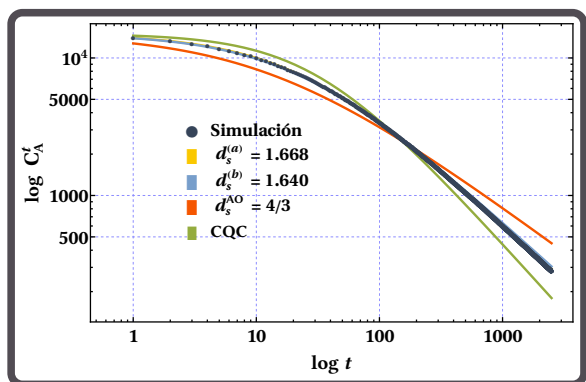
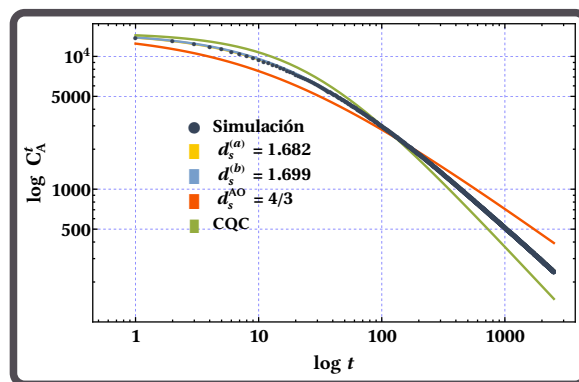


**Figura 3.1.** Cinética de la reacción de aniquilación unimolecular sobre los cúmulos de percolación en escla log-log a distintos valores de  $\xi$ . La simulación se lleva a cabo con  $C_A^0 = 15000$  distribuidas aleatoriamente, las cuales se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo. Todos los encuentros son efectivos y dos especies se anulan cuando ocupan la misma posición, en la que puede haber cualquier cantidad de partículas. Se observa que la reacción se ve favorecida en los casos más correlacionados.

En la Tabla 3.1 se muestra la raíz cuadrada del error cuadrático medio ( $\sqrt{ECM}$ ), la constante fractal  $k_f$  y su desviación estándar  $\sigma_{k_f}$  de los ajustes del modelo fractal resuelto para los 3 valores de  $d_s$  mostrados en la Figura 3.2. Se ha omitido el modelo de la cinética química fractal. En suma, resolviendo el modelo fractal con  $d_s = 4/3$  solo resulta ser la mejor estimación en el caso  $\xi = 0.09$ , por lo que la conjetura de Alexander-Orbach no se cumple cuando el medio adopta una clara correlación espacial.

Tabla 3.1. Raíz cuadrada del error cuadrático medio ( $\sqrt{ECM}$ ), la constante fractal  $k_f$  y su desviación estándar  $\sigma_{k_f}$  de los ajustes del modelo fractal resuelto para los 3 valores de  $d_s$  mostrados en la Figura 3.2. En morado se resaltan los mejores ajustes.

$\xi = 0.09$				$\xi = 3.32$			
	$d_s$				$d_s$		
	1.247	1.321	4/3		1.395	1.345	4/3
$\sqrt{ECM}$	118.52	41.17	31.22	$\sqrt{ECM}$	119.971	162.101	172.256
$k_f$	$4.34 \times 10^{-6}$	$3.69 \times 10^{-6}$	$3.59 \times 10^{-6}$	$k_f$	$5.42 \times 10^{-6}$	$5.99 \times 10^{-6}$	$6.14 \times 10^{-6}$
$\sigma_{k_f}$	$5.88 \times 10^{-9}$	$1.76 \times 10^{-9}$	$1.3 \times 10^{-9}$	$\sigma_{k_f}$	$1.04 \times 10^{-8}$	$1.54 \times 10^{-8}$	$1.68 \times 10^{-8}$
$\xi = 10.08$				$\xi = 14.03$			
	$d_s$				$d_s$		
	1.586	1.505	4/3		1.637	1.597	4/3
$\sqrt{ECM}$	87.34	156.64	313.95	$\sqrt{ECM}$	62.94	93.59	314.39
$k_f$	$3.17 \times 10^{-6}$	$3.76 \times 10^{-6}$	$5.39 \times 10^{-6}$	$k_f$	$3.5 \times 10^{-6}$	$3.79 \times 10^{-6}$	$6.46 \times 10^{-6}$
$\sigma_{k_f}$	$4.27 \times 10^{-9}$	$8.92 \times 10^{-9}$	$2.48 \times 10^{-8}$	$\sigma_{k_f}$	$3.82 \times 10^{-9}$	$6.11 \times 10^{-9}$	$3.32 \times 10^{-8}$
$\xi = 18.73$				$\xi = 22.59$			
	$d_s$				$d_s$		
	1.668	1.640	4/3		1.682	1.699	4/3
$\sqrt{ECM}$	12.60	31.56	267.56	$\sqrt{ECM}$	6.67	12.53	250.93
$k_f$	$4.09 \times 10^{-6}$	$4.31 \times 10^{-6}$	$7.81 \times 10^{-6}$	$k_f$	$4.68 \times 10^{-6}$	$4.53 \times 10^{-6}$	$8.96 \times 10^{-6}$
$\sigma_{k_f}$	$1.02 \times 10^{-9}$	$2.67 \times 10^{-9}$	$3.85 \times 10^{-8}$	$\sigma_{k_f}$	$6.74 \times 10^{-10}$	$1.23 \times 10^{-9}$	$4.52 \times 10^{-8}$

(a)  $\xi = 0.09$ (b)  $\xi = 3.32$ (c)  $\xi = 10.08$ (d)  $\xi = 14.03$ (e)  $\xi = 18.73$ (f)  $\xi = 22.59$ 

**Figura 3.2.** Comparación entre la simulación de la reacción de aniquilación unimolecular (círculos negros), sobre los cúmulos de percolación, con el modelo fractal resuelto para tres valores de  $d_s$  (curvas amarilla, azul y anaranjada) y el modelo de la cinética química clásica (curva verde), ecuaciones (3.3) y (3.4), respectivamente. Los valores  $d_s^{(a)}$  y  $d_s^{(b)}$  se reportan en la Tabla 2.4 y  $d_s^{AO}$  es el valor de  $d_s$  de la conjetura de Alexander-Orbach.

## 3.1.2

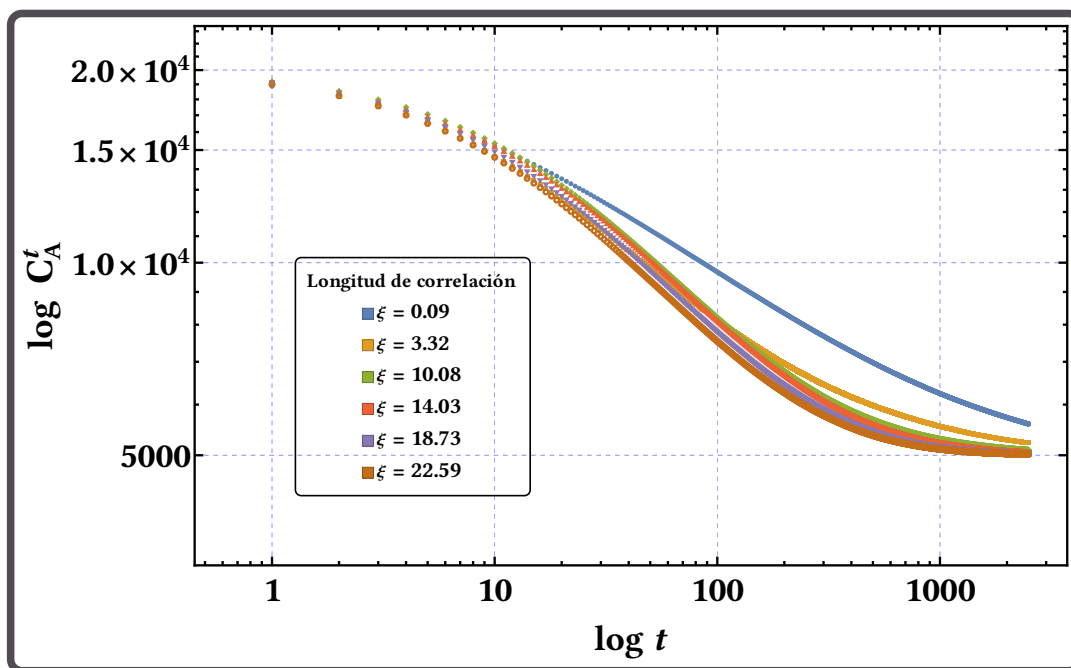
## LA REACCIÓN DE ANIQUILACIÓN BIMOLECULAR:



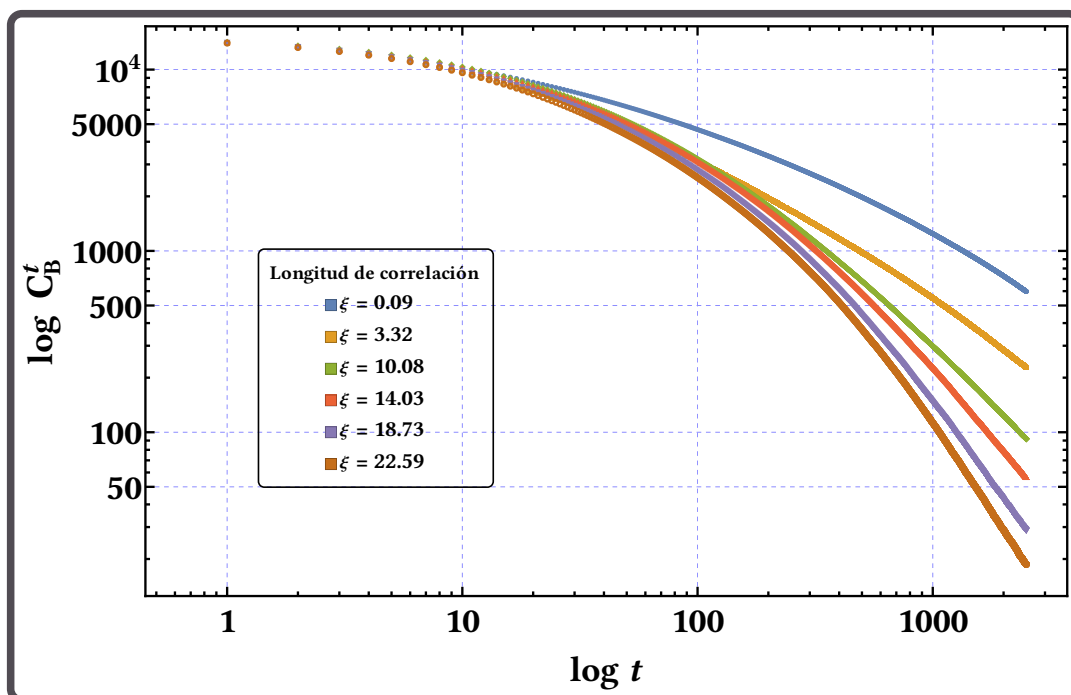
En la Figura 3.3 se muestra la cinética de la reacción de aniquilación bimolecular, en escala log-log, sobre los cúmulos de percolación para los casos  $\xi \in \{0.09, 3.32, 10.08, 14.03, 18.73, 22.59\}$ . La simulación se lleva a cabo con  $C_A^0 = 20000$  y  $C_B^0 = 15000$  partículas, distribuidas aleatoriamente, las cuales se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo. Las especies se anulan cuando ocupan la misma posición. En esta, puede existir cualquier cantidad de partículas, por lo que estamos en un escenario en el que no hay fuerzas de interacción entre partículas.

Se puede observar que en todos los casos la evolución temporal de la especie B, al ser el reactivo limitante, disminuye de forma monótona en todo el tiempo de reacción, lo que provoca que la evolución temporal del reactivo A se desacelere, manifestándose por el punto de inflexión observado en todos los casos analizados. Es decir, el reactivo A enfrenta tanto las restricciones geométricas del medio como los pocos encuentros con la especie B, lo que disminuye su población. Por las condiciones de la simulación este cambio de régimen para la especie A será únicamente debido a la dispersión de las partículas por lo que se descartan efectos de segregación de las mismas.

De este modo no es posible aplicar la aproximación fractal a esta reacción pues está pensada para reacciones gobernadas totalmente por los efectos geométricos del medio a través de  $d_s$ . Así, hemos mostrado, de forma parcialmente cuantitativa, las limitaciones de la aproximación fractal de Kopelman, la cual, podemos decir, resulta ser un caso especial de una teoría cinética más general que debe considerar los efectos de concentración y cantidad de especies reactivas involucradas en la reacción.



(a) Evolución temporal de la especie A en escala log-log a distintos valores de longitud de correlación  $\xi$ .



(b) Evolución temporal de la especie B en escala log-log a distintos valores de longitud de correlación  $\xi$ .

**Figura 3.3.** Cinética de la reacción de aniquilación bimolecular sobre los cúmulos de percolación. La simulación se lleva a cabo con  $C_A^0 = 20000$  y  $C_B^0 = 15000$  partículas, distribuidas aleatoriamente, las cuales se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo. En (a) la evolución temporal de la especie A presenta una desaceleración debida a los pocos encuentros con la especie B la cual disminuye su cantidad de forma monótona en todo el tiempo de reacción, como se observa en (b).

## 3.1.3

LA REACCIÓN DE TERCER ORDEN CON DOS REACTANTES:  
 $2A + B \rightarrow 2C$ 

En la Figura 3.4 se muestran los resultados de la simulación Montecarlo de la cinética de reacción de tercer orden sobre los cúmulos de percolación. Las líneas azul, anaranjada y verde representan la evolución temporal de las especies A, B y C, respectivamente. La simulación se lleva a cabo con  $C_A^0 = 20000$ ,  $C_B^0 = 15000$  y  $C_C^0 = 0$  partículas, distribuidas aleatoriamente, las cuales se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo. Todos los encuentros son efectivos y la reacción se produce cuando cantidades estequiométricas de las especies reaccionantes se encuentren en la misma posición, ignorando efectos de exclusión por volumen. Nuevamente se asume que no existen fuerzas de interacción entre las partículas.

En todos los casos los inicios de la reacción provocan una tasa constante de producción de la especie C, pero a medida que la reacción avanza, la especie A comienza a disminuir de forma monótona hasta el término de la reacción, lo que provoca igualmente una disminución en la tasa de reacción de la especie B y en la producción de C.

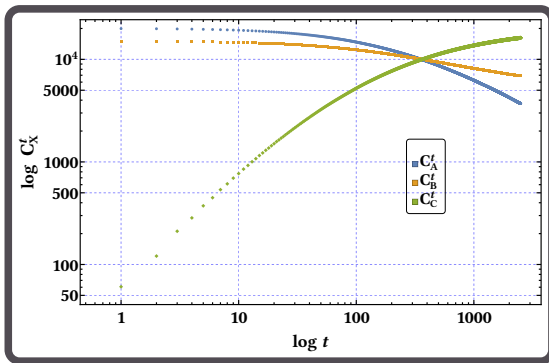
En el gráfico log-log de la evolución temporal de la especie A, Figura 3.5, se puede apreciar claramente la disminución monótona de esta durante todo el transcurso de la reacción. También se puede observar que los casos con  $\xi = 3.32$  y  $\xi = 14.03$  evolucionan de forma muy similar. Cabe destacar que el caso  $\xi = 10.08$  es el que más favorece esta reacción y en el caso  $\xi = 18.73$  se obtiene la menor interacción entre los reactivos. El caso con la mayor longitud de correlación,  $\xi = 22.59$ , quedó como un caso intermedio entre los dos anteriores.

En la Figura 3.6 se muestra la evolución temporal de la especie B, también en escala log-log, en la que se aprecian cambios de concavidad, los cuales se pueden asociar a la transición entre regímenes cinéticos relacionados a la disminución progresiva de la especie A y a la separación entre las especies reactivas conforme el tiempo avanza, lo que provoca una disminución en la tasa de reacción de esta especie. De este modo, la disminución progresiva de la especie A y la transición entre regímenes cinéticos experimentado por la especie B, provocan una disminución en la tasa de producción de C como se muestra en la Figura 3.6. Nuevamente, por las condiciones en las que se realizó la simulación se descarta la segregación de reactivos.

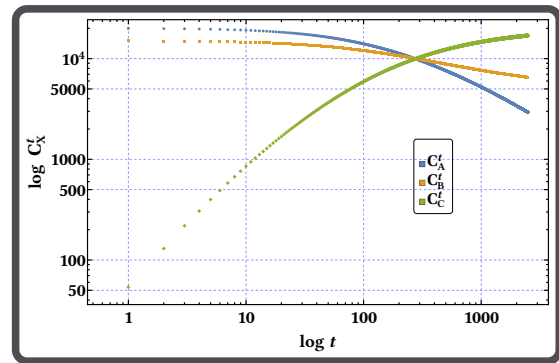
Lo anterior demuestra que las exigencias estequiométricas de esta reacción requieren un medio en el que las partículas no tengan tantas dificultades de movimiento, como en los medios con  $\xi = 0.09$ , ni tampoco tanta libertad para moverse como sucede en los casos con  $\xi = 22.59$ , pues en el primer caso el medio es muy tortuoso, lo que provocará que al

principio de la reacción la probabilidad de que 2 partículas de A se encuentren con una de B sea alta, pero a medida que el tiempo transcurra, las partículas restantes se encontrarán distantes unas de las otras, lo que disminuye la probabilidad de encuentros efectivos para la reacción. En el segundo caso, los inicios de la reacción serán similares al primero, pero a medida que el tiempo transcurra las especies se encontrarán distantes unas de las otras, pero por las mejores propiedades de transporte del medio, la probabilidad de que se produzcan encuentros efectivos es mayor que en el primer caso, sólo habrá que esperar un cierto tiempo para que se produzcan los encuentros exigidos por la estequiometría de la reacción.

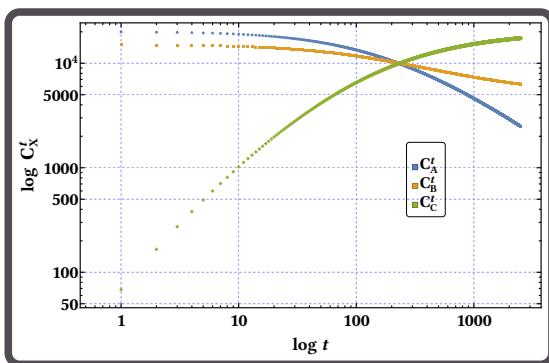
Así, nuevamente hemos constatado que debido a la cantidad de especies involucradas en la reacción y a la estequiometría de la misma, la cinética deja de estar controlada únicamente por las restricciones geométricas del medio contenidas en  $d_s$ , lo que añade escalas adicionales que rompen la invarianza de escala simple que postula la aproximación fractal de Kopelman.



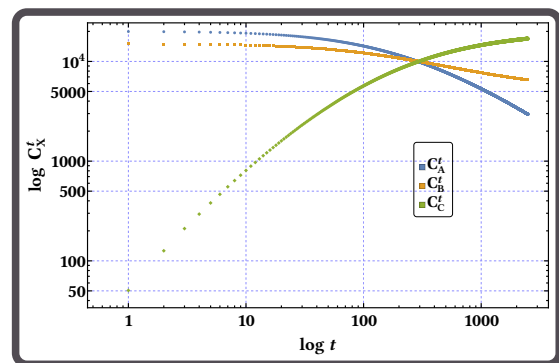
(a)  $\xi = 0.09$



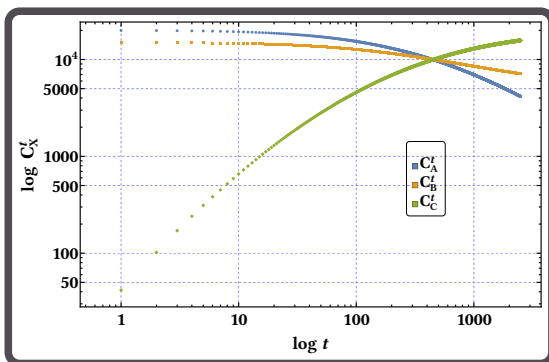
(b)  $\xi = 3.32$



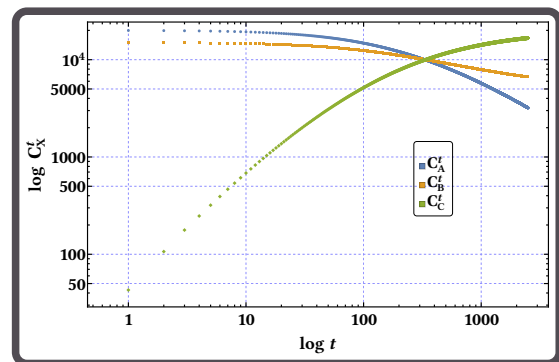
(c)  $\xi = 10.08$



(d)  $\xi = 14.03$

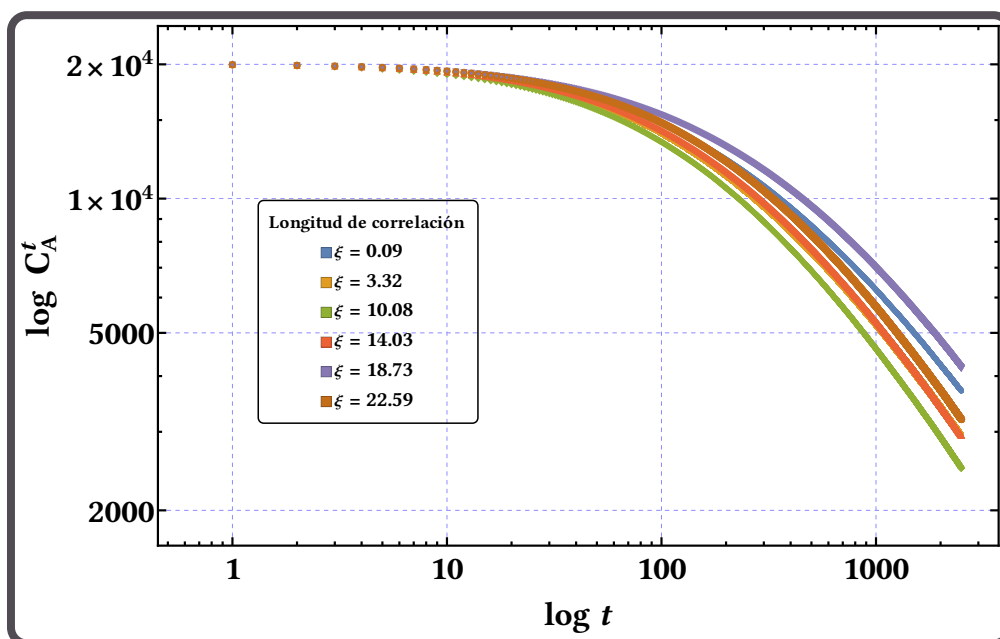


(e)  $\xi = 18.73$

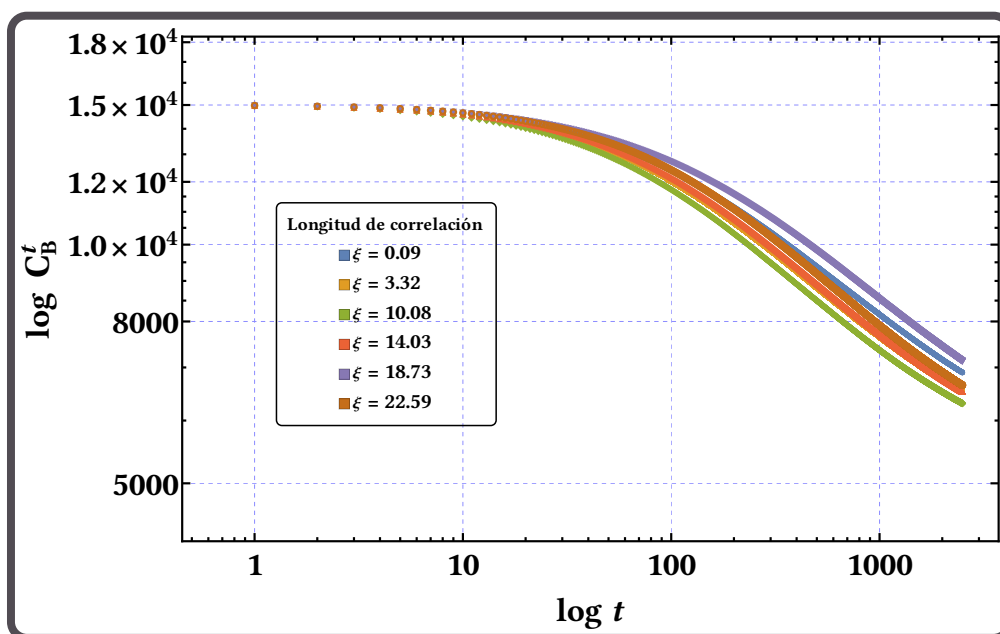


(f)  $\xi = 22.59$

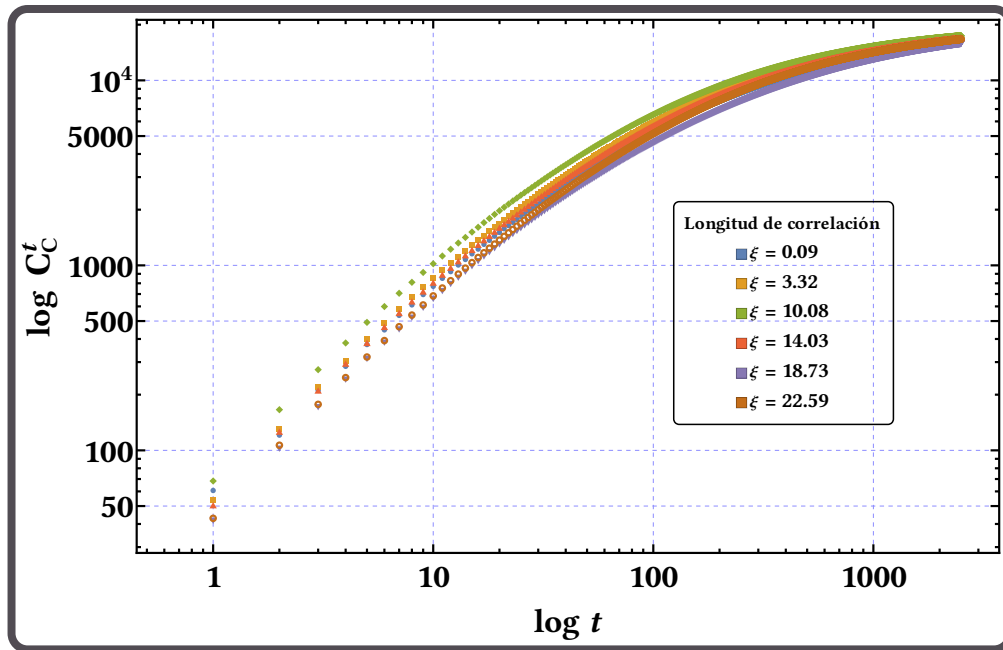
**Figura 3.4.** Cinética de la reacción de tercer orden sobre los cúmulos de percolación en escala log-log. La simulación se lleva a cabo con  $C_A^0 = 20000$ ,  $C_B^0 = 15000$  y  $C_C^0 = 0$  distribuidas aleatoriamente, las cuales se mueven de acuerdo al modelo del caminante aleatorio clásico hasta un total de 2500 pasos de Montecarlo. En todos los casos los inicios de la reacción provocan una tasa constante de producción de la especie C, pero a medida que la reacción avanza, la especie A comienza a disminuir de forma monótona en su tasa de reacción, provocando un efecto similar en las tasas de reacción y producción de las especies B y C, respectivamente.



**Figura 3.5.** Evolución temporal de la especie A en la reacción  $2A + B \rightarrow 2C$  para distintos valores de  $\xi$ . En todos los casos la población de A disminuye de forma monótona hasta el término de la reacción. El caso  $\xi = 10.08$  es el que más favorece esta reacción y en el caso  $\xi = 18.73$  se logra la menor interacción entre los reactivos.



**Figura 3.6.** Evolución temporal de la especie B en la reacción  $2A + B \rightarrow 2C$  para distintos valores de  $\xi$ . Los cambios de concavidad reflejan la transición entre regímenes cinéticos, debidos a la disminución progresiva de la especie A y a la separación entre las especies reactivas.

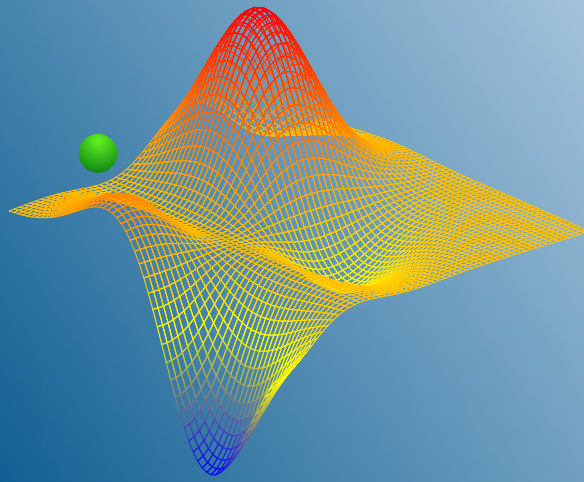


**Figura 3.7.** Evolución temporal de la especie C en la reacción  $2A + B \rightarrow 2C$  para distintos valores de  $\xi$ . Al principio los encuentros efectivos entre A y B mantienen una tasa de producción de C constante, pero a medida que la especie A se agota progresivamente, dicha tasa de producción también disminuye.

## **Parte III**

# **ALCANCES DEL TRABAJO Y CONCLUSIONES GENERALES**





## TRABAJO A FUTURO Y CONCLUSIONES



*Isaac Asimov*

*El aspecto más triste de la vida es que la ciencia reúne el conocimiento más rápidamente que la sociedad la sabiduría.*

**RESUMEN:** Se propone la creación y caracterización de redes triangulares y hexagonales como una línea de investigación a futuro para analizar procesos dinámicos que se adapten mejor a esas geometrías, como pueden ser algunas reacciones químicas o procesos de liberación controlada de fármacos, por ejemplo. Además, herramientas matemáticas como las ecuaciones diferenciales con retardo temporal o el cálculo de orden no entero se encuentran en la literatura actual como las mejores opciones para modelar dichos procesos, entre otras razones por su carácter no local. Finalmente, en las conclusiones se resalta la manera en que la correlación espacial de las redes cuadradas isotrópicas de conectividad 4, a partir de las cuales se obtuvieron los cúmulos de percolación correlacionados, afecta las propiedades fractales y de transporte de estos últimos: a mayor correlación espacial del medio la dimensión fractal aumenta y la lagunaridad disminuye, al mismo tiempo que el transporte de materia se vuelve más eficiente.

- 1 Realizar simulaciones encaminadas a establecer modelos cinéticos, como el de Kopelman, en los que se tomen en cuenta los efectos de la estequiometría y la concentración de reactivos para superar las limitaciones de invarianza de escala simple que incorporó en su aproximación fractal.
- 2 Aplicar técnicas de Montecarlo cinético para abordar los efectos de la temperatura y propiedades fisicoquímicas del medio que impactan directamente a las reacciones para lograr simulaciones más realistas.
- 3 Construcción y caracterización redes cuadradas isotrópicas con correlación espacial de conectividades 3 y 6 para el estudio de procesos dinámicos que se adapten mejor a este tipo de geometrías.
- 4 Explorar las propiedades fractales del perímetro interno de los cúmulos infinitos de percolación obtenidos a partir de redes isotrópicas de conectividad  $z \in \{3, 4, 6\}$ .
- 5 Siendo los soportes poliméricos estructuras fractales en los que se incorporan principios activos para liberación controlada, los cúmulos de percolación con correlación espacial, como los considerados aquí, se vuelven un modelo adecuado para utilizarlos como una aproximación a tales soportes en dicho proceso dinámico.
- 6 Simular reacciones enzimáticas sobre los cúmulos de percolación correlacionados y utilizar herramientas como las ecuaciones diferenciales con retardo temporal y el cálculo de orden no entero, las cuales se han mostrado útiles para abordar los problemas de mezclado, y así establecer modelos matemáticos que describan mejor la evolución temporal de dichos procesos.
- 7 Extrapolar este estudio a redes en tres dimensiones.

Con el MDSE se lograron construir redes isotrópicas cuadradas de  $1000 \times 1000$  sitios, de conectividad cuatro y diferentes grados de correlación espacial, las cuales se caracterizaron por su longitud de correlación  $\xi$ . El máximo valor de  $\xi$  logrado con el MDSE fue de 22.59 unidades de red (Figura 2.3). A partir de estas redes se obtuvieron cúmulos infinitos de percolación clásica los cuales presentaron topologías diferentes conforme la longitud de la red aumenta (Figura 2.5). La longitud de correlación provocó un abatimiento de los umbrales de percolación (Figura 2.4). Los cúmulos infinitos, junto con sus huecos interiores, representaron los conjuntos fractales, que se caracterizaron por sus propiedades estáticas y dinámicas. Estos sirvieron como un modelo de medio poroso en donde se llevaron a cabo procesos dinámicos como reacciones químicas de orden dos y tres. Tanto propiedades estáticas como dinámicas presentaron solo pequeñas variaciones cuando  $0.09 \leq \xi \leq 0.93$ , mientras que las variaciones más significativas se dieron siempre que  $\xi > 0.93$ .

Las propiedades estáticas como la dimensión fractal ( $d_f$ ) y la lagunaridad ( $L$ ), fueron medidas analizando regiones irregulares del conjunto fractal (regiones continuas del conjunto con un total de  $s$  elementos) y no de la forma tradicional como se hace con los métodos “conteo de cuadros” (box counting) y “ventana deslizante” (gliding box) en los que se analizan los elementos del conjunto fractal dentro de regiones cuadradas. De la relación  $R_{g,s} \sim s^{1/d_f}$  se determinó la dimensión fractal, donde  $R_{g,s}$  es el radio de giro de una región del conjunto fractal en la que hay  $s$  elementos. La dimensión fractal así calculada disminuye cuando  $0.09 \leq \xi \leq 3.32$ , hasta llegar a un valor mínimo de 1.812, mientras que crece monótonamente cuando  $\xi > 3.32$ , alcanzando el valor máximo de 1.973 (Figura 2.7). Las curvas de lagunaridad decrecen de forma monótona a medida que aumenta el tamaño de cubrimiento analizado. Lo anterior permitió establecer que los conjuntos fractales con longitud de correlación espacial y dimensión fractal elevadas son menos lagunares y viceversa; es decir, en conjuntos fractales con longitud de correlación espacial y dimensión fractal elevadas, los tamaños de hueco se distribuyen en intervalos más reducidos, en comparación con los intervalos en los que se distribuyen los tamaños de hueco para conjuntos fractales con longitud de correlación espacial y dimensión fractal bajas (Figura 2.9).

Las propiedades dinámicas como dimensión del caminante ( $d_w$ ) se determinó a partir del desplazamiento cuadrático medio que escala con el tiempo de la forma  $\langle r^2(t) \rangle = t^{2/d_w}$ . Por su parte la dimensión espectral ( $d_s$ ) se determinó por dos vías: 1) a partir de  $S(t) \sim t^{d_s/2}$ , en donde  $S(t)$  es el número de sitios distintos que visita un caminante aleatorio, y

2) a partir de  $d_s = 2 \cdot d_f / d_w$ . En ambos casos se utilizó el modelo del caminante aleatorio clásico como partícula que difunde. La dimensión del caminante disminuyó desde 2.826 a 2.322 a medida que la longitud de correlación del medio aumenta (Figura 2.11). En el caso de la dimensión espectral se encontró que por la vía 1 aumenta desde 1.247 hasta 1.682, a medida que la longitud de correlación del medio aumenta; mientras que por la vía 2 se observó el mismo comportamiento pero esta vez aumentando desde 1.321 hasta 1.699 (Figura 2.13). Tanto la disminución de la dimensión del caminante como el aumento de la dimensión espectral indican que la longitud de correlación afecta directamente las propiedades de transporte del medio: el transporte de materia se vuelve más eficiente a medida que la correlación espacial del medio aumenta. Estos resultados demuestran que  $d_s = 4/3$  de la conjetura de Alexander-Orbach no es válida cuando el medio adopta una clara correlación espacial.

En reacciones químicas de segundo orden del tipo  $A + A \rightarrow 0$  llevadas a cabo en medios fractales, la aproximación fractal propuesta por Kopelman, a la que se le incorporan los valores de  $d_s$  propios del medio, es el modelo que explica mejor la cinética química de dichas reacciones, sobre todo en los casos en los que el medio adopta una clara correlación espacial (Figura 3.1).

Las cinéticas de las reacciones  $A + B \rightarrow 0$  y  $2A + B \rightarrow 2C$  nos permitieron establecer, de forma cuantitativa parcial, que la estequiometría y la diferencia de concentraciones iniciales de los reactivos introducen escalas adicionales que rompen la invarianza de escala simple que postula la aproximación fractal de Kopelman (Figuras 3.3 y 3.6).

## **Parte IV**

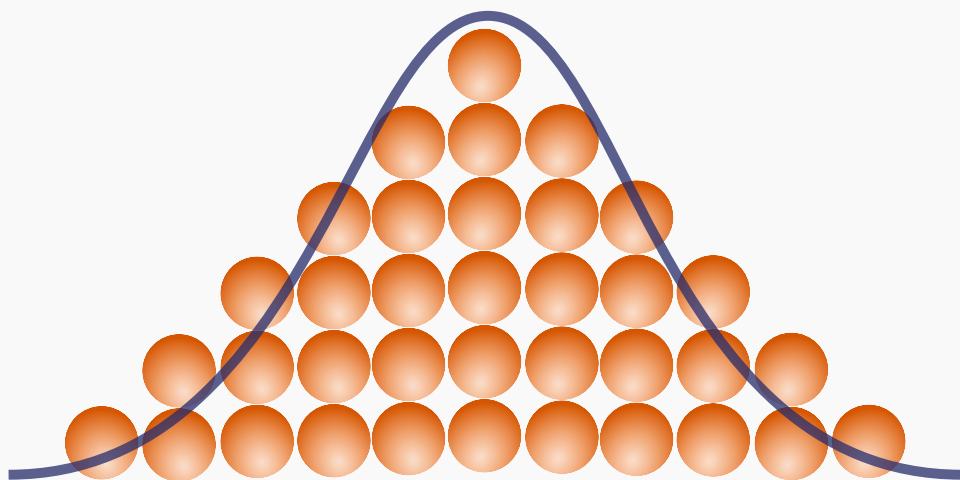
# **APÉNDICES**



# APÉNDICE

## A

### CAMINANTE ALEATORIO Y ECUACIÓN DE DIFUSIÓN: COMPARACIÓN NUMÉRICA



## § A.1

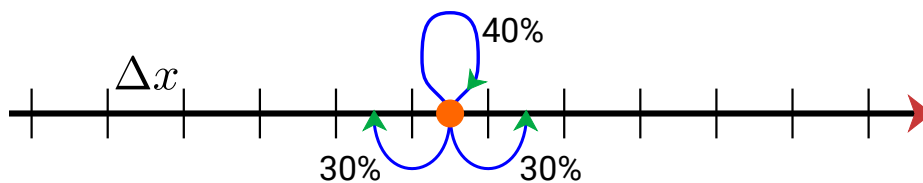
## DEL CAMINANTE ALEATORIO A LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

Ilustraremos esta equivalencia matemática con el modelo más sencillo del caminante aleatorio, que corresponde al modelo en una dimensión [21].

Sobre la recta numérica realizamos divisiones igualmente espaciadas de longitud  $\Delta x$ . Elegimos el origen como punto de partida y en el colocamos una partícula, la cual representa nuestro caminante aleatorio, y cada movimiento que esta realice lo hará en un intervalo de tiempo  $\Delta t$ . Los movimientos de la partícula se llevan a cabo conforme a las siguientes reglas:

- 30 % de probabilidad de moverse a la derecha.
- 30 % de probabilidad de moverse a la izquierda.
- 40 % de probabilidad de quedarse en el mismo lugar.

En la Figura A.1 se muestra una representación gráfica del espacio discreto unidimensional sobre el cual el caminante aleatorio, representado por el círculo en color naranja, se moverá en intervalos de tiempo también discretos.



**Figura A.1.** Espacio discreto unidimensional en el que se puede realizar una caminata aleatoria. Cada vez que el caminante realice un movimiento, que le tomará un tiempo  $\Delta t$ , tendrá un 40 % de probabilidad de quedarse en el mismo sitio y 35 % de probabilidad de moverse a la izquierda o a la derecha. Repeticiones consecutivas de este proceso, y sobre todo a tiempos largos, quedarán descritas por las ecuaciones de la difusión unidimensional.

De este modo podemos definir una función,  $p[n\Delta x, m\Delta t]$  donde  $n$  y  $m$  son enteros, que represente la probabilidad de encontrar a la partícula en el intervalo  $n\Delta x$  al tiempo  $m\Delta t$ . Después del tiempo  $m\Delta t = 0$  la función  $p$  está expresada como:

$$\begin{aligned}
p[n\Delta x, m\Delta t] &= 0.4 p[n\Delta x, (m-1)\Delta t] \\
&+ 0.3 p[(n-1)\Delta x, (m-1)\Delta t] \\
&+ 0.3 p[(n+1)\Delta x, (m-1)\Delta t]
\end{aligned} \tag{A.1}$$

Como se puede observar en la ecuación (A.1), para conocer la probabilidad de encontrar a la partícula en una posición e instante dados es necesario conocer la información del instante anterior. El intervalo  $(n-1)\Delta x$  se ubica a la izquierda de  $n\Delta x$ , y la probabilidad que incluye dicho intervalo en la ecuación (A.1) se multiplica por la probabilidad de que la partícula se mueva a la derecha. Por otro lado, el intervalo  $(n+1)\Delta x$  se ubica a la derecha de  $n\Delta x$ , y la probabilidad que incluye dicho intervalo en la ecuación (A.1) se multiplica por la probabilidad de que la partícula se mueva a la izquierda. El primer término de la ecuación (A.1) se explica de forma similar a los anteriores.

Si al inicio la posición de la partícula se conoce haciendo  $n = 0$ , la solución de la ecuación (A.1) se obtiene por iteraciones partiendo de:

$$p(0, 0) = 1, \quad p(n\Delta x, 0) = 0 \quad \text{para } n \neq 0$$

La conexión con la ecuación de difusión se logra cuando hacemos que  $\Delta x$  y  $\Delta t$  tiendan a cero. Para tal fin se expande  $p[(n \pm 1)\Delta x, (m-1)\Delta t]$  y  $p[n\Delta x, m\Delta t]$  como una serie de Taylor alrededor de  $(x, t)$  considerando  $x = n\Delta x$  y  $t = (m-1)\Delta t$  como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
p[(n \pm 1)\Delta x, (m-1)\Delta t] &= p[n\Delta x, (m-1)\Delta t] \pm \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \\
&\pm \frac{1}{6} \Delta x^3 \frac{\partial^3 p}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^4)
\end{aligned} \tag{A.2}$$

$$p[n\Delta x, m\Delta t] = p[n\Delta x, (m-1)\Delta t] + \Delta t \frac{\partial p}{\partial t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \tag{A.3}$$

De este modo la ecuación (A.1) se transforma en:

$$\begin{aligned}
p(x, t) + \Delta t \frac{\partial p}{\partial t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) &= 0.4 p(x, t) \\
&+ 0.3 \left[ p(x, t) - \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{1}{6} \Delta x^3 \frac{\partial^3 p}{\partial x^3} \right. \\
&\left. + \mathcal{O}(\Delta x^4) \right] + 0.3 \left[ p(x, t) + \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right.
\end{aligned}$$

$$\left. + \frac{1}{6} \Delta x^3 \frac{\partial^3 p}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \right] \quad (\text{A.4})$$

Tras reducir términos semejantes y dividir ambos miembros entre  $\Delta t$  la ecuación anterior se puede expresar como::

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \mathcal{O} \left( \Delta t, \frac{\Delta x^4}{\Delta t} \right) \quad (\text{A.5})$$

donde el coeficiente de difusión,  $D$ , queda definido como

$$D = \frac{3}{10} \cdot \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (\text{A.6})$$

Para que este coeficiente sea finito en el límite cuando  $\Delta x$  y  $\Delta t$  tienden a cero se requiere que  $\Delta t$  tienda a cero a la par con  $\Delta x^2$  (o lo que es lo mismo  $\Delta t \sim \Delta x^2$ ). Por otro lado, si  $\Delta x^2/\Delta t$  se mantiene finito,  $\Delta x^4/\Delta t = (\Delta x^2)(\Delta x^2/\Delta t)$  tiende a cero en el límite. De este modo, la ecuación (A.5) se transforma en:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (\text{A.7})$$

Así, la ecuación para la función de distribución de probabilidad continua  $p(x, t)$  es equivalente a la ecuación de difusión, ecuación (1.3). En otras palabras, los procesos de difusión y el caminante aleatorio (en el límite continuo) comparten la misma expresión matemática. De esta manera, un problema que se aborde y solucione con un modelo puede servir para comprender o predecir el comportamiento del otro.

## A.1.1 COMPARACIÓN NUMÉRICA ENTRE LOS MODELOS

La Tabla A.1 presenta la evolución numérica de la función de probabilidad  $p(n, m)$ , de acuerdo a la ecuación (A.1), con  $\{n \in \mathbb{Z} \mid -5 \leq n \leq 5\}$  y  $\{m \in \mathbb{Z} \mid 0 \leq m \leq 6\}$ . Se observa claramente que cuando  $n = m = 0$  se tiene toda la certeza de encontrar a la partícula en el origen. A medida que el tiempo avanza, la probabilidad se distribuye hacia las posiciones adyacentes conforme a las reglas de movimiento definidas. Se evidencia la simetría característica del proceso difusivo, donde  $p(-n, m) = p(n, m)$ , consecuencia de la igualdad entre las probabilidades de moverse hacia la izquierda o hacia la derecha.

Además, se verifica que la suma de los valores en cada fila es igual a la unidad, por lo que  $p(n, m)$  representa una densidad de probabilidad.

**Tabla A.1. Comportamiento de la función de probabilidad  $p(n, m)$  para algunos instantes de tiempo de acuerdo a la ecuación (A.1). Por simplicidad se considera  $\Delta x = 1$  y  $\Delta t = 1$ .**

$n$	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
$m = 0$						1.000					
$m = 1$					0.300	0.400	0.300				
$m = 2$				0.090	0.240	0.340	0.240	0.090			
$m = 3$			0.027	0.108	0.225	0.280	0.225	0.108	0.027		
$m = 4$		0.008	0.043	0.119	0.206	0.247	0.206	0.119	0.043	0.008	
$m = 5$	0.002	0.016	0.055	0.122	0.192	0.223	0.192	0.122	0.055	0.016	0.002
$m = 6$	0.006	0.024	0.064	0.123	0.180	0.204	0.180	0.123	0.064	0.024	0.006

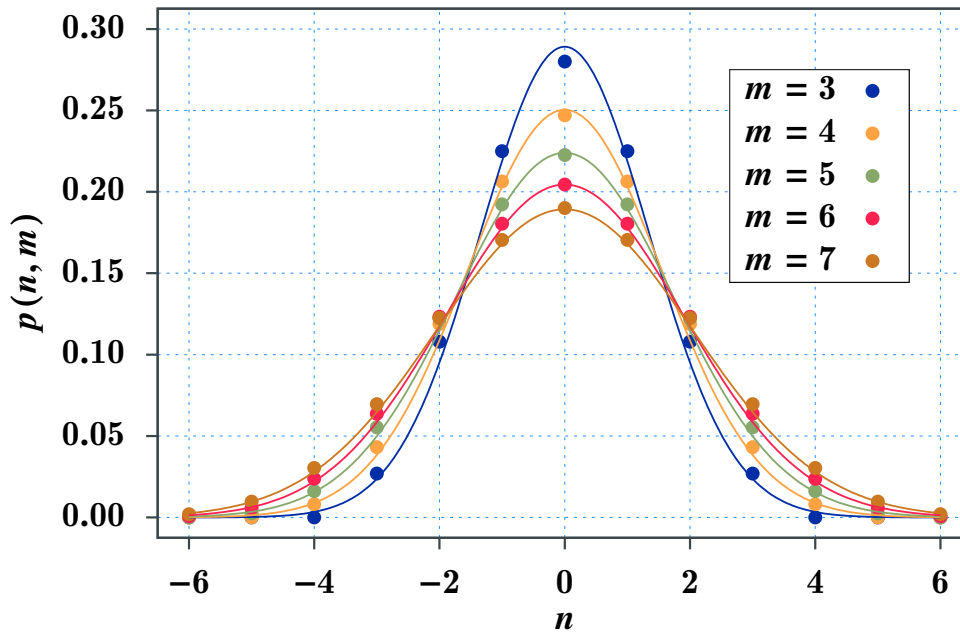
Para comparar con el modelo continuo (ecuación (1.4)) expresamos  $p$  de la forma:

$$p(n, m) = \frac{\omega}{\sqrt{4\pi Dm}} \exp\left(-\frac{n^2}{4 Dm}\right) \quad (\text{A.8})$$

en donde se ha definido  $\Delta x = 1$  y  $\Delta t = 1$ . Para conocer el valor de  $\omega$  se escoge el valor de  $p$  para  $n = 0$  y  $m = 6$  de la Tabla A.1, los cuales se sustituyen en la ecuación (A.8) (con  $D = 0.3$ ), lo que arroja  $\omega \approx 0.972296$ . La proximidad de  $\omega$  a la unidad<sup>(i)</sup> se reflejará en una convergencia casi inmediata del modelo discreto al modelo de difusión continua, tal como se observa en la Figura A.2; por lo que la ecuación de difusión se convierte en una muy buena aproximación para describir el transporte en un sistema discreto y viceversa.

El ancho característico de estas distribuciones está determinado por su desviación estándar,  $\sigma$ , y como sabemos  $\langle n^2 \rangle = 2Dm$ . Dado que para una distribución normal la varianza es  $\sigma^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$ , y considerando que el sistema es simétrico ( $\langle n \rangle = 0$ ), obtenemos  $\sigma = \sqrt{2Dm}$ , lo que indica que  $\sigma$  escala con  $\sqrt{m}$ .

(i) Como  $p(n, m)$  es una función de densidad de probabilidad, el valor de  $A$  debe ser 1 para garantizar normalización.



**Figura A.2.** Comparación de la densidad de probabilidad entre el modelo del caminante aleatorio discreto (puntos) y la forma analítica de la ecuación de difusión (líneas continuas), ecuaciones (A.1) y (A.8), respectivamente. Se puede observar una convergencia casi inmediata al régimen de difusión continua.

Geoméricamente, el área de una curva tipo campana es aproximadamente su altura ( $A$ ) multiplicada por su ancho ( $\sigma$ ). Para mantener el área constante mientras el ancho crece como  $\sqrt{m}$ , la altura debe disminuir inversamente:

$$A(m) = p(0, m) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dm}} \propto \frac{1}{\sqrt{m}} \tag{A.9}$$

Podemos verificar este comportamiento analizando los datos presentados en la Tabla A.1 y en la Figura A.2. Para  $m = 3$ ,  $p(0, 3) \approx 0.28$ . Así, de acuerdo a la ecuación (A.9)

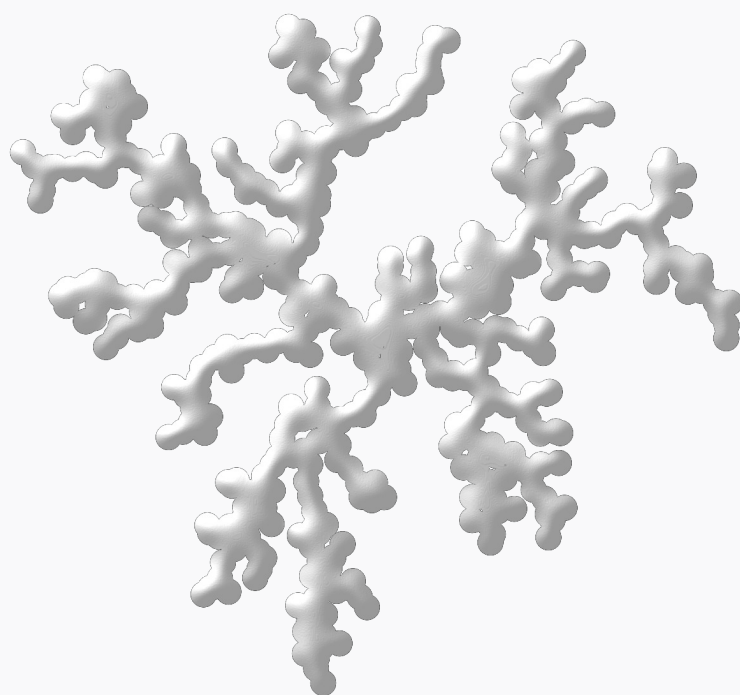
$$\frac{A(5)}{A(3)} = \frac{1/\sqrt{5}}{1/\sqrt{3}} = \sqrt{\frac{3}{5}} \approx 0.845$$

Lo que indica que la altura en  $m = 5$  es un 15% menor a la altura en  $m = 3$ . Así, multiplicando este factor por la altura en  $m = 3$  se obtiene  $A(5) = 0.28 \times 0.845 \approx 0.237$ , valor muy cercano al 0.223 correspondiente a la altura en  $m = 5$  de acuerdo al modelo discreto.

# APÉNDICE B

## DISTRIBUCIONES $\alpha$ -ESTABLES Y PROCESOS DIFUSIVOS

$$S_n/n^{1/\alpha}$$



La familia de distribuciones estables, también conocidas como distribuciones  $\alpha$ -estables de Lévy, se caracterizan no solo por tener segundos momentos infinitos sino por propiedades como la estabilidad, es decir, son distribuciones autosimilares y por tener funciones de densidad con un comportamiento asintótico que obedece a una ley de potencia. Si se realiza la suma de dos o más variables extraídas de esta distribución, la distribución de la suma conservará la misma forma, es decir, será idéntica salvo por un posible desplazamiento y escalado, por algunos factores aún indeterminados. Si la suma de un gran número de variables extraídas de cualquier distribución converge a una distribución con una forma bien definida, debe tratarse de una distribución estable [2, 75].

La mayoría de las distribuciones estables no tienen una FDP explícita en forma cerrada<sup>(i)</sup>, pero sí tienen una función característica (FC) bien definida. La función de densidad de este tipo de funciones puede aproximarse por:

$$f(x) \approx \frac{\gamma}{\pi x^{\alpha+1}} \Gamma(\alpha + 1) \operatorname{sen} \left( \frac{\pi\alpha}{2} \right) \quad (\text{con } \alpha > 0 \text{ para asegurar normalización})$$

lo que nos dice que los procesos estables de Lévy tienen varianza infinita para  $\alpha < 2$ .

Por otro lado, la función de densidad de probabilidad  $\mathbf{S}(x; \alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma})$  de una variable aleatoria  $X$  que sigue una distribución estable se define con su función característica  $\phi(t)$  como:

$$\mathbf{S}(x; \alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t) e^{-ixt} dx$$

Los parámetros  $\alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma}$  son constantes reales que tienen el significado siguiente [75, 90]:

- $\alpha$  es el índice de estabilidad o exponente característico. Toma valores en el intervalo  $(0, 2]$ . Cuando  $\alpha = 2$  obtenemos la distribución normal. Nos da una idea del decaimiento de la función para valores de  $x$  muy grandes.
- $\hat{\beta}$  es el parámetro de asimetría e indica cuan sesgada es la función de densidad. Toma valores en el intervalo  $[-1, 1]$ . Si la función de densidad está sesgada a la

(i) Significa que no existe una fórmula matemática simple y finita que utilice funciones elementales estándar (como polinomios, exponenciales, logaritmos, funciones trigonométricas, etc.) para expresar su densidad.

derecha corresponde al caso  $\hat{\beta} = 1$  y sesgada a la izquierda cuando  $\hat{\beta} = -1$ . La función de densidad es simétrica si  $\hat{\beta} = 0$ .

- $\hat{\sigma}$  es el parámetro de escala y no debe interpretarse como la desviación estándar dado que esta solo existe cuando  $\alpha = 2$ . Sin embargo, a mayor valor de  $\hat{\sigma}$ , más ancha es la función de densidad.
- $\hat{\mu}$  es el parámetro de localización o posición, y solo en el caso de que los primeros momentos de la distribución existan se cumple  $\hat{\mu} = \mathbb{E}(X)$ .

Mathematica (Wolfram Language) versión 14.1 implementa estas distribuciones a través de su función integrada `StableDistribution[tipo,  $\alpha$ ,  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}$ ]`, la cual representa una distribución estadística continua que pertenece a uno de dos tipos y está parametrizada por el número real positivo  $\hat{\sigma}$  y por los números reales  $\hat{\mu}$ ,  $\alpha$  (con  $0 < \alpha \leq 2$ ) y  $\hat{\beta}$  (con  $-1 \leq \hat{\beta} \leq 1$ ). Estos parámetros determinan conjuntamente el comportamiento general de su FDP (para una revisión más detallada de la teoría puede verse [75, 90]).

Existen múltiples parametrizaciones para este tipo de funciones, dependiendo del tipo de problema que se quiere analizar. En específico, la función integrada `StableDistribution` de Mathematica permite dos parametrizaciones diferentes, designadas como Tipo 1 y Tipo 2 [107], y se describen a continuación.

1. **Distribución Estable Tipo 1** (Parametrización Estándar). El Tipo 1 (especificado como `StableDistribution[1, ...]`) es la parametrización estándar, a menudo denominada parametrización (S0) o (Z). Es la utilizada por defecto si se omite el argumento `tipo` en Mathematica. Su función característica  $\phi(t; \alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma})$  es continua en  $\alpha$  y está dada por:

$$\phi(t) = \mathbb{E}[e^{itX}] = \begin{cases} \exp \left\{ -\hat{\sigma}^\alpha |t|^\alpha \left[ 1 - i\hat{\beta} \left( \tan \frac{\pi\alpha}{2} \right) (\text{sign}(t)) \right] + i\hat{\mu}t \right\} & \text{si } \alpha \neq 1 \\ \exp \left\{ -\hat{\sigma}|t| \left[ 1 + i\hat{\beta} \frac{2}{\pi} (\text{sign}(t)) \ln(|t|) \right] + i\hat{\mu}t \right\} & \text{si } \alpha = 1 \end{cases}$$

donde  $\text{sign}(t)$  es la función signo de  $t$ . Esta parametrización es generalmente recomendada para trabajos numéricos y teóricos.

2. **Distribución Estable Tipo 2** (Parametrización Alternativa). El Tipo 2 (especificado como `StableDistribution[0, ...]`) es una parametrización alternativa, a veces referida como (S1) o (M). Se usa particularmente en contextos donde  $\alpha < 1$ . Su función característica es discontinua en  $\alpha = 1$  y está dada por:

$$\phi(t) = \mathbb{E}[e^{itX}]$$

$$= \begin{cases} \exp \left\{ -\hat{\sigma}^\alpha |t|^\alpha \left[ 1 + i\hat{\beta} \left( \tan \frac{\pi\alpha}{2} \right) (\text{sign}(t)) (|\hat{\sigma}t|^{1-\alpha} - 1) \right] + i\hat{\mu}t \right\} & \text{si } \alpha \neq 1 \\ \exp \left\{ -\hat{\sigma}|t| \left[ 1 + i\hat{\beta} \frac{2}{\pi} (\text{sign}(t)) \ln(|\hat{\sigma}t|) \right] + i\hat{\mu}t \right\} & \text{si } \alpha = 1 \end{cases}$$

La elección entre Tipo 1 y Tipo 2 afecta a la forma en que los parámetros  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\mu}$  y  $\hat{\sigma}$  interactúan en la función característica. Para  $\alpha = 2$  (distribución normal), el parámetro  $\hat{\beta}$  no tiene efecto y ambas parametrizaciones resultan en la misma distribución normal.

En general, la FDP de una distribución estable es unimodal, con un único “pico” (es decir, un máximo global). No obstante, su forma global —su altura, su dispersión y la posición horizontal de su máximo— está determinada tanto por su tipo como por los valores de los parámetros  $\alpha$ ,  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\mu}$  y  $\hat{\sigma}$ . Además, las colas de la FDP pueden ser *gruesas* (es decir, la FDP decrece de forma no exponencial cuando  $|x| \rightarrow \infty$ ) o *delgadas* (es decir, la FDP decrece exponencialmente cuando  $|x| \rightarrow \infty$ ), dependiendo de los valores de tipo,  $\alpha$ ,  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\mu}$  y  $\hat{\sigma}$ . (Este comportamiento puede hacerse cuantitativamente preciso mediante el análisis de la *función de supervivencia* de la distribución). Las versiones con cuatro, dos y un parámetro, denotadas como `StableDistribution`[ $\alpha$ ,  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}$ ], `StableDistribution`[ $\alpha$ ,  $\hat{\beta}$ ] y `StableDistribution`[ $\alpha$ ], son equivalentes a `StableDistribution`[1,  $\alpha$ ,  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}$ ], `StableDistribution`[1,  $\alpha$ ,  $\hat{\beta}$ , 0, 1] y `StableDistribution`[1,  $\alpha$ , 0, 0, 1], respectivamente.

La distribución normal y de Lévy son ejemplos de distribuciones estables de Tipo 1, en el sentido de que la FDP de `NormalDistribution`[ $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}$ ] es equivalente a la de `StableDistribution`[1, 2,  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}/\sqrt{2}$ ] (versión abreviada `StableDistribution`[2,  $\hat{\beta}$ ,  $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}/\sqrt{2}$ ]), y la FDP de `LevyDistribution`[ $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}$ ] es precisamente la misma que `StableDistribution`[1, 1/2, 1,  $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}$ ] (versión abreviada `StableDistribution`[1/2, 1,  $\hat{\mu}$ ,  $\hat{\sigma}$ ]).

## B.1.1 TEOREMA DEL LÍMITE CENTRAL CLÁSICO

Comenzaremos enunciando el teorema del límite central clásico como se muestra en el recuadro siguiente:

### Teorema del límite central

Si las variables aleatorias independientes  $X_1, \dots, X_n$  constituyen una muestra aleatoria de tamaño  $n$  con media  $\mu$  y varianza  $\sigma^2$ , y además  $0 < \sigma^2 < \infty$ , el teorema del límite central clásico establece que la media muestral  $\bar{X}_n = (X_1 + \dots + X_n)/n$  satisface

$$\frac{\bar{X}_n - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \xrightarrow{d} Z \sim N(0, 1) \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty$$

lo que puede reescribirse como

$$a_n(X_1 + \dots + X_n) - b_n \xrightarrow{d} Z \sim N(0, 1) \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty$$

donde  $a_n = 1/(\sigma\sqrt{n})$  y  $b_n = \sqrt{n}\mu/\sigma$

La notación  $Y_n \xrightarrow{d} Y$  significa que la sucesión de variables aleatorias  $Y_n$  converge en distribución, es decir, las distribuciones correspondientes satisfacen  $F_n(y) \rightarrow F(y)$  en todos los puntos de continuidad de  $F$ .

Lo que expresa el teorema es que si seleccionamos una muestra aleatoria suficientemente grande de cualquier distribución con media  $\mu$  y varianza  $\sigma^2$ , sin importar si esta es discreta o continua, se cumple que la distribución de la variable  $n^{1/2}(\bar{X}_n - \mu)/\sigma$  se aproxima a una distribución normal. Por tanto, la distribución de  $\bar{X}_n$  es aproximadamente una distribución normal con media  $\mu$  y varianza  $\sigma^2$ , de igual forma, la distribución de la suma  $\sum_{i=1}^n X_i$ , será aproximadamente una distribución normal con media  $n\mu$  y varianza  $n\sigma^2$  [22, 42, 50]. Este teorema constituye una inmensidad de resultados muy organizada y sutil que se originó a partir de un concepto básico sencillo, y que representa un punto de referencia único en la teoría de la probabilidad y la física estadística debido a su amplia aplicabilidad.

Una visión cronológica de los distintos enfoques utilizados para derivar los teoremas del límite y las propiedades de convergencia de las sumas de variables aleatorias pueden verse en [34]. El teorema del límite central y la aparición de distribuciones normales dan lugar a una encrucijada paradigmática entre las matemáticas y la física, pues los matemáticos piensan que es una ley de la naturaleza, mientras que los físicos están convencidos de que es un teorema matemático [49].

## B.1.2 TEOREMA DEL LÍMITE CENTRAL GENERALIZADO

Pero ¿qué sucede si la distribución de las variables aleatorias no tiene media o varianzas finitas como lo exige el TLC clásico? En tales casos, el *teorema del límite central generalizado* (TLCG) nos dice que la distribución límite pertenece a una familia particular de distribuciones conocidas como distribuciones  $\alpha$ -estables (como se discutió en la sección principal) o de Lévy [2], dentro de las cuales la distribución normal o gaussiana es un caso particular. Por otra parte, el ya presentado escalamiento de la forma  $\sqrt{n}$  en el teorema del límite central no se cumple en general, de modo que se sustituye por uno que depende fuertemente de la forma de la cola de la distribución. El teorema dice lo siguiente [75]:

### Teorema del límite central generalizado

Una variable aleatoria no degenerada  $Z$  es  $\alpha$ -estable para algún  $0 < \alpha \leq 2$  si y sólo si existe una sucesión de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas  $X_1, X_2, X_3, \dots$  y constantes  $a_n > 0, b_n \in \mathbb{R}$  con

$$a_n(X_1 + \dots + X_n) - b_n \xrightarrow{d} Z$$

donde  $X_1, X_2, X_3, \dots$  son copias independientes e idénticamente distribuidas de  $X$ .

Para analizar la convergencia de sumas normalizadas es necesario definir el *dominio de atracción* de  $Z$  (distribución estable), el cual consiste en el conjunto de todas las funciones de distribución de probabilidad (de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas) tales que, al sumar un número suficientemente grande de estas variables y aplicarles las constantes de normalización y centrado adecuadas, la suma converge en distribución a esa distribución límite específica.

Ahora, supongamos que  $X$  es una variable aleatoria cuyas probabilidades de cola satisfacen

$$x^\alpha \mathbb{P}(X > x) \rightarrow c_+, \quad x^\alpha \mathbb{P}(X < -x) \rightarrow c_- \quad \text{cuando } x \rightarrow \infty$$

con  $c_+ + c_- > 0$  y  $1 < \alpha < 2$ . Entonces,  $\hat{\mu} = \mathbb{E}[X]$  es finita, y el teorema de la forma explícita del TLCG muestra que el análogo del TLC es:

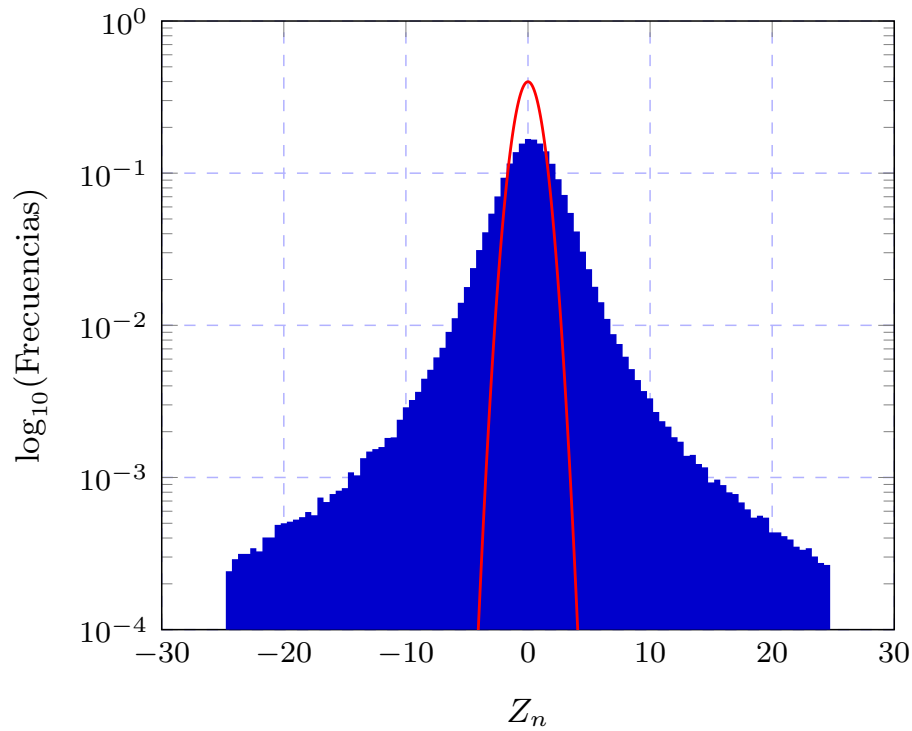
$$a_n(X_1 + \cdots + X_n) - b_n \xrightarrow{d} Z_n \sim \mathbf{S}(1, \alpha, \hat{\beta}, 0, 1) \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty$$

donde

$$a_n = \left( \frac{\pi(c_+ + c_-)}{2\Gamma(\alpha) \sin(\frac{\pi\alpha}{2})} \right)^{-1/\alpha} n^{-1/\alpha}, \quad b_n = na_n\hat{\mu}, \quad \hat{\beta} = \frac{c_+ - c_-}{c_+ + c_-}$$

En este caso, la tasa de decaimiento de las probabilidades de cola de  $X$  determina el índice de estabilidad  $\alpha$ , y los pesos relativos de las colas derecha e izquierda determinan el parámetro de asimetría  $\hat{\beta}$  [75, 90].

Una aproximación a  $Z_n$  se obtiene de la superposición  $Z_n = (X_1 + \dots + X_n)/n^{1/\alpha}$  [90]. Utilizando una distribución de Pareto (distribución  $\alpha$ -estable) con parámetros  $\{k_P, \alpha_P\} = \{1, 1.5\}$  para generar un número grande de trayectorias aleatorias hasta un total de  $n$  pasos, entonces  $Z_n = (X_1 + \dots + X_n)/n^{1/\alpha_P}$ . En la Figura B.1 se muestra el histograma semilogarítmico de las sumas normalizadas de 600 mil trayectorias y un total de  $n = 100$  variables de la distribución de Pareto, con los parámetros mencionados, simuladas en Mathematica. Claramente se observa que la distribución de los datos exhibe colas pesadas tal como es característico de una distribución  $\alpha$ -estable de Lévy. Al comparar con la distribución gaussiana (línea roja) con la misma varianza que los datos truncados se hace evidente que los datos reales tienen muchas más ocurrencias en los extremos, característica no observada en el caso gaussiano.

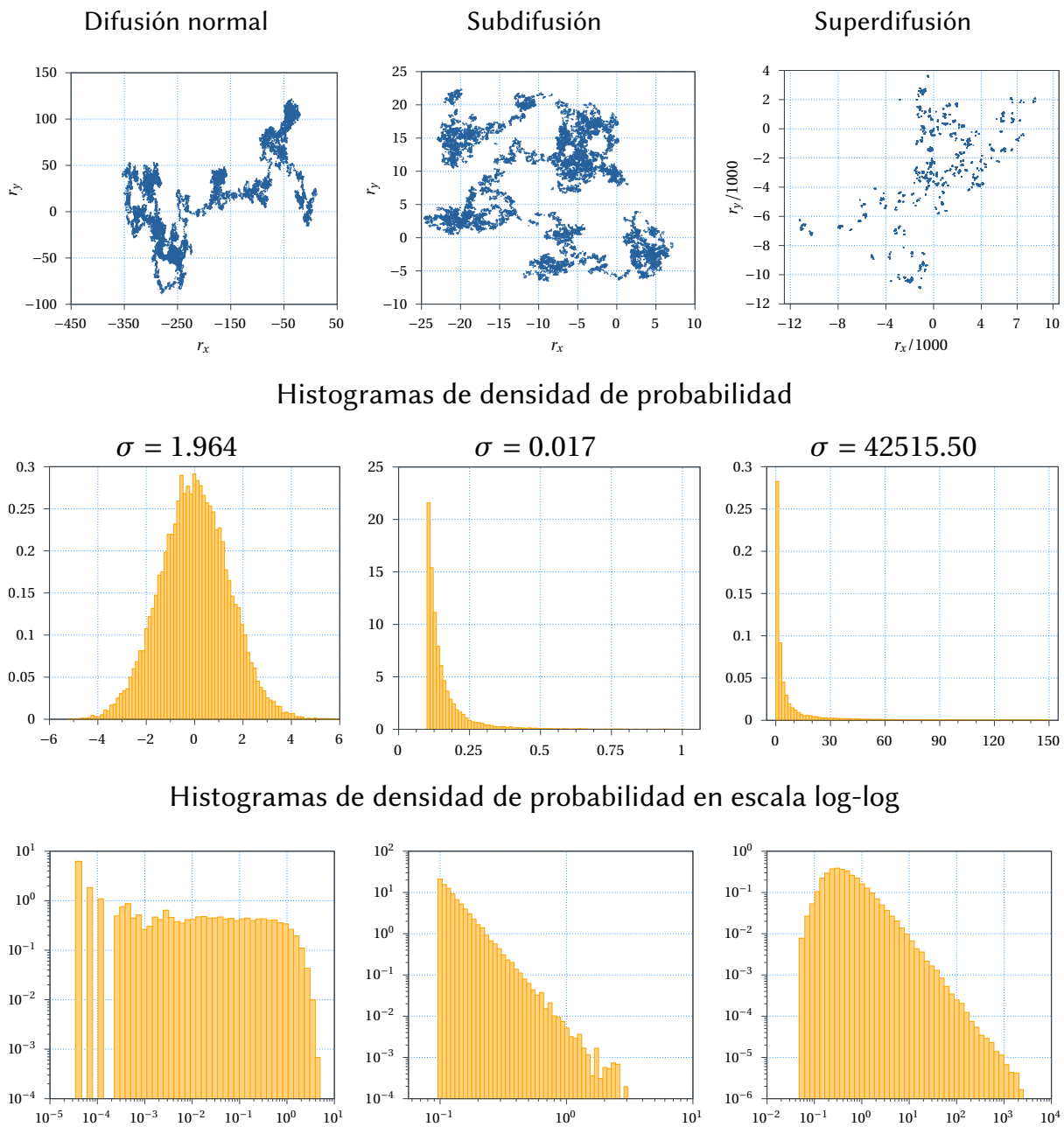


**Figura B.1.** Histograma semilogarítmico de las sumas normalizadas de 600 mil trayectorias y un total de cien variables de la distribución de Pareto con parámetros  $\{k_p, \alpha_p\} = \{1, 1.5\}$ . La distribución exhibe colas pesadas características de una distribución  $\alpha$ -estable de Lévy. La línea roja muestra la forma esperada de una gaussiana con la misma varianza que los datos truncados; se observa claramente que los datos reales tienen muchas más ocurrencias en los extremos, característica no observada en el caso gaussiano.

## § B.2

## APLICACIONES A PROCESOS DIFUSIVOS

En la Figura B.2 se muestran simulaciones para los distintos escenarios de difusión en el plano utilizando la función integrada `StableDistribution` de Mathematica con la que se obtienen los desplazamientos en cada instante de las simulaciones. Cada columna está identificada con el régimen difusivo correspondiente. En el primer renglón se presentan las caminatas aleatorias después de 20 mil pasos; los histogramas de frecuencia de las longitudes de desplazamiento en escala normal y log-log se presentan en los renglones 2 y 3, respectivamente. La difusión normal y la superdifusión se realizaron con probabilidades de longitud de desplazamiento determinadas por la distribución de probabilidad  $\alpha$ -estable con parámetros  $\{\alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma}\} = \{2, 0, 0, 1\}$  y  $\{\alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma}\} = \{0.5, 1, 0, 1\}$  (densidad de Lévy-Smirnov), respectivamente. Para la subdifusión se utilizó la distribución de probabilidad de Pareto con parámetros  $\{t_{min}, \alpha_P\} = \{0.1, 2.6\}$ . La superdifusión se realizó considerando una distribución de tiempos de espera  $\tau$  en la que un valor de la distribución de probabilidad de Pareto menor a 0.3 implicaba una selección aleatoria de  $\tau$  con  $1 \leq \tau \leq 5$ , de otro modo la selección aleatoria de  $\tau$  era para  $6 \leq \tau \leq 10$ , lo que equivale a que de los 20 mil pasos de la simulación en el régimen superdifusivo, aproximadamente en el 30 % de ellos el caminante realizó un desplazamiento, con una mayor frecuencia de tiempos de espera para  $1 \leq \tau \leq 5$ .



**Figura B.2.** Simulaciones de los distintos escenarios de difusión en el plano. En el primer renglón se presentan las caminatas aleatorias después de 20 mil pasos. La difusión normal y la superdifusión se realizaron con probabilidades de longitud de desplazamiento determinadas por la distribución de probabilidad  $\alpha$ -estable con parámetros  $\{\alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma}\} = \{2, 0, 0, 1\}$  y  $\{\alpha, \hat{\beta}, \hat{\mu}, \hat{\sigma}\} = \{0.5, 1, 0, 1\}$ , respectivamente. Para la subdifusión se utilizó la distribución de probabilidad de Pareto con parámetros  $\{t_{min}, \alpha_P\} = \{0.1, 2.6\}$ . La superdifusión se realizó considerando una distribución de tiempos de espera  $\tau \in [0, 10]$  tipo Pareto ajustada de tal manera que de los 20 mil pasos de la simulación, aproximadamente en el 30 % de ellos el caminante realizó un desplazamiento.

# REFERENCIAS

- [1] ALLAIN, C. y CLOITRE, M., «Characterizing the lacunarity of random and deterministic fractal sets». *Phys. Rev. A*, vol. 44(6), págs. 3552–3558. 1991.
- [2] AMIR, A., «An elementary renormalization-group approach to the generalized central limit theorem and extreme value distributions». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2020(1), pág. 013214. Enero 2020.
- [3] DE ANNA, P., LE BORGNE, T., DENTZ, M., BOLSTER, D. y DAVY, P., «Anomalous kinetics in diffusion limited reactions linked to non-Gaussian concentration probability distribution function». *J Chem Phys.*, vol. 17(135), pág. 174104. Noviembre 2011.
- [4] ARGYRAKIS, P., EVANGELOU, S. N. y MAGOUTIS, K., «Density of states, level-statistics and localization of fractons in 2- and 3-dimensional disordered systems». *Z. Phys. B Condens. Matter*, vol. 87(2), págs. 257–264. 1992.
- [5] ARGYRAKIS, P. y KOPELMAN, R., «Fractal to Euclidean crossover and scaling for random walks on percolation clusters. II. Three-dimensional lattices». *J. Chem. Phys.*, vol. 83(6), págs. 3099–3101. 1985.
- [6] BARBOSA, H., BARTHELEMY, M., GHOSHAL, G., JAMES, C. R., LENORMAND, M., LOUAIL, T. ET AL., «Human mobility: Models and applications». *Physics Reports*, vol. 734, págs. 1–74. Marzo 2018.
- [7] BEN-AVRAHAM, D. y HAVLIN, S., *Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems*. Cambridge University Press, Cambridge. 2000.
- [8] BERKOWITZ, B. y EWING, R. P., «Percolation Theory and Network Modeling Applications in Soil Physics». *Surveys in Geophysics*, vol. 19, págs. 23–72. 1998.
- [9] BERKOWITZ, B., SCHER, H. y STEPHEN E., S., «Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media». *Water Resources Research*, vol. 36(1), págs. 149–158. 2000.
- [10] BLUMEN, A., KÖHLER, G. H. y SCHAEFER, D. W., «Reactions in and on Fractal Media [and Discussion]». *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 423(1864), págs. 189–200. Mayo 1989.

- [11] BOFFETTA, G. y SOKOLOV, I. M., «Relative Dispersion in Fully Developed Turbulence: The Richardson's Law and Intermittency Corrections». *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, pág. 094501. **Febrero 2002**.
- [12] BORYS, P., KRASOWSKA, M., GRZYWNA, Z. J., DJAMGOZ, M. B. A. y MYCIELSKA, M. E., «Lacunarity as a novel measure of cancer cells behavior». *Biosystems*, vol. 94(3), págs. 276–281. **2008**.
- [13] BUNDE, A., HEITJANS, P., INDRIS, S., KANTELHARDT, J. W. y ULRICH, M., «Anomalous Transport and Diffusion in Percolation Systems». *Diffusion-fundamentals*, vol. 6, págs. 9.1–9.17. **2007**.
- [14] BURIONI, R. y CASSI, D., «Random walks on graphs: ideas, techniques and results». *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 38, págs. R45–R78. **2005**.
- [15] CASPI, A., GRANER, R. y ELBAUM, M., «Diffusion and directed motion in cellular transport». *Phys. Rev. E*, vol. 66, pág. 011916. **Julio 2002**.
- [16] CECCONI, F., COSTANTINI, G., TALONI, A. y VULPIANI, A., «Probability distribution functions of sub- and superdiffusive systems». *Phys. Rev. Research*, vol. 4(2), pág. 023192. **Junio 2022**.
- [17] CHUNG, W. J. y DEEM, M. W., «Numerical observation of disorder-induced anomalous kinetics in the  $A+A \rightarrow \emptyset$  reaction». *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 265(3), págs. 486–499. **1999**.
- [18] CORDERO, S., KORNHAUSER, I., DOMÍNGUEZ, A., FELIPE, C., ESPARZA, J. M., ROJAS, F. ET AL., «Review: Site-Bond Network Modeling of Disordered Porous Media». *Part. Part. Syst. Charact.*, vol. 21, págs. 101–116. **2004**.
- [19] CRUZ, O., HIDALGO, R., ALAS, S., CORDERO, S., MERAZ, L., LOPEZ, R. ET AL., «Is the Alexander-Orbach Conjecture Suitable for Treating Diffusion in Correlated Percolation Clusters?» *Adsorption Science & Technology*, vol. 29(7), págs. 663–676. **2011**.
- [20] CRUZ VÁZQUEZ, R. O., *Lotka-Volterra en medios tortuosos y mal agitados: Estudio in Silico*. Tesis de maestría (Química), Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México, D. F. **2012**.
- [21] CUSHMAN-ROISIN, B., «Chapter 2. Diffusion Equation. Part 1». Disponible en internet: <https://is.gd/ZRJci0> (consultado el 30 de enero de 2022).
- [22] DEGROOT, M. H. y BERNARDO, J. M., *PROBABILIDAD Y ESTADISTICA*. 2ª edición, Addison-Wesley Iberoamericana. **1988**.

- [23] DILLON, R. y OTHMER, H. G., «A Mathematical Model for Outgrowth and Spatial Patterning of the Vertebrate Limb Bud». *J. Theor. Biol.*, vol. 197(3), págs. 295–330. 1999.
- [24] DOKOUMETZIDIS, A. y MACHERAS, P., «Fractional kinetics in drug absorption and disposition processes». *J Pharmacokinet Pharmacodyn.*, vol. 36(2), págs. 165–178. Abril 2009.
- [25] DOLMETSCH, R. E., XU, K. L. y LEWIS, R. S., «Calcium oscillations increase the efficiency and specificity of gene expression». *Nature*, vol. 392, págs. 933–936. 1998.
- [26] DOMÍNGUEZ, A., BORIES, S. y PRAT, M., «Gas cluster growth by solute diffusion in porous media. Experiments and automaton simulation on pore network». *Int. J. of Multiphase Flow*, vol. 26, págs. 1951–1979. 2000.
- [27] DOMÍNGUEZ, A., PÉREZ-AGUILAR, H., ROJAS, F. y KORNHAUSER, I., «Mixed wettability: a numerical study of the consequences of porous media morphology». *Colloids Surf. A*, págs. 415–424. 2001.
- [28] EINSTEIN, A. y FÜRTH, R., *Investigations on the theory of Brownian movement*. Dover Publications, New York, N. Y. 1956.
- [29] EPSTEIN, I. R. y POJMAN, J. A., *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics: Oscillations, Waves, Patterns, and Chaos*. Oxford University Press. 1998.
- [30] FALCKE, M., «Reading the patterns in living cells: the physics of Ca<sup>2+</sup> signaling». *Adv. Phys.*, vol. 53. 2004.
- [31] FELDMAN, D. P., *Chaos and fractals: an elementary introduction*. Oxford University Press. 2012.
- [32] FELIPE, C., LÓPEZ, R. H., VIDALES, A. M. y DOMÍNGUEZ, A., «2D Automaton Simulation of Bubble Growth by Solute Diffusion in Correlated Porous Media». *Adsorption*, vol. 11, págs. 491–496. 2005.
- [33] FINNIGAN, J., «The science of complex systems». *Australian Science*, págs. 32–34. Junio 2005.
- [34] FISCHER, H., *A History of the Central Limit Theorem: From Classical to Modern Probability Theory*. Sources and Studies in the History of Mathematics and Physical Sciences, Springer New York. 2012.
- [35] FRY, R. L., «Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph». *Proc. R. Soc. Lond. A*, vol. 110, págs. 709–737. Abril 1926.

- [36] FUJIWARA, T. K., IWASAWA, K., KALAY, Z., TSUNOYAMA, T. A., WATANABE, Y., UMEMURA, Y. M. ET AL., «Confined diffusion of transmembrane proteins and lipids induced by the same actin meshwork lining the plasma membrane». *Molecular Biology of the Cell*, vol. 27(7), págs. 1101–1119. 2016.
- [37] GABRIELLI, A. y CECCONI, F., «Diffusion, super-diffusion and coalescence from a single step». *J. Stat. Mech: Theory Exp.*, vol. 2007(10), pág. P10007. Octubre 2007.
- [38] GARFINKEL, A., KIM, Y. H., VOROSHILOVSKY, O., QU, Z. L., KIL, J. R., LEE, M. H. ET AL., «Preventing ventricular fibrillation by flattening cardiac restitution». *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, vol. 97(11), págs. 6061–6066. 2000.
- [39] GEFEN, Y., MEIR, Y., MANDELBROT, B. B. y AHARONY, A., «Geometric Implementation of Hypercubic Lattices with Noninteger Dimensionality by Use of Low Lacunarity Fractal Lattices». *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50(3), págs. 145–148. Enero 1981.
- [40] GEISEL, T. y THOMAE, S., «Anomalous Diffusion in Intermittent Chaotic Systems». *Phys. Rev. Lett.*, vol. 52, págs. 1936–1939. Mayo 1984.
- [41] GILLESPIE, D. T. y SEITARIDOU, E., *Simple Brownian Diffusion: An Introduction to the Standard Theoretical Models*. Oxford University Press. 2013.
- [42] GNEDENKO, B. V. y KOLMOGOROV, A. N., *Limit Distributions for Sums of Independent Random Variables*. Addison-Wesley Mathematical Series, Addison-Wesley. 1968.
- [43] GOVER, T. A., «Diffusion of gases: A physical chemistry experiment». *J. Chem. Educ.*, vol. 44(7), págs. 409–411. 1967.
- [44] GRZYBOWSKI, B. A., *Chemistry in Motion. Reaction-Diffusion Systems for Micro- and Nanotechnology*. John Wiley & Sons Ltd, UK. 2009.
- [45] HAMMERSLEY, J. M. y HANDSCOMB, D. C., *Monte Carlo Methods*. Methuen's monographs on applied probability and statistics, London: Methuen & Co Ltd. 1964.
- [46] HAVLIN, S. y BEN-AVRAHAM, D., «Diffusion in disordered media». *Advances in Physics*, vol. 36(6), págs. 695–798. 1987.
- [47] HAVLIN, S. y BUNDE, A., «Percolation II». En: BUNDE, A. y HAVLIN, S. (editores), *Fractals and Disordered Systems*, Springer, Berlin, Heidelberg, págs. 115–176. 1996.

- [48] HRABE, J., HRABĚTOVÁ, S. y SEGETH, K., «A Model of Effective Diffusion and Tortuosity in the Extracellular Space of the Brain». *Biophysical Journal*, vol. 87(3), págs. 1606–1617. 2004.
- [49] KAC, M., *Statistical Independence in Probability, Analysis, and Number Theory*. The Carus Mathematical Monographs, Mathematical Association of America. 1959.
- [50] KARDAR, M., *Statistical Physics of Particles*. Cambridge University Press. 2007.
- [51] KHRAMCHENKOV, M. G., «Dispersion and Chemical Reactions in Porous Media». *Fluid Dynamics*, vol. 36(1), págs. 166–168. 2001.
- [52] KIM, J. W., PERFECT, E. y CHOI, H., «Anomalous diffusion in two-dimensional Euclidean and prefractal geometrical models of heterogeneous porous media». *Water Resources Research*, vol. 43, pág. W01405. 2007.
- [53] KLAGES, R., RADONS, G. y SOKOLOV, I. M., *Anomalous Transport: Foundations and Applications*. Wiley. 2008.
- [54] KOCH, D. L. y BRADY, J. F., «Anomalous diffusion in heterogeneous porous media». *The Physics of Fluids*, vol. 31(5), págs. 965–973. Mayo 1988.
- [55] KOPELMAN, R., «Fractal Reaction Kinetics». *Science*, vol. 241, págs. 1620–1626. 1988.
- [56] KRASOWSKA, M., BORYS, P. y GRZYWNA, Z. J., «Lacunarity as a measure of texture». *Acta Physica Polonica B*, vol. 35(4), págs. 1519–1534. 2004.
- [57] KÖPF, M., CORINTH, C., HAFERKAMP, O. y NONNENMACHER, T. F., «Anomalous diffusion of water in biological tissues». *Biophysical Journal*, vol. 70(6), págs. 2950–2958. 1996.
- [58] LEDUC, S., *Théorie Physico-Chimique de la Vie et Générations Spontanées*. A. Poinat (editor). París. 1910.
- [59] LIESEGANG, R. E. *Naturwiss. Wochenschr.*, vol. 11(30), págs. 353–362. 1896.
- [60] LÓPEZ, R. H., *Caracterización de Medios Porosos y Procesos Percolativos y de Transporte*. Tesis de doctorado (Física), Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina. 2004.
- [61] LÓPEZ, R. H., VIDALES, A. M., DOMÍNGUEZ, A. y ZGRABLICH, G., «How does a patchy network affect the structure of invading percolation patterns?» *Colloids Surf. A*, vol. 300, págs. 122–128. 2007.

- [62] LÓPEZ, R. H., VIDALES, A. M. y ZGRABLICH, G., «Correlated site-bond ensembles: statistical equilibrium and finite size effects». *Langmuir*, vol. 16, págs. 3441–3445. 2000.
- [63] LÓPEZ, R. H., VIDALES, A. M. y ZGRABLICH, G., «Fractal properties of correlated invasion percolation patterns». *Physica A*, vol. 327, págs. 76–81. 2003.
- [64] LÓPEZ, R. H., VIDALES, A. M., ZGRABLICH, G., ROJAS, F., KORNHAUSER, I. y CORDERO, S., «Determination of pore size distributions using the Dual Site-Bond Model: experimental evidence». *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, vol. 206(1), págs. 393–400. 2002.
- [65] MADZVAMUSE, A., *A numerical approach to the study of spatial pattern formation*. Tesis de doctorado (Doctor de Filosofía), Universidad de Oxford, Oxford, Reino Unido. 2000.
- [66] MADZVAMUSE, A., MAINI, P., WATHEN, A. y SEKIMURA, T., «A Predictive Model for Color Pattern Formation in the Butterfly Wing of *Papilio dardanus*». *Hiroshima Math. J.*, vol. 32(2), págs. 325–336. 2002.
- [67] MAHAKRISHNAN, S., CHAKRABORTY, S. y VIJAY, A., «Normal and Anomalous Diffusion: An Analytical Study Based on Quantum Collision Dynamics and Boltzmann Transport Theory». *J. Phys. Chem. B*, vol. 120(36), págs. 9608–9620. 2016.
- [68] MAIR, T., WARNKE, C., TSUJI, K. y MÜLLER, S. C., «Control of glycolytic oscillations by temperature». *Biophys. J.*, vol. 88(1), págs. 639–646. 2005.
- [69] MALTHE-SØRENSEN, A., *Percolation Theory Using Python*. Departamento de Física, Universidad de Oslo. 2020.
- [70] MANDELBROT, B. B., *LA GEOMETRÍA FRACTAL DE LA NATURALEZA* (Llosa, J., trad.). 3ª edición, Tusquets, Barcelona. 2009.
- [71] MAYAGOITIA, V., «Fundamentals of the textural characterization of the catalysts». *Catalysis Letters*, vol. 22, págs. 93–105. 1993.
- [72] MAYAGOITIA, V., JAVIER CRUZ, M. y ROJAS, F., «Mechanistic studies of capillary processes in porous media. Part 1.—Probabilistic description of porous media». *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1*, vol. 85, págs. 2071–2078. 1989.
- [73] MAYAGOITIA, V., ROJAS, F., PEREYRA, V. D. y ZGRABLICH, G., «Mechanistic study of surface processes on adsorbents I. Statistical description of adsorption surfaces». *Surface Science*, vol. 221, págs. 394–408. 1989.

- [74] MILOVANOV, A. V., «Topological proof for the Alexander-Orbach conjecture». *Phys. Rev. E*, vol. 56(3), págs. 2437–2446. **Septiembre 1997**.
- [75] NOLAN, J. P., *Univariate Stable Distributions: Models for Heavy Tailed Data*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering, Springer International Publishing. **2020**.
- [76] OLIVEIRA, F., FERREIRA, R., LAPAS, L. y VAINSTEIN, M., «Anomalous Diffusion: A Basic Mechanism for the Evolution of Inhomogeneous Systems». *Front. Phys.*, vol. 7(18). **2019**.
- [77] ORBACH, R. L., «Dynamics on Fractals». En: MEYERS, R. A. (editor), *Encyclopedia of Complexity and Systems Science*, Springer, New York, NY, págs. 2253–2261. **2009**.
- [78] PENG, C.-K., BULDYREV, S. V., GOLDBERGER, A. L., HAVLIN, S., SCIORTINO, F., SIMONS, M. ET AL., «Fractal landscape analysis of DNA walks». *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 191(1), págs. 25–29. **Diciembre 1992**.
- [79] RAMMAL, R., D' AURIAC, J. C. A. y BENOIT, A., «Universality of the spectral dimension of percolation clusters». *Phys. Rev. B*, vol. 30(7), págs. 4087–4089. **1984**.
- [80] RAMMAL, R. y TOULOUSE, G., «Random walks on fractal structures and percolation clusters». *J. Physique*, vol. 44, págs. L13–L22. **1983**.
- [81] ROGOSIN, S. V. y KOROLEVA, A. A. (editores), *Advances in Applied Analysis*. Trends in Mathematics, Springer Basel. **2012**.
- [82] ROMÁN-ALONSO, G., ROJAS-GONZÁLEZ, F., AGUILAR-CORNEJO, M., CORDERO-SÁNCHEZ, S. y CASTRO-GARCÍA, M. A., «In-silico simulation of porous media: Conception and development of a greedy algorithm». *Microporous and Mesoporous Materials*, vol. 137, págs. 18–31. **2011**.
- [83] ROSALES HERRERA, D., *Transiciones de fase percolativas en estrategias de siembra con columnas alternadas*. Tesis de licenciatura (Matemáticas), Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México. **2020**.
- [84] ROTHSCHILD, W. G., *Fractals in Chemistry*. John Wiley & Sons, Inc., New York. **1998**.
- [85] SAGUÉS, F. y EPSTEIN, I. R., «Nonlinear chemical dynamics». *Dalton Trans.*, págs. 1201–1217. **2003**.
- [86] SAHIMI, M., *Applications of Percolation Theory*. London: Taylor & Francis. **1994**.

- [87] SCHIRMACHER, W., PREM, M., SUCK, J.-B. y HEIDEMANN, A., «Anomalous Diffusion of Hydrogen in Amorphous Metals». *Europhysics Letters*, vol. 13(6), pág. 523. **Noviembre 1990.**
- [88] SCHULZKY, C., FRANZ, A. y HOFFMANN, K. H., «Resistance scaling and random walk dimensions for finitely ramified Sierpinski carpets». *SIGSAM Bull.*, vol. 34, págs. 1–8. **2000.**
- [89] SENESI, N. y WILKINSON, K. J. (editores), *Biophysical Chemistry of Fractal Structures and Processes in Environmental Systems*, vol. 11 de *IUPAC Series on Analytical and Physical Chemistry of Environmental Systems*. John Wiley & Sons Ltd. **2008.**
- [90] SHINTANI, M. y UMENO, K., «Super Generalized Central Limit Theorem —Limit Distributions for Sums of Non-identical Random Variables with Power Laws—». *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 87(4), pág. 043003. **Abril 2018.**
- [91] SHLESINGER, M. F., ZASLAVSKY, G. M. y FRISCH, U., *Lévy Flights and Related Topics in Physics*. Lecture Notes in Physics, Springer Berlin Heidelberg. **1995.**
- [92] STAUFFER, D. y AHARONY, A., *Introduction to Percolation Theory*. 2ª edición, Taylor & Francis, London. **1992.**
- [93] STREET, R. A., TSAI, C. C., KAKALIOS, J. y JACKSON, W. B., «Hydrogen diffusion in amorphous silicon». *Philosophical Magazine B*, vol. 56(3), págs. 305–320. **1987.**
- [94] TAO, T., «Structure and Randomness in the Prime Numbers». En: SCHLEICHER, D. y LACKMANN, M. (editores), *An Invitation to Mathematics: From Competitions to Research*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, págs. 1–7. **2011.**
- [95] TORQUATO, S., «Percolation and Clustering». En: *Random Heterogeneous Materials. Interdisciplinary Applied Mathematics*, vol. 16, Springer, New York, NY, págs. 210–233. **2002.**
- [96] TURING, A. M., «The chemical basis of morphogenesis». *Phil. Trans. R. Soc. B*, vol. 237(641), págs. 37–72. **1952.**
- [97] VANEGAS, J. C., P., N. S. L. y GARZON, D. A., «Análisis de la inestabilidad de Turing en modelos biológicos». *Revista DYNA*, vol. 76(158), págs. 123–134. **2009.**
- [98] VIDALES, A. M., LÓPEZ, R. H. y ZGRABLICH, G., «Role of size correlations in fluid displacement in porous solids». *Langmuir*, vol. 15, págs. 5703–5706. **1999.**
- [99] VIDALES, A. M., MIRANDA, E., NAZZARRO, M., MAYAGOITIA, V., ROJAS, F. y ZGRABLICH, G., «Invasion percolation in correlated porous media». *Europhys. Lett.*, vol. 36(4), págs. 259–264. **1996.**

- [100] VODÁK, R., FÜRST, T., ŠÍR, M. y KMEC, J., «The difference between semi-continuum model and Richards' equation for unsaturated porous media flow». *Sci. Rep.*, vol. 12(7650). 2022.
- [101] VOLLMER, J., RONDONI, L., TAYYAB, M., GIBERTI, C. y MEJÍA-MONASTERIO, C., «Displacement autocorrelation functions for strong anomalous diffusion: A scaling form, universal behavior, and corrections to scaling». *Phys. Rev. Res.*, vol. 3, pág. 013067. Enero 2021.
- [102] WANG, Z., LI, W. y RUAN, S., «Traveling Wave Fronts of Reaction-Diffusion Systems with Delay». *J. of Differential Equations*, vol. 222(1), págs. 185–232. 2006.
- [103] WEISS, G. H., *Aspects and Applications of the Random Walk*. International Congress Series, North-Holland. 1994.
- [104] WEISS, G. H. y HAVLIN, S., «Some properties of a random walk on a comb structure». *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 134(2), págs. 474–482. 1986.
- [105] WEISS, G. H. y HAVLIN, S., «Use of comb-like models to mimic anomalous diffusion on fractal structures». *Philosophical Magazine B*, vol. 56(6), págs. 941–947. 1987.
- [106] WEISS, M., ELSNER, M., KARTBERG, F. y NILSSON, T., «Anomalous Subdiffusion Is a Measure for Cytoplasmic Crowding in Living Cells». *Biophysical Journal*, vol. 87(5), págs. 3518–3524. Noviembre 2004.
- [107] WOLFRAM RESEARCH, «StableDistribution, Wolfram Language function». Updated 2016. 2010, URL <https://reference.wolfram.com/language/ref/StableDistribution.html>.
- [108] XUN, Z. y ZIFF, R. M., «Bond percolation on simple cubic lattices with extended neighborhoods». *Phys. Rev. E*, vol. 102, pág. 012102. Julio 2020.
- [109] ZAIKIN, A. N. y ZHABOTINSKY, A. M., «Concentration wave propagation in 2-dimensional liquid-phase self-oscillating system». *Nature*, vol. 225, págs. 535–537. 1970.



# ÍNDICE ALFABÉTICO

## A

- Alan Turing  
  inestabilidades ..... 5
- Alexander y Orbach  
  conjetura de ..... 50
- Aniquilación bimolecular ..... 60  
  simulación Montecarlo ..... 60
- Aniquilación unimolecular  
  reacción de ..... 55  
  simulación Montecarlo ..... 56  
  y aproximación fractal ..... 56
- Autosimilitud ..... 19
- Bacterias  
  y movimientos ciliares ..... 6
- Boris Belousov ..... 5
- simétrica discreta ..... 11  
  y movimiento browniano ..... 12
- Cinética química  
  leyes ..... 4  
  no lineal ..... 5
- Cinética Química Anómala ..... 53
- Citoplasma celular ..... 13
- Coefficiente de correlación  
  y longitud de correlación ..... 30
- Conectividad  $z$  ..... 16  
  y umbral de percolación ..... 16
- Corazón  
  arritmias cardiacas ..... 6  
  fibrilación ..... 6  
  taquicardia ventricular ..... 6  
  control del ritmo cardiaco ..... 6
- Cubrimientos ..... 35
- Célula  
  control de la concentración de iones  
     $\text{Ca}^{2+}$  dentro de ..... 6  
  regulación de la concentración de  
    iones dentro de ..... 6  
  y cicatrización de heridas ..... 6  
  y secreción pancreática ..... 6
- Células confluentes ..... 5
- Cúmulo de percolación  
  y caminante aleatorio ..... 21  
  y correlación ..... 21
- Caminante aleatorio  
  ecuación de difusión ..... 78  
  en una dimensión ..... 76  
  y ecuación de difusión ..... 76  
  comparación numérica ..... 78
- Caminata aleatoria ..... 10  
  propiedades ..... 12

## B

## C

Cúmulos de percolación  
 perímetro interno de ..... 35  
 y autosimilitud ..... 31  
 y el método del virus costero ..... 35

**D**

Desplazamiento cuadrático medio .... 9  
 definición probabilística ..... 10  
 raíz cuadrada del ..... 12  
 varianza del ..... 11

Difusión  
 anómala ..... 9, 13  
 exponente de ..... 21  
 fenómeno transitorio ..... 13  
 coeficiente de ..... 7  
 ecuación de ..... 7  
 fenómeno estadístico emergente .... 8  
 gaussiana ..... 12  
 normal  
 simulación ..... 89  
 y transición de fase ..... 13  
 y colisiones microscópicas ..... 8  
 y densidad molecular ..... 7  
 y dinámica microscópica ..... 8  
 y flujo molecular del soluto ..... 7  
 y reacciones químicas  
 material poroso ..... 8

Dimensión del caminante ..... 21  
 determinación de la ..... 45  
 y flujo de corriente ..... 22  
 y número de sitios de crecimiento . 46  
 y número de sitios distintos que visita  
 el caminante ..... 46

Dimensión espectral ..... 22  
 determinación de la ..... 47  
 y densidad de estados ..... 48

y probabilidad de retorno ..... 22, 48

Dimensión fractal ..... 19  
 determinación de la ..... 37  
 y algoritmo del radar cuadrado .... 38  
 y radio de giro ..... 37

Dimensión fractón .... véase Dimensión  
 espectral

Dinámica caótica ..... 13

Distribuciones  $\alpha$ -estables ..... 14, 82  
 parámetros de las ..... 82  
 y procesos difusivos ..... 89

Distribución  $\alpha$ -estable  
 y espacio de Fourier ..... 14

Distribución de Pareto ..... 87

**F**

Fick  
 primera ley ..... 7  
 segunda ley ..... 8

Fluidos  
 mecánica de ..... 7  
 turbulencia ..... 7

Fractales  
 e invarianza de escala ..... 19  
 irregulares ..... 19  
 regulares ..... 19

Fuerzas  
 de deformación ..... 7  
 debidas al campo gravitacional ..... 7  
 en la superficie ..... 7

**G**

Geometría fractal ..... 18  
 Glicólisis ..... 6

**H**

Husos mitóticos ..... 5

**K**

Kopelman  
 aproximación fractal de ..... 53

**L**

Lagunaridad ..... 22  
 aplicaciones de la ..... 22  
 determinación de la ..... 22, 42  
 e invarianza bajo traslación ..... 42

Lévy  
 vuelo de y RCDCM ..... 14  
 vuelos de ..... 13

Lévy-Khintchin  
 teorema de ..... 14

Lévy-Smirnov  
 densidad de ..... 89

Límite continuo ..... 10

**M**

Materiales  
 amorfos ..... 13  
 magnéticos ..... 13  
 porosos ..... 13

Medio poroso

y correlación espacial ..... 20  
 y direccionalidad ..... 20  
 y modelos de red ..... 20  
 y percolación invasiva ..... 20  
 y red discreta ..... 27

Medios porosos  
 modelos de ..... 26

Migración-reacción  
 sistemas ..... 5

Modelo dual de sitios y enlaces .. 21, 26  
 características del ..... 27  
 primera ley ..... 28  
 segunda ley ..... 28  
 y coeficiente de correlación ..... 30  
 y medio poroso ..... 21  
 y medios porosos ..... 27  
 y sistemas desordenados ..... 21

Moléculas  
 de ATP ..... 6  
 de NADH ..... 6

Movimiento browniano  
 unidimensional ..... 12

Movimientos  
 moleculares ..... 4

**N**

Nanotecnología ..... 5

Navier-Stokes  
 ecuaciones de ..... 7

Newton  
 segunda ley ..... 7

**O**

Organismos  
 extremidades.....6  
 vivos ..... 6

Oscilaciones  
 inducidas por glucosa.....6

**P**

Patrones  
 complejos.....4  
 espaciales.....4  
 espacio-temporales .....6  
 temporales.....4

Percolación ..... 15  
 teoría de la.....15  
 umbral de.....15  
 y cúmulos infinitos de ..... 20  
 y fenómeno crítico.....15  
 y flujo aleatorio ..... 15  
 y flujo determinista.....15  
 y teoría de gráficas ..... 15  
 y teoría de redes.....15  
 y transición de fase ..... 15

Presión  
 hidrostática ..... 7

**R**

Radio de giro ..... 35

Rafael Liesegang  
 anillos de ..... 4

Rammal y Toulouse ..... 50

condición de ..... 50  
 Reacción de tercer orden.....62  
 simulación Montecarlo.....62

Reacción-difusión  
 Patrones espacio-temporales ..... 5  
 sistema ..... 5  
 ejemplos ..... 6

**S**

Sistemas dinámicos  
 teoría de ..... 5

Stéphane Leduc ..... 4  
 experimentos ..... 5

Subdifusión ..... 9  
 simulación ..... 89

Superdifusión ..... 9, 14  
 simulación ..... 89

Superficie heterogénea ..... 31

**T**

Teorema del límite central ..... 9  
 clásico ..... 84  
 generalizado ..... 14, 86  
 hipótesis del ..... 13

**V**

Variable aleatoria  
*n*-ésimo momento de una ..... 10





Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE DISERTACIÓN PÚBLICA

No. 00195

Matrícula: 208180173

CÚMULOS DE PERCOLACIÓN  
CORRELACIONADOS: LA  
IMPORTANCIA DE SUS  
PROPIEDADES FRACTALES Y DE  
TRANSPORTE EN CINÉTICA  
QUÍMICA ANÓMALA MEDIANTE  
SIMULACIONES MONTECARLO.

En la Ciudad de México, se presentaron a las 10:00 horas del día 9 del mes de diciembre del año 2025 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. JOSE LUIS DEL RIO CORREA  
DR. CARLOS FELIPE MENDOZA  
DR. ADRIAN MAURICIO ESCOBAR RUIZ  
DR. DIDIER SAMAYOA OCHOA  
DR. SALOMON CORDERO SANCHEZ



*Rogelio Ommar Cruz Vázquez*

ROGELIO OMMAR CRUZ VAZQUEZ  
ALUMNO

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron a la presentación de la Disertación Pública cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

DOCTOR EN CIENCIAS (QUÍMICA)  
DE: ROGELIO OMMAR CRUZ VAZQUEZ

y de acuerdo con el artículo 78 fracción IV del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

**Aprobar**

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

REVISÓ

*[Signature]*  
MTRA. ROSALÍA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

*Roman Linares Romero*  
DR. ROMAN LINARES ROMERO

PRESIDENTE

*[Signature]*  
DR. JOSE LUIS DEL RIO CORREA

VOCAL

*[Signature]*  
DR. CARLOS FELIPE MENDOZA

VOCAL

*[Signature]*  
DR. ADRIAN MAURICIO ESCOBAR RUIZ

VOCAL

*[Signature]*  
DR. DIDIER SAMAYOA OCHOA

SECRETARIO

*[Signature]*  
DR. SALOMON CORDERO SANCHEZ