

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

**CARACTERIZACIÓN DE CAMINANTES
EN CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CON
LAGUNARIDAD DIVERSA**

Tesis que presenta:
M. en C. David Ricardo Hidalgo Olgún

Para obtener el grado de
Doctor en Ciencias (QUÍMICA)

Asesores: Dr. Armando Domínguez Ortiz
Dr. Salomón de Jesús Alas Guardado

Jurado:

Presidente: Dr. Carlos Felipe Mendoza

Secretario: Dr. Salomón de Jesús Alas Guardado

Vocal: Dr. Damián Hernández Herrán

Vocal: José Elías Pérez López

Vocal: Pedro Pablo González Pérez





CONSTANCIA DE PRESENTACION DE EXAMEN DE GRADO

La Universidad Autónoma Metropolitana extiende la presente CONSTANCIA DE PRESENTACION DE DISERTACIÓN PÚBLICA de DOCTOR EN CIENCIAS (QUIMICA) del alumno DAVID RICARDO HIDALGO OLGUIN, matrícula 202180256, quien cumplió con los 346 créditos correspondientes a las unidades de enseñanza aprendizaje del plan de estudio. Con fecha veinte de octubre del 2017 presentó la DEFENSA de su DISERTACIÓN PÚBLICA cuya denominación es:

CARACTERIZACIÓN DE CAMINANTES EN CUMULOS DE PERCOLACIÓN CON LAGUNARIDAD DIVERSA

Cabe mencionar que la aprobación tiene un valor de 180 créditos y el programa consta de 483 créditos.

El jurado del examen ha tenido a bien otorgarle la calificación de:


APROBAR

JURADO

Presidente


DR. CARLOS FELIPE MENDOZA

Secretario


DR. SALOMON DE JESUS ALAS GUARDADO

Vocal


DR. JOSE ELIAS PEREZ LOPEZ

Vocal


DR. DAMIAN HERNANDEZ HERRAN

AGRADECIMIENTOS ESPECIALES

AL JURADO QUE AMABLEMENTE ACEPTO CONTRIBUIR AL PRESENTE
TRABAJO DE INVESTIGACION:

DR. CARLOS FELIPE MENDOZA

DR. DAMIÁN HERNÁNDEZ HERRÁN

DR. JOSÉ ELIAS PÉREZ LÓPEZ

DR. PEDRO PABLO GONZÁLEZ PÉREZ

A MIS ASESORES TESONEROS QUE CON SU INSISTENCIA COTIDIANA
MANTUVIERON E HICIERON POSIBLE ESTE PROYECTO.

DR. ARMANDO DOMÍNGUEZ ORTIZ

DR. SALOMÓN DE JESÚS ALAS GUARDADO

AGRADECIMIENTOS:

AL ÁREA DE FISICOQUÍMICA DE SUPERFICIES DE LA UAM Y EL DEPARTAMENTO DE QUÍMICA EN DONDE SE REALIZÓ ESTE TRABAJO DE INVESTIGACIÓN.

A LOS PROFESORES DE ESTA UAM, DIGNIFICADORES DE LA EDUCACIÓN Y LA CULTURA PÚBLICA.

A MI PADRE, QUE DÍA A DÍA CON TRABAJO Y ESFUERZO ME HA MOTIVADO.

A MIS BODOQUES QUE SIEMPRE SERÁN LO QUE MEJOR ME HA PASADO.

AL BUEN GREGORIO DÍAZ QUIEN ES UN ANIMAL EN EXTINCIÓN, POR SUS SIEMPRE BUENOS LIBROS ENSALSADOS DE REBELDÍA, PERO SOBRE TODO DE ESPERANZA.

A TODOS LOS CHAVALES POLITECNICOS INQUIETOS Y PROTAGONISTAS DEL PARO DEL IPN EN 2014. DEFINITIVAMENTE SALVARON EL PRESTIGIO Y EMPLEOS DE MUCHOS DE NOSOTROS, TODOS TRABAJADORES ASALARIADOS QUE NO ALCANZAMOS A SER DIGNOS.

AL INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL, SOBRE TODO A LA UPIICSA QUE ME HA PERMITIDO ALCANZAR MUCHOS LOGROS.

...FALTAN FRASES TODAS ELLAS DE GRATITUD

ÍNDICE

	Pag.
RESUMEN	1
INTRODUCCIÓN	3
OBJETIVO GENERAL	6
OBJETIVOS PARTICULARES	6
HIPÓTESIS.....	6
CAPÍTULO I	
ANTECEDENTES	7
1.1 Conocimiento, ciencia y complejidad	9
1.1.1 Fenómenos cotidianos no predecibles.....	11
1.1.2 Descripción del objeto en estudio	12
1.1.3 Medio de evolución.....	12
1.1.4 Modelos de malla o de red	13
1.2 Topología de los sistemas	14
1.2.1 Malla no simétrica.....	14
1.2.2 Gráficos de nodos y líneas	15
1.2.3 Ley de potencia para nodos y líneas	16
1.2.4 Ejemplos físicos de sistemas complejos	18
1.3 Geometría fractal.....	18
1.3.1 Fractales en la naturaleza	20
1.3.2 Dimensión topológica (D_t).....	22
1.3.3 Dimensión de Euclides (d_i)	23
1.3.4 Dimensión de contenido o dimensión de Hausdorff– Besicovitch (d_b).....	23
1.3.5 Rugosidad y textura: Lagunaridad (L)	25
1.4 Modelo de red para polímeros en solución	27
1.5 Percolación y medio fractal.....	29
1.5.1 Medio de percolación y modelos de red	30
1.5.2 Percolación y geometría.....	31
1.5.3 Umbral de percolación (ρ)	32
1.5.4 Exponentes críticos y umbral de percolación	33
1.6 Modelos de difusión de partículas	35
1.6.1 Caminante aleatorio (RW).....	35
1.6.2 Caminante aleatorio (RW) en 1D	36

1.6.3 Caminante auto-evitante (SAW).....	37
1.6.4 Polímeros y el modelo auto-evitante.....	38
1.6.5 Enumeración de pasos de un caminante auto-evitante.....	41
1.6.6 Enumeración de paseos auto-evitantes en 2D.....	43
1.6.7 Conteo de paseos auto-evitantes	44
1.6.8 Desplazamiento cuadrático medio de caminantes auto-evitantes	49
Resumen.....	51
CAPÍTULO II	
CONSTRUCCIÓN DE REDES Y CARACTERIZACIÓN ESTADÍSTICA	53
2.1 Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DSBM).....	55
2.1.1 Distribución de tamaños para sitios y enlaces	56
2.1.2 Principio de construcción auto-consistente.....	57
2.1.3 Leyes de auto-consistencia.....	58
2.2 Redes numéricas utilizando el DSBM	61
2.2.1 Criterio para el estudio de las redes numéricas.....	62
2.2.2 Construcción de redes numéricas mediante el DSBM.....	63
2.3 Simulación de redes numéricas.....	65
2.3.1 Histogramas de frecuencias de sitios en las redes numéricas	65
2.3.2 Resultados	67
2.3.3 Redes numéricas y tratamiento de imagen.....	69
2.4 Propiedades de las redes numéricas	71
2.4.1 Correlación descriptiva	72
2.5 Longitud de correlación (ξ).....	74
2.5.2 Resultados	75
Resumen.....	79
CAPÍTULO III	
CONSTRUCCIÓN DE CÚMULOS DE PERCOLACIÓN Y CARACTERIZACIÓN FRACTAL DE SU GEOMETRÍA.....	81
3.1 Percolación.....	83
3.2 Umbral de percolación (ρ)	83
3.2.1 Resultados	85
3.3 Dimensión fractal (d_f)	91
3.3.1 Resultados	92
3.4 Lagunaridad (L).....	95

3.4.1 Calibración para el cálculo de la lagunaridad (L)	96
3.4.2 Resultados	98
Resumen.....	103
CAPÍTULO IV	
CARACTERIZACIÓN FRACTAL DE PASEOS ALEATORIOS, AUTO-EVITANTES Y SIN REGRESO EN LOS CÚMULOS DE PERCOLACIÓN.....	
4.1 Propiedades emergentes	107
4.2 Caracterización de propiedades de los cúmulos percolantes	108
4.2.1 Dimensión fractal del caminante aleatorio (d_w).....	108
4.2.2 Resultados	110
4.3 Dimensión espectral (d_s).....	116
4.3.1 Resultados	117
4.4 Relación teórica de Flory para el cálculo de (d_{SAW}).....	123
4.4.1 Relación entre SAW's y fractales	124
4.4.2 Resultados de la d_{SAW} utilizando la relación de Flory	126
4.5 Estudio de mapeo del NRRW en cúmulos de percolación.....	130
4.5.1 Resultados	131
Resumen.....	140
CAPÍTULO V	
CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS.....	
5.1 Conclusiones	143
5.2 Estudios del medio intracelular y biomoléculas	147
5.3 Perspectivas.....	149
APÉNDICES Y BIBLIOGRAFÍA	
APÉNDICE A.....	153
Método de Monte Carlo y construcción de redes correlacionadas.	153
Implementación de la matriz numérica o red.....	154
APÉNDICE B	157
Dimensión de Hausdorff - Besicovitch.....	157
APÉNDICE C	160
Algoritmo de Hoshen Kopelman	160
APÉNDICE D.....	162
Dimensión fractal (d_f) método de conteo de cajas	162
APÉNDICE E	166

Lagunaridad L - Método de desplazamiento de cajas	166
APÉNDICE F.....	170
Plegamiento de secuencias HP.....	170
ÍNDICE DE FIGURAS.....	176
ÍNDICE DE TABLAS	183
BIBLIOGRAFÍA	185

NOMENCLATURA

$F(x)$	Función de la variable x
α	Exponente
C	Constante de proporcionalidad
D	Dimensión entera.
d_f	Dimensión fractal
D_t	Dimensión topológica
d_i	Dimensión de inmersión
d_b	Dimensión de Hausdorf-Besicovitch
M	Magnitud o medida
N	Cantidad de escala
ε	Elemento de magnitud
d_m	Dimensión de medida
μ	Valor promedio de las distribuciones
L	Lagunaridad
v_p	Volumen de un monómero
v_s	Volumen de disolvente
Z	Número de coordinación
Ω	Estado lleno de malla
ΔS_m	Entropía de mezclado
ΔG_m	Energía libre de mezclado
ΔH_m	Entalpia de mezclado
T	Temperatura
k	Constante de Boltzman
n	Mol
ϕ	Fracción volumen
ρ	Umbral de percolación
P_∞	Transición de fase
p	Probabilidad
p_c	Probabilidad critica
ξ	Correlación del cúmulo de percolación infinita
β	Exponente crítico
S	Sitios en la percolación

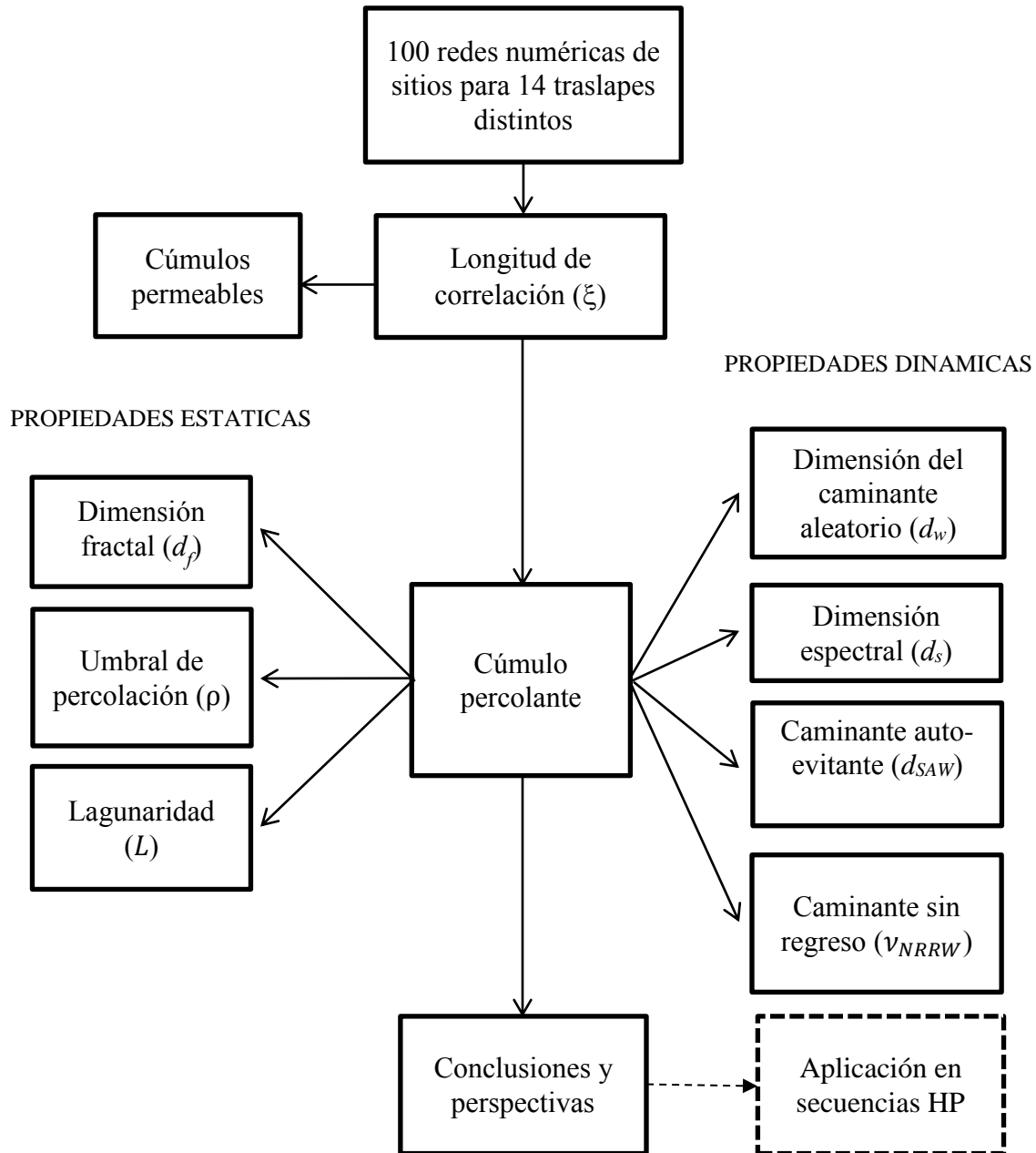
R	Radio o tamaño
r	Distancia
∞	Infinito
RW	Caminata aleatoria
SAW	Paseo auto-evitante
n	Paso, salto
N	Largo de una cadena
R_N	Longitud extremo a extremo
$\langle R_N^2 \rangle$	Distancia cuadrática media.
s_i	i-ésimo paso
n_{RW}	Número de paseos aleatorios
n_{SAW}	Número de paseos auto-evitantes
\mathbf{x} ,	Posición
$\langle r^2 \rangle$	Distancia cuadrática media
$\langle r^2(t) \rangle$	Desplazamiento cuadrático en función del tiempo
t	Tiempo
ν	Exponente
AFM	Microscopia de fuerza atómica
R_g	Radio de giro
a	Parámetro de estructura
R_e	Longitud de una cadena
R_m	Longitud de extremo a cualquier punto en una cadena
R_o	Posición inicial en una cadena
R_i	Posición cualquiera en una cadena
$\mu^{(d)}$	Constante de conectividad
DSBM	Modelo Dual de Sitios y Enlaces
MC	Monte Carlo
F_S	Función de distribución de sitios
F_B	Función de distribución de enlaces
Φ	Correlación
R_S	Radio de sitios
R_B	Radio de enlaces

$S(R_S)$	Distribución normalizada de sitios
$B(R_B)$	Distribución normalizada de enlaces
$\Phi(R_S, R_B)$	Función de correlación sitio enlace
B	Enlaces
S	Sitios
Ω	Traslape entre funciones de distribución sitio enlace
ξ	Longitud de correlación sitio-sitio
\bar{R}_S	Promedio tamaño de sitios
L	Longitud de red
ρ_c	Fracción ocupada por los cúmulos percolantes
R	Constante universal de los gases
P	Presión
V	Volumen
Cov_{xy}	Covarianza entre variables
ζ_{xy}	Correlación entre variables
$S_n^2(x)$	Dispersión de datos
$C(r)$	Función de correlación
C_{SS}	Correlación de sitios
r_{SS}	Distancia entre sitios
R_{S_i}	Radio del sitio i -ésimo
m_i	Masa i -ésima
$\bar{\rho}$	Umbral promedio
D	Coefficiente de difusión
τ	Cte de proporcionalidad
S_N	Sitios visitados
$R_s(r)$	Radio del sitio de r
\bar{R}_S	Radio promedio de sitios
R_{SS}	Distancia sitio-sitio
SD_ξ	Desviación estándar de la longitud de correlación
SD_ρ	Desviación estándar del umbral de percolación
SDd_f	Desviación estándar de la dimensión fractal
$L(r)$	Lagunaridad en función de la distancia r

$u. r.$	Unidades de red
$P(m, r)$	Probabilidad de m pixeles con tamaño r
$\sum_m m P(m, r)$	Primer momento
x, y	Coordenadas
$E^2(S)$	Promedio del número de pixeles ocupados
$var(S)$	Varianza del número de pixeles ocupados
d_w	Dimensión fractal del caminante aleatorio
d_s	Dimensión espectral
d_{SAW}	Dimensión fractal del caminante auto-evitante
m	Pendiente
FL	Flory
EE	Enumeración Exacta
RS	Espacio de Renormalización
RG	Renormalización de Grupos
NRRW	Paseo aleatorio sin regreso
n_{NRRW}	Número de paseos aleatorios sin regreso
ν_{NRRW}	Exponente del NRRW
ν_{RW}	Exponente del RW

CARACTERIZACIÓN DE CAMINANTES EN CÚMULOS DE PERCOLACIÓN CON LAGUNARIDAD DIVERSA

ESQUEMA DEL TRABAJO DISPUESTO EN ESTA TESIS



RESUMEN

En este trabajo de tesis se construyeron redes numéricas correlacionadas mediante el Modelo Dual de Sitios y Enlaces, el cual ha sido ampliamente utilizado en el área de Fisicoquímica de Superficies para estudiar medios porosos. Las redes numéricas con distinta longitud de correlación son manejadas mediante una rutina de percolación de sitios, para obtener el cúmulo infinito. El cúmulo infinito de percolación que luego es caracterizado mediante su dimensión fractal y su lagunaridad. Se observó que la dimensión fractal no es suficiente para caracterizar cúmulos infinitos de percolación construidos sobre sistemas espacialmente correlacionados. Se implementan caminatas aleatorias, se considera el caminante auto-evitante y paseos aleatorios sin regreso. Se contrastan los resultados, se discuten las diferencias observadas y los valores reportados y la posibilidad de su empleo como medios de evolución. Entre los principales resultados se tiene:

1. La longitud de correlación de las redes y la lagunaridad de los cúmulos son características particulares de cada sistema.
2. La conectividad del cúmulo infinito de percolación, construido sobre el medio, es una función de la longitud de correlación de la red casi de manera lineal.
3. Los exponentes de los tres tipos de caminantes son función de la longitud de correlación y difieren entre ellos.
4. El caminante auto-evitante incrementa su desplazamiento a mayor longitud de correlación y su coeficiente extremo a extremo concuerda con la teoría de Flory para cualquier longitud de correlación.

Las redes correlacionadas se construyen con el lenguaje de programación C, utilizando un método de Monte Carlo clásico. La longitud de correlación se mide con una ecuación establecida en trabajos previos. El umbral de percolación se obtiene utilizando el algoritmo de Hoshen-Kopelman, implementado en el software Mathematica 8.0.4, la dimensión fractal y la lagunaridad se obtienen por el método de conteo de cajas y desplazamiento de cajas,

respectivamente, utilizando el software ImageJ versión 1.47i. Por otra parte, para medir las propiedades dinámicas sobre los cúmulos infinitos de percolación, se desarrollaron programas propios en lenguaje C.

Finalmente se concluye de nuestros resultados y medidas que; los cúmulos de percolación construidos sobre las redes correlacionadas pueden ser modelos útiles como medios de evolución heterogéneos y/o no homogéneos. En ellos se puede analizar el comportamiento del ensamblaje de cadenas de polímeros, el fenómeno de plegamiento de proteínas o procesos de difusión, por mencionar algunos. De manera que, la principal aportación de este trabajo consiste en la elaboración de estructuras geométricas conocidas como cúmulos de percolación sobre redes numéricas correlacionadas. Tales modelos han sido caracterizados mediante sus propiedades estáticas: longitud de correlación, umbral de percolación, dimensión fractal y lagunaridad; y propiedades dinámicas como la dimensión espectral (conexidad del medio) empleando la dimensión del caminante aleatorio, la dimensión del caminante auto-evitante y la dimensión del caminante sin regreso.

INTRODUCCIÓN

Muchos problemas relacionados con macromoléculas, como por ejemplo, propiedades de estructura, geometría, aglomeración, torsión, plegamiento y la interacción entre elementos de la cadena, pueden ser estudiados utilizando modelos computacionales y pueden ser catalogados como “problemas de optimización difíciles” en las ciencias físico-químico-biológicas. Esta familia de problemas representa todo aquello para lo que no se garantiza obtener la mejor solución en un tiempo razonable. En el estudio de la estructura de polímeros y biopolímeros de cadenas pequeñas se presenta un gran reto, este reto se magnifica cuando se estudian polímeros de cadena larga, debido a que los arreglos posibles pueden ser bastante numerosos, y en biopolímeros con fragmentos laterales que interactúan, el problema se vuelve colosal porque se pueden conformar una infinidad de posibles estructuras. La búsqueda sobre toda la gama de posibilidades es prácticamente inviable. De aquí que los modelos minimalistas son utilizados para la investigación de tales estructuras [1].

El ambiente, medio o entorno que circunda a las macromoléculas es determinante sobre su estructura, ya que se sabe que juega un papel importante para dirigir y disponer los posibles fenómenos que controlan la geometría de estos sistemas, como interacciones hidrófobas e hidrófilas, puentes de hidrógeno, dipolos inducidos, transferencia de carga, entre otros. La tortuosidad y fractalidad del ambiente físico-químico precisan que para el diseño o modelaje molecular (a nano o micro-escala) es importante estudiar previamente la geometría del ambiente mismo. Los modelos planteados hasta ahora no han considerado explícitamente el medio en donde evolucionan las macromoléculas. **En este trabajo se aborda el diseño y caracterización del medio sin olvidar las características complejas en que se desenvuelven los procesos, sobre todo los biológicos.** Algunas propiedades estáticas y dinámicas en los medios de evolución son caracterizadas.

La complejidad es universal en los sistemas naturales [2], gracias a ella, procesos a priori irrealizables, se tornan factibles [3]. En consecuencia, cuando se modelan procesos ocurriendo en el seno de sistemas naturales, debe considerarse el medio de evolución como un sistema complejo. En esta propuesta se plantea un modelo de red para representar el medio de evolución, en donde ocurren los procesos, de esta manera es posible discretizar el espacio de posibilidades. Se sabe que toda hipótesis sobre el modelo propuesto, introduce aproximaciones o simplificaciones a la situación real. Por lo que es crucial establecer, cuáles son las variables más relevantes del sistema, con la finalidad de evitar complicaciones innecesarias en la descripción del problema. **Una observación importante cuando ocurre un proceso en la naturaleza es que las correlaciones espaciales siempre están presentes en los sistemas reales** [4].

Cuando pensamos en los elementos, por ejemplo de un arreglo numérico rectangular, como *ordenado* o *aleatorio* (en donde no se observa algún patrón de comportamiento), los valores numéricos examinados en cualquier dirección, colocados de manera descendente o ascendente, de izquierda a derecha o de arriba hacia abajo o al azar, reflexionamos en las causas que motivan tal distribución. Indagar en causas y efectos, supone considerar correlaciones espaciales presentes desde las escalas atómicas, microscópicas y macroscópicas. Se observa también que la naturaleza del desorden no es aleatoria para los sistemas, dando origen a sistemas cuasi-ordenados, que presentan la generación de patrones, como las rayas de las cebras, las cordilleras volcánicas o las dunas de arena.

De lo *simple a lo complejo*, los sistemas altamente ordenados como los cristales, son ejemplos indiscutibles de la disposición de átomos y moléculas, en arreglos espaciales *bastante predecibles*. A nivel microscópico la distribución espacial de átomos en una celda unitaria, fijan la estructura cristalina, generando correlaciones espaciales de corto y largo alcance. Una organización muy regular de *máxima simetría*, con átomos igualmente distribuidos en las tres direcciones del espacio forma estructuras isótropas (sistema cúbico). Los sistemas cristalinos distorsionados o *anisótropos* con diferentes arreglos geométricos: hexagonal, trigonal, tetragonal, rómbico, monoclinico, triclinico (mallas tridimensionales), son ejemplos de la pérdida de simetría de un cubo [5]. Los sólidos amorfos como los minerales en el caso extremo, carecen de

organización interna, estos últimos son ejemplos de una distribución espacial irregular que generan estructuras, además de *anisótropas y complejas*, difíciles de caracterizar [6].

Por ello, la dificultad para entender el diseño de la naturaleza, nos remite a una *complejidad de la naturaleza*, con elementos diversos literalmente entrelazados, simultáneamente como causas y efectos. Así los ambientes en que se llevan a cabo la totalidad de los procesos, por ejemplo la difusión de un líquido en una roca porosa, se deben considerar como medios tortuosos y sin agitación, lo que torna más complicado su modelaje, pero al mismo tiempo más interesante. ¿Cómo introducir correlaciones espaciales en un modelo de red que intenta representar un medio tortuoso, mal agitado y no homogéneo? y ¿cómo tal correlación es capaz de afectar fenómenos de difusión o transporte y de acomodo espacial?

Por tales motivos, la introducción de correlaciones espaciales en los modelos de red afectan fuertemente los procesos que se quieren estudiar [7]. Varios modelos han sido usados para introducir correlaciones espaciales. Entre ellos nuestro grupo ha desarrollado el Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DSBM) [8], el cual ha sido ampliamente utilizado para el estudio y análisis de medios porosos y explicar fenómenos de adsorción y de difusión-reacción.

Este escrito se encuentra distribuido de la forma siguiente: el primer capítulo consiste en una introducción de los conceptos que motivan el presente trabajo y la descripción de sistema complejo; modelado mediante redes numéricas. En el segundo capítulo se explica la metodología utilizada para la construcción de las redes numéricas correlacionadas, las cuales pueden ser utilizadas como medios de evolución. En el capítulo tres se determinan las propiedades estáticas de las redes numéricas construidas. Mientras que, en el capítulo cuatro se obtienen propiedades dinámicas temporales, como consecuencia de las propiedades estáticas y que direccionan los procesos de difusión y de transporte [9]. El capítulo cinco se proporciona las conclusiones y se plantean las perspectivas para realizar nuevas investigaciones sobre los sistemas construidos y caracterizados. Finalmente, se presenta la aplicación de estos sistemas en una investigación posterior al presente trabajo, en que se muestra la utilidad de las redes numéricas correlacionadas [10, 11] (Apéndice F).

OBJETIVO GENERAL

Simular sistemas correlacionados en el espacio 2D empleando un método de Monte Carlo clásico, caracterizar las propiedades de cúmulos infinitos de percolación clásica y modelar paseos aleatorios, considerar paseos auto-evitantes y modelar paseos sin regreso en el seno de los cúmulos.

OBJETIVOS PARTICULARES

1. Desarrollar los algoritmos necesarios para construir redes cuadradas correlacionadas en 2D utilizando el DSBM por medio de un método de Monte Carlo clásico.
2. Construir un banco de redes correlacionadas a diferentes traslapes de sitios y enlaces.
3. Medir la longitud de correlación (ξ) para cada una de las redes construidas.
4. Caracterizar y analizar las propiedades estáticas de los cúmulos infinitos de percolación: umbral de percolación (ρ), dimensión fractal (d_f) y lagunaridad (L).
5. Caracterizar y analizar las propiedades dinámicas de paseos sobre los cúmulos infinitos de percolación: dimensión del caminante aleatorio (d_w), dimensión espectral (d_s), dimensión del caminante auto-evitante (d_{SAW}) y dimensión del caminante sin regreso (d_{NRRW}).

HIPÓTESIS

Los cúmulos infinitos de percolación de las redes correlacionadas, construidas a partir del DSBM, presentan propiedades estáticas, propiedades emergentes y pueden ser considerados como medios en que ocurren fenómenos físicos como la difusión de partículas.

CAPÍTULO I

ANTECEDENTES

1.1 Conocimiento, ciencia y complejidad

La palabra complejo viene de *complexo*, que proviene del latín *complexus*, participio del verbo *complecti* (abarcarse, rodear, enlazar completamente). *Complecti* está formado con el prefijo *con-* (junto, completamente) y el verbo *plectere* (enredar, entrelazar, trenzar), frecuentativo de *plicare* (plegar), “complejo es la palabra que se refiere a algo de estructura complicada, bien trenzada y entrelazada”. Desde el punto de vista coloquial o informal, el uso de la palabra complejo se refiere a la integración de vivencias o experiencias individuales en una experiencia de conjunto y totalizadora. El uso de la palabra complejo desde el punto de vista científico, refiere a un sistema compuesto de partes interrelacionadas que exhibe propiedades y comportamientos no evidentes, que funcionan como un todo y las propiedades de todo el sistema no se pueden describir mediante el estudio de un fragmento del sistema.

Desde lo cognitivo, un ente complejo puede ser definido como aquello para lo cual no se tiene una comprensión clara o exacta en términos de los elementos del conocimiento propio o en términos del recorrido intelectual adquirido para configurar mapas mentales cuya finalidad sería la racionalización y entendimiento del objeto complejo. Este ente puede ser un objeto físico o una representación imaginaria de algo, es por ello que para cada área de la ciencia se plantean sistemas de estudio particulares que pueden considerarse como complejos para los que se debe plantear un método de estudio para “abordar lo complejo”¹. La mente humana por su naturaleza multifacética es el mejor ejemplo de sistema complejo.

“El término complejidad no puede más que expresar nuestra turbación, nuestra confusión, nuestra incapacidad para definir de manera simple, para nombrar de manera clara, para poner orden en nuestras ideas, a fin de revelar el orden simple al que obedecen los fenómenos”.

La misión del conocimiento científico debe disipar la aparente complejidad de los fenómenos y no al revés. La complejidad lleva en su seno confusión, incertidumbre, desorden, su definición a

¹ Prólogo de Marcelo Pakman, introducción al pensamiento complejo de Edgar Morin.

priori no puede aportar ninguna claridad, debido a que es complejo aquello que no puede resumirse en una palabra maestra, aquello que no puede distinguirse con una ley, aquello que no puede reducirse a una idea simple, dicho de otro modo, lo complejo no puede resumirse en el término complejidad, enmarcarse en una ley de complejidad, reducirse a la idea abstracta de complejidad, la complejidad es una palabra problema y no una palabra solución.

La necesidad del pensamiento complejo no es facultad de una determinada área del conocimiento [12], campo filosófico o técnico. Tal necesidad no puede más que imponerse progresivamente a lo largo de un camino en el cual aparecen ante todo, los límites, las insuficiencias y las carencias del pensamiento simplificante, es decir, las condiciones en las cuales no podemos eludir el desafío de lo complejo. Es necesario, preguntarse si hay complejidades diferentes y si se puede ligar a ellas en un entramado de complejidades. Será necesario, finalmente, ver si hay un modo de pensar o un método, capaz de estar a la altura del desafío de la complejidad, no se trata de retomar la ambición del pensamiento simple para controlar y dominar lo real. Se trata del ejercicio de un pensamiento capaz de tratar, de dialogar, de negociar con lo real² [13].

En el pensamiento complejo la complejidad no elimina a la simplicidad. La complejidad aparece donde el pensamiento simplificador falla, pero integra en sí misma todo aquello que pone orden, claridad, distinción, precisión en el conocimiento. El pensamiento simplificador desintegra la complejidad de lo real, el pensamiento complejo integra en lo más posible los modos simplificadores de pensar, pero rechaza las consecuencias mutilantes, reduccionistas, unidimensionalizantes y cegadoras de una simplificación que se considera reflejo de aquello que hubiere de real en la realidad.

La **ambición del pensamiento complejo** es rendir cuenta de las articulaciones entre dominios disciplinarios quebrados por el pensamiento, disgregados (uno de los principales aspectos del pensamiento simplificador), que aísla lo que separa, y oculta todo lo que religa, interactúa o interfiere. En este sentido el pensamiento complejo debe aspirar al conocimiento multidimensional, pero sabe desde el comienzo que el conocimiento completo es imposible: uno

² Edgar Morin, introducción al pensamiento complejo.

de los axiomas de la complejidad es la imposibilidad, incluso teórica de una omnisciencia. Implica el reconocimiento de un principio de incompletud³ y de incertidumbre, aquí habría que citar a Gödel para inducir una analogía y reconocer que ninguna teoría formal es capaz de describir todas las cosas reales [14], pero implica también por principio, el reconocimiento de los lazos entre las entidades que nuestro pensamiento debe necesariamente distinguir, pero no aislar entre sí. Pascal había planteado correctamente que todas las cosas son «causadas y causantes, ayudadas y ayudantes, mediatas e inmediatas y que todas subsisten por un lazo natural e insensible que liga a las más alejadas y a las más diferentes»⁴.

El pensamiento complejo está animado por una tensión permanente entre; la aspiración a un saber no parcelado, no dividido, no reduccionista y el reconocimiento de lo inacabado e incompleto de todo conocimiento.

1.1.1 Fenómenos cotidianos no predecibles

Como consecuencia inmediata de la reflexión de complejidad, muchos fenómenos naturales no son fáciles de predecir: la predicción del clima en meteorología; el fenómeno de la turbulencia en mecánica de fluidos, bastante irregular comparado con el flujo laminar de un fluido; el movimiento de las placas tectónicas; la caída repentina de la bolsa de valores que parece ser un fenómeno al azar o el crecimiento poblacional; son eventos que pueden considerarse complejos.

Para ejemplo práctico: en ecología es importante saber cómo evolucionan durante el transcurso del tiempo las poblaciones, una población de insectos crece de manera exponencial si no existen depredadores y si el alimento es suficiente, en poco tiempo el planeta no tendría capacidad para su habitad⁵, este tipo de comportamiento sin factores que lo restrinjan se tornaría caótico⁶ [15, 16, 17] (del griego $\chi\alpha\omicron\varsigma$, khaos), desordenado o confuso de manera absoluta [18]. En un sistema real (natural), un comportamiento de este tipo no ocurre y se puede plantear un modelo

³ Del prefijo en latín *in-* *negación* de un sistema lógico semánticamente incompleto en donde al menos una de las fórmulas lo inválida.

⁴ *Ibid*, nota 2.

⁵ http://bibliotecadigital.ilce.edu.mx/sites/ciencia/volumen3/ciencia3/150/htm/sec_10.htm.

⁶ Relativo al desorden o al estado antes de la ordenación del cosmos, la palabra “caos” proviene del griego y de origen designa un abismo oscuro, en la cosmogonía y la filosofía griega significa masa de materia sin forma.

matemático que describa de manera correcta la variación real de la población; la falta de alimento hace que la población de insectos en un momento dado disminuya; la población crece hasta cierto punto y más allá de éste se reduce por factores adicionales como la acción de depredadores, la vida media de la especie o el efecto del clima.

1.1.2 Descripción del objeto en estudio

Podemos utilizar una definición de sistema complejo que se adapte a nuestras necesidades como: *Una entidad cuyo comportamiento global es más que la suma de las propiedades de sus partes, adicionalmente limitamos esas partes a un conjunto de elementos dispuestos en una red de muchos componentes agregados en varias escalas y patrones cuyas propiedades no se pueden entender en una descripción simplificada*⁷.

De manera particular nos interesa modelar un medio en el cual se puedan llevar a cabo fenómenos como los ya planteados, deben ser complejos y por supuesto nuevos a nuestro conocimiento, pero que tengan analogía y de ser posible representen parte de la realidad que ocurre en nuestro universo de tal manera que podemos definir un medio como a continuación.

1.1.3 Medio de evolución

Un medio de evolución se puede definir como *“Un espacio en el cual se cuenta con todas las condiciones para llevar a cabo un proceso y puede tener alguna característica física particular y encontrarse en estado sólido, líquido, gaseoso o un semifluido”*.

Conceptualmente para los diferentes estados de la materia: un sólido está considerado como aquel estado de la materia en el que las moléculas que lo forman solo son capaces de efectuar movimientos vibratoriales en torno a una posición fija promedio. En el estado líquido, las moléculas son capaces de migrar libremente o de difundirse en cualquier dirección y solamente se ven limitadas por la frontera del recipiente que los contiene. Para el estado *gaseoso*, las moléculas se encuentran lo suficientemente separadas de tal forma que las interacciones entre

ellas son prácticamente nulas. En consecuencia los efectos de una fuerza o perturbación externa sobre las moléculas o átomos que componen a un sólido puede desplazarlas fuera de sus posiciones de equilibrio, sin embargo cuando la fuerza desaparece las moléculas vuelven a sus posiciones originales, por el contrario en los estados líquido y gaseoso, una vez que desaparece la fuerza externa, las moléculas no regresan a su posición inicial se puede decir entonces que el sistema ha sido favorecido entrópicamente. Los sólidos regulares tienen representaciones tridimensionales y arreglos moleculares altamente ordenados y relativamente simples con distancias y ángulos de enlace entre sus átomos predecibles, por tanto, esta descripción es con la que se puede entender el significado de red.

El estado semifluido considerado como materia blanda, intermedio entre líquido y sólido merece una precisión adicional: *semifluido*, del latín *semi*-casi y *fluidus* tiene un sufijo *idus*-cualidad perceptible a los sentidos sobre el verbo *fluere*-deslizarse, fluir, nos hace pensar en materia en la que se observa un cuasi-movimiento como una gelatina semi-sólida a temperatura ambiente, como ejemplo están considerados los coloides y el ambiente intracelular [19, 20, 21].

1.1.4 Modelos de malla o de red

Tradicionalmente una malla es una estructura formada por filamentos entrecruzados, delgados y flexibles, ocurre de manera similar en una red, los entrecruzamientos de los filamentos representan nodos, los filamentos unen los nodos, representan conexiones, los filamentos que llegan a un nodo pueden variar en número, una red no necesariamente presenta simetría como pasa con la malla [22, 23]. En una representación matemática, una red bidimensional (2D) o tridimensional (3D), contiene entradas que están ocupadas por valores numéricos, que pueden representar una magnitud física, por ejemplo, la longitud, el perímetro o el tamaño de los elementos de red. La red se considera una sucesión alternada de elementos, donde los máximos locales representan a los nodos, de tal manera que no está limitada a poseer un determinado estado de la materia, por ejemplo, un polímero en solución o un gel se puede clasificar como *materia blanda débilmente condensada* o un estado semifluido. Los mejores ejemplos de estados

⁷ Walter Ritter Ortíz y Tahimi E. Perez Espino, Centro de Ciencias de la Atmósfera. UNAM.

semifluidos son los geles, las estructuras de polímeros en solución y los sistemas biológicos, por ejemplo, el cito-esqueleto, el citoplasma, la membrana celular o las proteínas.

1.2 Topología de los sistemas

Para el estudio de las formas en razón de las posiciones de los componentes de un sistema, sin considerar su tamaño, se pueden emplear desde sólidos cristalinos que poseen características topológicas simples o bien, según la teoría de grafos⁸, una representación gráfica (o grafo) de los elementos constituyentes de un sistema o conjunto, en esta teoría los esquemas constan de dos elementos, 1) un conjunto de vértices o nodos y 2) otro de aristas o líneas. Como es bien sabido la topología de los cristales consta de mallas tridimensionales altamente regulares de simetría casi perfecta [5].

1.2.1 Malla no simétrica

En contraparte, una malla carente de simetría regular se considera compleja, no tiene las características de un sólido cristalino⁹ excepto las líneas y nodos que lo componen, y no se puede describir mediante elementos de geometría tradicional como triángulos, cuadros, círculos, esferas o cilindros [24]. Se parece más a una gráfica similar a la generada por las redes: tecnológicas de comunicación (Figura 1.1a), redes; sociales, de transporte, neurológicas (Figura 1.1b) o epidemiológicas, por mencionar algunas; en todas ellas se considera un alto grado de distribución o número de conexiones asociadas a un nodo y un alto coeficiente de agrupamiento; como estructura jerarquizada y dinámica [9].

⁸ En la literatura científica actual, sobre todo en español, se utiliza la frase *teoría de grafos*, sin embargo es común encontrarse la frase *teoría de gráficas*.

⁹ En un sólido cristalino los átomos representan los nodos y los enlaces químicos entre átomos las aristas o líneas.

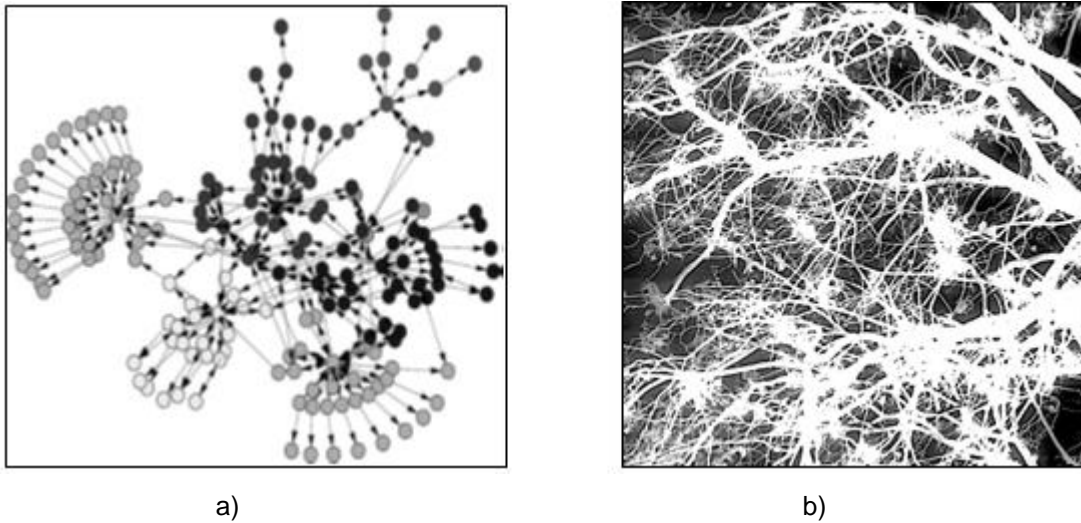


Figura 1.1 Sistemas complejos jerarquizados y dinámicos: a) páginas de un sitio web y los enlaces dirigidos entre ellos, con 180 páginas de la web de una corporación y b) representación de un sistema neuronal. En ambos sistemas la conectividad varía al transcurrir el tiempo.

1.2.2 Gráficos de nodos y líneas

En el lenguaje de las matemáticas, un espacio topológico es una estructura que permite definir los conceptos de *convergencia*, *conectividad* o número de líneas que convergen en un nodo (grado de un nodo) y *continuidad*; por supuesto con restricciones y estructuras propias de cada sistema particular.

En la representación gráfica de redes complejas, el grado de un nodo en la red es el número de conexiones asociadas a éste y se considera como un número variable, algunos nodos están altamente conectados y otros escasamente. Cuando existen redes con nodos con una distribución grande de grados como en la Figura 1.1b, son conocidas como redes libres de escala. El recuento del número de nodos y la conectividad asociada para cada uno de ellos permiten calcular una distribución de la conectividad y en consecuencia la distribución de probabilidad del grado en la red. La noción de conectividad se ilustra en la Figura 1.2. Aquí se pueden observar tres gráficas de puntos, los cuales representan nodos, conectados por líneas, en donde a) y b) tienen conectividades variables y c) tiene conectividad constante.

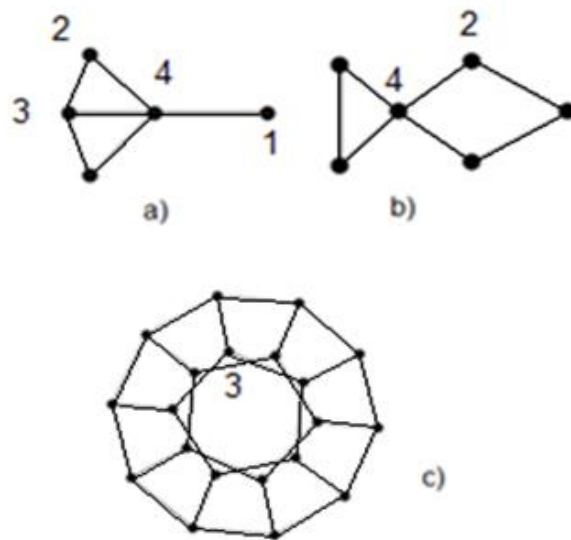


Figura 1.2 Representación de gráficas: a) y b) conectividad variable y c) conectividad 3. En el caso de una red compleja o libre de escala, existen nodos dentro de la misma red que contienen una gran cantidad de conexiones de tal manera que no es simple contabilizarlas.

1.2.3 Ley de potencia para nodos y líneas

En los sistemas que presentan diferente conectividad como en Figura 1.1b, cuando se intenta enumerar la cantidad de conexiones que convergen en los nodos, debe observarse lo siguiente:

- el diámetro de los nodos no es constante,
- se presenta conectividad variable en los nodos y
- el tamaño (longitud y diámetro o volumen) de las conexiones no es constante.

De tal manera que unos nodos tendrán pocas conexiones y otros gran cantidad de conexiones. La Figura 1.3 representa el comportamiento gráfico entre la cantidad de conexiones y nodos, lo que permite designar el grado de distribución de probabilidad en el sistema, que puede considerarse como una red.

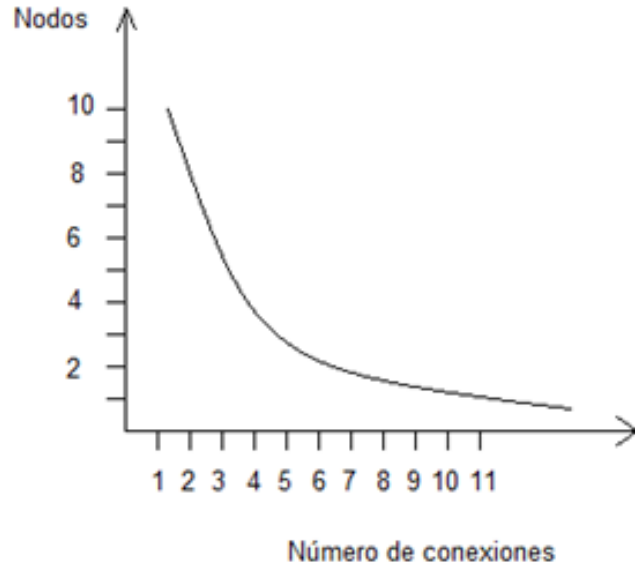


Figura 1.3 Cantidad de nodos y de conexiones asociados a un grafo complejo. Se observa un decaimiento exponencial en la asignación de conexiones para los nodos.

De manera simplificada, el comportamiento entre nodos y la cantidad conexiones se puede representar como una ley de potencias:

$$F(x) = Cx^{-\alpha} \tag{1.1}$$

en donde $F(x)$ representa la cantidad de nodos, x representa el número de conexiones que llegan a los nodos y C es una constante pre-exponencial y α el exponente. Esta ley de potencias se puede extrapolar para otros tipos de sistemas, por ejemplo, para comportamientos de tipo fractal.

La Ecuación 1.1 no solo muestra una relación de tipo exponencial también permite establecer una jerarquía para los nodos que contienen alta conectividad y diferente tamaño y para los nodos que presentan baja conectividad y diferente tamaño.

1.2.4 Ejemplos físicos de sistemas complejos

Conceptualmente los sólidos amorfos son los ejemplos más representativos de los sistemas complejos, tienen huecos y canales: los canales representan conectividad entre huecos. Las arcillas presentan conectividad variable y son ejemplos fieles de sólidos complejos [25], la piedra pómez, una roca tan común en los hogares es el ejemplo más accesible.

Los ejemplos físicos de sistemas complejos tienen interrelaciones entre sus componentes de acuerdo a una ley de potencias. La materia blanda; materia débilmente condensada o semifluida y deformable al esfuerzo: geles, coloides, los polímeros, las soluciones viscosas, los biopolímeros, el cito-esqueleto, la membrana celular, el medio intracelular, [26] son sin duda sistemas complejos. Los sistemas complejos están presentes en nuestro entorno más de lo que imaginamos, son objetos de interés matemático considerados dentro del estudio del caos y de la geometría no euclidiana, debido a que bastantes de estos sistemas presentan propiedades *fractales*. Para el estudio de estos sistemas no son adecuados la geometría euclidiana¹⁰, el álgebra o el cálculo diferencial.

Para el estudio de objetos con geometría que no se puede medir con la herramienta matemática tradicional [18, 27, 28], se ha desarrollado la geometría fractal de Mandelbrot [29]. Formalmente, también se emplean técnicas y procedimientos de mecánica estadística, termodinámica y otros campos afines. En particular los métodos de Monte Carlo han sido determinantes para entender y explicar estos sistemas. [30, 31, 32].

1.3 Geometría fractal

El concepto de geometría fractal¹¹ hace pensar en la idea de *magnitud*, pretensión de la teoría de la medida [33]. Benoit Mandelbrot al respecto se preguntó ¿Cuánto mide la costa de Inglaterra?, la respuesta depende de cómo se mide el contorno, si la medición se realiza desde un satélite,

¹⁰ A partir de cinco postulados se pueden estudiar las propiedades de; líneas y planos, círculos y esferas triángulos y conos, etc. en donde estos objetos presentan formas regulares.

¹¹ Por los orígenes etimológicos *geo*- tierra y *métrica*- medida y *fractus*-quebrado y *al*-relativo a.

algunas estructuras no se observarán, pero si luego cambiamos el punto de observación, ahora desde menor altura, por ejemplo desde un avión aparecen bahías, penínsulas, formaciones rocosas, es decir, se presentan más detalles de la estructura. Si finalmente la medición se realiza desde algún punto de la costa aparecen aún más detalles. El cambio de *escala de medida* hace que la longitud del contorno de la costa no se pueda determinar ya que al hacerse más precisa la medida aparecen más y más detalles, y su longitud tiende a ser infinita. Entonces ¿Cuál es su longitud?, en este punto el concepto de dimensión juega un rol fundamental y el concepto de longitud ya no tiene sentido, por ello es importante la definición de dimensión.

Benoît Mandelbrot estableció las bases de la denominada *geometría fractal* apoyado en ideas acerca de la topología de los cuerpos irregulares o estudio de las propiedades de los cuerpos que permanecen inalteradas ante transformaciones continuas, cuyo interés se expresa conceptualmente en la proximidad, número de huecos y la textura que presentan los objetos. La geometría fractal establece un conjunto de herramientas matemáticas útiles para el análisis de objetos irregulares con características específicas [34], las cuales no habían sido tomadas en cuenta por la geometría euclídea. La geometría fractal define a aquellos objetos o fenómenos espaciales o temporales, que son continuos [27] pero no diferenciables¹² como las escalas en que ocurren los fenómenos meteorológicos o la función matemática de Karl Weierstrass (1815) cuya dimensión fractal es mayor a uno [35] y que además exhiben correlaciones espaciales a diferentes escalas como el alcance y duración de un temblor y luego su réplica [36].

En el campo de la geometría fractal se han desarrollado conceptos y métodos muy importantes para entender el comportamiento de las estructuras, de tal manera que se habla de diversos tipos de fractales como: los fractales auto-similares o matemáticos deterministas (similitud geométrica estricta), los fractales auto-similares en sentido estadístico (no deterministas), generados de manera estocástica (por ejemplo con un método de Montecarlo). Estos fractales aleatorios son útiles para modelar algunos fenómenos naturales [37]. Todos los fractales deterministas, por ejemplo, el polvo de Cantor, la curva de Koch, la carpeta de Sierpinski, la esponja de Menger y el conjunto de Mandelbrot tienen similitud estricta. Mientras que, los fractales aleatorios; las

¹² Desde la geometría diferencial que atañe a las variedades diferenciales en geometría y topología.

turbulencias, las ramificaciones de redes neuronales, la ruta de ríos, la propagación de poblaciones y enfermedades, las estructuras vegetales y montañosas, por mencionar algunos, corresponden a los fractales que tienen similitud aproximada.

Mandelbrot conceptualiza un fractal como una “figura construida de alguna forma, de fragmentos similares al todo”. La mayor contribución cuantitativa del concepto de fractal es lo que se denomina la *dimensión fractal* (d_f), el cual es un parámetro utilizado para caracterizar estructuras heterogéneas. Es adecuado e importante abordar algunas definiciones útiles al concepto de dimensión fractal como son: la dimensión topológica (D_t), la dimensión de inmersión (d_i) o de Euclides y la dimensión de Hausdorff-Besicovitch (d_b) [38]. La dimensión de Hausdorff-Besicovitch se aborda en detalle en el Apéndice A. Cabe señalar que Falconer en 1988 desarrolla y define el concepto de la dimensión de Hausdorff-Besicovitch utilizando la teoría de la medida y primeros principios [39].

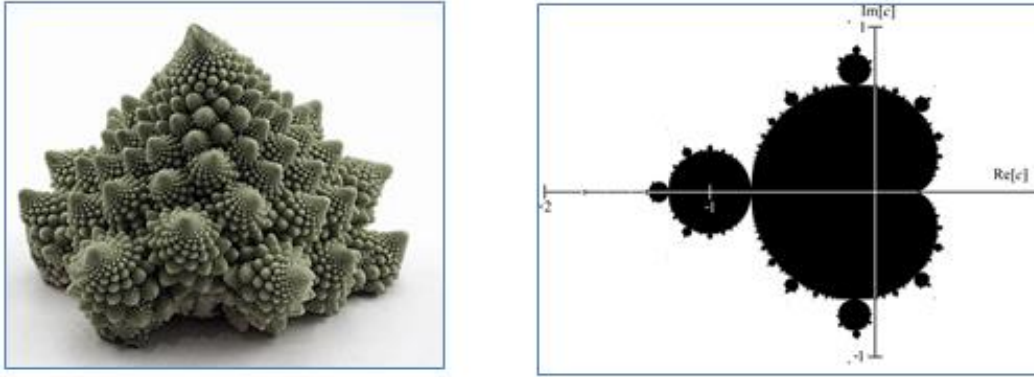
1.3.1 Fractales en la naturaleza

En la naturaleza una gran cantidad de objetos presentan propiedades fractales y son designados objetos fractales, ejemplos de estos son: el brócoli romanesco, las hojas de los helechos, la costa de Inglaterra, las estructuras de sólidos heterogéneos, las fracturas en los materiales, la porosidad de suelos y rocas, la estructura conformacional de proteínas, la membrana celular, los fenómenos de transporte a través del citoplasma, la estructura de un cúmulo percolante, el movimiento Browniano descrito por una partícula, etc.

En 1975 Mandelbrot acuña el término fractal, palabra que deriva del Latín *fractus*, que significa quebrado o fracturado. La definición más simple de un fractal es que este es un objeto geométrico cuya estructura básica, fragmentada o irregular, se repite a diferentes escalas de medida mostrando autosimilitud¹³. En la Figura 1.4a, se puede observar el hecho anterior, en donde el brócoli romanesco presenta autosimilitud (la figura como un todo), y cada brote es autosimilar a los otros y al todo. En la Figura 1.4b, se muestra el fractal del conjunto de Mandelbrot,

¹³ Propiedad de un objeto en que el todo es exacto o aproximadamente similar a una parte de sí mismo.

un fractal puramente matemático, es generado a partir de un algoritmo generador¹⁴ y su geometría es invariante ante el cambio de escala [24]. En ambas estructuras, una natural y otra matemática, se conserva la geometría aun cuando la escala cambia.

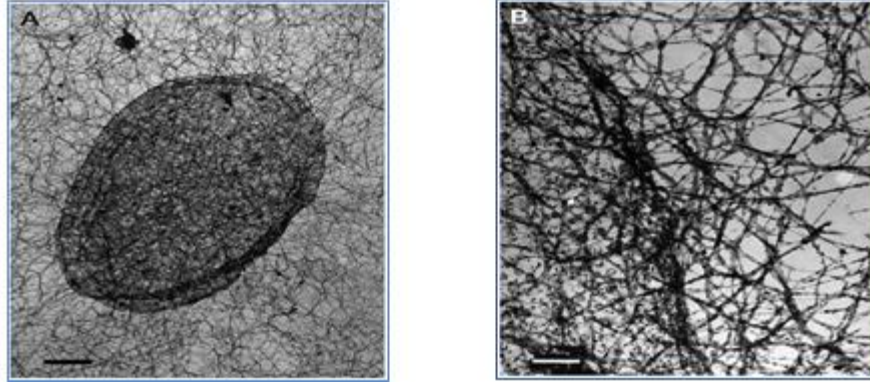


a) b)
Figura 1.4 a) El brócoli romanesco es un ejemplo de fractal natural ($d_f = 1.7181$) y b) el fractal de Mandelbrot es un ejemplo de fractal matemático ($d_f = 1.2419$)¹⁵, ambos fractales aportan la propiedad de autosimilitud.

En la Figura 1.5a y 1.5b se muestra las fotografías de un corte del núcleo y la frontera de éste para una célula real respectivamente. La estructura del citoesqueleto tiene geometría fractal y presenta variabilidad de conexiones (ver Sección 1.2.3) para múltiples nodos (sistemas libres de escala). A diferentes escalas de observación, esto es de $3 \mu\text{m}$ y $0.15 \mu\text{m}$, se observa la continuidad entre el cito-esqueleto y el interior del núcleo celular [40].

¹⁴ El algoritmo no es fácil de implementar y no es el objetivo de este trabajo.

¹⁵ La dimensión fractal fue obtenida por medio del software ImageJ 1.42.



a)

b)

Figura 1.5 Visión general del citoesqueleto del fibroblastos de la piel de ratón: a) núcleo celular ($d_f = 1.8535$ y $3 \mu\text{m}$) y b) frontera núcleo-citoplasma ($d_f = 1.8154$ y $0.15 \mu\text{m}$). La frontera muestra una continuidad del citoesqueleto hacia el interior del núcleo celular.

1.3.2 Dimensión topológica (D_t)

Para comprender el concepto de dimensión topológica, primero es necesario recordar que la dimensión euclídea es simplemente el número de coordenadas requeridas para describir un objeto [41]. La dimensión topológica mide la habilidad para cubrir un objeto con conjuntos abiertos de radio pequeño (dimensión de cubiertas), usualmente la dimensión topológica tiene el mismo valor que la dimensión euclídea, sin embargo, la dimensión topológica D_t puede traducirse como el estudio de la magnitud o magnitudes de posición y forma. La topología es una geometría no métrica, Leibniz considero que esta geometría se tendría que ocupar solamente de la medición de la posición y las propiedades derivadas de la misma, sin tomar en cuenta las cantidades ni su cálculo. Una de las propiedades topológicas más importantes de los sistemas es la conexidad ya que define espacios topológicos equivalentes [42].

Una dimensión topológica cero describe un conjunto que puede ser cubierto por pequeños conjuntos abiertos, que no tienen ningún elemento en común o disyuntos. La dimensión topológica de uno, describe un conjunto que puede ser cubierto por pequeños conjuntos abiertos, con solo una intersección entre pares adyacentes. Un conjunto es considerado con dimensión topológica dos si puede ser cubierto por pequeños conjuntos abiertos que se intersecan sólo tres

veces. Así el concepto de dimensión considera que existen cuatro dimensiones topológicas (D_t) [43] que se pueden resumir de la siguiente manera:

- el punto por definición tiene dimensión topológica cero ($D_t = 0$),
- la línea representa dos puntos conectados y es la dimensión topológica del punto más uno o $D_t = 0 + 1 = 1$,
- para un plano se requieren tres puntos conectados y su dimensión topológica es la línea más un punto, $D_t = 1 + 1 = 2$ y
- la dimensión topológica de la esfera es la dimensión topológica del plano más un punto, $D_t = 2 + 1 = 3$.

1.3.3 Dimensión de Euclides (d_i)

La dimensión de Euclides o dimensión de inmersión (d_i) es la menor dimensión en que un objeto puede estar inmerso, por ejemplo, una línea con dimensión topológica de $D_t = 1$ presenta varias formas de inmersión según su arreglo, esto se observa en la Tabla 1.1.

Tabla 1.1 Dimensión de inmersión (d_i) de una línea con $d_t=1$.

Arreglo	d_i
recta	1
aro	2
pirámide	3

1.3.4 Dimensión de contenido o dimensión de Hausdorff– Besicovitch (d_b)

La dimensión de Hausdorff-Besicovitch o de similitud (d_b) se emplea cuando un contenido o medida (M) que se pretende cuantificar se vuelve infinito debido a que la escala de medida ε es muy fina. Un contenido lineal se calcula sumando pasos ε elevados a un exponente uno. Un contenido de superficie se calcula sumando pasos ε elevados al exponente dos (donde ε es el lado de cada uno de los cuadrados que componen la superficie), que es la dimensión del plano. Un

contenido de volumen se calcula sumando pasos ε elevados al exponente tres (ε es el lado de cada uno de los cubos que compone al volumen), que es la dimensión del espacio [41]. De tal forma que el contenido M se puede considerar como $M = N\varepsilon^{d_m}$, donde N es la cantidad de veces que se tiene que sumar ε y d_m es la dimensión de medida. Así la escala u objeto de medida puede representarse por una magnitud lineal ε (como ya se mencionó su magnitud en el límite tiende a cero) por elementos de área ε^2 o por elementos de volumen ε^3 , es decir, conforme se quieren más detalles del objeto de interés se hace más y más pequeño el instrumento de medición (ver Apéndice B). Por ejemplo; la intención de medir la costa de Inglaterra cuando se observa desde fuera de la tierra, la estructura formada se divide como segmentos pequeños de recta con longitud ε , siguiendo el proceso de Hausdorff sólo se debería hacer una suma de elementos ε elevados al exponente d_m , donde d_m es la dimensión de la costa, luego para la dimensión de medida d_m desde un punto más cercano por ejemplo desde un satélite bastaría con utilizar elementos de área ε^2 , y la dimensión de medida sería $d_m = 2$, si el punto de medición es sobre la costa, para medir valles, montañas y rocas ahora la dimensión de medida cambiara a elementos de volumen ε^3 y $d_m = 3$ y se vuelve imposible determinar la magnitud de la costa, debido a que ahora con los elementos de volumen aparecen más detalles de la misma, la dimensión de la costa no es la de una línea, tampoco la de un plano y mucho menos la dimensión de un volumen.

Así la magnitud o contenido de interés M y la escala de medida d_m tienen una relación inversa debido a que la escala de medida se hace muy pequeña: como $M(\varepsilon) = 1/\varepsilon^{d_m}$, en donde $d_m = 1, 2$ o 3 . En general, para la escala de medida ε , la dimensión de medida es igual dimensión de Hausdorff-Besicovitch, esto es, $d_m = d_b$. Para objetos que no contienen una dimensión entera se puede establecer la dimensión de similitud o de Hausdorff-Besicovitch con la relación:

$$M(\varepsilon) = \frac{C}{\varepsilon^{d_b}} \quad (1.2)$$

en donde C es una constante de proporcionalidad de la ley de potencia $M(\varepsilon) = C\varepsilon^{-d_b}$ similar a la Ecuación 1.1. De modo que cuando sucede el cambio de escala al hacerse más próxima la posición a la costa de Inglaterra (en la pregunta de Maldelbrot), conceptualmente la dimensión de

medida d_m y la dimensión de similitud d_b tienen valores diferentes, por ejemplo para $d_m = 1$ y $d_b = 2$, implica medir planos utilizando líneas, de tal forma que se obtienen longitudes infinitas, debido a que existe un número infinito de puntos a lo largo de una línea, así como también un número infinito de líneas a lo largo de un plano o viceversa, esto es, cuando el observador se aleja de la costa, al medir líneas rectas con planos se obtiene un área con valor cero; lo cual resulta lógico debido a que la línea se vuelve un punto (ver Apéndice B).

Entonces ¿cómo se miden los objetos, como la alfombra de Sierpinski, con segmentos de tamaño ε ($d_m = d_t = 1$), en donde a medida que disminuye la magnitud del objeto de medida se muestran más detalles y cuya longitud sería infinita? De acuerdo con la Ecuación 1.2, $M(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-1}$, d_b debe ser mayor que 1, esto es, la dimensión de similitud (dimensión de objetos autosimilares ante el cambio de escala) debe ser mayor a la dimensión topológica. Al tratar de medir esta dimensión con planos cuadrados de lado ε , donde $d_m = 2$ con dimensión de inmersión $d_t = 2$, el resultado sería cero por tratarse de un objeto de tipo unidimensional topológicamente descrito, o cuando menos con dimensión cercana a uno. En conclusión, la dimensión de la alfombra de Sierpinski está entre 1 y 2, que es acorde a la consideración siguiente:

Un fractal es un subconjunto de un espacio métrico para el cual su dimensión de Hausdorff–Besicovitch d_b es estrictamente mayor que su dimensión topológica d_t , y se concluye que la dimensión de Hausdorff–Besicovitch no está restringida a tomar valores enteros [44] (ver Apéndice B).

1.3.5 Rugosidad y textura: Lagunaridad (L)

No es suficiente caracterizar un sistema mediante su dimensión fractal; solo aporta el tamaño del comportamiento de escala y no describe como es la distribución de los patrones que conforman una determinada estructura (la dimensión fractal d_f muestra que tan disperso está un sistema) [45], por esto es necesario introducir el concepto de lagunaridad (L).

La lagunaridad muestra que tan estructurado está un sistema, permite cuantificar en un bosque la distribución de diferentes especies arbóreas, también se puede cuantificar mediante análisis, la

demografía y el urbanismo de una ciudad [46-49]. En esencia la lagunaridad cuantifica la distribución de los espacios vacíos en una estructura, la cual puede estar como una imagen fotográfica o mapa en 2D o en 3D, es decir, la escala en la cual una imagen es heterogénea o la medida de la desviación de un objeto con invarianza traslacional. El análisis primero fue propuesto por Plotnick y colaboradores en 1993 [50] para realizar un estudio ecológico. Ellos utilizaron el algoritmo de desplazamiento de cajas desarrollado por Allain y Cloitre [51] (ver Apéndice E) y demostraron su utilidad en el análisis de la heterogeneidad en patrones espaciales en 2D, análisis de patrones temporales y patrones volumétricos temporales en 3D. La medición de la lagunaridad en ecología y urbanismo tiene amplia utilidad [47].

La palabra lagunaridad literalmente se refiere a un hueco o estanque y se deriva de la palabra en latín *laguna*, en inglés lake, pero para el análisis morfológico puede tener varias definiciones como: brecha, textura visual, heterogeneidad, invariancia traslacional o rotacional. En 1982 Mandelbrot creó el término lagunaridad (del inglés lacunarity) *para caracterizar el grado de homogeneidad de un patrón espacial*, debido a que “la dimensión fractal por sí sola no es suficiente para describir la geometría y propiedades de fractales-lagunares”, [29], de tal manera se requirió de otro parámetro de medición, que designo como lagunaridad.

Cuando se observan los objetos pueden apreciarse formas y detalles, como: textura, cimas, valles, huecos, rugosidad, etc. Los objetos de *baja lagunaridad* son bastante homogéneos y son invariantes ante la traslación debido a que todos sus huecos presentan “casi” el mismo tamaño, al contrario, objetos con amplia gama de tamaños son heterogéneos y no son invariantes a la traslación, estos tienen *alta lagunaridad*. Los objetos que son homogéneos a grandes escalas pueden ser bastante heterogéneos cuando son examinados a pequeñas escalas.

La lagunaridad como medida analítica multiescala de la heterogeneidad espacial, se considera dependiente de:

- la escala de medida,
- la fracción ocupada en el espacio característico y

- la distribución espacial de patrones.

Mandelbrot calculó la lagunaridad de galaxias utilizando modelos de distribución [29] y más tarde en 1991 Allain y Cloitre reportan un método de cómo hacer esta medición. Existen diferentes procedimientos descritos en la literatura para analizar la lagunaridad de patrones espaciales, los más usados son el método de conteo de cajas (box counting), el método de cajas de arena (sand box) y el método de desplazamiento de cajas (gliding box) (ver Apéndice D).

1.4 Modelo de red para polímeros en solución

El primer modelo para describir polímeros en solución fue propuesto por Paul Flory y Maurice Huggins [52, 53] (FH) en donde el medio o disolvente se discretiza en un arreglo regular (Figura 1.6), el cual toma en cuenta el efecto del volumen excluido y considera [54]:

- el medio o solución está representado por un modelo de malla o red,
- cada sitio en la malla tiene un volumen igual al de una molécula de disolvente,
- la molécula de polímero se compone de m -unidades monoméricas o segmentos, cada uno definido a partir de los volúmenes de la molécula de polímero (v_p) y de la molécula de disolvente (v_s),
- cada segmento en la red tiene un número Z de sitios vecinos disponibles, a Z se le conoce como número de coordinación,
- las interacciones moleculares no contribuyen a la entropía pero sí al calor de mezclado.
- la disolución (mezcla disolvente-polímero) se lleva a cabo mediante la ocupación al azar de los sitios o lugares disponibles (volumen excluido) en la malla,
- el volumen es invariante durante el mezclado,
- a partir de esta ocupación o llenado, se calcula el número de formas en que las moléculas de polímero podrían llenar la malla (Ω),
- la entropía de mezclado (S) está fuertemente influenciada por la conectividad de la cadena del polímero,

- la entalpía de mezclado para mezclas de moléculas pequeñas de polímeros es similar a las de las soluciones regulares,
- se particionan n -posiciones de la malla y
- las i -cadenas de polímero están colocadas en la malla o red. Cada molécula de polímero ocupa una fracción de la malla.

Las consideraciones mencionadas se pueden resumir en la Figura 1.6, de donde se puede estimar la entropía conformacional.

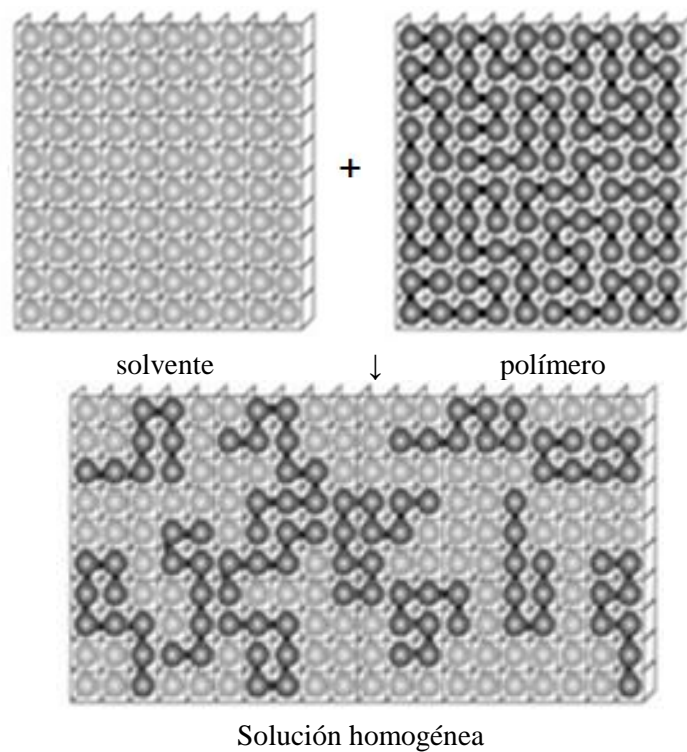


Figura 1.6 Estados sin mezclar y mezclado de cadenas de polímeros con solvente. Esta representación corresponde a un modelo de malla discreto en donde los monómeros ocupan espacios contiguos a primeros vecinos en 2D. Los movimientos permitidos de los monómeros son adelante, izquierda o derecha, pero sin movimientos hacia atrás o en posiciones ocupadas.

De manera somera, la energía de mezclado se puede calcular por medio de $\Delta G_m = \Delta H_m - T\Delta S_m$, la relación entre las formas (Ω) en que las moléculas de un polímero pueden llenar el medio o la malla como $S = k \ln \Omega$ con que $k = 1.380662 \times 10^{-23}$ J/K.

La expresión de FH para la entropía de mezclado de una solución polimérica está dada como: $\Delta S_m = -k(n_1 \ln \phi_1 + n_2 \ln \phi_2)$, en donde $\phi_1 = \left(\frac{n_1}{n_1+n_2m}\right)$ y $\phi_2 = \left(\frac{n_2m}{n_1+n_2m}\right)$ son las fracciones del volumen de los componentes de la disolución, n_1 y n_2 son las moles del disolvente y del polímero respectivamente. La entropía de mezclado ΔS_m permite el cálculo de la entropía conformacional del sistema medio-macromolécula o cadena de monómeros [54]. Este trabajo es semejante a la propuesta de FH, debido a que la red o malla se modela de forma discreta, sin embargo a diferencia del trabajo de FH, en donde la malla representa un solvente homogéneo, aquí se toma en cuenta la heterogeneidad del medio que considera barreras o bloqueos que no permiten el movimiento libre de moléculas o de partículas [55], pero el medio no necesariamente representa al solvente.

1.5 Percolación y medio fractal

La percolación es un fenómeno de difusión de líquidos o gases a través de un sólido y está relacionada con una cantidad de fenómenos físicos sobre la superficie de la materia y dentro de ella. Frecuentemente los medios en donde ocurren los fenómenos percolativos o de transporte tienen características fractales.

En 1957 Broadbent y Hammersley [56], los fundadores de la teoría de percolación acuñaron el término percolación como opuesto a la difusión; *mientras los procesos de difusión implican una caminata aleatoria de una partícula en un medio regular, los procesos de percolación implican un movimiento regular (fluido o corriente eléctrica) a través de un medio aleatorio.*

Una breve lista de problemas que involucran la teoría de la percolación son; el transporte intracelular, la gelación de polímeros, transición gas-líquido en coloides, permeabilidad de rocas porosas, difusión turbulenta, etc. [21, 43, 58-61].

Un ejemplo de percolación, en donde un líquido pasa a través de un sólido o medio poroso, es el transporte del agua a través de los granos de café. Otros ejemplos del fenómeno de percolación son: el movimiento del petróleo a través de rocas fracturadas, la lixiviación para la extracción de sólidos solubles con un líquido que percola y el paso de corriente a través de una red de resistencias aleatorias [62].

1.5.1 Medio de percolación y modelos de red

Los medios de percolación pueden representarse mediante modelos discretos en red (Figura 1.7), con las limitaciones geométricas respectivas (redes con diferente geometría y conectividad; cuadrada, triangular, hexagonal, cúbica, tetraédrica, redes de Bethe, redes de Barabási, etc.). La Figura 1.7 muestra un fragmento de una red en 2D con conectividad cuatro, que puede representar un corte de un sólido poroso. En color negro se representa el espacio permeable, pero un fluido puede quedar atrapado y no salir de ahí; el color blanco corresponde al espacio no accesible, en donde el fluido no penetra; y en color rojo se muestra el cúmulo percolante, que también pertenece a la fase permeable, sin embargo aquí el fluido circula de un extremo a otro, es decir, el fluido tiene la capacidad de salir de la estructura, es aquí en donde ocurren los fenómenos de difusión y transporte.

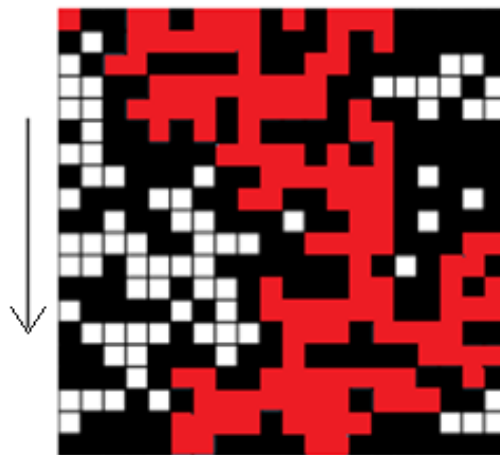


Figura 1.7 Red cuadrada de 20×20 sitios. En color rojo se observa el cúmulo (o región) percolante. La dirección de la percolación se lleva a cabo desde el extremo superior al inferior. Además, se observa que en este cúmulo existen zonas de menor área en donde ocurren estrangulamientos.

El medio a través del cual ocurre la percolación exhibe correlaciones a diferentes escalas y es heterogéneo. La permeabilidad es una medida de que tan fácil atraviesa un fluido y varía según la región del medio, [63]. Las regiones impermeables existen en diferentes zonas y algunas pueden estar conectadas o no; esto se puede consultar a detalle en el Apéndice C. La interconexión de las diferentes regiones de un sistema poroso están consideradas dentro de la teoría de la percolación, la interconexión del medio dice como están afectadas las propiedades globales del sistema en términos de la fracción volumen de la región permeable o el volumen crítico. En la percolación clásica se asume que las regiones permeables e impermeables están distribuidas aleatoriamente y son independientes unas de otras y poseen características fractales en las cercanías del punto crítico [64].

1.5.2 Percolación y geometría

El problema de percolación describe una posibilidad de transición de fase con un comportamiento no trivial [65]. La naturaleza geométrica de esta transición es de aplicación a diversos problemas físicos y ha proyectado su aplicación hacia muchas investigaciones [64], [66]. La formulación general del problema de percolación se vislumbra mediante el uso de objetos geométricos elementales como esferas, barras, sitios, enlaces, etc., colocados en un entramado aleatorio.

En la teoría de la percolación, merece especial atención el umbral de percolación (ρ) en el que un cúmulo infinito cruza todo el espacio, por simplicidad los sitios de percolación introducen la idea de “percolación de sitios” con cúmulos de sitios conexos topológicamente (un cúmulo infinito de percolación es un espacio de una sola pieza) [42]. La percolación de enlaces es bastante similar. También existe una formulación híbrida de la percolación de sitios y enlaces. El valor del umbral de percolación depende de la dimensión del espacio, del tipo de elemento (sitio o enlace) y del tipo de malla¹⁶. En general, un cúmulo de percolación es un aglomerado, por ejemplo, de sitios conectados mediante la regla de primeros vecinos (ver Apéndice C).

¹⁶ Geometría: cuadrada, triangular, hexagonal, cúbica, tetraédrica, etc.

En la Figura 1.8 se representan diferentes tipos de malla o red [67]. Los valores reportados del umbral de percolación para diferentes geometrías en la percolación de sitios son: red cuadrada $\rho = 0.5927 \pm 0.00003$, red hexagonal $\rho = 0.697 \pm 0.004$ y red triangular $\rho = 0.5 \pm 0.005$, mientras que para enlaces son: $\rho = 0.499 \pm 0.004$, $\rho = 0.652701$ y $\rho = 0.347296$ [64], respectivamente. Es pertinente mencionar que, el tipo de red que se ha utilizado en este trabajo es la mostrada en la Figura 1.8a [68].

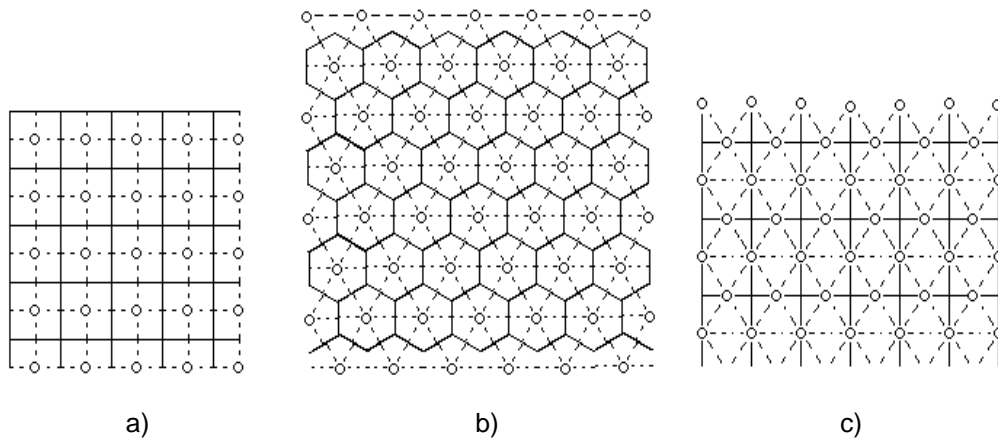


Figura 1.8 Redes o mallas en 2D: a) cuadrada, b) hexagonal o de panal de abejas y c) triangular. Las líneas punteadas representan las direcciones de desplazamiento de una partícula y los círculos vacíos representan posiciones que pueden ser ocupadas.

1.5.3 Umbral de percolación (ρ)

El umbral de percolación considera que los objetos son conexos a una distancia r y supone que dos objetos están comunicados entre sí cuando la distancia r entre ellos es menor al radio promedio de R^{17} . El interés consiste en saber ¿cómo es que muchos objetos pueden formar un cúmulo? y especialmente ¿cuándo y cómo los cúmulos se vuelven infinitos?, esto es, cruzan la red de lado a lado. Es evidente que un parámetro de control es la densidad de objetos o su número promedio por unidad de volumen o área según sea el caso.

El umbral de percolación corresponde a la concentración mínima en la cual un cúmulo se propaga espontáneamente en todo el espacio disponible atravesándolo en una dirección dada, como la huella que deja el paso lento del agua a través del café, de esta manera la percolación exhibe dos características esenciales: comportamiento crítico y correlaciones de largo alcance. Por lo que este modelo es relevante para un gran número de problemas de transporte en medios desordenados que exhiben comportamientos críticos como la localización de electrones o la conducción de salto en sólidos amorfos [64], mediante un enfoque esencialmente geométrico para el estudio de los procesos de transporte o difusión.

Un cúmulo infinito de percolación es estadísticamente autosimilar en el intervalo de escala desde $r < R$ hasta infinito: $[r, \infty]$, donde r es la distancia de comunicación entre objetos. Un cúmulo infinito de percolación, es el modelo clásico de un fractal no determinista [69]. Para todo el intervalo de correlaciones, virtualmente, todos los fenómenos críticos implican autosimilitud estadística. El lenguaje de la geometría fractal es bastante factible para describir aspectos geométricos y de transición de fase.

1.5.4 Exponentes críticos y umbral de percolación

El motivo por el cual el modelo de la percolación es importante es porque describe transiciones críticas de fase [69], *las cuales siguen el siguiente comportamiento:*

$$P_{\infty} \sim (p - p_c)^{\beta} \tag{1.3}$$

en donde P_{∞} es la probabilidad en la cual un elemento de red (por ejemplo un enlace) experimenta una transición de fase cuando se forma el cúmulo infinito de percolación, p es la probabilidad de alguno de los elementos de red, en nuestro caso de sitios, p_c es la probabilidad en la cual se forma el cúmulo infinito de percolación y se conoce como umbral crítico de percolación y β es el exponente crítico del parámetro de orden y depende solo de la dimensión

¹⁷ La condición de conexión de una distancia r entre dos objetos menor a R implica que r es menor al promedio de los radios de ambos objetos.

del espacio. Así, cuando el valor de p es bajo existe una población diluida del elemento de red y predominan estos elementos conectados formando pequeños cúmulos. Cuando p aumenta el tamaño de los cúmulos también aumentan. En un momento dado, si p es lo suficientemente grande entonces se genera un cúmulo que abarca a la red de un extremo a otro. Abajo del valor del umbral de probabilidad crítica p_c no se forma el cúmulo infinito, así que $P_\infty = 0$, sin embargo P_∞ tiene valores finitos cuando $p > p_c$. Cabe mencionar que, en la teoría de la percolación los exponentes críticos son determinantes debido a que son utilizados para clasificar transiciones de fase en categorías de universalidad.

Uno de los exponentes críticos más importantes es el exponente de la longitud típica de los cúmulos finitos y es caracterizado por la longitud de correlación ξ , este diverge en las proximidades del umbral de percolación p_c y se especifica como:

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu} \quad (1.4)$$

El exponente crítico ν es el mismo por debajo y por arriba de la transición crítica que ocurre en el umbral de percolación [70]. Por abajo del umbral de percolación el tamaño típico de los cúmulos es finito en el orden de la longitud de correlación ξ , por tanto, se dice que los cúmulos pueden ser autosimilares solo por arriba de esta longitud de escala. Arriba de la transición crítica ξ es una medida de los cúmulos finitos en el sistema. En la extensión del cúmulo infinito los huecos grandes son típicamente de tamaño ξ , sin embargo existe la presencia de huecos en todas las longitudes de escala, lo que caracteriza a un fractal aleatorio.

La masa promedio de los cúmulos finitos S es análogo a la susceptibilidad magnética en transiciones de fase ferromagnéticas; S diverge alrededor de p_c :

$$S \sim |p - p_c|^{-\gamma} \quad (1.5)$$

de nuevo el exponente γ tiene el mismo valor antes y después de la transición.

1.6 Modelos de difusión de partículas

Dados los elementos para la comprensión del medio en términos de los fenómenos que se pretende ocurran en él o se representen (sin olvidar que la estructura de la naturaleza posee propiedades complejas), su diseño debe ser explícito y entonces deberá poseer características fractales. Existen modelos que ayudan a comprender la difusión de partículas a escalas macroscópicas, por ejemplo la filtración de agua en una roca. Los más útiles, a escalas microscópicas, son el caminante aleatorio (RW) y el caminante auto-evitante (SAW). En este apartado se explican brevemente el RW y en el siguiente el SAW.

1.6.1 Caminante aleatorio (*RW*)

El proceso clásico de difusión se contempla en el movimiento Browniano [71] donde se observa que las partículas microscópicas se mueven cuando se encuentran inmersos en un fluido como una gota de agua. Este fenómeno fue descubierto en 1827 por el biólogo Robert Brown quien observó el desplazamiento de pequeñas partículas de polen en forma aleatoria y sin razón aparente en un líquido (agua). Hoy se sabe que el movimiento de las partículas es provocado por agitación térmica.

El problema del caminante aleatorio ha servido para modelar los fenómenos de difusión como: el camino seguido por una molécula que viaja a través de un líquido o de un gas de manera aleatoria, en fenómenos de transporte, difusión de calor a través de los metales, la propagación y contagio de enfermedades, el movimiento al azar de una espiral aleatoria (una cadena de polímero) [69, 72-75], etc.

De forma general, a la distancia recorrida por un caminante aleatorio desde una posición inicial dada hasta una posición final durante un cierto tiempo, se define como un paseo aleatorio. Cualquier proceso, donde la posición de una partícula en cierto instante dependa sólo de su posición en el instante previo y de alguna variable aleatoria que determine su siguiente dirección y donde la longitud del paso, no tiene que ser la misma a la previa (salto) se llama proceso de

Markov, [76, 77]. Casos específicos de los paseos aleatorios incluyen la caminata de un “borracho”, el vuelo de Lévy y como ya se mencionó, el movimiento browniano.

Los paseos aleatorios están relacionados con los modelos de difusión y son un tema fundamental en la discusión de los procesos de Markov. Varias propiedades de los paseos aleatorios incluyen distribuciones dispersas, tiempos del primer cruce, rutas de encuentro y tiempo de retorno al punto de origen [76].

1.6.2 Caminante aleatorio (RW) en 1D

La pregunta más natural de un caminante aleatorio RW es ¿cuál es la distancia recorrida (R) de un extremo a otro después de s_i pasos?, y ¿varía R con el tamaño N del caminante? La respuesta es relativamente sencilla. En una dimensión, 1D, la longitud extremo a extremo R_N se define como:

$$R_N = \sum_{i=1}^N s_i \tag{1.6}$$

donde s_i representa el i -ésimo paso, un paso se considera de una longitud de magnitud = 1 y tiene la misma probabilidad de apuntar en cada una de las dos posibles direcciones, adelante o atrás. De la fórmula de la distancia $r = \sqrt{(x_1 - x_0)^2}$ y de la distancia cuadrática promediada $\langle r^2 \rangle = \langle (x_1 - x_0)^2 \rangle$ resulta que para el caminante: $\langle R_N^2 \rangle = \langle (R_{N-1} + s_N)^2 \rangle$. Haciendo el desarrollo algebraico se tiene que $\langle R_N^2 \rangle = \langle R_{N-1}^2 \rangle + 2\langle R_{N-1} \cdot s_N \rangle + \langle s_N^2 \rangle$, para finalmente obtener:

$$\langle R_N^2 \rangle = \langle R_{N-1}^2 \rangle + 1 \tag{1.7}$$

donde $s_i = \pm 1$, entonces los posibles valores de $\langle s_N^2 \rangle = 1$. Como el caminante no está condicionado en una u otra dirección, $(R_{N-1}) \cdot (s_N)$ toma valores diferentes de cero R_{N-1} y $-R_{N-1}$

tienen probabilidades iguales, en consecuencia su expectativa es cero. Se sigue que $R_N^2 = s_t^2 = 1$ quedando al final que:

$$\langle R_N^2 \rangle = N \tag{1.8}$$

El resultado anterior indica que el número de dimensiones no afectan el desplazamiento cuadrático medio esperado desde el origen del caminante hasta el extremo, pero el número de paseos posibles del caminante en una dimensión se incrementan como $n_{RW} = 4^N$, donde N es el tamaño de la caminata. Como las posibilidades en 2D son equivalentes, los paseos o caminatas posibles se incrementan por un factor de dos si el movimiento se lleva a cabo en una malla cuadrada con conectividad 4 [76]. En estos paseos aleatorios las posibilidades de movimiento no están restringidas por efectos de volumen excluido.

1.6.3 Caminante auto-evitante (SAW)

El caminante auto-evitante SAW es un modelo estándar en el área de polímeros [78]. La condición auto-evitante, a diferencia del caminante aleatorio, es que no existen el entrecruzamiento de la caminata y el regreso sobre el mismo sitio [79]. Las características básicas que determinan el comportamiento del SAW son:

- el número de pasos s_i del caminante auto-evitante de longitud N^{18} ,
- el desplazamiento cuadrático medio $\langle R_N^2 \rangle \approx N^{2\nu}$ [80, 81], y
- el límite de escala, por ejemplo para 2D, si se considera como modelo de superficie continuo, el caminante mapea de modo que tarde o temprano caerá en un camino sin salida y deberá detenerse; un paseo auto-evitante no continúa indefinidamente [82].

El modelo del SAW se adapta bien para el estudio de estructuras moleculares con cadena lineal grande [83, 84]. Como se puede intuir es la versión que mejor describe al movimiento

¹⁸ La longitud del SAW consta de n pasos o saltos y que pueden representar N -partículas sobre una cadena. En un espacio discreto, cada lugar accesible por la caminata, puede ser ocupado por solo una partícula.

Browniano en el espacio discreto, [85-87], pero también puede representar el movimiento de un reptil que evade obstáculos (ej. reptación) o el movimiento de un viajero entre las calles de la ciudad cuando se traslada de un punto a otro (Figura 1.9).

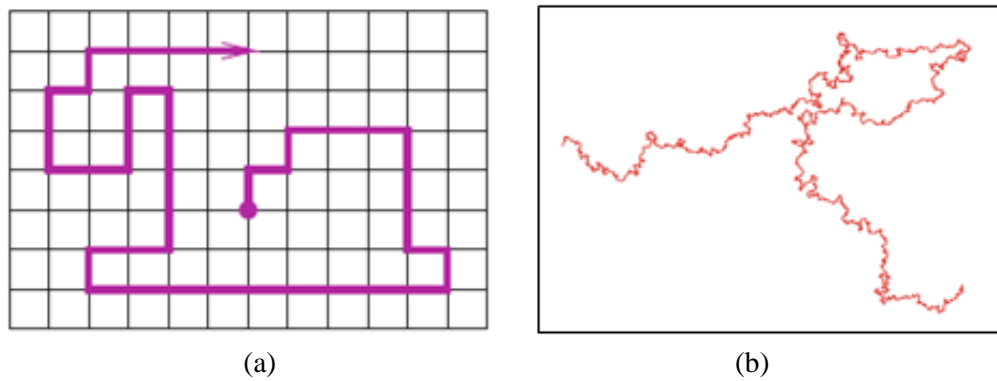


Figura 1.9 a) Un caminante auto-evitante en una red 2D arraigado en un punto, el movimiento está indicado por la flecha, por conveniencia el origen es (0,0) y b) el mismo caminante después de recorrer 2^{25} pasos. El movimiento del caminante se realiza a primeros vecinos.

1.6.4 Polímeros y el modelo auto-evitante

En la Figura 1.10 se muestran las imágenes de la 2-poli-vinilpiridina a un pH de 3.0 en solución acuosa absorbidas sobre mica. Las imágenes se obtuvieron mediante microscopia de fuerza atómica (AFM) [88], en ellas se observan detalles conformacionales direccionados por los efectos de la interface sólido-líquido, el pH, la fuerza iónica y la calidad del solvente y que justifican por de más la investigación de los medios en donde se llevan a cabo este tipo de fenómenos o procesos de difusión. Nótese cómo la influencia de los factores externos, es decir el medio de reacción, en este caso la mica y el pH, generan estructuras diferentes sobre la cadena polimérica.

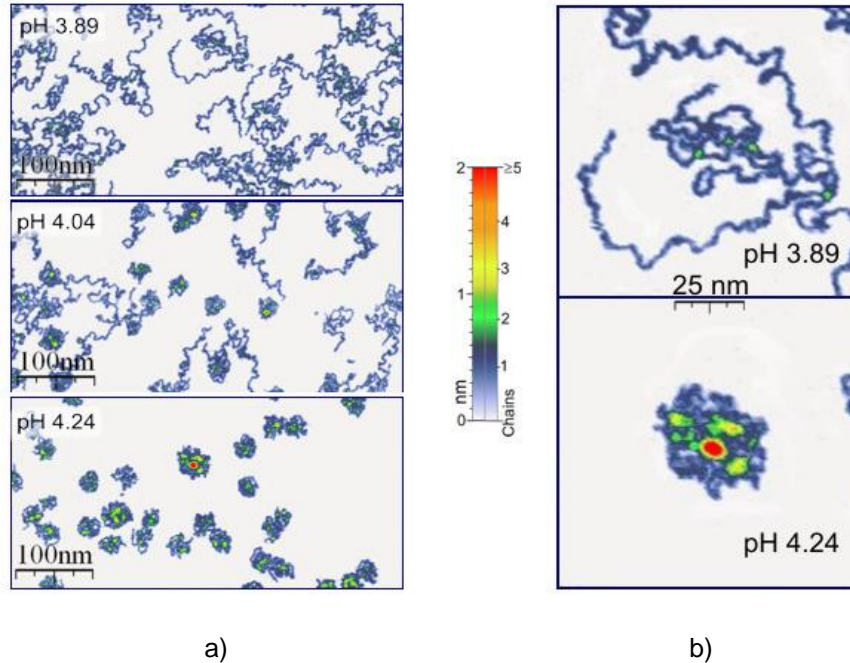


Figura 1.10 Imágenes de macromoléculas en solución [88]: a) Contorno de la cadena: 2-poli-vinilpiridina, un polímero aproximadamente de 204 nm y espesor aproximado de 0.4 nm en solución acuosa a tres pH's diferentes, adsorbidos sobre mica. En a) se puede ver como el incremento de pH hace que el polímero se agregue formando glóbulos sobre la mica por efecto del medio y en b) se muestran zonas amplificadas a pH = 3.89 y 4.24.

A mayor pH, las interacciones a lo largo de la cadena del polímero se incrementan hasta formar lo que se conoce como un glóbulo (Figura 1.10b). Entre pH = 3.0 – 3.9 las estructuras se aproximan a una forma plana con un radio de giro $\langle R_g^2 \rangle^{\frac{1}{2}} \approx 22 \text{ nm}$ y una distancia extremo a extremo de $\langle r^2 \rangle^{\frac{1}{2}} \approx 55 \text{ nm}$. Las estructuras alargadas se pueden modelar mediante el caminante o paseo auto-evitante SAW de manera pseudo aleatoria, como se muestra en la Figura 1.9, las cadenas cuando se agregan en forma de glóbulos se pueden modelar condicionando más al paseo auto-evitante.

De manera natural el SAW genera el efecto de no entrecruzamiento o regreso sobre sí, evitando las posiciones de átomos o moléculas sobre un mismo espacio físico, situación que no presentan los paseos aleatorios RW. Las cadenas alargadas o compactas de polímeros son en esencia un

paseo auto evitante bajo ciertas condiciones, en donde el medio juega un papel determinante para direccionar a dichas cadenas.

Se puede resumir que la conformación y las propiedades que definen el comportamiento estructural de la cadena de un polímero en solución pueden ser descritas mediante [89]:

- la distancia extremo a extremo de una cadena de N monómeros: $R_N = aN^\nu$ [90, 91], donde a es un parámetro de estructura que depende de la calidad del solvente y ν depende de la dimensión: $3/2$ para 2D, 0.592 para 3D y 0.5 para 4D [69],
- la longitud de la cadena: $R_e = |R_N - R_0|^2 = \sum_{n=1}^N r_N$, donde N es el número de monómeros repetidos, que también representa el grado de polimerización, y r es la unidad de longitud para cada monómero,
- el cuadrado del radio de giro: $R_g^2 = \frac{1}{2(N+1)^2} \sum_{i,j=0}^N |R_i - R_j|^2$, y
- el cuadrado de la distancia de un monómero en cualquier posición al extremo de la cadena: $R_m^2 = \frac{1}{2(N+1)} \sum_{i=0}^N [|R_i - R_0|^2 + |R_i - R_N|^2]$, en donde R_0 es la posición inicial del monómero, R_i y R_j es la posición cualquiera dentro de la cadena y R_N es la posición del último monómero [92].

Para el modelo del caminante auto-evitante un ensamble de paseos aleatorios (SAW's) de longitud de cadena fija cumple con el balance detallado y con el principio de ergodicidad [73, 93, 94], y permite caracterizar observables como son: la distancia cuadrática media extremo a extremo $\langle R_N^2 \rangle$ proporcional a N , el cuadrado del radio de giro R_g^2 , el promedio de la distancia de un monómero al extremo de la cadena R_m^2 o su posición dentro de la cadena y que son determinantes para calcular la entropía conformacional de la cadena de un polímero.

Adicionalmente se emplean herramientas termodinámicas para el cálculo de propiedades como son la entalpía y la entropía conformacional. Así los sistemas modelados generan información adicional útil para entender los procesos fisicoquímicos que ocurren en el sistema real.

Para comprender la geometría de una molécula de cadena larga, es decir, los movimientos de torsión, de tijera o flexión, el movimiento en forma de ovillo aleatorio, el plegado o la aglomeración, y como no existe la ocupación de dos cuerpos en el mismo espacio y en el mismo tiempo, entonces el efecto geométrico se puede modelar mediante la caminata de una partícula que se auto-evita. En la naturaleza las posibilidades de movimientos de átomos, moléculas o grupos de moléculas están limitadas y descritas por la llamada característica auto-evitante¹⁹. Se han encontrado aplicaciones interesantes del SAW en la física de materiales magnéticos y en el estudio de las transiciones de fase. Cabe mencionar que este tipo de fenómeno es de interés matemático pero ha sido difícil su análisis²⁰.

1.6.5 Enumeración de pasos de un caminante auto-evitante

Por convención una caminata en 2D comienza en el origen $(0,0)$ ²¹: un paso se mueve desde el sitio de la red actual a uno de los cuatro sitios vecinos más cercano (ej. Sur, Norte, Este, y Oeste), la longitud de una caminata R_e la define el número de s_i pasos con unidad de longitud $r = 1$ (la unidad de longitud más simple para cada monómero), por lo tanto el número de sitios visitados en una red es $n + 1$, en donde n es igual al número de pasos o saltos [95]. Los saltos no están limitados a una determinada magnitud, por ejemplo en los vuelos de Levy la magnitud de los saltos pueden tener magnitudes diferentes a la unidad, por ello conviene establecer la relación entre saltos y pasos como $n = s_i$ en que $s_i = 1$.

Como ya se vio una caminata o paseo al azar puede ocupar cualquier lugar vecino y no se auto-evita, por tanto puede regresar sobre sí mismo ocupando cualquier sitio con igual probabilidad, así el número de posibles paseos para un caminante aleatorio n_{RW} de tamaño N en 1D es de 4^N (ej. utilizando la analogía del largo de una cadena de N unidades monoméricas). Aunque se sabe que un caminante aleatorio no siempre vuelve al punto de partida. George Pólya mostró que

¹⁹ Por ejemplo la teoría del enlace de valencia junto con la teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia de Gillespie permite predecir la forma de las moléculas.

²⁰ Brian Hayes es escritor-redactor de American Scientist. Desde 1993 ha escrito la columna de "Ciencias de la Computación", anteriormente, escribió columnas similares para Scientific American, para Computer Language y para The Sciences. De 1972 a 1984 fue editor de Scientific American, de 1990 a 1992 editor de American Scientist y visitante en el Instituto de Investigación de Ciencias Matemáticas en Berkeley y en el Centro Internacional de Física Teórica en Trieste. <http://www.americanscientist.org/authors/detail/brian-hayes>.

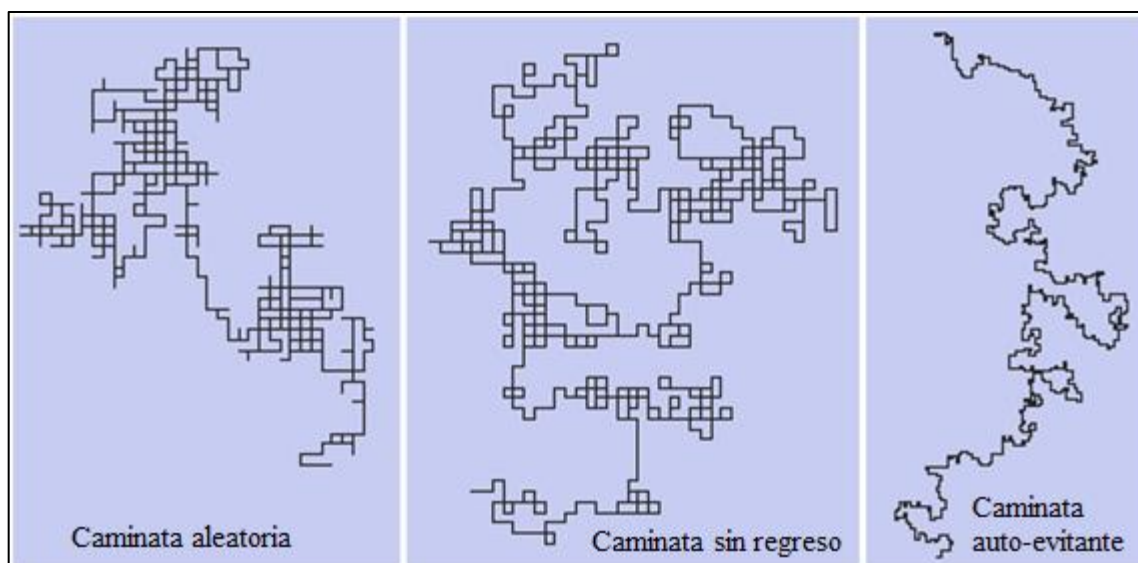
volver o no al punto de partida depende de la dimensionalidad de la red, en una o dos dimensiones un caminante aleatorio volverá al punto de partida cuando el paseo continúa un tiempo suficiente, pero en tres o más dimensiones existe suficiente espacio para perderse y el regreso no se puede garantizar²².

Para paseos en una red 2D, si la probabilidad de un paseo aleatorio RW de regresar al punto de partida es 1, la probabilidad del paseo auto-evitante SAW para que vuelva a visitar el origen debe ser 0. El regreso de un caminante auto-evitante, arbitrariamente largo, tiene poca probabilidad de ocurrir o casi sin posibilidad de encontrarse consigo mismo (limitación que dificultaría su estudio y que supone problemas de escala), de manera paradójica, el número de paseos auto-evitantes es tan numeroso que es un reto el contarlos a todos [96]. Una etapa intermedia entre un paseo aleatorio y uno auto-evitante es la caminata sin regreso NRRW (Figura 1.11b), en donde no hay inversión de sentido de un caminante pero sí puede pasar sobre sí mismo. En una red cuadrada, un paseo SAW tiene cuatro opciones para el primer paso, pero sólo tres opciones para cada paso sucesivo. El número de paseos n_{SAW} de un caminante que se auto-evita de longitud N es $4 \times 3^{N-1}$ y para N grande converge a 3^N .

Las diferencias en las medidas cuantitativas de la geometría de los distintos paseos es importante; el promedio del cuadrado de la distancia entre los puntos extremos de la caminata aleatoria RW de s_i pasos es N (Ecuación 1.8), para las caminatas sin regreso y auto-evitantes SAW tiene una dependencia de potencias, por tanto los paseos auto-evitantes son cualitativamente diferentes con respecto a los paseos aleatorios. El desplazamiento cuadrático medio para el SAW crece como una función no lineal de N y se parece más a $N^{3/2}$ (Figura 1.11c), aunque estos resultados no se han comprobado de manera definitiva [97, 98].

²¹ El paseo SAW en 1D es un caso trivial.

²² <http://www.americanscientist.org/authors/detail/brian-hayes>.



a)

b)

c)

Figura 1.11 a) Caminata aleatoria RW, b) caminata sin regreso NRRW y c) caminata auto-evitante SAW. Cada caminata consta de 1000 pasos. El caminante auto-evitante se muestra en escala reducida debido a que la distancia cuadrática media crece de manera exponencial como $N^{3/2}$.²³

Un paseo aleatorio puede continuar para siempre, mientras que un paseo auto-evitante puede tropezar con un callejón sin salida y quedar atrapado en un sitio de la red y puede ser que ninguno de los otros sitios vecinos sean visitados; en cualquier paso el SAW tiene una probabilidad pequeña de ser atrapado en un camino sin salida (menos del 1 por ciento de los paseos), pero en un paseo por tiempo indefinido tiene el 100% de probabilidad de caer en un callejón sin salida [99].

1.6.6 Enumeración de paseos auto-evitantes en 2D

¿Cómo se contabiliza el número de paseos auto-evitantes (n_{SAW}) distintos de un caminante de tamaño N con s_i unidades monoméricas?, y que por conveniencia el tamaño de un monómero y la distancia r entre cada monómero en la unidad; por ejemplo, un caminante auto-evitante de tamaño $N = 10$ unidades monoméricas o partículas puede tener $n_{SAW} = 78732$ paseos auto-evitantes (Tabla 1.12), además ¿cuántos paseos pueden generarse en una red cuadrada?, ¿son

diferentes a los obtenidos utilizando otra geometría? No existe una fórmula exacta, análoga a la expresión 4^N que enumera paseos aleatorios, pero los límites superior e inferior se pueden establecer. El número de paseos por conteo evitante tiene que ser inferior a 3^N porque ese es el número de paseos no reversibles. Del mismo modo, es fácil construir subconjuntos de los paseos por conteo evitante cuyos números crecen como 2^N ; ejemplo de esta familia de paseos son los que sólo se mueven hacia el Norte o hacia el Este en cada paso. Así, el número de caminatas de n -pasos auto-evitantes por conteo paso a paso debe estar entre 2^N y 3^N .

1.6.7 Conteo de paseos auto-evitantes

En la Figura 1.12 se representa un caminante de 8 partículas en dos dimensiones, las posibilidades de movimiento son Norte (N), Este (E), Sur (S) y Oeste (W).

En la representación del caminante SAW de la Figura 1.12, se esquematiza cómo es posible el recuento de los paseos por enumeración para ocho partículas de un caminante de tamaño $N = 8$, como ya se ha considerado, para $n = 8$ pasos, cada paso representa un lugar dentro del espacio discretizado y que solo una partícula es capaz de ocupar. Para contar el número posible de paseos se inicia considerando una forma cualquiera de la cadena con ocho partículas distribuidas en el espacio entonces se contabiliza el número de posibles paseos:

- se toma uno de los posibles paseos, por ejemplo el mostrado en la Figura 1.12a),
- se disminuye una posición del caminante ($N-1 = 7$), como se observa en la Figura 1.12b), y se consideran los siguientes posibles movimientos a primeros vecinos (3 movimientos),
- se vuelve a disminuir una posición y a considerar los posibles movimientos a primeros vecinos,
- se continua hasta llegar a la posición inicial, obteniéndose el número de paseos $n_{SAW} = 4 \times 3^{N-1}$ (Figura 1.12i)), y
- el punto de origen o de arraigo corresponde a una de las 4 posiciones posibles como se observa en la Figura 1.12i).

²³ *Ibid nota 22.*

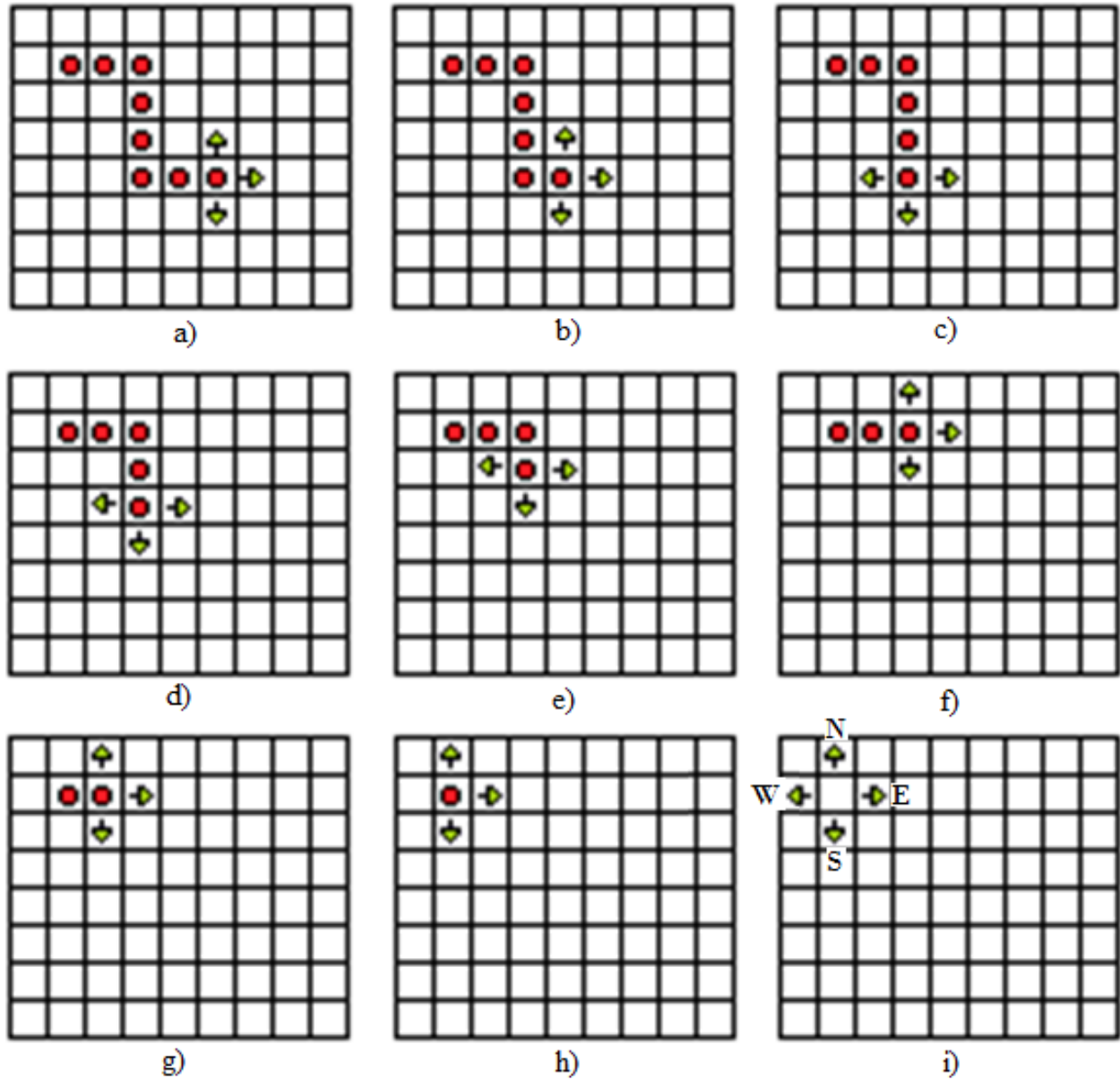


Figura 1.12 Conteo de los posibles paseos en 2D para un caminante auto-evitante arraigado SAW de $N = 8$ partículas. El número de paseos por conteo es de $4 \times 3^{N-1} = 8748$. El primer paso se “sujeta” en cualquiera de las 4 posibilidades de la red, el siguiente considera 3 posibilidades, hasta agotar los n pasos o saltos, menos el anterior.

La Tabla 1.2 muestra 4 columnas en donde se agrupan los caminantes de 1 a 24 pasos, en las columnas 2, 3 y 4 están los conteos de los paseos para cada caminante.

Tabla 1.2 Conteo de paseos auto-evitantes²⁴ en 2D, en los paseos arraigados se distingue el inicio y el final del caminante como si se hubiese sembrado la primera partícula.

N	SIN ARRAIGO ^a	POR CÓMPUTO ARRAIGADO	ENUMERACIÓN Y ARRAIGADO $4 \times 3^{N-1}$
1	1	4	4
2	2	12	12
3	4	36	36
4	9	100	108
5	22	284	324
6	56	780	972
7	147	2172	2916
8	388	5916	8748
9	1047	16268	26244
10	2806	44100	78732
11	7600	120292	236196
12	20437	324932	708588
13	55313	881500	2.12576×10^6
14	148752	2.37444×10^6	6.37729×10^6
15	401629	6.4166×10^6	1.91319×10^7
16	1.07875×10^6	1.72453×10^7	5.73956×10^7
17	2.90575×10^6	4.64667×10^7	1.72187×10^8
18	7.79363×10^6	1.24659×10^8	5.16561×10^8
19	2.0949×10^7	3.35117×10^8	1.54968×10^9
20	5.61125×10^7	8.97697×10^8	4.64905×10^9
21	1.50562×10^8	2.40881×10^9	1.39471×10^{10}
22	4.02802×10^8	6.44456×10^9	4.18414×10^{10}
23	1.07919×10^9	1.72666×10^{10}	1.25524×10^{11}
24	2.8842×10^9	4.61464×10^{10}	3.76573×10^{11}

^aEn esta categoría se encuentran las estructuras palíndromas.

Las columnas de la Tabla 1.2 están dispuestas de la siguiente manera:

- la primera columna contiene el número de unidades monoméricas que componen una cadena de largo N ,
- en la segunda columna se enumeran los paseos sin arraigo, es decir, los caminantes se generan mediante permutaciones de segmentos de cadena de largo N . Las cadenas en principio se pueden doblar por la mitad una o más veces dependiendo del largo de la cadena (por pivoteo), siempre auto-evitándose,

²⁴ *Ibid* nota 22.

- la tercera columna contiene el número de paseos arraigados y generados mediante algoritmos computacionales y
- la cuarta columna contiene el número de paseos arraigados por conteo como $4 \times 3^{N-1}$, véase la Figura 1.12.

Así la única forma conocida para obtener una cifra exacta es averiguar por conteo la realidad de toda la caminata de n pasos (Figura 1.12 y Tabla 1.2).

En 1996 Conway y Guttmann [100] enumeran todos los paseos auto-evitantes para un caminante de $N = 51$ encuentran que hay ¡14.059.415.980.606.050.644.844 paseos! Para este cálculo fue necesario un algoritmo sofisticado y una supercomputadora Intel Paragón con 1,024 procesadores y 10 gigabytes de memoria. Bryan Hayes dice que no tiene sentido describir paseos arraigados cuando se simulan polímeros reales, por ejemplo, cuando se dobla un polímero por la mitad se puede empezar en cualquier extremo reduciéndose el número de pasos por un factor de 2 como se observa en la Figura 1.13.

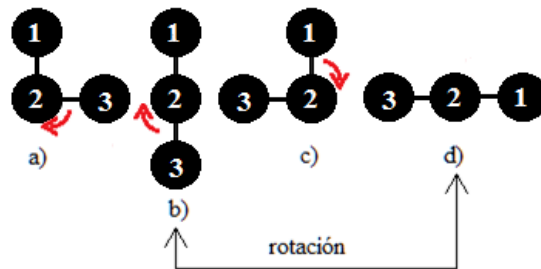


Figura 1.13 Posibles movimientos de una cadena de 3 partículas similares a la flexión de un alambre en 2D. La doble flecha indica como la figura d) puede obtenerse por rotación de b) en 90° a favor de las manecillas del reloj, mientras que c) es la reflexión de a). En ambos movimientos la partícula numerada con 2 representa un pivote²⁵.

²⁵ De la lengua francesa (pivot). Concepto para nombrar un objeto sobre el que se sostiene otro objeto diferente, logrando que uno esté en condiciones de girar sobre el otro. Esto es habitual en mecanismos formados por diversas piezas que interactúan entre sí.

La Figura 1.13 muestra las posibles permutaciones de una cadena de 3 partículas:

- la estructura de partida puede ser cualquiera de las cuatro,
- para este caso las flechas señalan como en a) la rotación de una partícula en el sentido de las manecillas del reloj a partir de la estructura inicial,
- del arreglo a) al c), solo se mueve la partícula 3 alrededor de 2,
- en la estructura d) se mueve la partícula 1 alrededor de 2, esta descripción no implica que 2 se encuentre arraigado,
- los movimientos ilustrados de esta manera deben cumplir con el movimiento en 2D con conectividad 4 y
- por último se ve cómo se puede pasar de una estructura a otra empleando operaciones de simetría y que dan pie al llamado algoritmo de pivoteo.

En la Figura 1.14 se comparan gráficamente el crecimiento de los paseos auto-evitantes en una red cuadrada 2D de 1 a 24 partículas por medio de los diferentes conteos referidos en la Tabla 1.2.

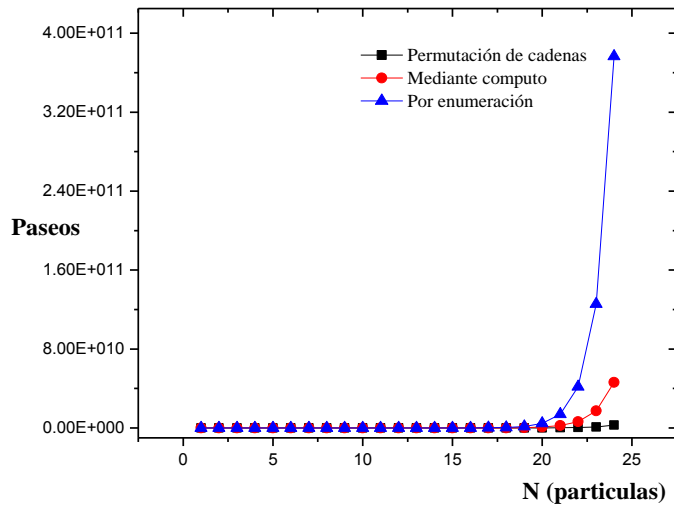


Figura 1.14 Conteo de la cantidad de paseos auto-evitantes para un caminante desde 1 hasta 24 partículas referidos en la Tabla 1.2. Los paseos correspondientes a las líneas en negro (sin arraigo) y en rojo (arraigado) se obtienen por algoritmos computacionales. La tendencia marcada con la línea azul se obtiene mediante la enumeración formulada como $4 \times 3^{N-1}$.

1.6.8 Desplazamiento cuadrático medio de caminantes auto-evitantes

En la Figura 1.15 se muestra la tasa de crecimiento de paseos auto-evitantes, esto de acuerdo con Brian Hayes²⁶, en términos de la constante de conectividad $\mu^{(d)}$ de una malla [101]. Aquí se muestra como el caminante con arraigo crece rápidamente comparado con el no arraigado, casi de manera lineal, conforme crece el número de pasos del caminante (aproximadamente $N=15$) la constante de conectividad ya no es determinante. El parámetro es determinado con un autómata en una malla 2D, la constante de conectividad mide el número promedio de sitios disponibles para una caminata y determina la tasa de crecimiento en el número de paseos. Se considera que el valor límite para un número de pasos grande N es de aproximadamente 2.679192495 [97].

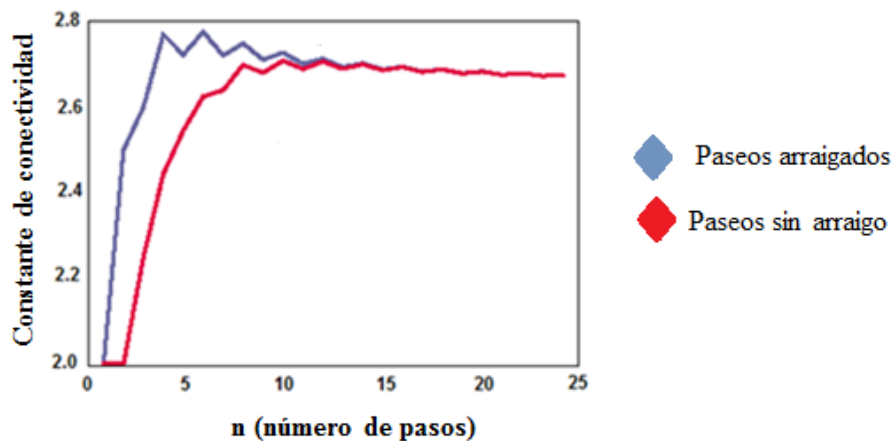


Figura 1.15 El número medio de sitios disponibles para un caminante SAW, determinan la tasa de crecimiento de paseos, para N grande, $\mu^{(d)}$ es igual a 2.679192495.

El número promedio de sitios disponibles determinan el desplazamiento cuadrático promedio del caminante auto-evitante. Estudios computacionales apoyan fuertemente la hipótesis de que el desplazamiento de un SAW en 2D crece como $N^{3/2}$, en que $2\nu = 1.5$ unidades. En general se da por hecho que este resultado es correcto, hasta ahora no se ha demostrado que el exponente 2ν

²⁶ *Ibid* nota 20.

debe ser mayor que 1 o menor que 2. La Figura 1.16 [96], muestra la distancia cuadrática media $\langle R_N^2 \rangle$ para tres tipos de caminantes: RW, NRRW y SAW.

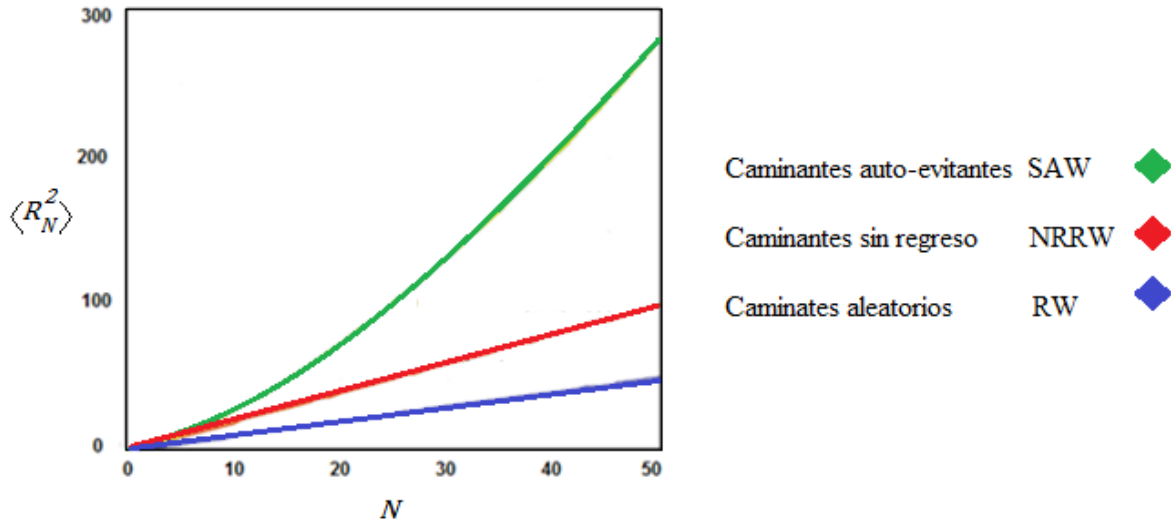


Figura 1.16 Evolución de la distancia cuadrática media $\langle R_N^2 \rangle$ para paseos: aleatorios RW, sin inversión o retorno NRRW y auto-evitantes SAW. En donde este último crece como $N^{3/2}$. Por tal motivo el SAW mostrado en la Figura 1.11c está en una escala reducida.

Resultados rigurosos sobre el recuento de los paseos por cuenta evitante también son escasos. La ley de crecimiento no ha sido explicada a partir de primeros principios, ni siquiera es seguro que el número de paseos aumenta a medida que N se hace más grande porque pueden quedar atrapados. La ley de crecimiento asintótica es una aproximación utilizada por químicos y físicos, y es lo suficientemente buena para ellos, pero no es satisfactoria para los matemáticos.

Lo ideal sería una fórmula para calcular el número exacto de paseos para cualquier valor de N , sin el conteo laborioso. Conway y Guttmann [102] en su análisis, dan argumentos convincentes del porqué, no hay prueba de que alguna función analítica sencilla prediga el número exacto de paseos auto-evitantes n_{SAW} . La evidencia empírica sugiere que para valores grandes de N el número de paseos crece como 2.679192495^N [101] pero esta suposición no es una ley de crecimiento.

La técnica, llamada algoritmo de pivoteo, descrita por primera vez por Moti Lal y más recientemente refinado por Neal Madras y Alan Sokal D. [103, 104], se basa en la idea de elegir al azar un punto de giro en algún lugar a lo largo del paseo y luego girar, reflejar o invertir el segmento en un lado del pivote. Si el resultado no superpone o entrecruza el recorrido del caminante el movimiento es aceptado, de lo contrario se elige un nuevo pivote y se vuelve a intentar. El algoritmo de pivote es bastante diferente a lo descrito por enumeración. En este caso los paseos sucesivos en la secuencia están altamente correlacionados, pero la repetición de las transformaciones barre la memoria de las configuraciones. En realidad, el pivoteo no genera un paseo auto-evitante paso a paso, sino que elige a uno y lo transforma en otro.

Resumen

En el contenido de este primer capítulo, se pretende dar la justificación del por qué la propuesta de este trabajo de tesis, partiendo de la conjetura de que los fenómenos de difusión o transporte ocurren en medios bastante heterogéneos y/o no homogéneos, dada nuestra comprensión de ellos, su estudio se torna complejo, por ello los modelos más sencillos para abordar este estudio son los llamados “modelos de malla o de red”, que consideran un espacio discreto. Del conjunto de conocimientos teóricos consideramos los elementos necesarios para este estudio y les asignamos una jerarquía:

- Es necesario tener en cuenta elementos de topología, tanto para el medio que se desea modelar, como para los posibles fenómenos que pueden ocurrir en él.
- Las características que se pretenden modelar de un medio, de manera natural, no son fáciles de describir en términos de la geometría tradicional o euclídea, así que, hemos considerado la geometría fractal para ello.
- Los polímeros en solución son ejemplos de los sistemas más estudiados por medio de modelos de malla o de red, con los que se han analizado fenómenos de difusión, considerando el efecto del medio sobre la cadena de monómeros.

- Se utilizan los elementos de la teoría de la percolación, que aporta los elementos necesarios para entender fenómenos que ocurren en sistemas desordenados y tortuosos.
- Para la difusión de partículas, en la literatura se ha utilizado ampliamente el caminante aleatorio RW y el caminante auto-evitante SAW. Este último considera el efecto del volumen excluido. Los dos modelos consideran desplazamientos probabilísticos, la evolución de ellos se ha estudiado ampliamente para medios homogéneos.
- Así, en este trabajo estamos interesados en la difusión de partículas en medios heterogéneos, desordenados y tortuosos, considerados como sistemas o medios fractales, por ello se requiere para su estudio al RW y al SAW.

CAPÍTULO II

CONSTRUCCIÓN DE REDES Y CARACTERIZACIÓN ESTADÍSTICA

En este capítulo se describe la construcción de diferentes redes en el espacio 2D con geometría cuadrada. Para tal objetivo se utiliza el Modelo Dual de Sitios y Enlaces, el cual fue desarrollado por el Profesor Vicente Mayagoytia en el área de Fisicoquímica de Superficies del Departamento de Química, UAM Iztapalapa [105-107].

Para la construcción de las redes se utiliza el método de Monte Carlo Clásico (CMC), en donde las redes que se crean están compuestas por dos tipos de elementos interrelacionados: nodos y enlaces (como se llaman en teoría de grafos [9, 108]). Cada uno de estos elementos tiene una característica diferente y claramente reconocible. Los nodos y las líneas están dispuestos en una configuración particular de la red (cfr. Figura 1.2), con una determinada geometría. A los nodos en el DSBM les llamaremos sitios, mientras que a las líneas les llamaremos enlaces, cada enlace se encuentra conectado a dos sitios adyacentes, de esta manera los sitios están asociados a cierta cantidad de enlaces (conectividad).

2.1 Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DSBM)

El Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DSBM) se ha utilizado ampliamente para estudiar las estructuras geométricas de materiales porosos como los óxidos de silicio SBA15²⁷ [109-112] y MCM41 [113, 114], fenómenos de percolación [115], procesos de adsorción-desorción [116] en superficies heterogéneas, fenómenos de difusión [105] y liberación de fármacos [117], por mencionar algunos. Estos procesos están relacionados con una gran variedad de problemas físicoquímicos que tienen lugar sobre la superficie de un material así como en el interior del mismo, por ejemplo, una roca, una arcilla, una resina, un fármaco, una membrana celular, etc.

El DSBM es un modelo con el cual se pueden construir redes numéricas correlacionadas (que representan ambientes o medios), es decir, no homogéneas, con arreglos geométricos bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D) con diferentes conectividades. El DSBM se caracteriza por su sencillez de implementar. La construcción de las redes se fundamenta en la utilización de dos elementos: sitios y enlaces, que cumplen con principios estadísticos básicos.

²⁷ Aunque el SBA15 no forma redes.

Las propiedades de la red están definidas por el traslape, el cual se obtiene por dos funciones de distribución de tamaños: una para los sitios (F_S) y otra para los enlaces (F_B). La correlación (Φ), en este modelo caracteriza al posible traslape (Ω) existente entre las dos distribuciones.

El DSBM se puede describir como un procedimiento estadístico de simulación [30, 77, 118]. Puede generarse un arreglo numérico en 2D o en 3D con diferente geometría: triangular, hexagonal, cuadrada, piramidal, cúbica, etc., utilizando números pseudo-aleatorios (Monte Carlo-Metrópolis) con elementos conectados entre sí mediante uniones. El DSBM es acorde al lenguaje de la teoría de grafos, que considera sistemas con dos tipos de elementos para generar modelos de red, como medios de evolución que direccionan fenómenos de difusión, por ejemplo, de acuerdo en lo expuesto en el Capítulo 1, las redes generadas se pueden considerar como sistemas complejos²⁸.

2.1.1 Distribución de tamaños para sitios y enlaces

Se establecen dos distribuciones normalizadas para los elementos de red en el DSBM [107], una para sitios $F_S(R_S)$ y otra para enlaces $F_B(R_B)$ ²⁹. Las probabilidades de existencia de sitios R_S y enlaces R_B (por ejemplo, diámetros, longitudes o volúmenes) con tamaños menores a los sitios, están dadas, respectivamente, por las integrales siguientes:

$$S(R_S) = \int_0^{R_S} F_S(R_S) dR_S \quad \text{y} \quad B(R_B) = \int_0^{R_B} F_B(R_B) dR_B \quad (2.1)$$

donde $S(R_S)$ y $B(R_B)$ representan el área bajo la curva para las funciones de distribución de ambos, sitios y enlaces: $F_S(R_S)$ vs R y $F_B(R_B)$ vs R . Se ilustra en la Figura 2.1 las funciones de distribución de los sitios y de los enlaces, las cuales son funciones de distribución uniforme debido a su simplicidad, así mismo R es una métrica, que expresa las magnitudes físicas de los

²⁸ Vid pp 11-28.

²⁹ Del inglés S site (sitio) y B bond (enlace, conexión).

elementos de red. La métrica, también puede representar la energía de adsorción en el caso de una superficie sólida [107].

Una distribución de probabilidad³⁰ se adjunta a la magnitud de la métrica para cada tipo de elemento. A fin de examinar relaciones de causa y efecto [107] entre los dos tipos de elementos, la naturaleza de la métrica debe poseer propiedades del mismo tipo para ambos: sitios y enlaces, en este caso se le ha llamado tamaño R .

2.1.2 Principio de construcción auto-consistente

Una red formada por sitios y enlaces que contenga morfología y topología de ambos elementos debe tener un principio de construcción, el cual dice que “el tamaño de un sitio debe ser mayor o al menos igual que el tamaño de cualquiera de los enlaces, mediante los cuales se encuentra conectado, o recíprocamente el tamaño de un enlace debe ser menor o a lo mucho igual a cualquiera de los sitios que conecta”.

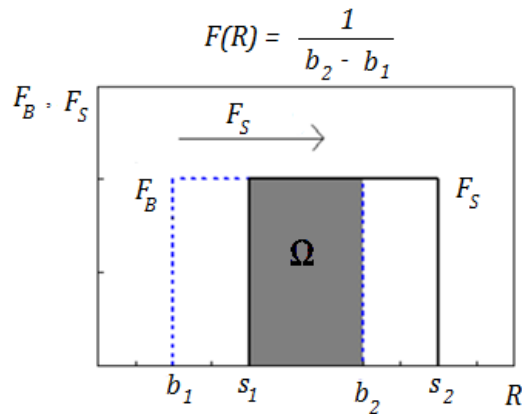


Figura 2.1 Funciones de densidad uniforme: para enlaces, línea punteada, $B(- -)$ y para sitios, línea continua, $S(- - -)$. El traslape Ω se representa por la zona sombreada: $\Omega = b_2 - s_1$. El traslape indica los tamaños que comparten ambas distribuciones: sitios y enlaces y $F(R) = \frac{1}{b_2 - b_1}$ representa el inverso de la magnitud de la distribución uniforme, en este caso se ha representado la de enlaces.

³⁰ v. gr. Funciones de distribución uniformes para ambos.

En la Figura 2.1 la distribución de tamaños para enlaces está ubicada a la izquierda cumpliendo con el principio auto-consistente, sobre el eje horizontal los tamaños se incrementan a la derecha. Solo en el caso de existir enlaces y sitios del mismo tamaño las distribuciones estarían completamente traslapadas.

2.1.3 Leyes de auto-consistencia

Mediante dos leyes se cumple el principio de construcción de una red. Primero, de manera global se impone una restricción sobre la red.

Primera Ley: de la distribución de enlaces se debe tener un número suficiente de enlaces con tamaños adecuados que puedan ser conectados a todos los sitios correspondientes a una distribución dada de tamaños, esto es:

$$B(R_B) - S(R_S) \geq 0 \quad (2.2)$$

para cualquier R , como ya se ha mencionados esta métrica llamada tamaño R posee propiedades del mismo tipo para sitios (S) y enlaces (B) y representan propiedades físicas como: diámetro, longitud o volumen.

Se observa de la Figura 2.1 que en el traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces existen sitios de tamaño R_S menor en contraste con tamaños mayores de enlaces R_B (zona sombreada de R); enlaces mayores a R_S violan el principio de construcción.

Por esto, de forma natural, surge una correlación entre tamaños de elementos para cumplir el principio de construcción e implica que el evento de encontrar un elemento de tamaño R_B conectado a un sitio de tamaño R_S no es independiente. De tal forma que la densidad de probabilidad de ocurrencia conjunta de ambos eventos se expresa como (119):

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

donde $\Phi (R_S, R_B)$ representa una función de correlación sitio-enlace, la cual es efecto del traslape Ω , que es una magnitud impuesta por el modelo DSBM de manera arbitraria para ambas funciones de distribución y Φ está relacionado a alguna longitud de correlación, que puede ser designada como ξ^{31} , que es un parámetro físicamente más representativo. Si $\Phi (R_S, R_B) = 1$, los eventos son independientes y la red sería construida totalmente al azar, pero si $\Phi (R_S, R_B) \neq 1$ los eventos se encuentran correlacionados. La presencia de la correlación conduce a la **Segunda Ley** de construcción, la cual queda como:

$$\Phi (R_S, R_B) = 0 \quad \text{para cualquier } R_S < R_B \quad (2.4)$$

La función de correlación $\Phi (R_S, R_B)$ debe ser de tal forma que integrada sobre todo el espacio debe conducir a la expresión siguiente:

$$\int_0^{R_S} \Phi (R_S, R_B) F_B (R_B) dR_B = \int_{R_B}^{\infty} \Phi (R_S, R_B) F_S (R_S) dR_S = 1 \quad (2.5)$$

Que expresa la seguridad de hallar para un sitio de tamaño R_S un enlace de tamaño R_B igual o menor, recíprocamente dado un tamaño R_B encontrar un sitio de tamaño mayor R_S o igual.

Entonces, para la Figura 2.1, la probabilidad de hallar un sitio o un enlace de tamaño no mayor que R en los intervalos semi-abiertos, $b = [b_1, b_2)$ y $s = [s_1, s_2)$, en donde las funciones de densidad están definidas, los sitios y enlaces comparten elementos de tamaño R en ambas distribuciones en la zona sombreada y se relacionan por medio de la densidad de probabilidad conjunta sitio-enlace: $F(R_S \cap R_B)$. Esta probabilidad permite encontrar un sitio de tamaño entre R_S y $R_S + dR_S$ conectado a un enlace de tamaño entre R_B y $R_B + dR_B$ [120].

³¹ Más adelante se verá que sitios o enlaces en una red numérica, guardan una relación particular entre sí, esta interacción está en función de la distancia física entre ellos.

De esta forma $\Phi(R_S, R_B)$ representa la función de correlación entre sitios-enlaces y proporciona la información del procedimiento de asignación de los elementos sitio-enlace dentro de la red, de tal manera que establece un parámetro de control. Así que la asignación de tamaños es lo más aleatoria posible, garantizando el principio de auto-consistencia, por tanto Φ se reduce a [107]:

$$\Phi(R_S, R_B) = \begin{cases} 0 & R_S < R_B \\ \frac{e^{-\int_{R_B}^{R_S} dB}}{B(R_B) - S(R_B)} & R_S \geq R_B \end{cases} \quad (2.6)$$

La función de correlación de sitios-enlaces $\Phi(R_S, R_B)$ puede calcularse explícitamente para el caso de distribuciones de tamaño uniforme, en esta Ecuación 2.6, el denominador de la exponencial $(B-S)$ representa una magnitud, referida a la cantidad de elementos que contiene la distribución de enlaces (B) asignados a la cantidad de elementos que contiene la distribución de sitios (S) . La cantidad de enlaces deben ser suficientes para conectar a la cantidad de sitios, independientemente de la conectividad, suponiendo que sitios y enlaces están distribuidos de manera uniforme (ver Ecuación 2.2), con densidades F_S y F_B . El denominador de la función: $B(R_B) - S(R_S)$ representa el traslape entre las funciones de distribución ver Figura 2.1.

$$F_S(R) = \begin{cases} F_0 & \text{si } s_1 \leq R \leq s_2 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad \text{y} \quad F_B(R) = \begin{cases} F_0 & \text{si } b_1 \leq R \leq b_2 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2.7)$$

El principio de construcción genera redes numéricas con sitios y enlaces que poseen cierta correlación, la que se debe determinar, es decir, se pesan las probabilidades de los elementos de la red en función de su ambiente inmediato. La Figura 2.2 muestra dos tipos de redes que se pueden generar con el DSBM.

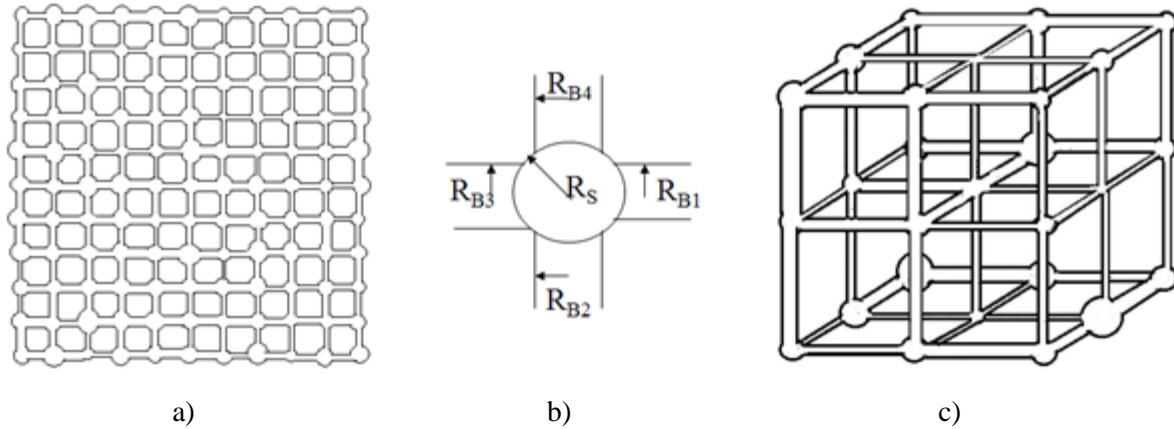


Figura 2.2 Representación de la conectividad de sitios con tamaño R_S y enlaces con tamaño R_B para elementos de red: a) y b) conectividad 4 en 2D y c) conectividad 6 en 3D. En a) y c) se observa como existen sitios y enlaces de diferente R pero conservando el principio de construcción.

Las redes formadas por sitios y enlaces con el DSBM a cierto traslape ($\Omega \geq 0$) entre sus distribuciones, mantienen una morfología y topología que cumple el principio de construcción “con sitios más grandes o al menos iguales al tamaño de cualquiera de sus enlaces y con una cantidad necesaria y suficiente de enlaces de acuerdo a la conectividad de los sitios”.

La presencia de correlaciones entre sitios y enlaces (o elementos de la red) es clave para explicar algunos procesos físicoquímicos como la evolución de un fenómeno de percolación en una red correlacionada, por lo que el estudio de este tipo de sistemas resulta interesante.

2.2 Redes numéricas utilizando el DSBM

La literatura reporta que en la mecánica estadística se efectúan estudios de fenómenos críticos utilizando redes de Bethe dentro de la aproximación de campo medio, estas son relativamente menos complicadas y similares a las construidas utilizando el DSBM. Son un modelo de red ramificado con número de coordinación o de conectividad Z , que a partir de un origen emanan Z enlaces que lo conectan a sus sitios vecinos, de aquí emanan a su vez $Z-1$ enlaces además del origen en un esquema finito [63]. Sin embargo, este modelo es bastante predecible y poco realista por ejemplo:

- el radio de tubo o de enlace es constante,
- el radio de sitios o cavidades también es constante,
- el modelo carece de tortuosidad,
- su ramificación ($Z-1$) es constante, bastante predecible y no se parece a las redes libres de escala (cfr. comportamiento en la Figura 1.3, Capítulo I) y
- tienen dimensión infinita.

Se podrían enumerar bastantes desventajas más, sobre todo cuando se examinan y comparan con los sistemas de flujo o transporte reales en que los tubos, canales o enlaces representan segmentos convergentes o divergentes, tienen deformaciones o estrangulamientos de diferente magnitud, la coordinación entre un sitio y enlaces es variable y no se mantiene una forma periódica predecible de su estructura. El DSBM logra una mejor representación de estos sistemas y los fenómenos que se simulan en las redes generadas son más representativos a los sistemas reales.

2.2.1 Criterio para el estudio de las redes numéricas

De forma sucinta la metodología que se empleará en este estudio consta de:

- construir un banco de 1400 redes,
- obtener una representación de las redes mediante un criterio estadístico,
- obtener los histogramas de frecuencias de los elementos de la red. Las distribuciones de frecuencias en los histogramas deben comportarse uniformemente, y
- observar que la función de correlación entre sitios y enlaces para cada traslape permita una distribución de elementos particular en cada una de las redes, observándose agrupaciones por tamaños de los elementos que componen a la redes en los histogramas de frecuencias.

Como se ha descrito en el Capítulo I esta metodología debe generar sistemas con características afines como aquellos en donde ocurren procesos de transporte. En el DSBM la conectividad o

número de coordinación con sitios vecinos es independiente del tamaño de la red, pueden ser de 2, 3, 4 o mayor para sistemas hexagonales o romboédricos para redes en 2D.

Con otros métodos de construcción de redes se han reportado valores de conectividad mayores, con los cuales se pueden comparar resultados, sin embargo, en este trabajo no se buscó hacer un estudio del efecto de la conectividad. Alberts en 2005 reportó valores de 12 [67], mientras que Hiu-YanYeung y colaboradores en 2006 reportaron valores mayores en materiales cerámicos utilizando tomografía micro-computarizada [25].

2.2.2 Construcción de redes numéricas mediante el DSBM

De acuerdo a la Figura 2.1 en la construcción de las redes, el límite inferior b_1 y superior b_2 del tamaño de enlaces se mantienen constantes, ocurre lo mismo con el intervalo de tamaños de sitios que en todo momento se mantiene constante en los valores de s_1 y s_2 [120].

Ambas funciones de densidad de probabilidad deben estar normalizadas, $\int_{s_1}^{s_2} F_S(R_S)dR_S$, y $\int_{b_1}^{b_2} F_B(R_B)dR_B$ por lo que la constante de normalización puede calcularse de una u otra ecuación integrando entre los límites superior e inferior y luego igualando a 1 el resultado es:

$$\int_{b_1}^{b_2} F_B(R_B)dR_B = 1 \quad (2.8)$$

Como se sabe la función de densidad uniforme es una función de densidad de probabilidad constante y es la forma más sencilla de una función, en donde $F_B(R_B) = K$, por lo que $K = \frac{1}{b_2-b_1}$, por tanto la función de tamaños queda definida como:

$$F(R) = \frac{1}{b_2-b_1} \quad (2.9)$$

El traslape es definido entonces como:

$$\Omega = (b_2 - s_1)F_i(R), \quad i = B, S \quad \text{y} \quad b_2 - b_1 = s_2 - s_1 \quad (2.10)$$

Para simular las redes numéricas a diferente traslape y bajo los términos de distribución fija de enlaces se desplaza solamente la distribución de los sitios como se muestra en la Figura 2.1.

La Tabla 2.1 muestra cómo varía el intervalo de la distribución de sitios de s_2 a s_1 de izquierda a derecha tal como se muestra en la Figura 2.1, mientras que, el intervalo de enlaces de b_2 a b_1 se mantiene fijo, $b_1 = 8$ y $b_2 = 56$ unidades y $K = 2.083 \times 10^{-2}$. El traslape Ω pasa de un valor mayor a un valor menor, como se ha mencionado las funciones de densidad de probabilidad están normalizadas y Ω tiene valores entre (1, 0] (ver Ecuación 2.10) El tamaño promedio de sitios está calculado como $R_S = (s_1 + s_2)/2$.

Tabla 2.1 Se muestran los valores promedios de sitios, los tamaño inferior y superior de sitios. Los tamaños de enlaces son constantes: $b_1 = 8$ y $b_2 = 56$ unidades, $K = 2.083 \times 10^{-2}$. El intervalo de tamaños de sitios es de 48 unidades. -

Promedio \bar{R}_S	Límite inferior s_1	Límite superior s_2	Traslape Ω
37.0	13.0	61.0	0.896
37.2	13.2	61.2	0.892
37.5	13.5	61.5	0.885
38.0	14.0	62.0	0.875
40.0	16.0	64.0	0.833
42.0	18.0	66.0	0.792
46.0	22.0	70.0	0.708
51.0	27.0	75.0	0.604
56.0	32.0	80.0	0.500
61.0	37.0	85.0	0.398
66.0	42.0	90.0	0.292
70.0	46.0	94.0	0.208
75.0	51.0	99.0	0.104
80.0	56.0	104.0	0

2.3 Simulación de redes numéricas

Se emplearon distribuciones uniformes para ambos elementos de las redes de sitios y enlaces, la conectividad de las redes regulares o mallas numéricas construidas es de cuatro con arreglo cuadrado en 2D. La construcción de redes usando funciones de distribución Gaussiana tienen restricciones asociadas al traslape y al tamaño de la red o escala, esto es, a mayor tamaño de red y a mayor traslape el tiempo de computo crece exponencialmente, por ello se descartó su empleo en este trabajo. Las redes numéricas construidas tienen las siguientes características:

- el tamaño de las redes es de $L \times L$ sitios y $2L \times L$ enlaces, en este caso particular $L = 1000$, por tanto cada red cuenta con 10^6 sitios,
- los elementos de interés de las redes construidas son los sitios, debido a que los fenómenos que desean observarse por el momento son sobre sitios,
- se generaron 100 redes para cada traslape (ver Tabla 2.1),
- en total se generó un banco de 1400 redes, 100 redes para 14 traslapos,
- las redes son isotrópicas de tal manera que la única relación entre los elementos de red es la interacción a distancia sitio-sitio y
- en este esquema de estudio, la variable de interés se denomina longitud de correlación (ξ) y en adelante será el parámetro de control³² en todas las mediciones. La ξ es una variable originada por el traslape, que como se ha mencionado es un parámetro impuesto por el modelo DSBM entre los sitios dentro de una red dada.

2.3.1 Histogramas de frecuencias de sitios en las redes numéricas

Las distribuciones de tamaños de sitios a diferente traslape y los histogramas de frecuencias se presentan a continuación; el tamaño máximo y mínimo de los sitios para las distribuciones están dados en la Tabla 2.1.

³² Más adelante se definirá formalmente la longitud de correlación ξ .

En la Figura 2.3 se han colocado 6 gráficos que caracterizan a tres redes numéricas con traslape $\Omega = 0.896, 0.875, 0.0$. Los ejes de coordenadas que corresponden: a “y” representa el tamaño de los sitios R_s y en “x” se representa la cantidad de sitios. Es necesario observar el comportamiento de las distribuciones de frecuencias debido a que deben corresponder a distribuciones uniformes. Se describe el contenido de la figura de la siguiente manera:

Para traslape $\Omega = 0.896$

- Figura 2.3, 1a): distribución de sitios que corresponde a la columna número uno de una matriz numérica de 1000×1000 . Aquí se observa la distribución de los tamaños numéricos de 1000 sitios.
- Figura 2.3, 1b): distribución de sitios que corresponde a las 10 primeras columnas de la matriz numérica de 1000×1000 o red. Aquí se observa la distribución de los tamaños numéricos de 10,000 sitios.
- Figura 2.3, 1c): histograma de frecuencias correspondiente a los 1000 sitios de la Figura 2.3, 1a) o distribución de frecuencias.

La misma explicación corresponde para las otras figuras, esto es, para las Figuras 2.3, desde la Figura 2.3, 2a) hasta la Figura 2.3, 3c) y su correspondiente traslape de $\Omega = 0.875$ y $\Omega = 0.0$.

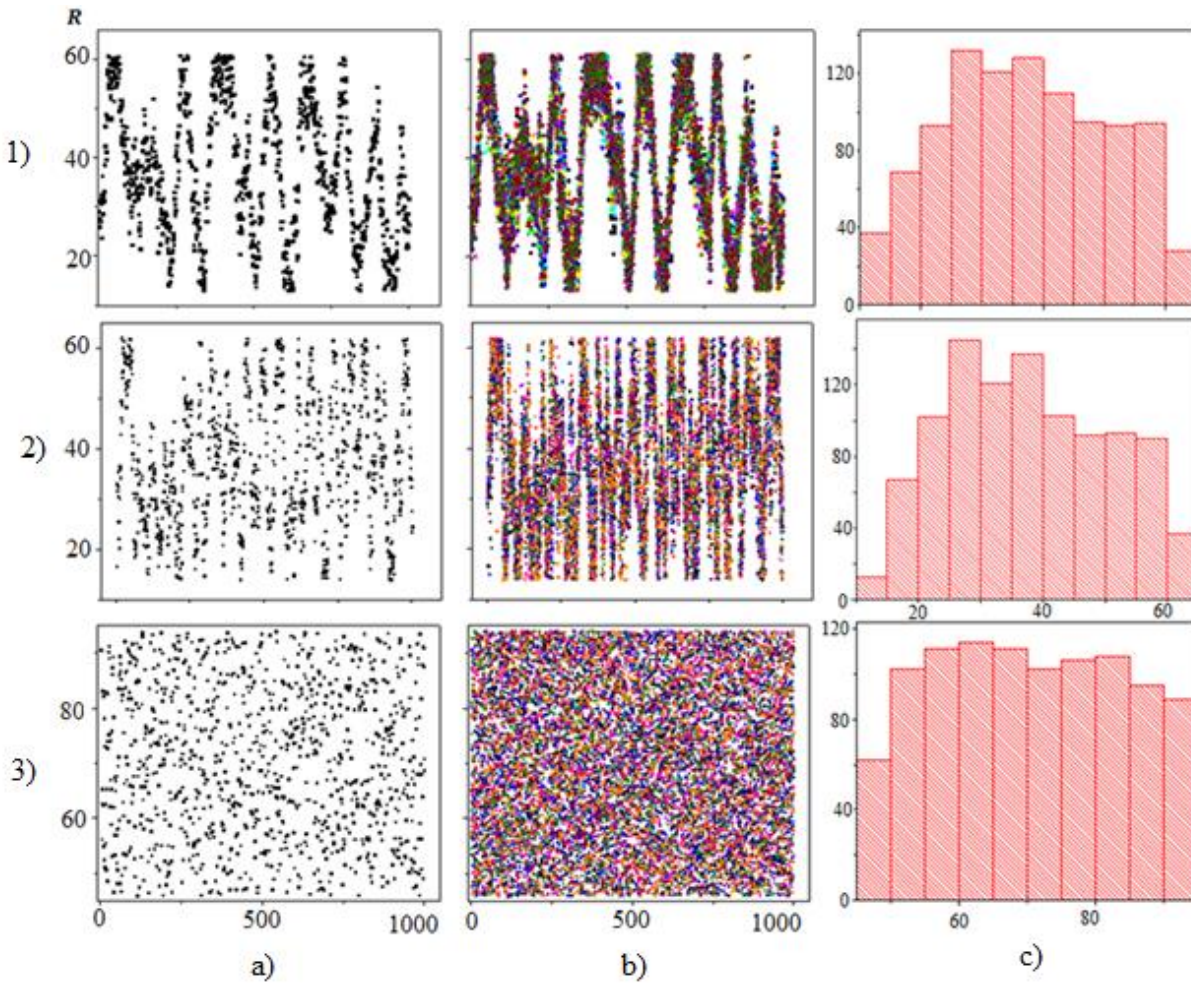


Figura 2.3 Distribuciones de sitios e histogramas de frecuencias a diferente traslape entre sitios y enlaces: 1) $\Omega = 0.896$, 2) $\Omega = 0.875$ y 3) $\Omega = 0.0$, a) sitios de una columna de 1000 sitios, b) sitios de 10 columnas con 10,000 sitios y c) histograma de frecuencias para 1000 sitios. A cada columna de sitios le corresponde un color, como se puede apreciar mejor en b).

2.3.2 Resultados

Las distribuciones de tamaños de los sitios mostrados en las Figuras 2.3: desde la Figura 2.3, 3b) hasta la Figura 2.3, 1b), de abajo hacia arriba, permiten observar una agrupación de los sitios por tamaños R_s dentro de las redes numéricas. Se observa en estas figuras que aumenta la formación de zonas diferentes y la población en número de sitios en ellas. En los histogramas de frecuencias³³ de las Figuras 2.3, c), con la inclusión de todos los elementos de la red se

³³ Las figuras de los histogramas y las distribuciones se obtuvieron con el programa OriginPro 8SR0 v8.0724(B727).

mostrarían barras con la misma altura para todos los traslapes, indicando que los contenidos en tamaños R_S de las redes corresponden a funciones de distribución uniforme.

Los histogramas muestran que a valor de traslape cero, Figura 2.3, 3c), existe una mayor variabilidad de tamaños R_S para sitios, la red formada es más aleatoria y se manifiesta en la altura más uniforme de las barras de distribución. De los tres histogramas de 1000 sitios con $\Omega = 0.896$, 0.875 , 0.0 , con menor uniformidad en las alturas (Figura 2.3, 1c), contiene a los sitios de la red más agrupados. El teorema del límite central nos dice que: los histogramas de frecuencias de una gran cantidad de números aleatorios tomando q a la vez se distribuyen de manera normal cuando su cantidad es muy grande.

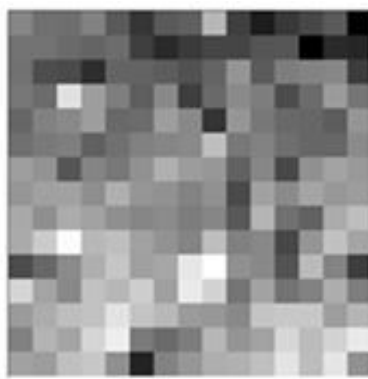
En términos del traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces, mayor Ω (ver Figura 2.3, 1c)) existe menor variabilidad de tamaños de los sitios; hay menor uniformidad en las alturas de las barras. Se puede la distribución de una gran cantidad de números aleatorios, Figura 2.3, 3c), corresponde a una distribución uniforme, lo que es acorde con distribuciones uniformes de sitios y enlaces del DBSM. Si Ω aumenta los sitios se agrupan por tamaños y comienzan a aparecer patrones de acuerdo con el principio de construcción. Las zonas de segregación de tamaños R_S están mejor definidas³⁴. Los patrones angostos muestran pocas zonas densas de sitios, se agrupan pocos sitios.

La Figura 2.3, 2b) presenta una distribución de tamaños con un agrupamiento incipiente en que comienzan a aparecer los patrones. En este trabajo el agrupamiento se observa claramente cuando el traslape es alto ($\Omega \gtrsim 0.8$). A partir de este comportamiento, la preferencia de agrupación nos indica que los elementos guardan una relación de correlación para la métrica empleada R_S del mismo valor.

³⁴ Del latín *segregare*, separar, apartar de un grupo, en el vocablo latino se compone de *segregarse*, separarse del rebaño.

2.3.3 Redes numéricas y tratamiento de imagen

La agrupación de elementos dentro de la red, muestra la tendencia a formar aglomeraciones que resultan en la formación de patrones bien definidos o estructuras correlacionadas, que pueden visualizarse mediante conversión de archivos texto a imágenes y la binarización sucesiva de las redes numéricas (Figura 2.4).



a)

29.0	27.0	26.9	28.6	24.9	21.6	24.9	25.5	33.5	22.5	19.4	21.9	23.3	24.9	16.8
27.2	27.2	26.4	25.9	26.7	22.4	20.5	22.1	23.1	23.0	24.5	24.6	16.6	20.6	20.1
27.1	23.8	23.5	20.9	25.9	25.9	25.2	24.2	25.9	30.4	25.0	28.3	28.7	29.1	22.2
27.6	26.6	37.4	31.2	28.3	25.3	29.3	22.4	26.3	29.4	28.2	23.7	26.6	30.9	27.5
26.0	28.6	29.4	31.1	26.3	26.7	31.2	29.3	21.5	30.5	27.7	26.3	26.1	25.2	30.4
27.0	27.9	28.4	25.6	27.1	28.5	29.0	29.4	34.3	27.8	28.6	26.9	26.1	26.1	29.5
31.2	30.2	24.6	28.8	27.7	30.0	32.9	31.0	30.6	25.7	29.0	23.4	30.0	31.7	30.8
30.5	31.5	31.6	29.8	32.9	30.5	30.1	28.7	30.0	23.5	31.5	29.5	31.9	30.7	31.1
32.2	29.9	32.5	31.6	29.9	29.0	29.5	28.2	29.0	24.8	33.3	27.1	25.7	32.4	34.2
32.4	35.4	39.9	33.6	34.3	31.5	30.2	28.9	34.2	28.5	29.2	23.3	30.5	34.5	31.9
23.7	26.2	29.5	32.8	34.9	31.4	32.1	38.0	40.2	30.0	29.3	24.4	33.9	28.8	22.3
36.3	31.8	29.3	34.5	33.5	35.6	31.4	38.3	36.0	27.4	31.6	27.2	28.6	32.6	28.3
30.9	32.6	34.2	34.6	37.6	34.7	33.6	30.9	30.7	29.3	34.7	35.1	35.1	31.2	33.4
28.6	33.3	31.9	36.3	38.6	27.9	26.5	28.2	33.4	30.4	31.7	36.5	34.0	36.1	38.3
31.6	31.1	34.4	35.0	29.9	19.9	28.7	30.6	32.7	33.0	34.4	37.7	34.1	37.8	30.1

b)

Figura 2.4 a) Imagen en niveles de gris del fragmento de una red numérica de 15×15 sitios convertida utilizando el software ImajeJ³⁵, b) red numérica que genera la imagen a). Para simplificar se ilustran a los valores de la red numérica con una cifra significativa después del punto decimal.

La Figura 2.4 es el resultado de un fragmento de una red con $\Omega = 0.896$ (considerando solo sitios) construido por el DSBM en escala de grises. La imagen se digitaliza tomando en cuenta todas las cifras numéricas del valor de cada sitio, pero para la representación numérica (Figura 2.4b) es necesario truncar a una cifra significativa después del punto decimal.

En la Figura 2.5 se muestran las imágenes digitalizadas en escala de grises de las redes numéricas de $L = 1000$ para diferentes traslapes.

³⁵Programa de procesamiento de imágenes de dominio público disponible en <http://imagej.nih.gov/ij/download.html>.

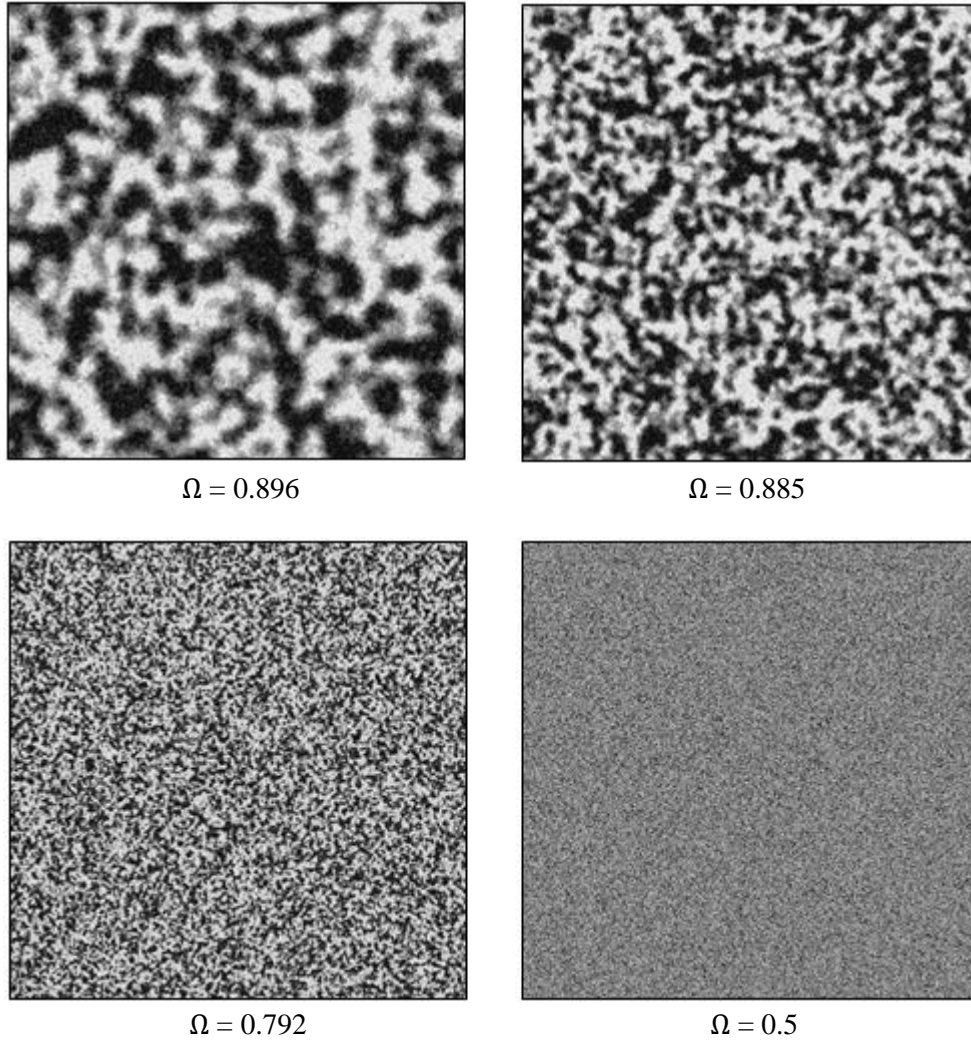


Figura 2.5 Redes de sitios sin binarizar construidas mediante el DSBM para diferente traslape (tamaño de red $L = 1000$). Note que conforme se disminuye el traslape los elementos de la red se desagrupan, lo que hace que la imagen sea más homogénea.

Las diferentes imágenes digitalizadas de las redes numéricas construidas mediante el DSBM mostradas en la Figura 2.5 presentan diferentes estructuras debido a la presencia de correlaciones entre los elementos que constituyen a la red y se muestran agrupados u ordenados por tamaños “jerárquicamente” cuando Ω aumenta.

La Figura 2.5 también permite observar como a menor traslape las redes numéricas presentan características aleatorias, mientras que a traslapes mayores las redes presentan estructuras homogéneas a escala local, pero con estructuras heterogéneas a escala global. Las redes

presentan las topologías reportadas por Riccardo, *et al.* [121] y Zgrablich, *et al.* [106]. En relación a la proximidad de los elementos de la red, el número de espacios vacíos o huecos y la textura o rugosidad se obtiene:

- una topología homogénea a bajo traslape con dos tipos de elementos (sitios y enlaces) en la red y
- a medida que el traslape aumenta, la topología global de la red se torna más heterogénea [51, 122], pero a nivel local es de tipo homogénea formándose agrupaciones o parches, y aparece una fuerte correlación entre los elementos.

2.4 Propiedades de las redes numéricas

Como todo sistema generado según sea el objeto de utilidad debe ser cuantificado. Por tanto, en este capítulo se caracterizan algunas propiedades estáticas de los sistemas construidos, en este caso las redes correlacionadas.

Una propiedad estática se puede entender como aquella característica o particularidad de un cuerpo o sistema que permanece en el mismo estado sin cambios y que no suponen actividad dinámica. La masa, el volumen, la temperatura, el estado de agregación o la forma, son ejemplos de ello.

Las propiedades estáticas de los sistemas analizados son; el tamaño de la red, la conectividad, la geometría, la longitud de correlación ξ , el umbral de percolación ρ , la fracción ocupada ρ_c , la dimensión fractal d_f y la lagunaridad L . En este trabajo estas propiedades se analizan de acuerdo al orden descrito. Es preciso mencionar que bajo el principio de construcción se implementaron el tamaño, la conectividad y la geometría. A continuación se desarrolla el análisis de la longitud de correlación. Mientras que, en el Capítulo III, se analizarán las otras propiedades estáticas

2.4.1 Correlación descriptiva

El concepto de correlación se examina de manera breve y desde el punto de vista estadístico. Cuando se manejan grupos de datos, lo primero que se cuestiona es si existe alguna relación entre ellos, en estadística existe la definición de covarianza y no es más que la variación conjunta de dos o más cantidades variables [123].

Por ejemplo: de la ley de los gases ideales $PV = n R T$, cuando se aplica en un sistema de masa constante n y donde R es la constante universal de los gases, la variación de la temperatura puede expresarse como $T = KP/V$; T varía conjuntamente con la presión P y el volumen V , lo cual es diferente a la variación directa que implica la variación de uno de los parámetros, por ejemplo, cuando mantenemos la masa y la presión constante $T = K'V$, ahora T está en función de una variable o mejor dicho $K' = T/V'$, relación conocida como la variación directa del volumen en función de la temperatura en condiciones de presión constante (experimento de Charles y Gay-Lussac), en notación de covarianza se tiene que $Cov = K'TV$.

En general para dos conjuntos de datos x e y la covarianza se expresa como $Cov = K_{xy}$ y su definición está dada por:

$$S_{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i - \bar{x} \bar{y} \tag{2.11}$$

en donde \bar{x} e \bar{y} representan los valores promedio de los datos x e y y n es el la cantidad de pares de datos (x, y) que contiene la muestra.

De aquí la correlación ζ_{xy} puede definirse como la medida del grado de relación entre dos variables, sin importar cuál es la causa y cuál es el efecto. Entre datos de diferente naturaleza la expresión matemática es:

$$\zeta_{xy} = \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_n^2(x)}\sqrt{S_n^2(y)}} \quad (2.12)$$

En este formalismo los conjuntos de datos x e y representados sobre un diagrama de dispersión no presentan ninguna tendencia lineal, por lo que el coeficiente de correlación no tiene sentido.

La correlación puede interpretarse como una varianza de las variables, “la dependencia de una variable respecto de la otra y viceversa”, $S_n^2(x)$ y $S_n^2(y)$ son las dispersiones respectivas para ambos conjuntos de datos x e y , entonces para ζ_{xy} los valores pueden ser:

$$\zeta_{xy} = \begin{cases} \zeta_{xy} > 0, & (0, 1] \\ 0 \\ \zeta_{xy} < 0, & [-1, 0) \end{cases} \quad (2.13)$$

De esta función por partes se tienen los casos siguientes:

- para correlaciones entre $(0,1]$ los datos son directamente proporcionales. Si el valor de una variable aumenta o disminuye la otra también aumenta o disminuye,
- para el valor de “cero” los datos son totalmente independientes y
- para correlaciones entre $[-1,0)$ los datos son inversamente proporcionales, si el valor de una variable aumenta la otra disminuye o si disminuye la otra aumenta.

En la naturaleza existen múltiples correlaciones de corto y largo alcance, bastante complejas y se expresan físicamente en las estructuras, por ejemplo, de las cordilleras volcánicas, las dunas formadas en un desierto, en México tenemos las conformaciones rocosas de los prismas basálticos, los pliegues del tejido pulmonar; en todos ellos se presentan patrones bien definidos debido a la correlación.

En nuestros sistemas numéricos son indeseables las correlaciones complejas debido a que son difíciles de evaluar, la única correlación deseable, como se mencionó es la distancia de correlación entre los elementos de red. Existe la correlación de sitios, de enlaces o de sitio-enlace; para fines de este trabajo sólo se considera la correlación sitio-sitio.

2.5 Longitud de correlación (ξ)

Como se ha establecido, uno de los parámetros que definen la topología de una red numérica en el DSBM es el traslape Ω , donde los elementos están separados por una distancia r definida en unidades de red (u. r.) y asignados mediante un coeficiente de correlación $C(r)$ entre ellos [124], la cual decae exponencialmente como:

$$C(r) \approx e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (2.14)$$

donde ξ es la distancia o longitud de correlación y mide la relación estadística directa que mantienen a una cierta distancia los elementos dentro de una red numérica, a diferencia de ξ que está relacionada al tamaño finito de los cúmulos antes y después del umbral de percolación y que diverge en el punto de transición crítico. $C(r)$ es la correlación sitio-sitio que se calcula con la ecuación establecida en este modelo [125]:

$$C(r) = \frac{\langle (R_{S_i} - \bar{R}_S)(R_S(r) - \bar{R}_S) \rangle}{\langle (R_S(r) - \bar{R}_S)^2 \rangle} \quad (2.15)$$

donde R_{S_i} es el tamaño del sitio en la posición inicial desde la cual se considera la correlación y $R_S(r)$ es el tamaño del sitio de la posición final y \bar{R}_S es el tamaño promedio de sitios de toda la red; las distancias entre los sitios están dadas en unidades de red (u. r.). En contraste con la Ecuación 2.13, los valores determinados de ξ en este modelo están comprendidos entre $[0, \infty)$ y es una correlación estadística directa a cierta distancia entre elementos sobre un modelo de

superficie. En la construcción de las redes, si las distribuciones de sitios F_S y enlaces F_B se traslapan en su totalidad, la longitud de correlación tiende a ser infinita, es decir, los elementos de red están infinitamente correlacionados.

Como se ha mostrado en este apartado, las longitudes de correlación $\xi \neq \xi$ (ver Capítulo I) no tienen la misma connotación, para la teoría de la percolación ξ denota la longitud típica del tamaño finito de los cúmulos dentro de un sistema y ξ es la distancia de interacción entre los elementos dentro de un sistema ya sea sitios o enlaces cuando se utiliza el DSBM para la construcción de redes numéricas.

2.5.2 Resultados

El comportamiento gráfico del coeficiente (Ecuación 2.15) de correlación sitio-sitio (v. gr. se consideran solo los sitios para este estudio) en función de la distancia puede observarse en la Figura 2.6. Aquí se representan 10 curvas de comportamiento para 10 redes a un mismo traslape de $\Omega = 0.708$. En esta figura se observa como los comportamientos del coeficiente de correlación están muy cercanos.

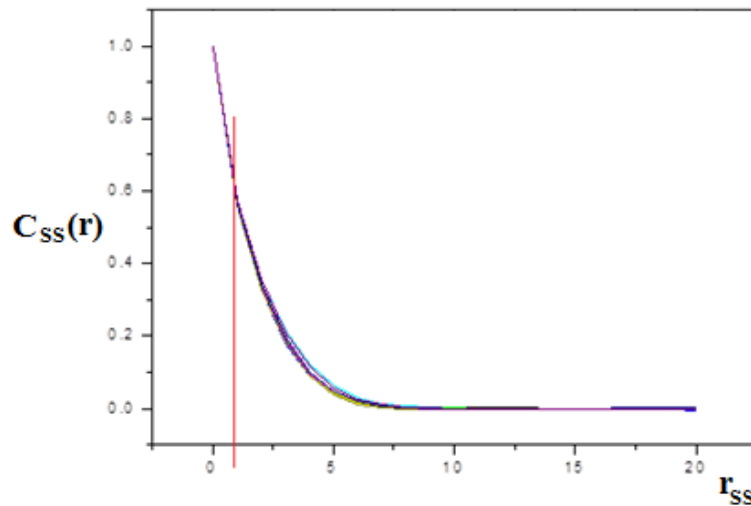


Figura 2.6 Comportamiento del coeficiente de correlación sitio-sitio para 10 redes con traslape $\Omega = 0.708$. La r_{ss} representa la distancia sitio-sitio. El trazo de la línea roja $C_{ss}(r)$ indica el valor de la longitud de correlación ξ entre sitios a una distancia r .

En la misma Figura 2.6, se nota que la curva que representa el promedio estadístico tiene poca variabilidad comparada con las 10 curvas. Como se observa, el coeficiente de correlación decae exponencialmente conforme se incrementa la distancia r y por el contrario aumenta cuando los sitios están cercanos en la red.

En la Figura 2.7 se presenta el promedio estadístico de 10 redes seleccionadas para 8 traslapes de un total de 14. No se muestran las curvas de $\xi = 0$, que corresponden a bajo traslape, debido a que el coeficiente de correlación presenta prácticamente el mismo comportamiento como el mostrado para $\Omega = 0.398$. La figura muestra como a menor traslape la función de correlación sitio-sitio no tiene un comportamiento de tipo exponencial. Para traslapes próximos a $\Omega = 0.0$ el comportamiento de la correlación en función de la distancia crece de manera prácticamente lineal.

A partir de cada curva de los datos de correlación sitio-sitio en función de la distancia C_{ss} vs r_{ss} , se obtienen los valores de la longitud de correlación ξ , observando el mejor comportamiento exponencial para cada caso.

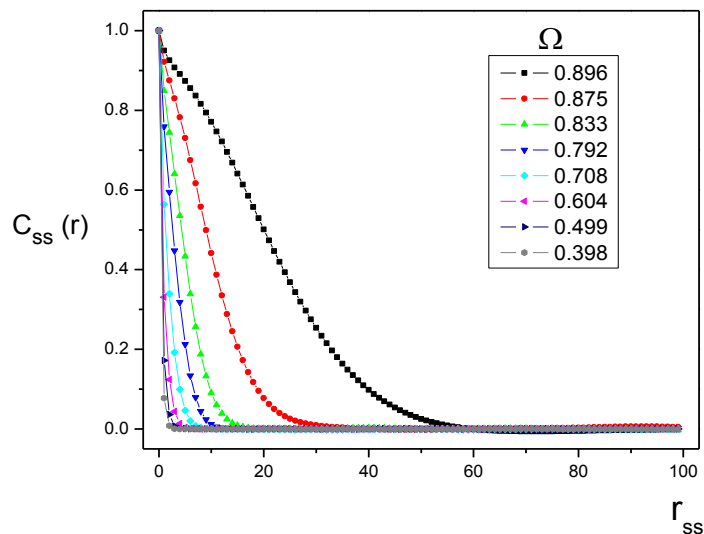


Figura 2.7 Comportamiento de la función de correlación sitio-sitio para diferentes traslapes. La distancia r_{ss} nos indica el alcance de la interacción entre sitios de la red. A mayor traslape existe mayor interacción.

En la Tabla 2.2 se presentan los valores obtenidos de ξ para cada Ω . En la columna tres de esta tabla se muestran las desviaciones estándar de ξ (SD_{ξ}) consideradas para 10 redes de un mismo Ω .

Tabla 2.2 Longitudes de correlación obtenidas a partir del comportamiento gráfico de la Función 2.15.

Ω	ξ	SD_{ξ}
0.0	0.0	0.0
0.104	0.0	0.0
0.208	0.0	0.0
0.292	0.0	0.0
0.396	0.392	0.001
0.500	0.571	0.003
0.604	0.926	0.007
0.708	1.800	0.023
0.792	3.341	0.122
0.833	5.579	0.309
0.875	11.700	0.676
0.885	18.123	1.181
0.892	28.426	2.063
0.896	37.977	2.797

El comportamiento de ξ es acorde al esperado al de la Ecuación 2.14, la longitud de correlación sitio-sitio, efectivamente tiende a infinito cuando Ω se incrementa y se muestra el comportamiento de ξ vs Ω en la Figura 2.8 [126, 127].

El comportamiento de la función de correlación sitios-sitio (Ecuación 2.15) y de la longitud de correlación (Ecuación 2.14) son de tipo exponencial. Como se ha mencionado la medición de la ξ de las redes numéricas no diverge, mientras que este hecho si ocurre con la longitud de correlación ξ medida para los cúmulos de percolación.

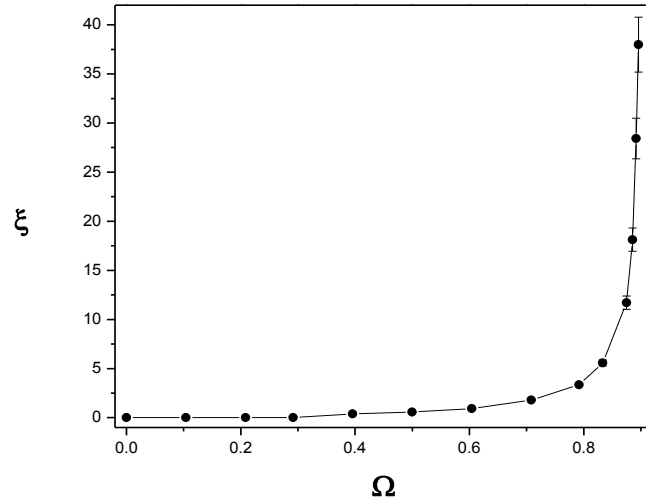


Figura 2.8 Comportamiento ξ vs Ω de las redes construidas. A medida que se incrementa el traslape la longitud de correlación entre los sitios de la red aumenta. A traslape completo $\Omega = 1$ la longitud de correlación debe ser infinita.

En la Figura 2.8 se pueden observar que el comportamiento ajustado matemáticamente³⁶ de la longitud de correlación ξ con respecto al traslape Ω contiene tres secciones de la forma siguiente:

$$\xi = \begin{cases} 0.0 & \text{si } 0 \leq \Omega < 0.4 \\ 0.4 e^{5.21\Omega^{3.77}} & \text{si } 0.4 \leq \Omega < 0.87 \\ 1.64 e^{29.62\Omega^{20.42}} & \text{si } 0.87 \leq \Omega < 0.9 \end{cases} \quad (2.16)$$

donde: para $\Omega < 0.4$ no existe correlación, para valores de $\Omega \geq 0.4$ se observa un efecto de la correlación y a $\Omega \geq 0.87$ la correlación se incrementa drásticamente.

De la Figura 2.8 se puede notar que el error estadístico, observado en las barras de error, a partir de $\Omega = 0.87$ se incrementa, lo que se esperaba como efecto de la variabilidad del tamaños de grano y formados por agrupaciones de sitios en la red, es decir las agrupaciones causadas por la

³⁶ Para los ajustes de datos se utiliza el programa OriginPro 8SR0 v8.0724(B727).

presencia de correlaciones entre los sitios. Este efecto también se mostró en la graficas de distribución de tamaños (Figura 2.3).

Resumen

- Por medio del DSBM se generan los arreglos numéricos, constituidos por sitios y enlaces, para simular los medios de evolución. Este tipo de arreglos numéricos pueden ser empleados para estudiar fenómenos de percolación clásica.
- Las imágenes de las distribuciones de tamaños de sitios y los gráficos de frecuencias generan de forma adecuada la información acerca del agrupamiento de estos elementos en función del traslape.
- La obtención de imágenes de arreglos numéricos da ventaja en la visualización de la estructura de las diferentes redes, observándose sistemas más estructurados a mayor traslape.
- Se ha implementado una mejora en el programa, desarrollado en lenguaje C, del DSBM que permitió construir las redes sin patrones direccionados, lográndose obtener redes isotrópicas que garantizan que las propiedades cuantificables de las redes deben ser equivalentes en cualquier punto o en cualquier dirección en que se evalúen. Se utilizó una modificación del programa que genera las redes correlacionadas isotrópicas en 2D del Dr. Raúl Horacio López. Estas redes presentan una distribución uniforme y se programaron el 20/08/1997. Además, se adaptó un programa desarrollado por el Dr. Salomón Cordero Sánchez, para el cálculo del coeficiente de correlación.
- El DSBM permite obtener redes correlacionadas con interacciones entre los elementos de red con tamaños variables, los cuales están asociados a la longitud de correlación.
- El traslape es un parámetro necesario e impuesto de manera natural en el DSBM, mientras que, la longitud de correlación ξ es un efecto del traslape, por tanto, la ξ es el parámetro que mejor caracterizan a las redes.

- Se observa que a baja ξ las redes son homogéneas a escala global y local y a alta ξ las redes presentan heterogeneidad a escala global pero son homogéneas a escala local.
- En particular, con este modelo, se observa que a traslapes bajos entre elementos la longitud de correlación es insignificante, sin embargo, a medida que el traslape entre ellos aumenta la longitud de correlación crece de manera exponencial. Este hecho será determinante para observar diferentes fenómenos de difusión y transporte dentro de la red.
- No es objetivo de este trabajo el estudio de la longitud de correlación ξ calculado en el modelo de percolación clásico, pero sí la medición de la ξ de las redes numéricas construidas a partir del modelo DSBM, sin embargo, cabe señalar que tampoco ha sido un objetivo el desarrollo de las ecuaciones y de la teoría para la medición de ξ , ya que tal desarrollo ha sido reportado en la literatura.

CAPÍTULO III

CONSTRUCCIÓN DE CÚMULOS DE PERCOLACIÓN Y CARACTERIZACIÓN FRACTAL DE SU GEOMETRÍA

3.1 Percolación

Como se dijo en el Capítulo I, la percolación es un proceso puramente geométrico de transición, ampliamente estudiado en la Ciencia, ha dado pie a la implementación de diferentes métodos numéricos para su comprensión, el más empleado es el Monte Carlo numérico, tanto para el medio percolante como para el sistema que difunde en él. La percolación ocurre de manera natural en suelos, rocas, en general en sólidos porosos y es fundamento para la comprensión de fenómenos más complicados, como movimiento de una cadena de polímeros en un medio heterogéneo con obstáculos, la difusión³⁷ de una proteína dentro de la célula [128] o la transducción de señales [129].

Se sabe que un sistema percolante es el ejemplo físico con características que no son fáciles de determinar con la geometría tradicional, que mide objetos con líneas, cuadrados o cubos, no funciona tampoco el concepto tradicional de medir, por tanto, es necesario utilizar el concepto de dimensión. El cúmulo percolante es el representante natural de un fractal no determinista, y como tal, un fluido difundiéndose en él debe ser una especie de imagen proyectada a semejanza (v. gr. al menos a ciertas escalas de observación, en que las partículas que difunden no interactúan con el cúmulo percolante como un medio continuo), por ello en este capítulo se caracterizan los cúmulos de percolación obtenidos de las redes correlacionadas generadas con el DSBM.

3.2 Umbral de percolación (ρ)

Para determinar el umbral de percolación se ha utilizado un algoritmo para etiquetar cúmulos dentro de una red numérica, este procedimiento es conocido como el algoritmo de Hoshen-Kopelman [131-134]. En este caso un cúmulo de percolación está formado por un grupo de sitios vecinos (ver Figura 1.7) que abarcan todo un espacio en una dirección determinada. El número

³⁷ Tradicionalmente al paso de una proteína dentro de la célula se le conoce como “difusión”, sin embargo se han estado proponiendo procesos percolativos dadas sus definiciones en estricto.

de sitios de un cúmulo (sitio o grupo de sitios ocupados) se etiqueta con el mismo color, como se muestra en la Figura 3.1.

El algoritmo de Hoshen-Kopelman es una herramienta que ha resultado eficaz para identificar grupos de celdas contiguas dentro de una red 2D, de manera que para cada celda es deseable asignar una etiqueta que identifica a un grupo de celdas a primeros vecinos (ver Apéndice C). Este algoritmo fue descrito originalmente en 1976 para estudiar percolación y distribución de cúmulos, técnicas de etiquetado de cúmulos múltiples y determinación de concentraciones críticas.

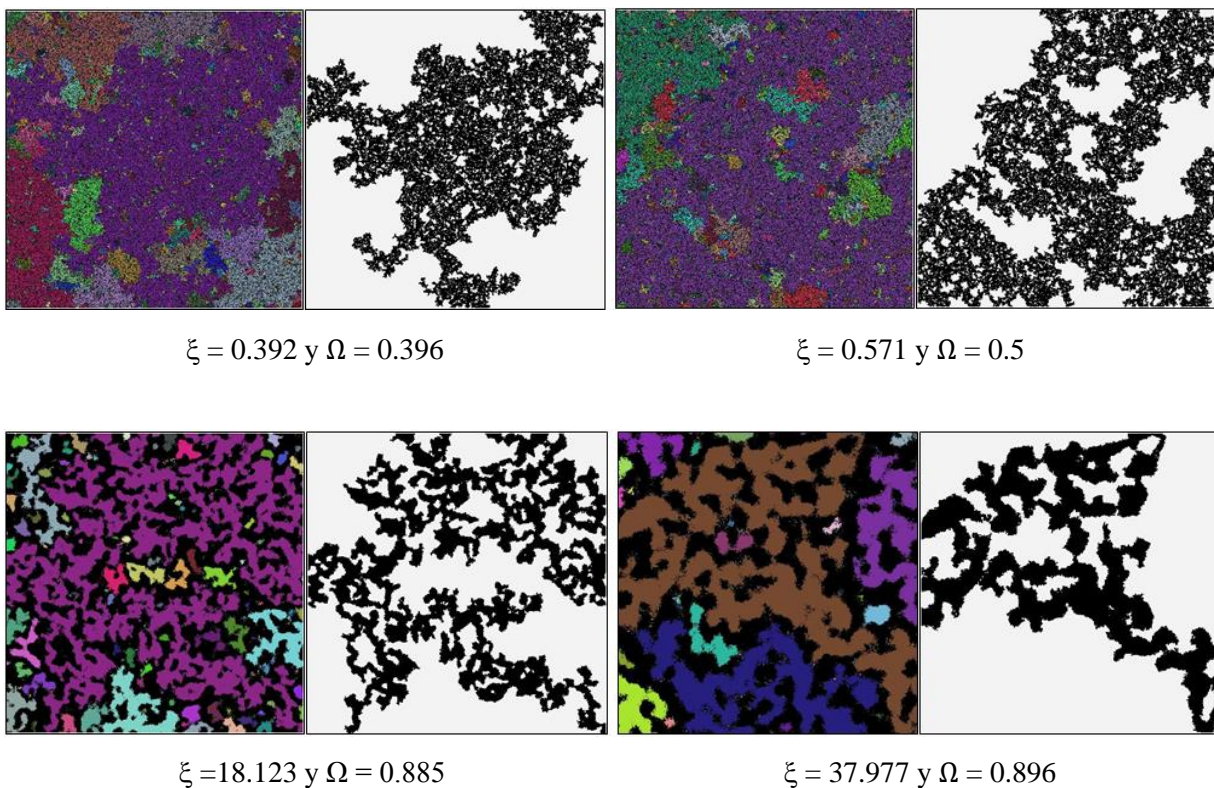


Figura 3.1 Los cúmulos de mojado se muestran en diferentes colores³⁸ (lado izquierdo de cada panel) y los cúmulos percolantes están en color negro (lado derecho de cada panel) de cuatro redes numéricas, que permiten observar el incremento de la densidad de puntos a diferente correlación.

³⁸ Obtenidos con Mathematica versión 8. Tratamiento de imágenes y procesamiento de datos.

En la parte izquierda de cada panel de la Figura 3.1, se muestran todos los cúmulos obtenidos para algunas redes con diferente longitud de correlación. Mientras que, en color negro, en la parte derecha de cada panel, se muestran los cúmulos infinitos percolantes para las mismas longitudes de correlación. En esta figura se puede observar un crecimiento del tamaño de grano, generado por el incremento de densidad de puntos, al aumentar la longitud de correlación. Al conjunto de los diferentes cúmulos agrupados en una red se les conoce como cúmulos o masa de mojado. El cúmulo infinito percolante muestra una mayor agrupación de sitios cuando la correlación espacial ξ del sistema aumenta, haciendo un cúmulo percolante mejor definido.

3.2.1 Resultados

En la Tabla 3.1 se presentan los valores de los umbrales de los cúmulos infinitos de percolación (ρ) y la desviación estándar (SD_ρ) para cada uno de ellos. De aquí en adelante se ha elegido como variable de control a la longitud de correlación ξ , debido a que, como se ha mencionado, en el método DSBM el traslape Ω es una condición impuesta (no se pueden obtener valores estadísticos) y la longitud de correlación es una variable estadística que relaciona el comportamiento entre los elementos que componen a las redes numéricas y que permite observar correlaciones de corto y largo alcance.

Los valores de los umbrales de percolación mostrados en la Tabla 3.1 corresponden al promedio de las 100 redes numéricas construidas para cada traslape. De esas 100 redes se tomaron 10 redes para realizar las siguientes mediciones. El criterio que se toma para elegir las 10 redes es el siguiente: al umbral de percolación promedio $\bar{\rho}$ de las 100 redes se le resta el umbral de percolación ρ_i de cada red y se eligen las redes en donde la diferencia entre estos valores sea mínima, esto es, se eligen las redes que cumpla $|\bar{\rho} - \rho_i| \rightarrow 0$. Cabe destacar que, el valor del umbral de percolación para redes homogéneas reportado en la literatura se reproduce cuando $\xi = 0$ [69].

Tabla 3.1 Umbrales de percolación de los cúmulos infinitos de percolación obtenidos a diferente ξ .

ξ	SD_{ξ}	ρ^*	SD_{ρ}
0	0.0	0.5929	2.844E-4
0.392	0.001	0.5875	4.372E-4
0.571	0.003	0.5811	3.686E-4
0.926	0.007	0.5643	4.864E-4
1.800	0.023	0.5483	6.446E-4
3.341	0.122	0.5287	9.148E-4
5.579	0.309	0.5232	1.320E-3
11.700	0.676	0.5023	2.450E-3
18.123	1.181	0.5092	2.930E-3
28.426	2.063	0.5147	4.880E-3
37.977	2.797	0.5279	1.830E-3

* El valor reportado en la literatura de ρ para sitios en mallas 2D es de 0.5927 [135].

El comportamiento gráfico de ρ en función de ξ se muestra en la Figura 3.2. Se puede observar en la gráfica el efecto de la variabilidad del tamaño de grano que aparece en los cúmulos percolantes, en donde estos se hacen más grandes a medida que los cúmulos se tornan más densos (ver Figura 3.1). Hasta $\xi = 11.7$, el umbral de percolación ρ disminuye rápidamente. Por encima de este valor el umbral de percolación se incrementa casi linealmente y de manera más lenta.

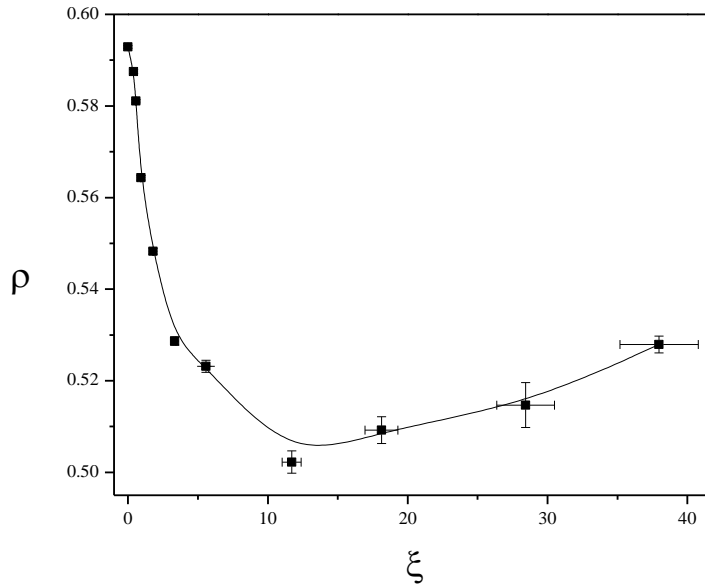


Figura 3.2 Comportamiento del umbral de percolación en función de ξ , cada punto representa el promedio estadístico de 10 redes tomadas alrededor del promedio de 100 redes, de manera que cumpla $|\bar{\rho} - \rho_i| \rightarrow 0$.

El comportamiento del umbral de percolación a baja correlación muestra que existen sitios en la red con tamaños muy variados, lo que hace una mayor cantidad de cúmulos de mojado (cfr. los diferentes cúmulos de la Figura 3.1). Las estructuras de los cúmulos infinitos de percolación se forman con elementos que tienen la misma o similar métrica R_s , como efecto de la función de correlación Φ (Ecuación 2.6). De modo que la Figura 3.2 [136] contempla dos zonas del comportamiento del umbral de percolación. Existe una disminución exponencial desde una longitud de correlación de 0 hasta 11.7 y a partir de este valor, un incremento de forma lineal. El comportamiento de la función del umbral de percolación se establece como³⁹:

$$\rho = \begin{cases} 0.392 + 0.047e^{-\frac{(\xi+t)}{51.391}} + 0.092e^{-\frac{(\xi+t)}{51.468}} + 0.066e^{-\frac{(\xi+t)}{1.714}} & \text{si } 0 \leq \xi \leq 11.7 \\ 0.491 + 9.249 \times 10^{-4}\xi & \text{si } 11.7 < \xi < 38 \end{cases} \quad (3.1)$$

en donde $t = 5.116 \times 10^{-9}$.

³⁹ *Ibid* nota 36.

Además, en la Figura 3.2 se observa que la coordenada $\xi = 11.7$ y $\rho = 0.5023$ forma un mínimo, en donde el comportamiento del umbral de percolación puede tener propiedades particulares, las cuales están relacionadas con el tamaño y la densidad de los granos que se forman en el cúmulo infinito de percolación. Con el fin de explicar lo que ocurre en la medición del umbral de percolación en dos puntos de longitud de correlación se hizo el análisis mostrado en la Figura 3.3 y la Figura 3.4. En estas figuras se muestran los umbrales de percolación para 100 redes con $\xi = 11.7$ y $\rho = 0.5023$ (Figura 3.3) y $\xi = 0$ y $\rho = 0.5929$ (Figura 3.4). En ambas figuras se observa que la obtención del umbral de percolación es de manera aleatoria, sin embargo, en las redes con $\xi = 0$ la desviación es menor en comparación a las redes con $\xi > 0$.

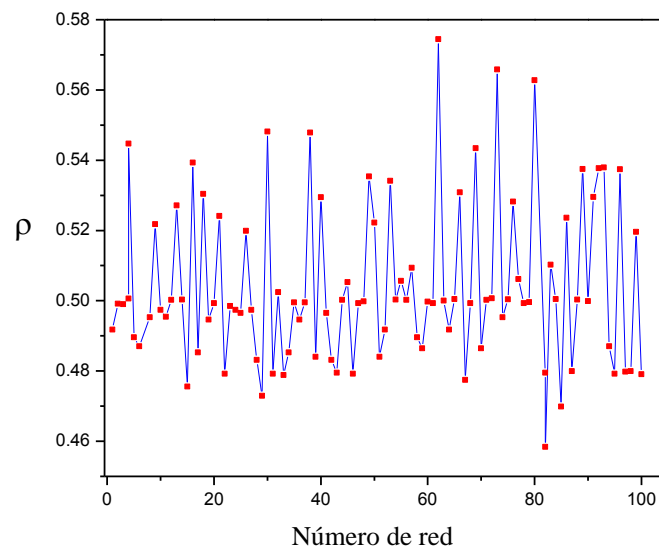


Figura 3.3 Comportamiento de los umbrales de percolación para 100 redes con longitud de correlación $\xi = 11.7$, el umbral promedio es de $\bar{\rho} = 0.5023$. Este valor se puede estimar aproximadamente a la mitad de los valores de la gráfica. Los valores mostrados dan evidencia de la aleatoriedad en la construcción de los cúmulos infinitos de percolación.

Este hecho se debe a que las redes que no tienen longitud de correlación son estadísticamente homogéneas pero son aleatorias, es decir, el tamaño de grano y su densidad es menor a las redes con presencia de correlación. A medida que la longitud de correlación aumenta las redes son más conexas, por tanto, el umbral de percolación disminuye, pero muestra mayor desviación porque aumenta el tamaño de los granos y la densidad de estos. Pero cuando la $\xi > 11.7$, después del

mínimo, el umbral de percolación aumenta, esto sucede porque el grano además de aumentar de tamaño también aumenta su densidad y para que suceda el fenómeno de percolación ocupa el espacio disponible dado por la densidad, después de este punto se incrementa de forma marcada la fracción ocupada (se incrementa la masa) por el cúmulo infinito de percolación.

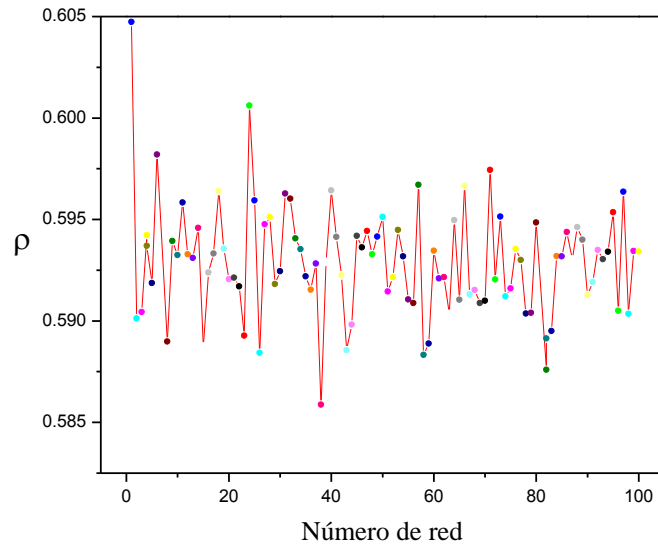


Figura 3.4 Comportamiento de los umbrales de percolación para 100 redes con longitud de correlación $\xi = 0$. El valor de $\bar{\rho} = 0.5929$, el cual está en acuerdo con el reportado en la literatura, $\rho = 0.5927$. De nuevo se observa la aleatoriedad en la construcción de los cúmulos infinitos de percolación.

El comportamiento del tamaño y densidad de grano formados en el proceso de percolación se pueden observar en la Figura 3.5. En la parte superior de esta figura se muestran los cúmulos infinitos de percolación para tres redes con longitud de correlación diferente, en cada una de ellas se marca con un cuadro de color rojo un área del mismo tamaño. En la parte inferior se muestra una ampliación de cada área marcada. De esta forma, las zonas ampliadas de las tres muestran como a mayor longitud de correlación se incrementa el tamaño de grano y también la densidad de puntos que componen el grano (cfr. relación de área total entre el área ocupada por los puntos).

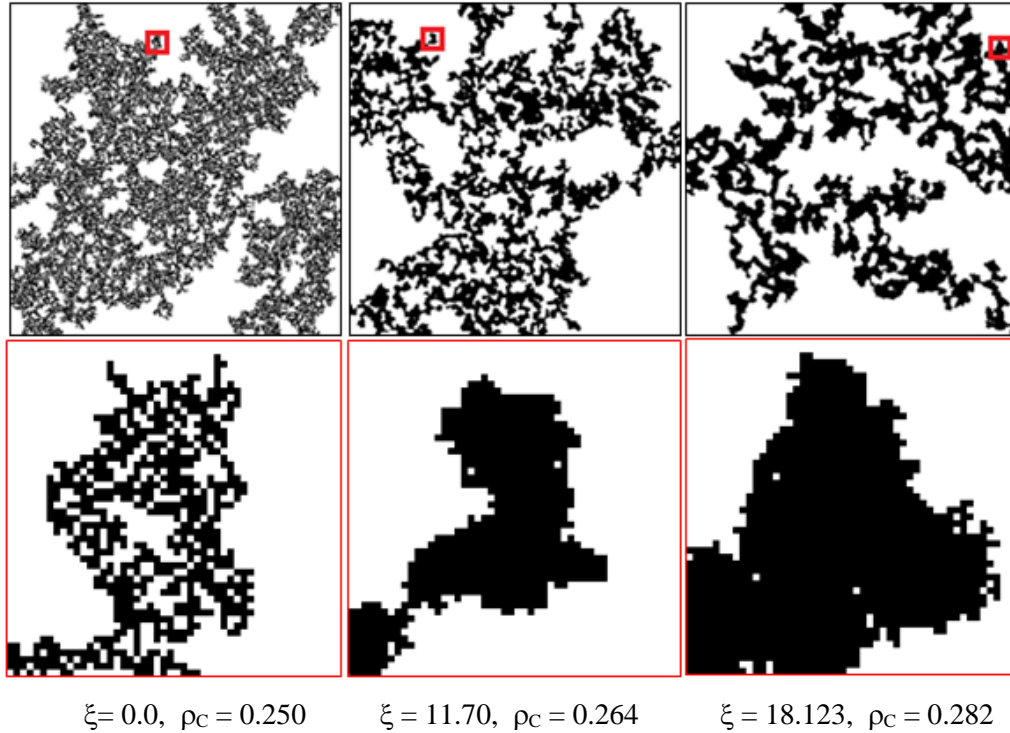


Figura 3.5 Tres cúmulos infinitos de percolación con sus respectivos granos, ρ_c representa la fracción ocupada de la red. A mayor longitud de correlación se observa un incremento de la densidad de pixeles ocupados por el objeto.

Finalmente, en la Tabla 3.2 se presentan los porcentajes de sitios, de la red total, que ocupan los cúmulos infinitos de percolación conforme aumenta la longitud de correlación. Se señala que, los valores del porcentaje de ocupación de los cúmulos percolantes para cada longitud de correlación son el promedio estadístico de las mismas 10 redes para cada ξ .

Aquí cabe mencionar que el umbral de percolación ρ se refiere a la fracción ocupada por todos los cúmulos (incluyendo los cúmulos de mojado) en el momento en que ocurre la transición crítica, mientras que ρ_c se refiere a la fracción ocupada solo por el cúmulo percolante en las redes numéricas correlacionadas.

Tabla 3.2 Porcentaje del área o de la masa ocupada de la red numérica por el cúmulo infinito de percolación para cada ξ .

ξ	% ρ_c
0	25.077
0.392	25.434
0.571	24.055
0.926	23.384
1.800	24.478
3.341	25.486
5.579	25.675
11.700	26.496
18.123	28.213
28.426	33.528
37.977	32.536

3.3 Dimensión fractal (d_f)

La medición de la dimensión fractal es ampliamente utilizada para estudiar una gran cantidad de sistemas, por ejemplo, sistemas complejos [137], comportamiento de patrones [4], porosidad de suelos [59, 61, 138], topología de estructuras, patrones en fenómenos de percolación clásica e invasiva [137], turbulencias en superfluidos [60], estabilidad, flexibilidad, topología, conformación, simetría de autosimilaridad, espacio accesible y estructura cuaternaria de proteínas [139-147], en el campo de la medicina: la morfología de organelos, características estructurales de células cancerígenas [26, 147-150], etc.

La dimensión fractal de un objeto se puede medir con diferentes métodos, por ejemplo, el método escalamiento de la masa con tamaño lineal o algoritmo de cajas de arena, el método de conteo de cajas que es uno de los más utilizados sobre todo para 2D (ver Apéndice D). Ambos algoritmos se pueden desarrollar en un lenguaje de programación para procesar los vóxeles (3D) o las imágenes binarizadas de los objetos.

3.3.1 Resultados

Para obtener las dimensiones fractales de los cúmulos infinitos percolantes construidos sobre las redes correlacionadas se emplea el método de conteo de cajas [51] con tamaños de cajas: 2, 3, 4, 6, 8, 12, 16, 32, 64. El método de conteo de cajas utilizado en este trabajo se encuentra implementado en el software ImageJ⁴⁰. Para mayor información sobre este método, consultar por favor el Apéndice D. En la Tabla 3.3 se presentan los valores obtenidos de la dimensión fractal para diferentes longitudes de correlación.

Tabla 3.3 Dimensiones fractales d_f obtenidas por medio de ImageJ para los cúmulos infinitos de percolación.

ξ	ρ	d_f^*	SDd_f
0	0.5929	1.829	0.02709
0	0.5929	1.829	0.02852
0	0.5925	1.830	0.02847
0	0.5911	1.830	0.02838
0.392	0.5877	1.824	0.02902
0.571	0.5809	1.823	0.02979
0.926	0.5642	1.807	0.03035
1.800	0.5482	1.793	0.02965
3.341	0.5281	1.773	0.02637
5.579	0.5229	1.770	0.02886
11.700	0.5038	1.764	0.02418
18.123	0.5092	1.772	0.02289
28.426	0.5147	1.771	0.02295
37.977	0.5283	1.800	0.02493

* El valor reportado en la literatura, de la dimensión fractal para un cúmulo infinito de percolación construido sobre una red con arreglo cuadrado es de 1.8958 [151].

La columna SDd_f de la Tabla 3.3 muestra las desviaciones estándar de los resultados de la dimensión fractal. Se mantienen los datos a $\xi = 0$ con la intención de mostrar los valores de los cúmulos de percolación para todas las redes construidas en este trabajo, es decir, para 14 traslapes.

⁴⁰ Para mayor detalle ver; <http://imagej.nih.gov/ij/>

En la Figura 3.6 se muestra el comportamiento de la dimensión fractal como función de ξ y la relación que sigue este comportamiento se muestra en la Ecuación 3.2. Tanto de la Figura 3.6 como de la Ecuación 3.2 se puede resumir que:

- el comportamiento presenta dos secciones, una disminución exponencial hasta $\xi = 11.7$ y a partir de ahí un incremento exponencial hasta $\xi = 37.977$,
- el comportamiento de la d_f no presenta valores únicos para algunos valores ξ . Esto demuestra que la dimensión fractal es una función no inyectiva con una correspondencia univoca con respecto a la longitud de correlación y
- esto se ejemplifica mejor con dos pares de puntos y sus coordenadas:

	ξ	d_f
Primer par	0.926	1.807
	37.977	1.800
Segundo par	5.579	1.770
	28.426	1.771

En el comportamiento unívoco de la longitud de correlación existe un solo valor de la dimensión fractal de tal manera que en una sección del comportamiento grafico de la dimensión fractal disminuye exponencialmente hasta $\xi = 11.7$, en que el tamaño de grano de las redes se ve distribuido de manera homogénea, pero a $\xi > 11.7$ el efecto del tamaño de grano se incrementa haciendo zonas más densas y la dimensión fractal se incrementa nuevamente, aunque más lentamente, a partir de aquí la distribución del tamaño de grano es heterogéneo. Como se observa, la dimensión fractal a alta correlación $\xi = 37.977$ es menor al extremo opuesto. Existe un valor de d_f para cada ξ , pero más de un valor de ξ para cada d_f , lo que hace que la función sea no inyectiva.

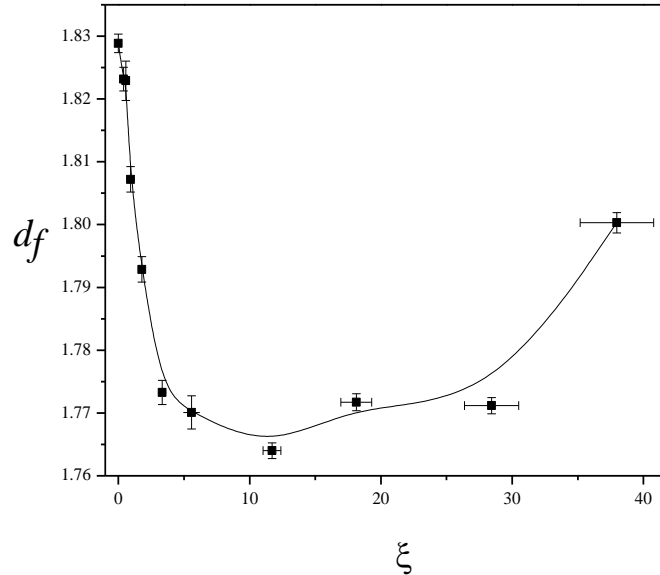


Figura 3.6 Dimensión fractal vs longitud de correlación, se observa un comportamiento no inyectivo con correspondencia univoca, con dos tendencias una descendente hasta una longitud de correlación de $\xi = 11.7$ unidades y otra ascendente hasta $\xi = 37.977$ u. r.

El comportamiento del umbral de percolación y de la dimensión fractal en función de ξ , tienen tendencias semejantes (ver Figuras 3.2 y 3.6), ambas caen respectivamente hasta 11.7 unidades, después de este valor se incrementa la densidad de píxeles y del tamaño de grano, comportamiento que se estima mediante las zonas ampliadas con la misma área de la Figura 3.5. A partir de este punto ambas propiedades ρ y ξ se incrementan de manera lenta.

La ecuación que ajusta⁴¹ la tendencia fractal en función de ξ , tiene dos zonas de comportamiento exponencial, una para la disminución hasta $\xi < 11.7$ y la otra para el incremento a partir de $\xi > 11.7$ y está dada como:

$$d_f = \begin{cases} 1.764 + 0.068e^{\left(\frac{-\xi}{2.069}\right)} & \text{si } 0 \leq \xi \leq 11.7 \\ 1.767 + 1.0 \times 10^{-5}e^{\left(\frac{\xi}{4.901}\right)} & \text{si } 11.7 < \xi < 38 \end{cases} \quad (3.2)$$

Es de interés conocer la dimensión fractal del cúmulo infinito percolante por la relación que guarda como medio de evolución que puede ser aplicado a un sistema real, por ejemplo, entre un fluido y el suelo poroso o entre el citoplasma y una cadena proteica. El medio simulado aquí contiene tortuosidad y complejidad, similar a un cúmulo percolante real como el citoesqueleto de una célula o la morfología del citoplasma de la misma [19, 40, 139, 144]. Los medios, simulados en este trabajo, aunque lejos de ser reales, mantienen una estructura estadísticamente representativa, y pueden ser utilizados para el estudio del plegado de proteínas o el arreglo de polímeros.

3.4 Lagunaridad (L)

Como ya lo han demostrado los resultados, la dimensión fractal no posee una correspondencia biunívoca y no es una función biyectiva con la longitud de correlación, lo que hace necesario un estudio de qué tanta estructura tiene un sistema fractal [46], es decir, a una escala de longitud dada es necesario medir que tan similares son las diversas regiones de las estructuras geométricas con respecto a las otras (sean objetos fractales o no). A diferencia de la dimensión fractal que mide cuanto espacio llena la estructura, la lagunaridad mide como las geometrías llenan el espacio [56].

Para obtener datos fiables mediante ImageJ y el plugin Frac Lac, se reproducen los datos publicados por Luo y Lin [58]. La literatura no da mucha información de cómo obtener la lagunaridad de imágenes. Los datos publicados por varios autores utilizan el método de desplazamiento de cajas [46, 49]. Los detalles de este método se encuentran en el Apéndice E.

⁴¹ Ibid nota 36.

3.4.1 Calibración para el cálculo de la lagunaridad (L)

La calibración consiste técnicamente en utilizar las imágenes reportadas por Luo y Lin [49, 58], reproducir sus datos, graficar su comportamiento y obtener conclusiones de su utilidad. En artículos de varios autores utilizan técnicas similares para analizar la heterogeneidad de los sistemas o que tanto están desviados los objetos geométricos de la invarianza traslacional; cabe señalar que los objetos regulares son simétricos bajo traslación [34, 47, 46, 50, 152].

Descripción del procedimiento:

- se digitalizan las imágenes en formato .jpg mediante un programa externo,
- las imágenes que se escanean son de 216×216 píxeles, los cuales se muestran en la Figura 3.7. Estas imágenes se obtuvieron del artículo de Luo y Lin,
- se binarizan las imágenes .jpg con el programa ImageJ a imágenes de 8 bits,
- se calcula la lagunaridad utilizando el plugin FracLac_2.5⁴², y
- en la medición de la lagunaridad se emplean 16 tamaños de cajas que consisten en 1, 2, 3, 4, 6, 10, 16, 25, 40, 63, 100, 123, 158, 251, 398 y 631 píxeles.

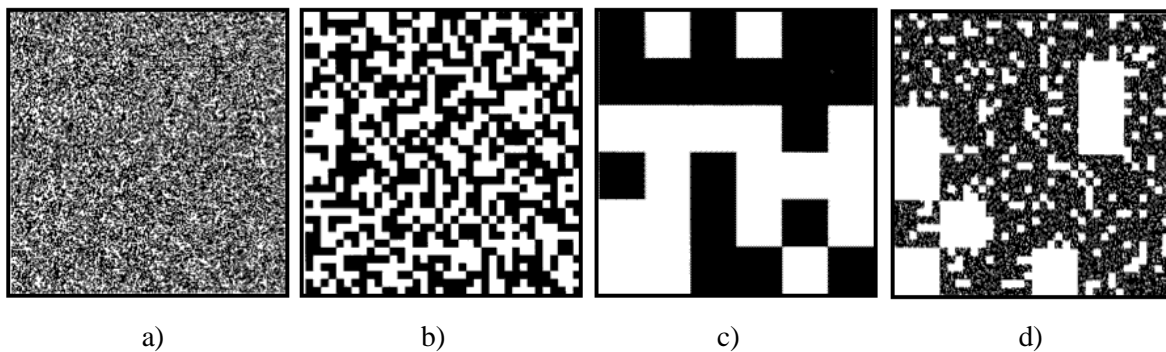


Figura 3.7 Imágenes obtenidas del estudio propuesto por Luo y Lin y de las referencias [47, 49], en las cuales se observan diferentes patrones con huecos: a) pequeños (Small), b) medianos (Middle), c) grandes (Large) y d) jerarquizados (Hierarchy) [48].

⁴² <http://rsbweb.nih.gov/ij/plugins/fractalac/FLHelp/Introduction.htm>.

La Figura 3.8 muestra los valores obtenidos de la lagunaridad para los objetos que se muestran en la Figura 3.7.

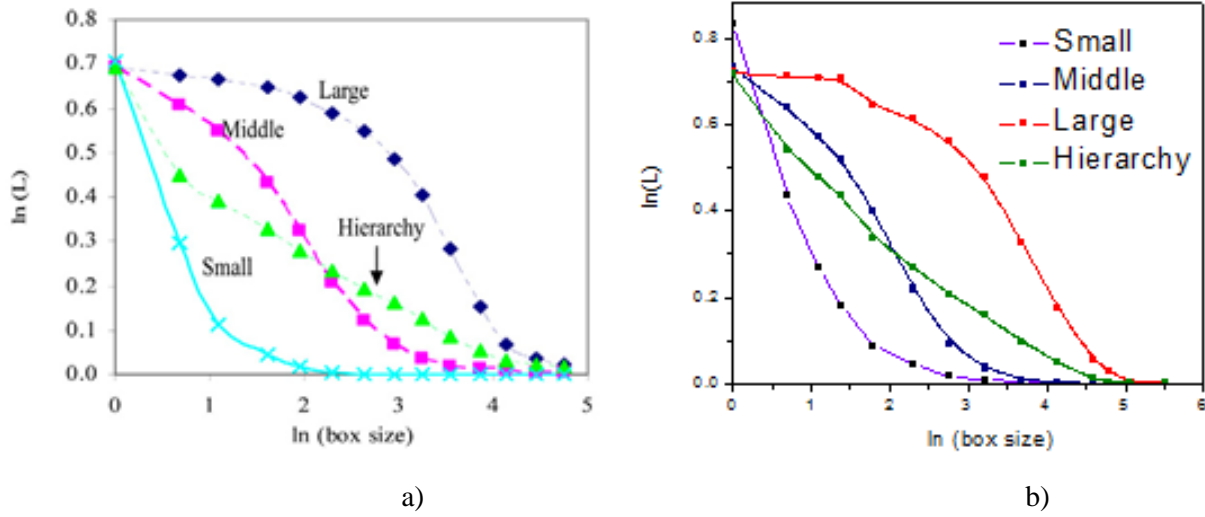


Figura 3.8 Comportamientos de $\ln(L)$ vs $\ln(BS)$ de las imágenes mostradas en la Figura 3.6: a) el reportado por Lou y Lin y b) el obtenido con ImageJ. BS significa el tamaño de cajas (por sus siglas en inglés).

La Figura 3.8a muestra los resultados que corresponden al artículo de Luo y Lin [58], mientras que la Figura 3.8b muestra los resultados obtenidos a partir del cálculo realizado con el software ImageJ. Como puede observarse ambos resultados son semejantes. Por tanto, se tiene la confianza de determinar la lagunaridad con este software para las redes correlacionadas construidas y utilizadas en este trabajo.

Para realizar el cálculo numérico de la lagunaridad utilizando las imágenes binarizadas se emplea la Ecuación 3.3, en cada imagen binarizada los espacios vacíos se representan con 0 y los espacios ocupados por la estructura con 1 [58]:

$$L(r) = \frac{\sum_m m^2 P(m, r)}{[\sum_m m P(m, r)]^2} \quad (3.3)$$

aquí $P(m, r)$ es la probabilidad de que una caja (o cubo) de tamaño r (longitud del lado de la caja o arista del cubo) que contiene m píxeles en 2D o voxels⁴³ en 3D, $\sum_m m P(m, r)$, es el primer momento y es igual al promedio de la función de distribución de probabilidad $P(m, r)$, y el segundo momento $\sum_m m^2 P(m, r)$ es igual a la suma de la varianza y el cuadrado del promedio $P(m, r)$. La Ecuación 3.3 puede reducirse a $L(r) = \frac{var(S)}{E^2(S)} + 1$, en donde $E^2(S)$ es el promedio y $var(S)$ es la varianza del número de píxeles ocupados dentro de la caja desplazada, en el Apéndice D se da más detalle al respecto.

En la Figura 3.8 el comportamiento de la lagunaridad presenta cuatro curvas, la curva inferior (Small) corresponde a la Figura 3.7a, en la que se observa un comportamiento muy homogéneo de los píxeles, por tanto no existen lagunas o huecos. La curva superior (Large) corresponde a la Figura 3.7c, y presenta un comportamiento muy heterogéneo en donde los píxeles están muy agrupados, formando una imagen muy lagunar con huecos grandes. La segunda curva de abajo hacia arriba (Middle) corresponde a la Figura 3.7b y presenta pequeñas lagunas. Finalmente, la tercera curva de abajo hacia arriba (Hierarchy⁴⁴) corresponde a la Figura 3.7d en donde existen lagunas o huecos en que aparece una jerarquía y estructura con los varios tipos de tamaños [58], este contenido de varios tamaños de lagunas significa que hay un comportamiento de tipo fractal en el que existen huecos o lagunas en todas las longitudes de escala.

3.4.2 Resultados

La reproducción del artículo de Luo y Lin permite utilizar el programa ImageJ y el plugin Frac_Lac 2.5 para analizar la lagunaridad de los cúmulos infinitos de percolación. Aquí se estima el grado de heterogeneidad de las redes generadas a partir del DSBM.

En la Figura 3.9 se muestra el comportamiento de la lagunaridad de los cúmulos infinitos de percolación para las 14 longitudes de correlación. Los resultados muestran un comportamiento

⁴³ En modelaje o simulación computacional, se refiere a un arreglo de elementos confinados en un elemento de volumen.

⁴⁴ Del inglés: jerarquía: para nuestro caso significara, un orden en la estructura, mayor estructura, aparición de mayor orden como una cualidad de categoría.

similar al reportado por Luo y Lin, cabe señalar que el comportamiento de la lagunaridad reportado por Luo y Lin [48], se midió sobre las imágenes de la Figura 3.7 y son similares a redes numéricas en escala de grises y no sobre fractales o cúmulos percolantes.

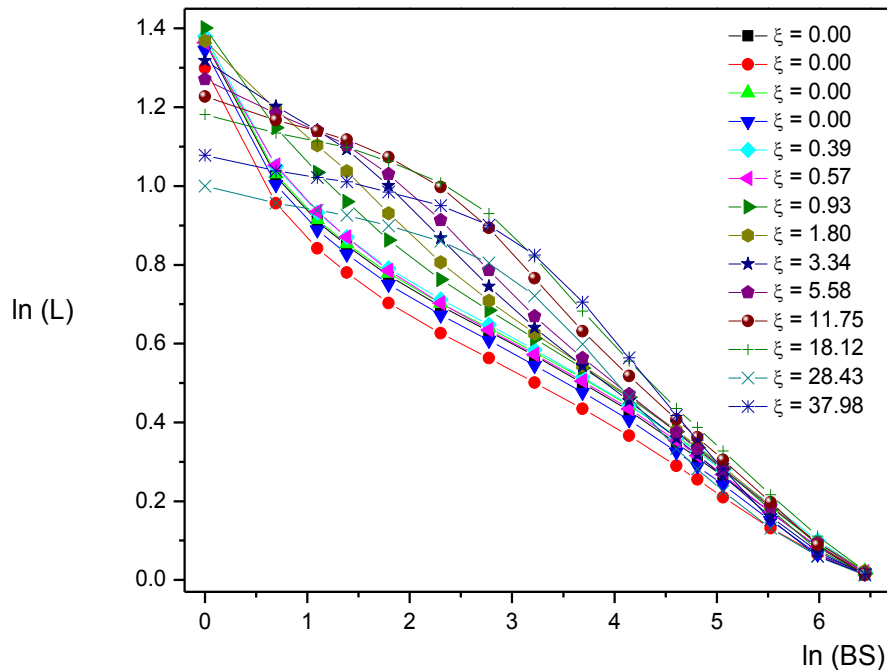


Figura 3.9 Comportamiento de la lagunaridad (L) en función del tamaño de caja (Box Size: BS) para los cúmulos de percolación estudiados a diferente ξ . Se observan las curvas (Large) de comportamiento muy heterogéneo o muy lagunar con huecos grandes. Las curvas (Middle) que presentan pequeñas lagunas. Las curvas (Hierarchy) en donde existen lagunas o huecos que presentan una estructura jerarquizada (múltiples tamaños) y las curvas inferiores (Small) que corresponden a un comportamiento muy homogéneo, sin huecos o lagunas.

Los cúmulos presentan propiedades fractales para cada una de las longitudes de correlación [153]. La zona lineal muestra el comportamiento fractal, sin embargo cuando aparece la curvatura se evidencia la pérdida de la fractalidad, lo cual es de esperarse debido a que los cúmulos infinitos de percolación obtenidos no tienen propiedades fractales a todas las escalas, es decir no son fractales matemáticos.

Los fractales estadísticamente autosimilares no presentan invarianza en todas las longitudes de escala, cuando incrementamos el tamaño de caja incrementamos el tamaño de escala. En este estudio para una longitud de correlación de $\xi = 1.80$, el comportamiento es prácticamente lineal; la lagunaridad es una función de tres factores:

1. el tamaño de la caja desplazada o tamaño del cubo en su caso,
2. la fracción del espacio ocupada por la masa y
3. la distribución o estructura espacial de la masa.

De tal manera, a medida que aumenta el tamaño de caja o cubo, la varianza disminuye, por lo que, la misma imagen tendrá menores lagunas. Cuando las lagunaridades disminuyen hacia la unidad $\ln(L(r)) = 0$ (tamaño de caja es grande), a partir de aquí permanecen constantes, esto sugiere que r se ha acercado el volumen elemental representativo⁴⁵ (REV) del material de interés. Por ejemplo, en la Figura 3.9, el tamaño del REV se alcanza cuando $\ln(BS) > 6.5$, es decir, el tamaño de caja r es mayor a 631 pixeles. Aquí ocurre que la lagunaridad converge en el mismo punto para todos los cúmulos infinitos de percolación, esto es, todos los cúmulos tienen el mismo REV. Esto sugiere que este estudio se realizó dentro de la escala de comportamiento fractal.

A medida que aumenta la ξ se observa que el comportamiento de la lagunaridad aumenta, esto se debe a que es más denso el espacio ocupado por los cúmulos infinitos de percolación (aumenta la masa), se llena el espacio en donde hubo pequeñas lagunas, los espacios con lagunas mayores predominan. Finalmente, ocurre que con un mismo nivel de fracción ocupada, una mayor lagunaridad representa un mayor grado de agrupamiento o de estructura, en promedio, la fracción ocupada por la masa en estos sistemas en de 25% hasta $\xi = 11.7$.

⁴⁵ El volumen más pequeño sobre el cual se puede realizar una medición, dará un valor representativo del conjunto, (por ejemplo la densidad de un líquido). En este caso significa que a partir de aquí la propiedad que hemos venido midiendo, ya no cambiara. En medios aleatorios, la situación es más complicada, para volúmenes más pequeños que el REV, no se puede definir una propiedad representativa y la descripción continua del material involucra a Volúmenes Elementales Estadísticos.

Las lagunaridades son más altas para la imagen con patrones característicos de gran tamaño y viceversa. La línea de mayor variabilidad de patrones de la Figura 3.9 es de $\xi = 1.80$ es similar a un fractal verdadero debido a que su curva de lagunaridad es casi lineal, como señalaron Allain y Cloitre (1991) y Plotnick et al., (1993) [51, 48], del mismo modo que la gráfica correspondiente a un fractal en donde del $\log N(r)$ vs $\log 1/r$ debe ser una línea recta con alta correlación y en que $N(r)$ es el número de cajas de tamaño r y la escala de medida r .

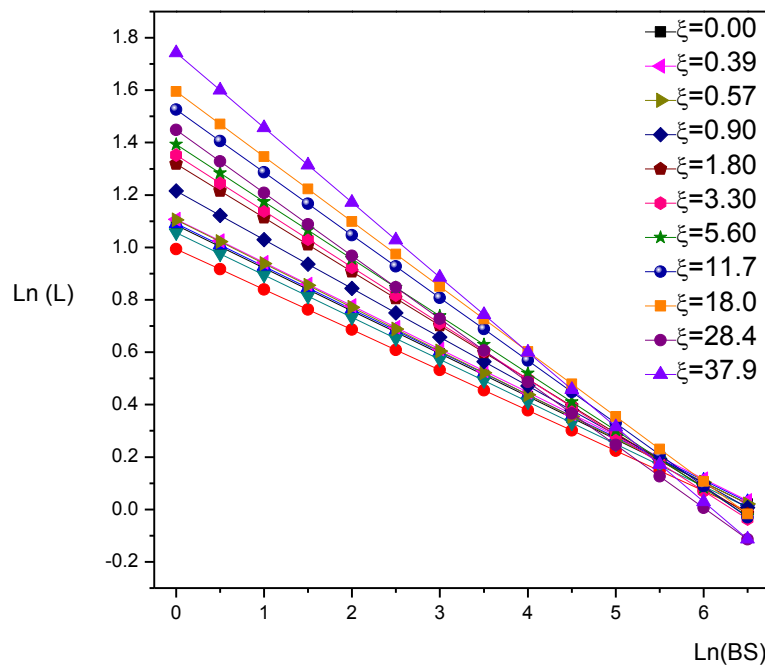


Figura 3.10 Comportamiento de la lagunaridad en función del tamaño de caja para los cúmulos de percolación estudiados. El valor de la pendiente negativa disminuye de manera proporcional al disminuir la longitud de correlación.

En la Figura 3.10, la zona lineal que corresponde al comportamiento fractal de la Figura 3.8 se magnifica para su mejor observación. Como se mencionó, para medir la lagunaridad de las imágenes se han utilizado 16 tamaños de caja, sin embargo en la Figura 3.10 solo se muestran 14 tamaños de caja (cada línea tiene 14 puntos). La razón de esta gráfica es observar el comportamiento de la lagunaridad, a mayor longitud de correlación la lagunaridad se incrementa casi de manera directamente proporcional, aunque debe recordarse que la lagunaridad no es un

número, por definición los medios aquí tratados son aleatorios por ello se utilizan varios tamaños de caja considerando por ello una lagunaridad estadística. Esta figura, también da cuenta del agrupamiento de los elementos de red para todas las correlaciones, de menor a mayor y es acorde con los resultados mostrados en la Figura 3.3 en donde se observó un incremento en la densidad de píxeles y un incremento del tamaño de grano cuando ξ aumenta, esto es, “los elementos de la red se agrupan más a medida que existe mayor correlación entre ellos”.

La medición de la lagunaridad en este estudio muestra que:

- a mayor correlación, están más agrupados los elementos de la red, forman estructuras más heterogéneas de manera global y en una área local las estructuras son más homogéneas,
- a baja correlación los elementos de la red están menos agrupados y menos estructurados, las redes son más homogéneas de manera global y
- a alta correlación se muestra un límite heterogéneo y a baja correlación se presenta un límite homogéneo, esto hablando en el sentido global de las redes.

Además, se puede observar en la Figura 3.10 que la lagunaridad es una función biyectiva y biunívoca con respecto a la longitud de correlación. Por tanto, la lagunaridad es un parámetro más fiable para medir objetos que presentan estructura compleja, por lo menos es resultado que se observa en este trabajo.

Resumen

- En este capítulo se obtuvieron los cúmulos de percolación de las redes, construidas a partir del DSBM, para diferentes longitudes de correlación ξ .
- La cantidad de cúmulos de mojado es mayor a baja correlación y viceversa, esto se deduce de observar el número de colores en los cúmulos de mojado, en donde cada color representa una etiqueta para un cúmulo diferente.
- Se realizaron las mediciones del umbral de percolación ρ , la dimensión fractal d_f y la lagunaridad L de los cúmulos infinitos de percolación. La medición del umbral de percolación ρ obtenido en este trabajo es acorde al reportado en la literatura para redes homogéneas.
- Aunque la d_f es diferente al valor reportado en la literatura, esto se debe a que los métodos de medición utilizados pueden ser diferentes.
- Los fractales que se obtienen por construcción sobre las redes con el método DSBM no muestran autosimilitud a todas las escalas, aunque nuestro universo de escala es pequeño, tanto como 16 tamaños de caja (hasta 631 píxeles).
- La dimensión fractal d_f presenta una correspondencia unívoca y es una función no inyectiva con respecto a la longitud de correlación.
- Debido a que la d_f no caracteriza de manera adecuada a un objeto, esto es, pueden haber objetos con diferentes estructuras y presentar la misma d_f , por ejemplo, en este caso para dos longitudes de correlación se tiene una d_f . Por tanto, es necesario hacer otro tipo de medición a la cual se le conoce como lagunaridad. De aquí, que la lagunaridad es una propiedad que caracteriza de mejor manera a las redes correlacionadas.
- El comportamiento de la lagunaridad es de tipo biyectivo y biunívoca con respecto a la longitud de correlación.

- Se observa que a mayor ξ las estructuras generadas son mas lagunares, esto quiere decir, que la estructura presenta huecos, lagunas o espacios vacíos de mayor tamaño a medida que aumenta la ξ .

CAPÍTULO IV

CARACTERIZACIÓN FRACTAL DE PASEOS ALEATORIOS, AUTO- EVITANTES Y SIN REGRESO EN LOS CÚMULOS DE PERCOLACIÓN

4.1 Propiedades emergentes

En la naturaleza la complejidad se manifiesta auto organizándose, con el fin de mantener el equilibrio de los sistemas actuando de manera no predecible, funcionando como un todo en una interrelación de cambio constante de las distintas partes que lo componen manteniendo un equilibrio⁴⁶ global y generando otras más conocidas como *propiedades emergentes*, las que se manifiestan en la acción de todas las partes que la componen. Los fenómenos de la naturaleza dependen de la estructura global, de la disposición de los componentes, pero *es fundamental la forma en la que los componentes están conectados*. Por ejemplo, en la evolución de la tierra la perturbación del equilibrio⁴⁷ ha hecho que unas especies desaparezcan y otras surjan, de esta manera se puede decir que ha surgido un nuevo estado de equilibrio⁴⁸ (o estado estacionario⁴⁹) diferente al inicial.

Así se puede enunciar que “las propiedades emergentes surgen del conjunto o totalidad⁵⁰ del sistema, si el sistema se descompone, también se pierden dichas propiedades emergentes”.

Los sistemas estudiados en este trabajo son más simples que muchos fenómenos observados en la naturaleza. A los cúmulos percolantes construidos, se les ha caracterizado varias propiedades estáticas. En este capítulo se aborda la caracterización de propiedades emergentes, temporales o dinámicas de los cúmulos de percolación, las cuales son consecuencia de aparición de las propiedades estáticas.

Las propiedades dinámicas se definen en términos de la fracción de tiempo que pasa una partícula en una estructura o sub-estructura en los sistemas percolantes [64, 154-156]. Las

⁴⁶ Comportamiento homeodinámico.

⁴⁷ El sistema no experimenta algún cambio cuando se somete a variaciones de contorno.

⁴⁸ La evolución y equilibrio están relacionados de manera sutil, si la evolución ocurre en periodos muy largos de tiempo, es prácticamente imperceptible, entonces se habla de un equilibrio.

⁴⁹ Las variables que definen el comportamiento de un sistema, son *invariantes* respecto del tiempo.

⁵⁰ Las propiedades emergentes involucran a todo el sistema, no se pueden estudiar considerando solo una de sus partes (ej. una relación holística).

propiedades que se determinan en este capítulo se relacionan con la difusión de partículas en el seno de los cúmulos infinitos de percolación.

4.2 Caracterización de propiedades de los cúmulos percolantes

A los sistemas percolantes se les pueden caracterizar diferentes propiedades como: el esqueleto, extremos colgantes o “dangling”, el perímetro externo o “hull”, la distancia química o la ruta más corta entre dos sitios, la dimensión química (también conocida como la dimensión topológica), entre otros. Estas propiedades se pueden estudiar utilizando modelos de difusión de partículas.

La propiedad más importante de un espacio topológico es la conexidad del medio que en este caso es la conexidad del cúmulo percolante, y que literalmente caracteriza si un espacio es continuo o de una sola pieza. Esta propiedad se puede estudiar con caminatas aleatorias (RW). La relación entre la dimensión fractal del cúmulo d_f y la dimensión fractal del caminante aleatorio d_w [95] permite conocer la conexidad del cúmulo percolante o dimensión espectral d_s (conexidad del medio). Esta caminata ofrece información adicional de los sistemas y es resultado de las interacciones de partículas con las poblaciones de sitios de la red, y que ocurre por el efecto de la correlación entre la gama diversa de tamaños de sitios. En este capítulo se caracterizan ambas (d_w y d_s) y adicionalmente se considera el fenómeno del caminante auto-evitante⁵¹ (SAW) y su dimensión espectral d_{SAW} , este último es un modelo utilizado en polímeros que considera el efecto del volumen excluido.

4.2.1 Dimensión fractal del caminante aleatorio (d_w)

El movimiento en dos dimensiones de un caminante aleatorio sólo está limitado por las direcciones de movimiento en las coordenadas x e y , esto se lleva a cabo cuando no aparecen obstáculos en medios continuos o regulares y la partícula puede regresar por el camino recorrido o cruzarse por el mismo. Cabe señalar que este fenómeno no siempre ocurre en los sistemas reales, por ejemplo, el movimiento en las partículas poliméricas que se difunden dentro de un

líquido, pero ayuda a tratar de entenderlo. De manera general la difusión es un proceso físico irreversible, en que se introducen moléculas a un medio inicialmente ausente de ellas, de tal forma que el sistema moléculas-medio aumenta su entropía, en el que las moléculas (solute) difunden o disuelven propagándose por todas partes en el seno del medio.

La subdifusión o difusión desacelerada permite entender el transporte en sistemas desordenados, en donde $d_w > 2$ [155] debido a la presencia de correlaciones espaciales; para la difusión en medios regulares $d_w = 2$. En el caminante aleatorio el desplazamiento cuadrático medio está descrito por la ecuación $\langle r^2(t) \rangle$ en función del tiempo:

$$\langle r^2(t) \rangle \approx t^{\frac{2}{d_w}} \quad (4.1)$$

donde d_w representa la dimensión de la caminata aleatoria y t el tiempo. Para este caso de estudio, los desplazamientos del caminante aleatorio se encuentran direccionados por un medio impuesto o medio de desplazamiento que presenta heterogeneidades, que a su vez representan obstáculos [95], por donde no será posible el tránsito del caminante. En general si se considera una malla cuya magnitud de las divisiones es a y se permite que la unidad de tiempo de paso en la malla sea τ entonces el tiempo t y los pasos n o saltos guardan una relación como $t = n\tau$, entonces:

$$\langle r^2(t) \rangle = (2d)Dt \quad (4.2)$$

donde D es una constante de difusión y está dada por $D = a^2/(2d\tau)$ [74], para $\langle r^2(t) \rangle = (2d)(a^2/(2d\tau))t = \frac{a^2}{\tau}t$ y como $t = n\tau$, entonces $\langle r^2(t) \rangle = \frac{a^2}{\tau}n\tau = a^2n$, si la magnitud $a = 1$, entonces $\langle r^2(t) \rangle = n$, la cual es la Ecuación 1.8 y que permite establecer la relación entre el desplazamiento cuadrático promedio y el tiempo. De esta manera para obtener el comportamiento en función del tiempo se realiza una gráfica del $\log \langle r^2(t) \rangle$ contra $\log t$, permite

⁵¹ Se puede considerar una discusión interesante a cerca del caminante auto-evitante en la dirección: <http://www.americanscientist.org/issues/pub/how-to-avoid-self>.

calcular la pendiente, de la cual se obtiene la dimensión fractal de la caminata aleatoria, como a continuación:

$$m = 2/d_w \quad (4.3)$$

en donde m es la pendiente de la gráfica lineal obtenida a partir del tiempo que permanece una partícula dentro del sistema y su desplazamiento, d_w es la dimensión de la caminata aleatoria, para este caso en los cúmulos percolantes de las redes correlacionadas.

Como anteriormente, si se observa que $d_w = 2$ el sistema se comporta como un medio continuo y la pendiente es igual con 1, en caso de que m sea diferente y menor que 1 existe un fenómeno de subdivisión y corresponde a un medio con características fractales.

4.2.2 Resultados

En la Figura 4.1 se muestran los resultados de la difusión del caminante aleatorio en algunos cúmulos infinitos percolantes, en donde el RW se siembra 10,000 veces. Para modelar el movimiento de las partículas se realizó un programa en Lenguaje C y utilizado el método de Monte Carlo. En la Figura 4.1, se puede observar que las zonas en donde hay mayor densidad estructural o mayor longitud de correlación el RW abarca más espacio, esto es, la partícula difunde más. A simple vista es difícil dilucidar que tanto difunde el RW a baja correlación, correspondientes a las zonas de menor densidad estructural.

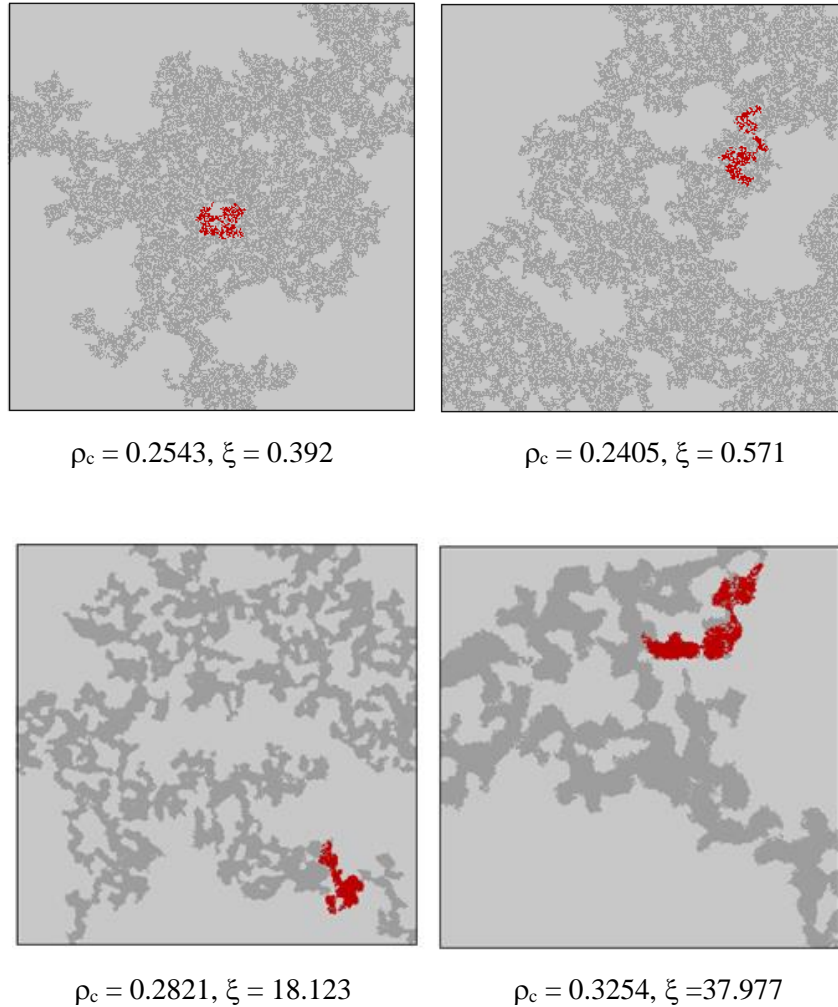


Figura 4.1 Imágenes que muestran algunos cúmulos percolantes con fracción ocupada ρ_c a diferente longitud de correlación. La difusión del caminante aleatorio se muestra en las zonas en color rojo para 10,000 pasos.

El desplazamiento del caminante RW en los cúmulos percolantes en el umbral de percolación de las redes con mayor aleatoriedad y longitud de correlación $\xi = 0$ es similar (no se muestran), y tiende a disminuir en comparación con el desplazamiento de los caminantes a $\xi \neq 0$. De aquí se deduce que en las redes aleatorias la subdifusión del caminante ocurre por la existencia de mayor cantidad de obstáculos, aunque se sabe que la presencia de correlaciones espaciales es la responsable de la subdifusión. El examen común o de la vida cotidiana, se presenta en la filtración de líquidos a través de medios porosos en donde existen zonas no conectadas, como caminos sin salida.

La hipótesis de Rammal y Toulouse [154] dice que la probabilidad de paseos y el número medio de sitios visitados se rigen por la dimensión espectral, el número de sitios distintos visitados durante una caminata aleatoria de N pasos en un cúmulo infinito en el umbral de percolación varía asintóticamente como: $S_N \sim N^{2/3}$, para cualquier dimensión. La Figura 4.2 corrobora este comportamiento para la difusión de los caminantes en los cúmulos infinitos de percolación de las redes con diferentes ξ .

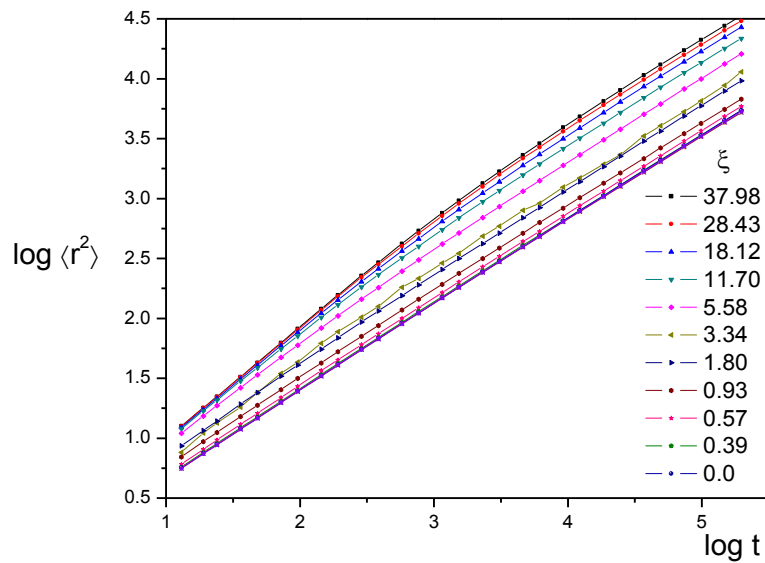


Figura 4.2 Desplazamiento del caminante aleatorio a diferentes longitudes de correlación. A mayor ξ aumenta el desplazamiento cuadrático medio del RW.

La Figura 4.2 muestra el desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo a diferentes longitudes de correlación ξ . La pendiente ascendente y positiva permite observar que a mayor tiempo de la caminata aleatoria el desplazamiento se incrementa, esto es, existe mayor cantidad de lugares visitados, y se mantiene la misma tendencia para todas las longitudes de correlación. Como se puede observar el espaciamiento entre las pendientes muestra de manera cuantitativa el incremento de la difusión en función de la longitud de correlación.

En la Figura 4.3 se indica el comportamiento de la difusión de las partículas en las redes que no presentan correlación, prácticamente tienen la misma difusión aunque el traslape Ω entre las funciones de distribución no necesariamente es cero, lo cual muestra que el parámetro de control en la difusión es la correlación entre sitios y no el traslape Ω , se ha mencionado que con el Ω no se pueden obtener valores estadísticos descriptivos.

Probablemente, la razón por la cual se observa la misma tendencia en el comportamiento de la difusión para las redes con traslape $\Omega = 0$ o bajo traslape, con longitud de correlación $\xi = 0$, se debe a que el tamaño de los sitios está uniformemente distribuido⁵² en términos de las distribuciones empleadas que postula el DSBM. El modelo de construcción de las redes asigna para cada uno de ellos un radio promedio de sitios para cada traslape (ver Tabla 2.1), pero por otro lado el teorema del límite central establece, a un cierto tamaño de muestra, que la distribución de tamaño de sitios debe aproximarse a una distribución normal [157]. La cantidad de sitios que contiene cada red es de 10^6 elementos, es decir, el espacio de tamaños es grande, por lo que es de esperarse que la difusión sea similar debido a que ocurre en cúmulos infinitos de percolación que se comportan como espacios topológicos equivalentes en la conectividad.

⁵² Los números aleatorios tienen una distribución uniforme cuando se les considera individualmente, pero si se toman arreglos o grupos cada vez, tienen una distribución gaussiana si la cantidad de ellos es grande.

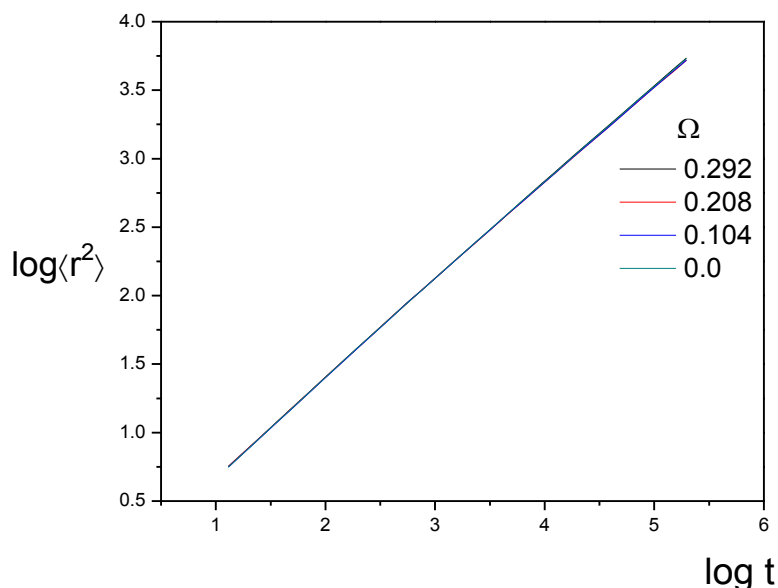


Figura 4.3 Desplazamiento cuadrático medio del RW a $\xi = 0$ para cuatro cúmulos infinitos de percolación, obtenidos de redes que se pueden considerar estadísticamente homogéneas. El desplazamiento no es significativo hasta un traslape de 0.3.

Como se mencionó a partir de las pendientes obtenidas de las gráficas $\log \langle r^2 \rangle$ vs $\log t$ de la Figura 4.2 se calculan los valores de las dimensiones del caminante aleatorio d_w utilizando la Ecuación 4.1. La Tabla 4.1 muestra los valores obtenidos de la dimensión del caminante aleatorio a diferentes longitudes de correlación.

Como se puede observar, los valores de d_w son mayores a 2 unidades ($d_w > 2$) y muestran la predicción de sub-difusión, característica que poseen los sistemas desordenados [158], en donde la difusión de las partículas está limitada por la presencia de barreras u obstáculos. Por otro lado conforme se incrementa la ξ , se incrementa el espacio disponible para el caminante aleatorio y aumenta la cantidad de sitios visitados, lo que hace tender el valor hacia $d_w \approx 2$ y la difusión de la partícula es mayor, físicamente hay mayor espacio accesible para la movilidad sin llegar a lo que se conoce como superdifusión en donde $d_w < 2$.

Tabla 4.1 Valores de la pendiente m y de la dimensión del caminante aleatorio d_w a diferentes longitudes de correlación ξ .

ξ	m	d_w^*
37.976	0.823	2.431
28.426	0.812	2.463
18.123	0.799	2.504
11.700	0.776	2.576
5.579	0.752	2.658
3.341	0.740	2.703
1.799	0.726	2.753
0.926	0.713	2.804
0.571	0.713	2.804
0.392	0.711	2.811
0	0.713	2.806

* Los valores reportados en la literatura para redes homogéneas son varios, para ello consúltese más adelante la tabla 4.2.

El comportamiento gráfico de la dimensión fractal del RW se muestra en la Figura 4.4. Aquí se puede observar de manera más precisa como el caminante se desplaza en los medios correlacionados, en donde la dimensión del caminante aleatorio disminuye a medida que aumenta la longitud de correlación.

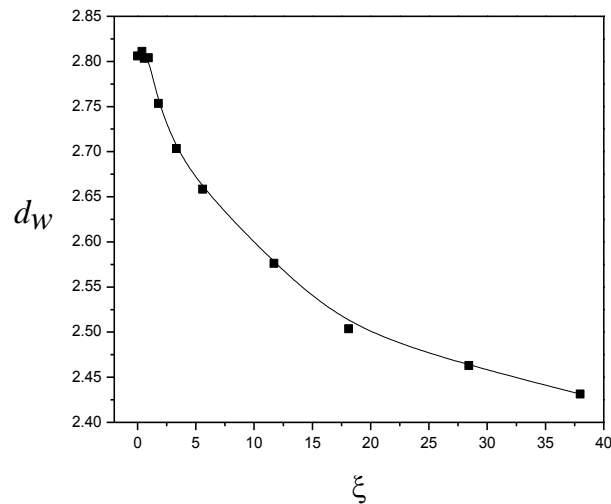


Figura 4.4 Dimensión fractal del caminante aleatorio en función de ξ . La partícula difunde más conforme los valores tienden a mayor ξ y a menor d_w ; el medio se muestra como continuo o sin obstáculos.

La tendencia de la dimensión fractal del caminante aleatorio en función de la longitud de correlación es de tipo exponencial⁵³ y está dada por:

$$d_w = 0.3941 e^{\xi/11.02514} + 2.42701 \quad (4.4)$$

La Tabla 4.2 muestra los valores de d_w reportados en la literatura para redes homogéneas en 2D. El valor obtenido en este trabajo para una red homogénea, esto es, $\xi = 0$, es acorde a los valores reportados en la literatura. En particular se coteja muy bien con los obtenidos por el método RS y MC.

Tabla 4.2 Valores reportados en la literatura de la dimensión del caminante aleatorio d_w reportados por diferentes métodos [159]. Las siglas RS se refieren al método de Espacio Real, EE al método de Enumeración Exacta y MC al método de Monte Carlo clásico.

Método	d_w
RS	2.809 [156]
EE	2.865 [158]
Analítico	2.841 [160]
MC	2.841 [161, 162, 163]
	2.551 [164]
	2.873 [165]
	2.808 [159]

4.3 Dimensión espectral (d_s)

La dimensión espectral d_s se puede definir de diferentes maneras, dependiendo del campo de estudio, por ejemplo, en la literatura se entiende como la expresión de múltiples géneros literarios [166], en física clásica como la gama de longitudes electromagnéticas o en física cuántica como flujo dimensional [167], para el estudio de redes se debe de entender como la

⁵³ Ibid nota 36.

conexidad del medio, y que no solo es una propiedad exclusiva de la red. Por su definición d_s es un parámetro dinámico, este no se debe confundir con la conectividad.

Como se dijo en el Capítulo II, cuando se intenta modelar un sistema en donde ocurren fenómenos de flujo o transporte, estos suceden a través de sitios y conexiones, canales o enlaces del sistema. Un sitio puede coordinarse con otro al menos a través de una conexión o enlace (ver la Figura 2.2), se utiliza este principio para la construcción de las redes correlacionadas con conectividad cuatro. A diferencia de la conectividad, cuando una partícula se desplaza a través de un medio que presenta baja o alta longitud de correlación, puede desplazarse poco o mucho, la posibilidad de un gran desplazamiento aumenta si la partícula se mueve en un medio altamente conexo.

La factibilidad de movimiento de una partícula de un punto a otro a través de un medio, que puede presentar obstáculos o discontinuidades, se estudia mediante la relación de la dimensión del caminante aleatorio y la dimensión fractal del medio [76, 159], relación que se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$d_s = \frac{2d_f}{d_w} \quad (4.5)$$

en donde d_s es la dimensión espectral. Como se observa en esta ecuación la dimensión espectral es la relación entre dos dimensiones, es decir, d_s mide que tanto una partícula se desplaza dentro de un fractal siendo su trayectoria también un fractal.

4.3.1 Resultados

Si se examinan las Figuras 4.1 y 4.2, conforme se incrementa la longitud de correlación ξ , una partícula moviéndose aleatoriamente abarca más espacio o incrementa su desplazamiento cuadrático promedio, en otras palabras, la partícula se desplaza a través de un medio más conexo.

A mayor longitud de correlación se incrementa la dimensión espectral del medio y el efecto producido es una mejor difusión, es decir, a medida que aumenta la longitud de correlación se incrementa o se facilita la difusión de las partículas en los cúmulos infinitos de percolación.

A fin de observar el comportamiento de la dimensión espectral de los cúmulos infinitos percolantes, a una determinada longitud de correlación, se elige un grupo de redes con lagunaridad similar, que actúan como medios para observar la difusión de las partículas. Se considera siempre que la lagunaridad tiene una serie de valores para una determinada longitud de correlación con una pendiente característica como la dada en la Figura 3.9.

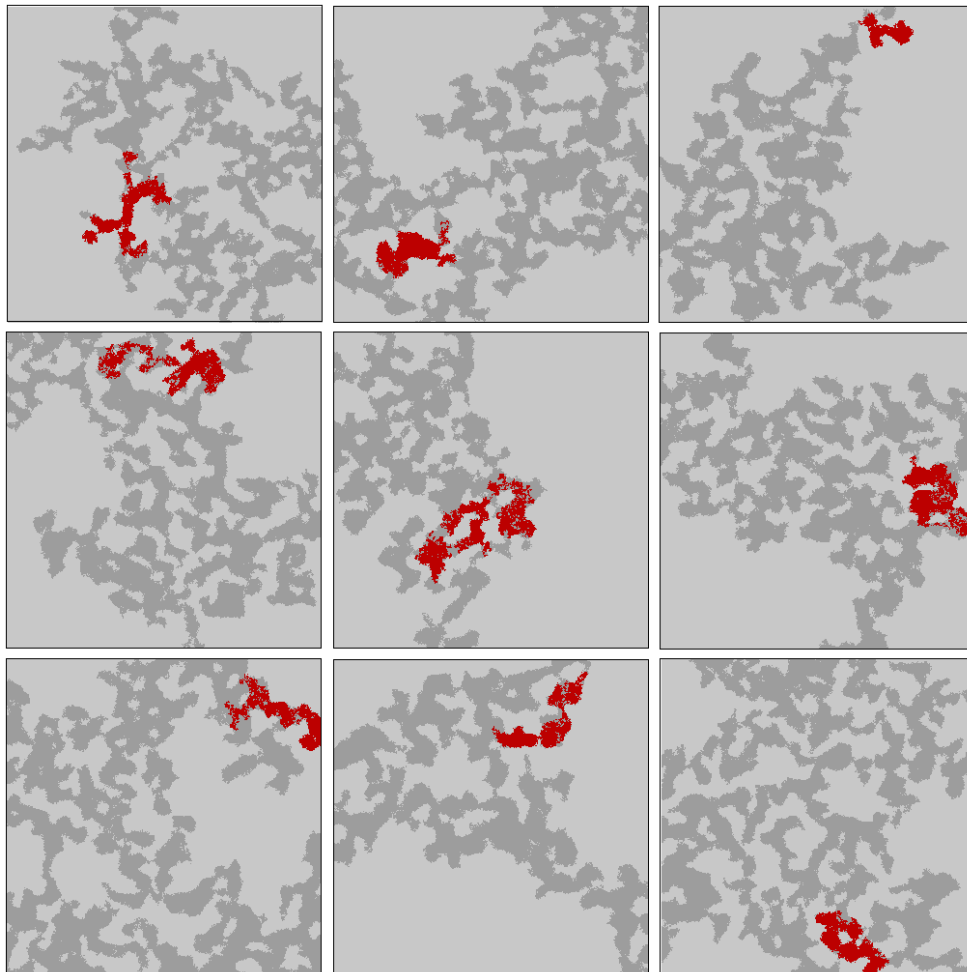


Figura 4.5 Difusión del caminante aleatorio para $\xi = 37.977$ y $d_w = 2.431$. El desplazamiento cuadrático medio de estas redes es similar (cfr. Figura 4.2) y son las que tienen la mayor conectividad reportada en este trabajo.

La longitud de correlación de la Figura 4.5 es de $\xi = 37.98$ y la dimensión promedio del caminante aleatorio $d_w = 2.43$ y $d_f = 1.8$. La dimensión espectral d_s que guarda una relación directa con la dimensión fractal del medio d_f e inversa con la dimensión del caminante aleatorio d_w , también tiene una relación directa con la lagunaridad. La partícula que se mueve de forma aleatoria en cúmulos muy lagunares recorre al medio como continuo localmente, debido a que:

- en este grupo de redes se observa la mayor difusión, la cual está marcada con zonas de color rojo, porque tienen la mayor conectividad y
- se muestra la aleatoriedad de los paseos del d_w para la misma longitud de correlación y lagunaridad, es decir, el caminante no siempre inicia en una determinada coordenada de la red, sino que lo hace de manera aleatoria, como se muestra en la Figura 4.6.

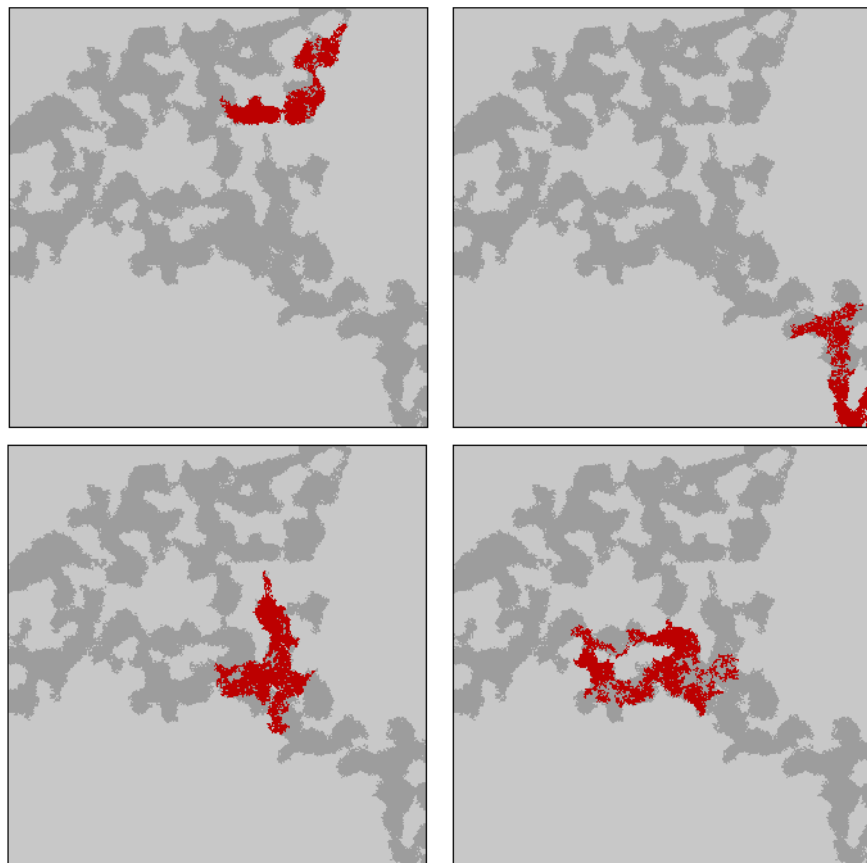


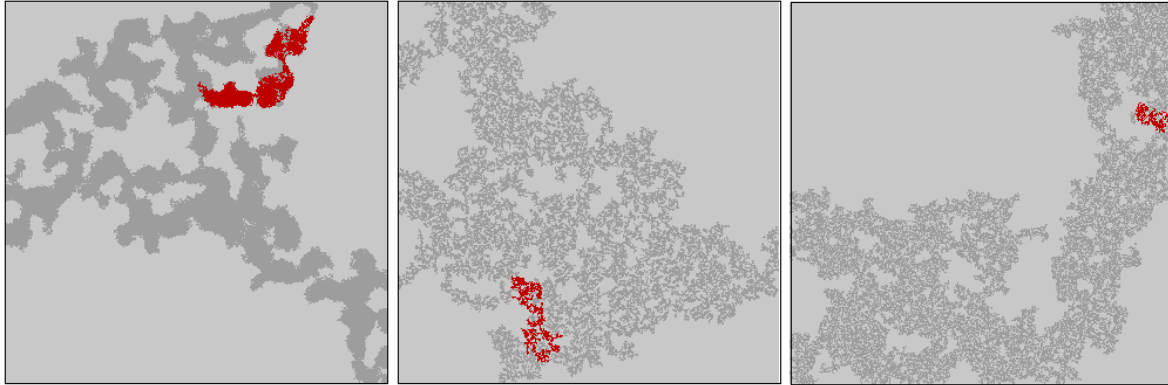
Figura 4.6 Difusión aleatoria del caminante RW en la misma red con $\xi = 37.977$ y $d_s = 1.481$. Aquí se ilustran cuatro caminantes o paseos aleatorios. El punto de origen se establece de forma aleatoria iniciando con una coordenada diferente de la red.

Para observar la relación que se presenta entre la conexidad del cúmulo infinito de percolación y la dimensión espectral se eligen redes de menor correlación (ver Figuras 4.7 y 4.8).

El valor reportado por Alexander y Orbach para la dimensión espectral es $d_s = 4/3$ (conocida como la conjetura de Alexander-Orbach) [160], también se obtiene en este trabajo. Este valor se obtiene de los cúmulos infinitos de percolación de las redes, en el valor de longitud de correlación $\xi = 5.579$ unidades de longitud (ver el renglón cinco de la Tabla 4.3). El valor reportado por Alexander y Orbach es obtenido de fractales aleatorios. Mientras que, en este trabajo el valor $d_s = 4/3$ corresponde a una red correlacionada no homogénea, por tanto, se observa que esta conjetura no se cumple únicamente para redes homogéneas⁵⁴. Cabe señalar que este hecho también ha sido reportado por nuestro grupo de investigación utilizando redes anisotrópicas [127]. De aquí:

- es claro que en la Figura 4.7, se observa que conforme disminuye la longitud de correlación, también disminuye la difusión del caminante aleatorio; zonas en color rojo de menor área,
- la relación entre lagunaridad y longitud de correlación se muestra en la Figura 3.9, a pesar de ello se puede decir que: a mayor ξ se incrementa la lagunaridad, recuérdese que L no es un número. En la Figura 4.7 lagunaridad de las redes aumenta de derecha a izquierda y
- en la Figura 4.8, se observa que los objetos con dimensión fractal similar pueden presentar una conexidad diferente. Este inconveniente es resuelto por medio de la medición de la lagunaridad. En consecuencia, la lagunaridad caracteriza mejor la conexidad del medio. De aquí se puede afirmar con seguridad que a mayor lagunaridad mayor es la conexidad del medio y mayor es la dimensión espectral.

⁵⁴ En este trabajo las redes numéricas en escala de grises y sobre todo las de $\xi = 0$, se han llamado estadísticamente homogéneas o sin parches.



$\xi = 37.976, d_S = 1.481$

$\xi = 5.79, d_S = 1.332$

$\xi = 0.0, d_S = 1.301$

Figura 4.7 Difusión del caminante aleatorio para cúmulos infinitos de percolación. De izquierda a derecha se presentan los cúmulos de mayor a menor ξ . También de izquierda a derecha la lagunaridad disminuye en los cúmulos infinitos de percolación. Se mantiene la escala de las imágenes para apreciar la disminución de la d_S .



$\xi = 28.426, d_f = 1.771, d_S = 1.438$ $\xi = 5.579, d_f = 1.770, d_S = 1.311$

Figura 4.8 Difusión del caminante aleatorio en dos cúmulos con similar dimensión fractal pero diferente ξ y diferente lagunaridad. La dimensión espectral cambia para ambos cúmulos y es mayor cuando la lagunaridad aumenta.

Tabla 4.3 Valores obtenidos de la dimensión espectral para diferente ξ .

ξ	d_s
37.977	1.481
28.423	1.438
18.123	1.415
11.700	1.369
5.579	1.332
3.341	1.311
1.800	1.302
0.926	1.289
0.571	1.301
0.392	1.298
0	1.303

La Figura 4.9 muestra el comportamiento gráfico de la dimensión espectral obtenida en este trabajo en términos de la longitud de correlación ξ (Tabla 4.3).

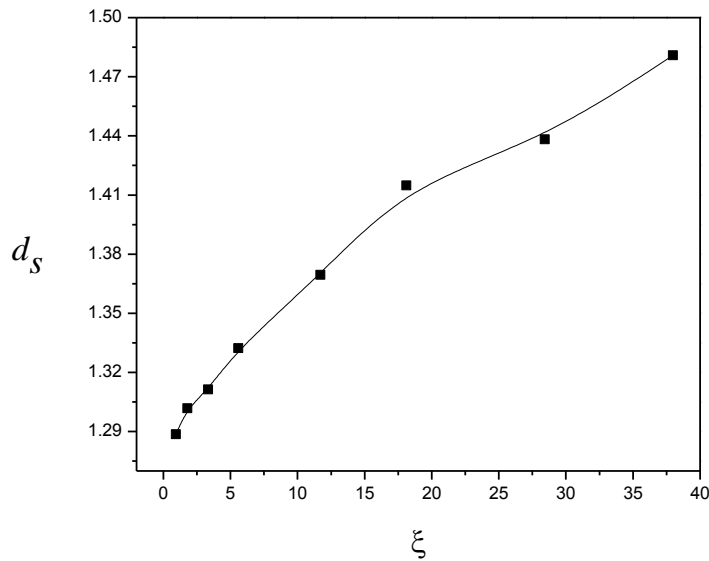


Figura 4.9 Comportamiento de d_s con respecto a la ξ . La dimensión espectral se comporta proporcional a la longitud de correlación, el comportamiento es casi lineal.

Como se puede observar en la Figura 4.9, la dimensión espectral aumenta a medida que la ξ también aumenta, luego la d_s aumenta en donde la estructura presenta mayor lagunaridad, las zonas están altamente pobladas y se comportan como un medio continuo de manera local,

facilitando el movimiento de la partícula representada por un caminante aleatorio. Por lo anterior se deduce que a mayor longitud de correlación y mayor lagunaridad el sistema está más conexo. Hasta $\xi = 0.926$ el medio puede considerarse estadísticamente homogéneo y poco conexo, a correlación mayor la dimensión espectral crece de acuerdo a la ecuación⁵⁵:

$$d_s = -0.25843e^{-\xi/27.67688} + 1.54145 \quad (4.6)$$

4.4 Relación teórica de Flory para el cálculo de (d_{SAW})

Como se ha mencionado el caminante auto-evitante (SAW) es un modelo para estudiar y analizar polímeros de cadena lineal, los sitios visitados por una partícula representan monómeros cuya interacción de volumen excluido se modelan por medio de la regla auto-evitante. El SAW es de interés en la teoría del equilibrio de transiciones de fases, sin embargo, por su propia naturaleza, representa un problema fundamental en la teoría de la probabilidad. La longitud, extremo a extremo, de un SAW de N pasos es aproximadamente:

$$\langle r^2(t) \rangle \approx t^{\nu_{SAW}} \quad (4.7)$$

donde $\langle r^2(t) \rangle$ es el desplazamiento cuadrático medio y ν_{SAW} es el exponente extremo a extremo de la cadena. La dimensión fractal de un SAW (d_{SAW}) se relaciona como:

$$d_{SAW} = 1/\nu_{SAW} \quad (4.8)$$

Los valores del exponente extremo a extremo, ν_{SAW} , son de 0.5 para 4D y 1.0 para 1D. Por lo general los SAW's son más extendidos, es decir, la longitud extremo a extremo de la cadena es mayor que la correspondiente a los caminantes aleatorios, por tanto $d_{SAW} \leq d_w$.

⁵⁵ Ibid nota 36.

Flory en 1971 sugiere una manera elegante de calcular el exponente extremo a extremo de los SAW's para D dimensiones. Este exponente puede ser calculado como:

$$\nu_{SAW} = \frac{3}{D+2} \quad (4.9)$$

La fórmula de Flory funciona sorprendentemente bien para espacios en 1D y 4D y reproduce los resultados exactos, es decir, $\nu_{SAW} = 1$ y $\nu_{SAW} = \frac{1}{2}$, respectivamente para ambos espacios. Las mejores estimaciones reproducen el valor de 0.75 para redes en 2D, valor que ha sido obtenido *mediante mapeos* de SAW's utilizando un modelo hexagonal [156].

Así mismo para redes en 3D, las mejores estimaciones están cercanas a 3/5, entre las cuales se encuentran las reportadas por Li *et al.* de $\nu_{SAW} = 0.5877 \pm 0.0006$ [168] y por Eizenberg y Klafter de $\nu_{SAW} = 0.5882 \pm 0.0009$ [169].

El resultado de la teoría de Flory [69] de la Ecuación 4.9, está basado en una estimación de campo promedio para la energía libre y por consideraciones entrópicas. Debido al posible número de configuraciones como se vio en el Capítulo I, el exponente probablemente es significativamente diferente al calculado mediante esta relación.

4.4.1 Relación entre SAW's y fractales

El estudio de los SAW's en medios fractales es de interés por varias razones:

- pueden servir como modelos para estudiar el comportamiento de polímeros en medios porosos, por ejemplo, electroforesis en gel, cromatografía de permeación en gel o la mejora de recuperación de petróleo,
- las propiedades conformacionales de los SAW's están determinadas a través del esqueleto del medio fractal y no por los extremos "laterales" de cúmulo de percolación infinito. De

esta forma, los SAW's complementarían la información de caminantes aleatorios no interactuantes y

- el estudio de los SAW's complementa e ilustra de mejor manera la teoría de Flory y las razones de su éxito [156]. Con este modelo se pueden explicar y entender de forma más clara el comportamiento de polímeros en líquidos diluidos.

Las propiedades de SAW's en cúmulos infinitos de percolación tienen un interés muy atractivo. Se ha encontrado numéricamente que el valor ν_{SAW} para $\rho > \rho_c$ es el mismo que para espacios euclidianos regulares y que para $\rho = \rho_c$, ν_{SAW} cambia [170] y que es afectado por la presencia de desórdenes débiles de la estructura [156]. Los valores pueden ser diferentes tanto en espacios euclidianos como en todos los cúmulos infinitos de percolación debido a presentan irregularidades entre sí. Los resultados de ν_{SAW} se obtienen y muestran en la Tabla 4.5, empleando solo la relación de Flory.

El consenso ha crecido en cuanto a que en el umbral de percolación los exponentes críticos o extremo a extremo difieren a los calculados en espacios euclidianos. En la Tabla 4.4 se muestran los valores de los exponentes extremo a extremo obtenidos en medios fractales en 2D.

Poco interés se ha tenido en la investigación del valor de la dimensión fractal d_{SAW} , la cual puede ser calculada utilizando la fórmula de Flory y que para diferentes casos ha sido suficiente. El uso de mapeos con SAW's arroja mayor información, particularmente mapeos en medios con característica fractal para describir estructuras de polímeros.

Tabla 4.4 Valores de los exponentes extremo a extremo de SAW's en cúmulos de percolación 2D reportados en la literatura. Las abreviaciones corresponden a: FL = ecuación de Flory y afines, EE = enumeración exacta, RS = espacio real, RG = renormalización por teoría de grupos y MC = Monte Carlo.

Método	ν_{SAW}	d_{SAW}
FL	3/4 *	1.286
	0.778 [171]	1.285
	0.770 [172, 173]	1.299
	0.760 [174]	1.316
	0.782 [159]	1.279
EE	0.745 [175]	1.342
	0.77 [176, 177]	1.299
	0.778 [178]	1.285
	0.78 [179]	1.282
	0.786 [180]	1.272
RS	0.778 [171]	1.285
	0.767 [181]	1.304
RG	0.785 [182]	1.273
	0.796 [183]	1.256
MC	0.77 [31, 184]	1.299
	0.783 [185]	1.277
	0.787 [178]	1.271

* Se deja el resultado de Flory para fines de comparación.

4.4.2 Resultados de la d_{SAW} utilizando la relación de Flory

La Tabla 4.5 muestra los resultados del exponente extremo a extremo ν_{SAW} aplicando la relación de Flory (Ecuación 4.9) a diferentes longitudes de correlación y la predicción para las dimensiones fractales utilizando la Ecuación 4.8 del caminante auto-evitante SAW. La dimensión D de la relación de Flory puede ser entera o fraccionaria, en este caso se emplea el valor de la dimensión fractal de los cúmulos infinitos de percolación en acuerdo con la modificación de Kremer a la ecuación de Flory [186].

Tabla 4.5 Valores estimados de la dimensión fractal del caminante auto-evitante d_{SAW} para diferentes longitudes de correlación ξ .

ξ	d_f	ν_{SAW}	d_{SAW}
0.000	1.829	0.783	1.276
0.392	1.824	0.785	1.275
0.571	1.823	0.785	1.274
0.926	1.807	0.788	1.269
1.800	1.793	0.791	1.264
3.341	1.773	0.795	1.258
5.579	1.770	0.796	1.257
11.700	1.764	0.797	1.255
18.123	1.772	0.795	1.257
28.426	1.771	0.796	1.257
37.977	1.800	0.789	1.267

Los resultados de los ν_{SAW} reportados por diferentes autores, a diferencia de este trabajo, no mencionan si los medios fractales que emplearon están correlacionados. Grosso modo, el valor promedio del $\nu_{SAW} = 0.789$ y está sobreestimado con respecto al valor obtenido por la ecuación de Flory de 0.75 (Ecuación 4.9), con una desviación estándar de 5.645×10^{-3} . Sin embargo, este valor está acorde con los valores reportados en la literatura utilizando diferentes metodologías de medición (ver Tabla 4.4). En particular, el valor de $\nu_{SAW} = 0.789$ es casi igual a los valores encontrados por Ordemann, *et al.* [178], Roman, *et al.* [180] y von Ferber, *et al.* [182]. En donde, el primero de los valores anteriores, $\nu_{SAW} = 0.787$, es el más cercano al obtenido en este trabajo. Efectivamente, recordando que el exponente de la distancia extremo a extremo, ν_{SAW} , es sensible a los desórdenes introducidos, como ocurre en los medios fractales y como lo postula Derrida [170]. En este estudio las redes a mayor longitud de correlación presentan más estructura o mayor agrupamiento de elementos de la red (aglomeración de elementos de tamaños parecidos). La Figura 4.10 muestra cómo es afectado el valor de ν_{SAW} en función del valor de la longitud de correlación de la red utilizada, para construir el cúmulo de percolación. Recordemos que la red que presenta menos estructura es la de menor correlación espacial. Por tanto, a menor longitud de correlación se observa que el SAW es menos extendido, pero a medida que la correlación espacial aumenta el SAW se extiende hasta un valor de $\xi = 11.7$. Después de este valor y hasta ξ

≈ 38 , el coeficiente v_{SAW} comienza a disminuir de manera lenta, es decir ya no varía considerablemente, indicando que nuevamente el SAW se extiende menos.

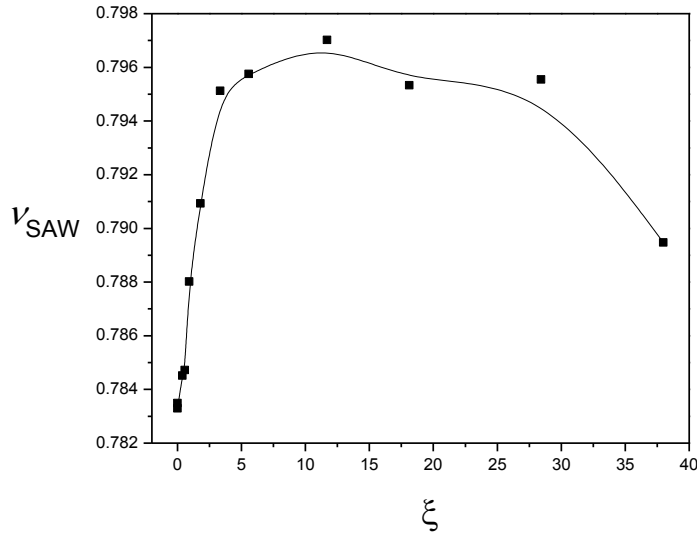


Figura 4.10 Comportamiento de v_{SAW} en función de la ξ . No se espera un comportamiento constante del v_{SAW} , ya que es sensible a desordenes débiles de la estructura. Las estructuras fractales presentan mayor desorden y están más débilmente estructuradas por debajo de $\xi = 11.7$; después de este valor las estructuras presentan mayor orden y estructura (véase el Capítulo II).

Examinando la Figura 3.5, se observa como a $\xi = 11.7$, el valor de la dimensión fractal cambia su comportamiento, esta comparación permite afirmar que v_{SAW} depende de la dimensión fractal del cúmulo infinito de percolación. El SAW se desplaza, aparentemente, en mayor ξ como ocurriría en un medio regular.

Otro hecho que justifica el comportamiento de los valores de los v_{SAW} es el análisis de la lagunaridad de los cúmulos infinitos de percolación de la Figura 3.8. Como se había analizado, la lagunaridad muestra la presencia de mayor estructura en el límite heterogéneo en la curva superior (más lagunar) y en el límite homogéneo existe falta de estructura lagunar que corresponde a la curva inferior (menos lagunar). Hasta $\xi = 11.7$, es congruente el cambio ascendente de v_{SAW} , a partir de allí el SAW se desplaza como lo haría en un medio regular no fractal, esto probablemente ocurre por la extensión del tamaño de la cadena N del SAW.

Recuérdese que para espacios en 2D, según la teoría de Flory, ν_{SAW} debe tener un valor de $3/4$. El comportamiento ascendente de ν_{SAW} hasta $\xi = 11.7$ establece un intervalo para ξ en que los cúmulos infinitos de percolación se pueden considerar como “más desordenados”. Sin embargo en ambas tendencias, es decir, por abajo y por arriba del valor de $\xi = 11.7$ se presentan variaciones débiles en la estructura. Para valores hasta $\xi = 11.7$ la magnitud del intervalo de $\nu_{SAW} = 0.014$, mientras que a partir de $\xi = 11.7$ y hasta $\xi = 37.976$ el valor del intervalo de $\nu_{SAW} = 0.008$. Con corrobora también que los cúmulos infinitos de percolación obtenidos presentan desordenes de estructura. También, en la Tabla 4.5, columna 4, se reportan los valores de la dimensión fractal d_{SAW} del SAW, el cual se obtiene del inverso del exponente ν_{SAW} (Ecuación 4.7). La Figura 4.11 muestra el comportamiento de la dimensión fractal del SAW, con respecto a la longitud de correlación. El resultado mostrado es congruente a la predicción del movimiento de un caminante auto-evitante en un medio continuo después de $\xi = 11.7$, sin embargo no olvidemos que la dependencia del SAW en términos de la dimensión fractal del medio esta descrita como en la Ecuación 4.8. La dimensión espectral mediante mapeos sin duda aportará mayor información debido a que refleja la presencia de barreras del medio en que los paseos SAW se desplazan.

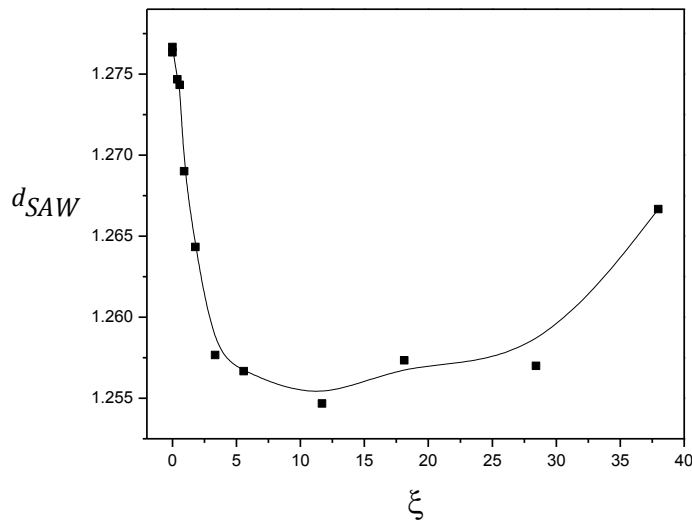


Figura 4.11 Comportamiento de la dimensión fractal del caminante auto-evitante en función de la ξ . En este comportamiento claramente se aprecian dos dominios, comportamiento muy similar al de la dimensión fractal en las redes utilizadas en este trabajo (ver Figura 3.5 del Capítulo II).

Hay trabajos actuales [85, 86, 187] en que, los paseos auto-evitantes se mapean en espacios discretos no correlacionados, tanto en 2D como en 3D. Una de las propiedades de interés para nosotros es la dimensión fractal del SAW que tiene que ver con la distancia extremo a extremo en una cadena de monómeros. Esta propiedad no ha sido obtenida por mapeos del SAW, al parecer no ha llamado la suficiente atención, hasta ahora no ha pasado de ser una curiosidad matemática. Sin embargo la teoría postula que la dimensión fractal de un caminante SAW, es un parámetro de estructura y que también puede relacionarse a la dimensión fractal de cadenas de macromoléculas. La dimensión fractal del SAW, tiene relación con valor del exponente de Flory como: $d_{SAW} = 1/\nu_{SAW}$, en que ν_{SAW} tiende al valor de 0.75 conforme crece la longitud de la cadena de manera auto-evitante. Hasta ahora no existe en la literatura reportes que se hayan ocupado de demostrar este valor y sobre todo mapeando paseos auto-evitantes para obtener valores estadísticos que sean contundentes para corroborar este valor.

Dado el costo computacional de mapeos del SAW se ha optado por otra alternativa la cual consiste en el estudio del caminante aleatorio sin retorno NRRW (no reversing random walk, por sus siglas en inglés). En la siguiente sección se presenta tal estudio en los cúmulos infinitos percolantes, este caminante también simula un fenómeno de difusión de partículas sobre una superficie.

4.5 Estudio de mapeo del NRRW en cúmulos de percolación

El método del caminante aleatorio sin retorno NRRW consiste en arraigar la primera partícula de manera aleatoria en algún punto del cúmulo infinito percolante y se deja crecer hasta que se detiene. Aquí no se utiliza pivoteo [103, 188] para que se despliegue en el mayor espacio posible, la reptación o el método de enriquecimiento [104]. No existen muchos trabajos que reporten resultados del NRRW, el cual está considerado como un caminante intermedio entre RW y el SAW. De este modo, se estudian con el NRRW las propiedades dinámicas de los cúmulos infinitos de percolación.

Los resultados obtenidos de un caminante aleatorio sin regreso NRRW dependen de los mapeos posibles que se hacen en las redes obtenidas con diferente correlación espacial y están determinados de la siguiente forma:

- el desplazamiento cuadrático promedio se obtiene con la Ecuación 4.9 que es equivalente a la Ecuación 4.6 para el desplazamiento en función del tiempo,
- en el método se siembra un intento de forma aleatoriamente sobre el cúmulo infinito de percolación y se permite que evolucione hacia adelante con la condición de no regresar sobre sí mismo y
- el caminante se detiene en el momento de encontrar un obstáculo ya sea porque:
 - a) durante el recorrido el camino se cierra (camino o callejón sin salida),
 - b) el espacio del cúmulo donde se siembra carece de área (de nuevo se trata de un camino sin salida),
 - c) se pliega sobre sí mismo o
 - d) existen muchas barreras como en el caso particular de la baja longitud de correlación.

El desplazamiento cuadrático promedio del NRRW en función del tiempo es de la forma:

$$\langle r^2(t) \rangle \approx t^{\nu_{NRRW}} \quad (4.10)$$

En el comportamiento para los datos obtenidos: $\log \langle r^2(t) \rangle$ vs $\log \langle t \rangle$, la pendiente corresponde al exponente: $m = \nu_{NRRW}$, lo que permite calcular los valores del exponente extremo a extremo del caminante no reversible.

4.5.1 Resultados

La Figura 4.12 muestra los resultados de los caminantes NRRW para las redes obtenidas con diferente longitud de correlación. En este experimento se lanzan 1000 intentos, es decir, la partícula se siembra 1000 veces para cada longitud de correlación ξ .

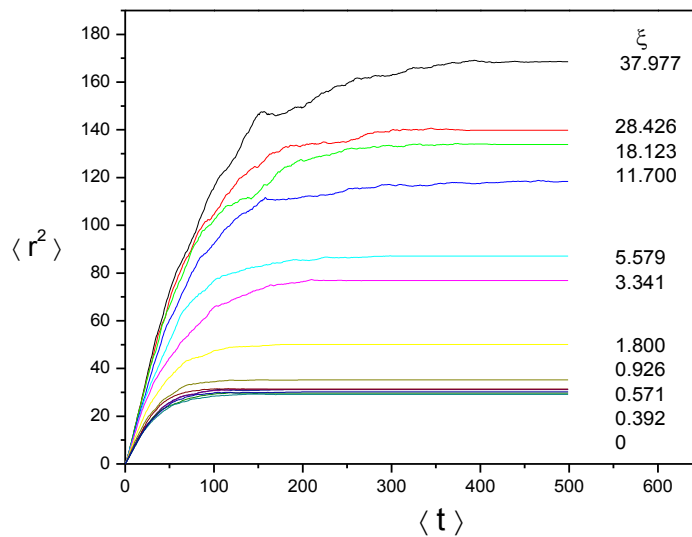


Figura 4.12 Desplazamiento cuadrático medio para 1000 intentos a diferente longitud de correlación ξ . Estos caminantes permiten considerar la conveniencia de emplear solamente 1000 intentos o siembras sobre las diferentes rede correlacionadas.

En la figura anterior:

- se observa que para la curva con longitud de correlación de $\xi = 11.7$ las curvas no son suaves,
- este hecho se puede corregirse aumentando la cantidad de intentos, es decir, los intentos deben ser mayores a 1000 siembras,
- el espaciamiento entre las curvas indica que el desplazamiento del caminante se incrementa a mayor correlación,
- a baja correlación el caminante llega a su máximo desplazamiento en menor tiempo en comparación con la alta correlación, esto es, la curva se satura en poco tiempo y
- cuando la correlación es cero o casi cero las curvas presentan la misma saturación, el desplazamiento es mínimo.

Para obtener un comportamiento suavizado que permita visualizar la zona lineal para asignar el número de intentos óptimos para cada cúmulo infinito de percolación a diferente ξ es necesario aumentar el número de intentos o siembras. Así, en esta figura se observa un comportamiento

peculiar, a una longitud de correlación mayor que $\xi = 11.7$ para 1000 siembras las curvas son más abruptas o menos suavizadas. Tal comportamiento se afecta a mayor ξ , por tanto se incrementan los caminantes NRRW hasta 10,000 intentos para los cúmulos con ξ iguales o mayores a 11.7. De esta manera la Figura 4.13 establece el número de siembras mayores a 1000 para la $\xi = 37.977$.

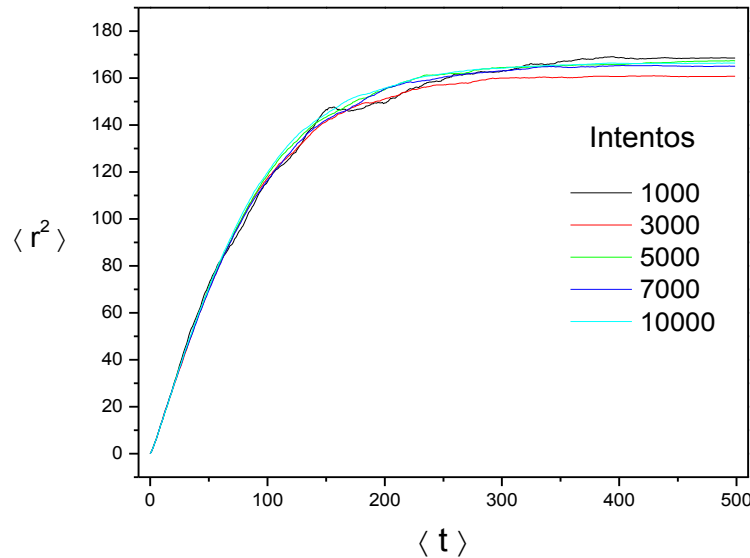


Figura 4.13 Desplazamiento cuadrático medio a diferentes intentos o siembras a una longitud de correlación $\xi = 37.977$. En este comportamiento se puede establecer que 5000 intentos son suficientes para obtener la curva suavizada.

Para mejorar el comportamiento de las curvas iguales o mayores a $\xi = 11.7$ se realizaron hasta 10,000 intentos, cabe señalar que esta cantidad de intentos es computacionalmente viable, es decir, a esta cantidad no se tienen problemas de capacidad computacional; tanto de memoria como de velocidad. La Figura 4.13 muestra que esto es viable para la longitud de correlación más grande descrita en este trabajo.

En la Figura 4.14 se muestran los resultados para 10,000 intentos utilizando las distintas redes correlacionadas; las curvas se encuentran suavizadas en su totalidad y se puede decir que todas presentan una pendiente bien definida sin saltos abruptos, lo cual indica que se puede obtener una regresión confiable.

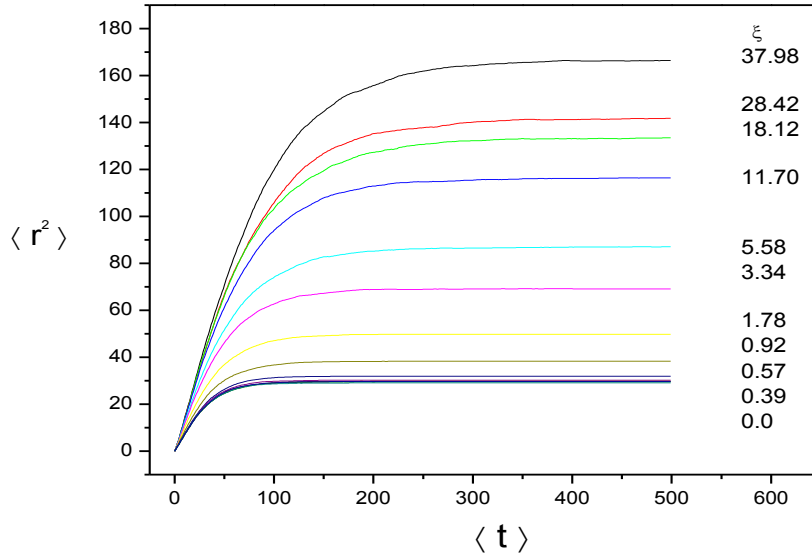


Figura 4.14 Desplazamiento cuadrático medio a diferentes longitudes de correlación para 10,000 intentos. Con estos intentos el tiempo de cálculo y recurso de cómputo son viables.

Los valores del comportamiento de la Figura 4.14 permiten obtener el cálculo de valores característicos del caminante NRRW en las redes homogéneas y en las redes heterogéneas. Con esto el intervalo de linealidad se observa mejor y muestra el punto de saturación en que los paseos NRRW ya no incrementan su desplazamiento cuadrático medio.

La Figura 4.15 muestra el resultado de la grafica $\log\langle r^2 \rangle$ vs $\log\langle t \rangle$ para los NRRW; se pide al lector observar las zonas de mayor linealidad para todas las correlaciones. La zona lineal de la figura permite establecer cuál es la mayor extensión o desplazamiento que alcanzan los paseos no reversibles NRRW. En la zona lineal se consideraran los datos de la línea recta para obtener valores estadísticos. Este criterio aunque simple, permite apreciar de manera cualitativa cual es el posible tamaño de una cadena conformada por partículas que se pueden estudiar a cada longitud de correlación. Las siembras de los diferentes paseos NRRW no se arraigan en el mismo punto del cúmulo, lo que hace que muchos de los desplazamientos sean pequeños.

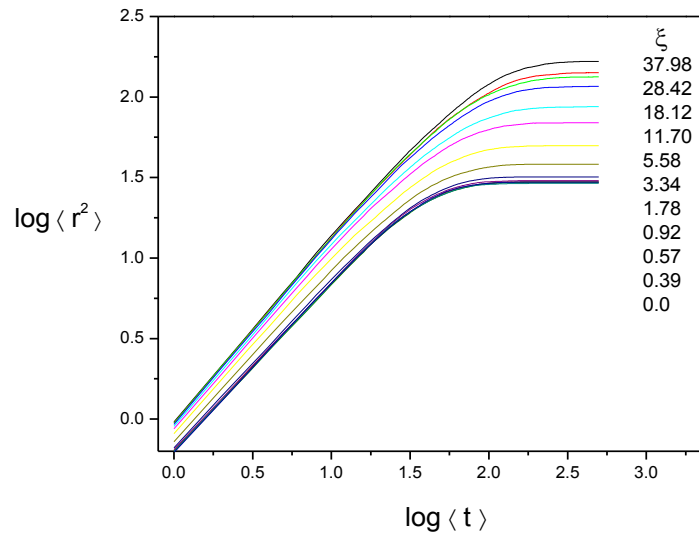


Figura 4.15 Gráfica logarítmica $\log\langle r^2 \rangle$ vs $\log(t)$ del desplazamiento cuadrático medio a diferentes longitudes de correlación para 10,000 intentos del NRRW. La parte lineal de las curvas se observa más definida, debido a que se utilizaron todos los datos del desplazamiento para cada ξ .

Tabla 4.6 Valores característicos para 10,000 intentos en los cúmulos infinitos de percolación construidos sobre las redes generadas.

ξ	$\langle r^2(t) \rangle$	Pendiente	Error	Linealidad
37.977	84.9982	1.0655	0.0070	0.9972
28.426	74.1839	1.0736	0.0082	0.9967
18.123	71.3624	1.0581	0.0079	0.9968
11.700	65.6009	1.0971	0.0069	0.9987
5.579	35.9260	1.0588	0.0090	0.9977
3.341	32.6497	1.0427	0.0100	0.9971
1.807	26.9296	1.0003	0.0109	0.9962
0.926	22.6929	0.9888	0.0098	0.9969
0.571	20.1581	0.9864	0.0083	0.9977
0.392	19.7374	0.9948	0.0070	0.9984
0	19.0831	0.9877	0.0080	0.9979
0	18.8239	0.9900	0.0082	0.9978
0	19.0910	0.9929	0.0085	0.9977
0	19.1258	0.9914	0.0089	0.9975

Los valores estadísticos de la zona lineal para 10,000 intentos o siembras y diferentes longitudes de correlación se presentan en la Tabla 4.6. Para todos los grupos de datos se procuró ajustar al mejor valor de correlación.

En el caso de las caminatas aleatorias las pendientes del comportamiento $\log\langle r^2(t) \rangle$ contra $\log t$ corresponden a los exponentes, de los cuales se puede despejar la dimensión fractal del RW (Ecuación 4.1). Las pendientes de la Tabla 4.6 carecen de ese sentido, debido a que se aplican a la parte lineal solamente. Estas no caracterizan al exponente del desplazamiento cuadrático promedio de la Ecuación 4.10. Sólo se han considerado para observar cuántos saltos o pasos en promedio, son posibles de realizar en cada cúmulo infinito de percolación antes de detenerse.

La información acerca de la cantidad de sitios visitados sobre la red, permite visualizar que a baja correlación los sitios visitados son menores, lo que permite visualizar la posible longitud de una cadena de partículas, aquí las cadenas cortas son las que ser estudiadas. A longitud de correlación mayor las cadenas de partículas que se pueden estudiar son más largas (casi cuatro veces más grandes).

En este estudio no todos los intentos son exitosos, los valores de las distancias cuadráticas promedio se obtienen de siembras aleatorias sobre los cúmulos o sobre un grano pequeño y se despliegan limitados no solo por barreras o caminos cerrados, también porque las siembras ocurren en zonas con poco espacio para su desplazamiento. El algoritmo es este estudio del NRRW no explora de manera eficiente las diferentes posibilidades de desplazamiento debido a que no se arraiga la primer partícula para todas las siembras, pero si permite buenos resultados para continuar un estudio más detallado y objetivo y que no se propuso en este trabajo, por ejemplo un estudio conformacional.

A pesar de las restricciones computacionales, el algoritmo empleado y a la cantidad de intentos generados, se debe destacar que los valores estadísticos de las pendientes tienen valores muy aceptables, esto es, si el número de intentos aumenta no se observarían cambios significantes en ellas.

Como se ha mencionado, en espacios homogéneos y conectividad 4, un RW explora $4D^N$ posibilidades y el SAW $4 \times 3^{N-1}$ posibilidades, lo que implica que en el caso de una $\xi = 0.392$ con desplazamiento cuadrático promedio de 19 unidades de red (partículas) para 2D, el RW tiene 2,097,152 y el SAW tiene 1,549,681,956 posibilidades cada uno (ver Capítulo 1), lo que demuestra en buena medida que se el NRRW implementado tiene bastantes limitaciones con 10,000 siembras o intentos. Es seguro que el número de posibilidades se encuentre fuertemente disminuido por la presencia de la correlación, sin embargo el NRRW da idea de la cantidad de partículas que puede tener una cadena para su estudio a cada ξ .

El algoritmo por pivoteo [103, 189] es recomendable para medir los desplazamientos junto con el SAW. El algoritmo de pivoteo no genera en estricto sentido de todos los posibles paseos auto-evitantes, pero si permite ver como se despliegan los SAW's en el espacio. El comportamiento del exponente extremo a extremo de la distancia cuadrática media en función del tiempo de las caminatas NRRW's es parecida a los valores comentados por Brian Hayes⁵⁶ (ver Capítulo I). Los valores de los exponentes extremo a extremo encontrados en este trabajo se ilustran en la Figura 4.16, que son acordes al comportamiento gráfico de los exponentes extremo a extremo del caminante aleatorio $\langle r^2(t) \rangle \approx t^{\frac{2}{d_w}}$, el cual está mostrado en la Figura 4.17.

La Figura 4.16 muestra el comportamiento de los exponentes extremo a extremo, que considera todo el conjunto de datos para cada longitud de correlación de los NRRW's, que se generan a partir de las curvas obtenidas en la Figura 4.14. Es pertinente mencionar, que las curvas se toman en su totalidad y no solo los datos de la parte lineal (pendiente) de cada corrida. La literatura dice que en un medio regular el valor de $\nu_{SAW} = 0.75$ cuando N tiende a infinito y considerado como valor universal [186]. El comportamiento del NRRW es menor de este valor, lo cual sucede porque el SAW no puede tener cruces consigo mismo, mientras que el NRRW si lo puede hacer, esto implica que el SAW se despliega más rápido comparado con el NRRW.

⁵⁶ *Ibid* nota 20.

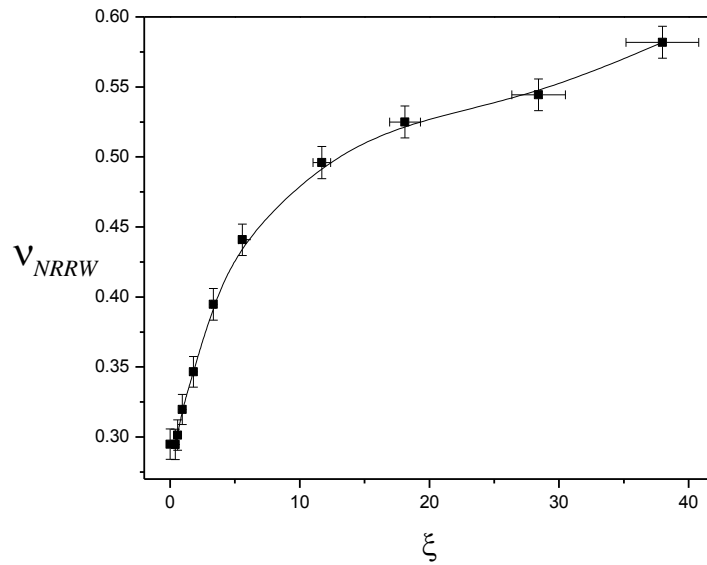


Figura 4.16 Exponentes extremo a extremo de los NRRW's en función de la longitud de correlación. A diferencia del SAW se puede observar que en el NRRW no se forma un hombro en la curva (Figura 4.10).

La Figura 4.16 muestra el comportamiento de los exponentes extremo a extremo, que considera todo el conjunto de datos para cada longitud de correlación de los NRRW's, que se generan a partir de las curvas obtenidas en la Figura 4.14. Es pertinente mencionar, que las curvas se toman en su totalidad y no solo los datos de la parte lineal (pendiente) de cada corrida. La literatura dice que en un medio regular el valor de $v_{SAW} = 0.75$ cuando N tiende a infinito y considerado como valor universal [186]. El comportamiento del NRRW es menor de este valor, lo cual sucede porque el SAW no puede tener cruces consigo mismo, mientras que el NRRW si lo puede hacer, esto implica que el SAW se despliega más rápido comparado con el NRRW.

El aumento de distancias cuadráticas promedio también implica una mayor longitud de los posibles paseos, condicionados a un aumento de la longitud de correlación, visto desde la dimensión espectral reflejan también mayor movilidad de las partículas en el medio en donde los paseos prefieren evolucionar (zonas más densas). La saturación muy rápida a baja longitud de correlación implica una cantidad menor de paseos de los NRRW's.

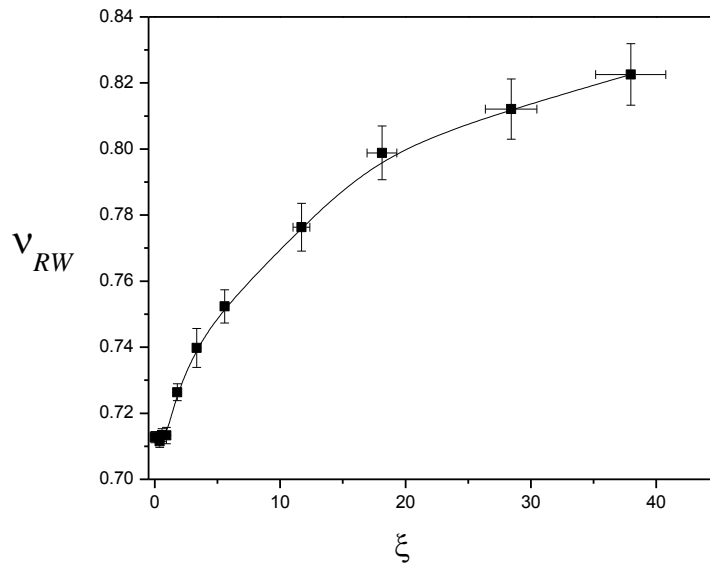


Figura 4.17 Exponentes extremo a extremo de los RW's en función de la longitud de correlación. Se puede observar que el comportamiento es similar al obtenido con los coeficientes del NRRW (Figura 4.16). En ambos caminantes, el inverso de los coeficientes extremo a extremo representan las dimensiones fractales correspondientes.

También de la Figura 4.16 se puede deducir la dependencia del coeficiente v_{NRRW} con respecto a la lagunaridad (ver Figura 3.8). Recordando, la lagunaridad no es un número como propiamente se ha comentado y mostrado en esa figura: conforme se incrementa la longitud de correlación, también se incrementa la lagunaridad. Los comportamientos del v_{RW} y v_{NRRW} tienen un comportamiento similar en función de la lagunaridad, ambos se incrementan a mayor longitud de correlación, por tanto se puede decir también que estos coeficientes aumentan a mayor lagunaridad. Aunque, en términos de la distancia cuadrática media recorrida por los caminantes, el NRRW tiende a desplegarse menos con respecto al RW, la condición de no retorno hace que el caminante tienda a enrollarse dentro del medio, en este caso dentro del cúmulo infinito de percolación.

Para ambas Figuras 4.16 y 4.17 se puede observar como las barras de error presentan un comportamiento de la siguiente manera: para la longitud de correlación la magnitud de los errores son completamente equivalentes, pero no es así para los exponentes extremo a extremo,

para el ν_{NRRW} la magnitud de los errores permanece constante para cada ξ y para el caso del ν_{RW} la magnitud de los errores se anula a baja longitud de correlación.

Resumen

- Los valores de la dimensión fractal del caminante aleatorio y la dimensión espectral de los cúmulos infinitos de percolación obtenidos son acordes a los reportados en la literatura; ambas propiedades son dependientes de la longitud de correlación.
- A medida que la longitud de correlación aumenta, la conexidad del medio se incrementa: la dimensión fractal del caminante aleatorio disminuye y la dimensión espectral del medio se incrementa casi de manera lineal.
- El coeficiente de la distancia extremo a extremo del caminante auto-evitante determinado por la ecuación de Flory es acorde a los valores reportados en la literatura, mostrando valores diferentes debido a que existen variaciones en la estructura de los cúmulos infinitos de percolación, en los cuales la longitud de correlación cambia.
- El estudio de propiedades por medio de mapeo de caminantes auto-evitantes sobre los medios correlacionados y la posible obtención de parámetros de estructura de macromoléculas es de alto costo computacional, por lo se debe implementar un análisis de manera muy específica en términos del fenómeno que se desee investigar.
- La dimensión fractal del caminante auto-evitante calculada mediante la fórmula de Flory es suficiente para este trabajo, por tanto no ha sido necesario realizar un estudio de mapeo.
- El modelo del caminante sin regreso es una alternativa que arroja información útil, permite observar la distancia cuadrática promedio recorrida, de tal forma que se puede implementar de manera específica el tamaño de una cadena de partículas para su estudio. Además, con este tipo de caminante se puede pre verificar el número de paseos posibles para cada longitud de correlación.

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

5.1 Conclusiones

En este proyecto de investigación se han construido redes cuadradas correlacionadas isotrópicas en 2D, por medio del método de Monte Carlo clásico. El fundamento de la construcción de estos espacios correlacionados está descrito en el Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DSBM). El código de programación se ha implementado a través del lenguaje C.

Las redes correlacionadas están constituidas por dos tipos de elementos: sitios y enlaces. Para lograr la correlación es necesario traslapar tales elementos. En este trabajo se realizaron 14 traslapes (Ω), incluyendo el traslape igual con cero. De esta forma para tener una muestra estadística representativa se construyeron 100 redes para cada traslape, por lo tanto se cuenta con un total de 1400 redes. De aquí se eligieron 10 redes de cada traslape para realizar el análisis de la longitud de correlación y de sus propiedades estáticas y dinámicas.

Se observa que cuando el traslape entre los elementos aumenta la longitud de correlación (ξ) se incrementa de forma exponencial. A medida que la longitud de correlación aumenta, sobre la red se forman “parches” más definidos, esto se debe a que los elementos se encuentran agrupados formando zonas que tienen una característica similar. La longitud de correlación es la propiedad que determina las propiedades estáticas y dinámicas de las redes.

Una vez caracterizada la longitud de correlación para cada red seleccionada, se determinan los cúmulos percolantes, también conocidos como masa o zona de mojado, a través del algoritmo de Hoshen-Kopelman, y de forma natural se determina el umbral de percolación (ρ). De aquí se obtienen los cúmulos infinitos de percolación y se calcula la fracción ocupada por estas (ρ_c). El umbral de percolación obtenido para $\Omega = 0$ es acorde al reportado en la literatura para redes homogéneas. En este trabajo, un $\Omega = 0$ significa que la red está construida por los elementos en disposición totalmente aleatoria, pero se trata de una red homogénea a escala global. También, se observa que si la longitud de correlación aumenta los cúmulos son más densos, esto es porque la agrupación entre elementos crea zonas de características particulares, como en el caso de la formación de los “parches” de las redes.

De la literatura se conoce que dentro de ciertas escalas sólo en el punto crítico los cúmulos infinitos de percolación tienen geometría fractal, por tanto, para cada uno de los cúmulos obtenidos en este trabajo se determina su dimensión fractal (d_f) utilizando el método de conteo de cajas con el software ImageJ. Se observa que la dimensión fractal con respecto a la longitud de correlación presenta una correspondencia unívoca mientras que la función es de tipo no inyectiva, esto es, a un valor de la d_f (contradominio) le pueden corresponder dos valores de ξ (dominio).

Debido al hecho de que la información que aporta la dimensión fractal no caracteriza por completo un medio fractal, es necesario recurrir a otro tipo de medición fractal, como lo sugirió Mandelbrot en su momento. De aquí se procede a determinar la lagunaridad (L) y que se determina con el plugin FracLac de ImageJ. En el caso particular de las redes, se observa que a medida que la longitud de correlación aumenta la lagunaridad también lo hace. Esto significa que a mayor ξ los elementos de la red forman cúmulos infinitos de percolación más densos con huecos mayores.

Las propiedades estáticas de los cúmulos infinitos de percolación son de interés debido a que permiten conocer de manera cuantitativa la facilidad de desplazamiento de una partícula dentro del medio o su permanencia en él. Estas propiedades están asociadas a los fenómenos de difusión o sub-difusión (difusión desacelerada) la cual ocurre en medios irregulares por la presencia de barras o cuellos de botella y obstáculos, en que la partícula debe buscar una mejor ruta de movimiento. En este trabajo se implementan caminantes aleatorios RW en el seno de los cúmulos infinitos de percolación, los cuales se programaron utilizando lenguaje C. El desplazamiento cuadrático medio de los RW en función del tiempo permite el cálculo de los coeficientes extremo a extremo, que se obtienen a partir de la pendiente del comportamiento gráfico del logaritmo del desplazamiento en función del logaritmo del tiempo, de aquí se relaciona la dimensión fractal del caminante aleatorio (d_w), como $d_w = 2 / m$ donde m es la pendiente. El valor de la dimensión fractal del RW obtenido para las redes con $\xi = 0$ es acorde al reportado en la literatura.

El RW es estudiado ampliamente en la literatura, en este caso permite conocer que a medida que se incrementa la longitud de correlación la dimensión fractal del caminante aleatorio disminuye, es decir, aumenta el valor del exponente del caminante aleatorio, acercándose al valor de difusión normal, en que el medio de difusión es continuo, la partícula tiene menos obstáculos en su trayecto. Cuando una partícula difunde dentro de un sistema también es importante conocer que tan conexo o vinculado se encuentra. La conexidad es diferente a la conectividad y esta propiedad se define como la dimensión espectral (d_s) [42, 154, 160], y se mide de la simple relación entre la característica fractal del medio desordenado y la dimensión fractal de la partícula que difunde. La dimensión espectral, para medios desordenados y homogéneos, propuesta por Alexander y Orbach es de $d_s = 4/3$, en los resultados reportados en el presente proyecto este valor se obtiene para una red correlacionada, esto es, para un sistema con heterogeneidades, y no es constante. Se observa que el comportamiento de la dimensión espectral tiene una dependencia lineal en función de la longitud de correlación.

La caminata aleatoria RW es un modelo de difusión generalizado, que tiene el inconveniente de ser poco realista debido a que toma en cuenta que las partículas pueden ocupar el mismo espacio de manera simultánea, y se sabe que para un modelo de partículas colocadas en un arreglo lineal existe la interacción de volumen excluido. Por tanto, el caminante auto-evitante SAW es un modelo que considera esta interacción, el exponente de la distancia cuadrática media de este caminante permite el cálculo de su dimensión fractal. Flory predijo el valor del exponente como $3/4$ para un caminante auto-evitante en 2D con longitud de cadena N . Sin embargo, los trabajos reportados en la literatura encuentran que el valor del exponente del SAW es aproximado a este valor. El valor encontrado, en este trabajo, para los cúmulos infinitos de percolación a diferentes longitudes de correlación también se aproxima al valor de Flory; aunque cabe señalar que estos valores se obtienen a partir de la relación de Flory y no por mapeo.

Finalmente, como alternativa al análisis del caminante auto-evitante, se estudia el caminante aleatorio sin regreso NRRW, el cual proporciona información útil para este trabajo. Se observa que a medida que la longitud de correlación aumenta el NRRW el valor del exponente anómalo aumenta. De tal forma, el recorrido que realiza el NRRW puede ayudar a diseñar y discriminar el tamaño de una cadena de partículas en un medio correlacionado específico.

En general se satisfizo la construcción de medios correlacionado por modelaje computacional, con ello se obtienen los prospectos adecuados para modelar la difusión de moléculas en términos del espacio accesible. En donde los medios presentan un cierto grado de heterogeneidad, tortuosidad y no están agitados y están mal mezclados. Además, a medida que aumenta la correlación aumenta la conexidad entre los elementos del medio y el sistema que se desplaza dentro de él, por ejemplo, un RW o NRRW. La difusión que se puede estudiar en estos medios, obtenida mediante mapeos del RW y el NRRW, presenta características que mejoran la comprensión de los mismos. Su estudio permite deducir como pueden ocurrir los fenómenos de difusión en los sistemas reales, por ejemplo, en el desplazamiento de una macromolécula, que puede ser biológica o no, en un ambiente tortuoso o concentrado.

En este mismo contexto se puede deducir, por ejemplo, que cadenas pequeñas de partículas percibirán a los sistemas generados como medios continuos cuando la correlación es alta, por el contrario cadenas grandes percibirán a los sistemas como medios bloqueados cuando la longitud de correlación es baja. Aunque, el estudio de la dimensión fractal del caminante auto-evitante puede generar parámetros de estructura tanto del medio como de la macromolécula, se deben dejar evolucionar cadenas arraigadas utilizando técnicas de mapeo, esto debido a que el mapeo es capaz de considerar interacciones entre el medio y las partículas que forman una cadena y entre las partículas mismas.

En este modelaje, se posibilita entender las propiedades de cadenas largas de polímeros simples a biomoléculas, en donde estas últimas presentan mayor complejidad. Por la caracterización de las propiedades estáticas y dinámicas de los sistemas construidos en este trabajo, se puede deducir que estos sistemas muestran características complejas.

Con los resultados obtenidos en este trabajo se han satisfecho los objetivos y la hipótesis planteada de forma adecuada.

5.2 Estudios del medio intracelular y biomoléculas

En general las propiedades físicas y químicas en el interior de la célula han sido estudiadas bajo condiciones idealizadas, por ejemplo, los experimentos *in vitro* presuponen que las reacciones ocurren en un volumen infinito y la solución es diluida, homogénea y bien mezclada [190].

Se sabe que el espacio intracelular está altamente poblado de macromoléculas biológicas tales como proteínas, ácidos nucleicos, carbohidratos, etc. La concentración de estas macromoléculas dentro de las células vivas está en el intervalo de 80-400 mg/ml, lo que corresponde a un volumen total ocupado, físicamente del citoplasma, de 5 a 40% [192], restringiendo el volumen a otras moléculas que pudiesen estar presentes [192]. En un experimento típico *in vitro* la concentración total de macromoléculas a menudo no es superior a 1 mg/ml [193-195], consecuentemente, el espacio intracelular disponible para las moléculas representa una fracción sustancial [196].

Estas características muestran que un sistema celular no está diluido y bien mezclado, en su lugar el medio real es tortuoso, altamente heterogéneo y correlacionado [190, 197]. Dentro de la célula las correlaciones espaciales son cruciales para llevar a cabo los procesos biofísicos, bioquímicos y fisiológicos de las macromoléculas [193, 194]. Estos medios se denominan “congestionados o saturados” y no como concentrados porque no hay especies de macromoléculas simples, necesariamente se encuentran presentes diferentes especies en altas concentraciones [190, 192, 194, 195].

Los efectos impuestos por el volumen excluido de macromoléculas son llamados efectos de aglomeración macromolecular o apiñamiento macromolecular [192-194], así las moléculas que imponen esos efectos son llamadas agentes de aglomeración o agentes de apiñamiento [193, 192],

De entre una amplia variedad de fenómenos afectados por la aglomeración macromolecular están, por ejemplo, los efectos sobre la estabilidad, plegamiento y agregación de las proteínas [194, 195, 198-200]. El hecho de que las macromoléculas biológicas han evolucionado para

funcionar en tales ambientes de hacinamiento plantea cuestiones de importancia biológica: ¿cómo el volumen excluido por macromoléculas afecta la interacción entre ellas?, ¿cómo las macromoléculas se pliegan, se asocian y se difunden a través del medio intracelular saturado? y ¿cuál es la forma geométrica que presenta este medio?

A este respecto, las evidencias experimentales sugieren que la forma geométrica del medio intracelular es de tipo fractal [201-203]. Por ejemplo, el citoplasma en la célula viva está organizado y estructurado por un ensamble macromolecular como un cúmulo de percolación, [195, 196, 198] Además, la naturaleza del cito-esqueleto es también un cúmulo de percolación de tipo fractal [40, 57, 129]; de hecho, la red del cito-esqueleto proporciona una trayectoria continua de la membrana externa al núcleo celular. Otras estructuras determinadas como fractales son la cromatina [204] y el ADN, por nombrar algunos.

En conclusión, se ha sugerido que los sistemas vivos o estructuras que median el transporte, la distribución e intercambio de energía y la materia dentro de las células y organismos vivos se ven obligados a adoptar una geometría fractal por la influencia evolutiva y para la eficiencia metabólica. La geometría fractal es una solución económicamente óptima que maximiza el área de intercambio y reduce al mínimo los costos de mantenimiento a través del transporte de un sistema distribuido que cumple con las necesidades celulares en un volumen tridimensional [202].

Por ejemplo, en el caso particular, el fenómeno de plegamiento de proteínas dentro de las células se lleva a cabo en un entorno altamente no homogéneo (fractal). Por lo tanto, es importante incluir en los estudios teóricos el medio donde se desarrolla el plegamiento de proteínas, como los desarrollados en este trabajo.

5.3 Perspectivas

A continuación se presentan las perspectivas más importantes derivadas de este trabajo.

- Tomando en cuenta el subcapítulo anterior, ya se ha iniciado el análisis del plegado de secuencias HP sobre los medios correlacionados y se han estado estudiando los efectos de la correlación del medio sobre el plegamiento o conformación de cadenas HP. En general, el modelo HP consiste en simplificar el problema de plegamiento de proteínas, en donde los aminoácidos que conforman a estas se reducen a un lenguaje de dos tipos de partículas: hidrófobos (H) y polares (P). Los estudios realizados utilizando el modelo HP, habían sido efectuados solo sobre medios continuos totalmente homogéneos. Sin embargo como se sabe, en la naturaleza los sistemas presentan irregularidades, que deben considerarse en el direccionamiento de los fenómenos de transporte y difusión de macromoléculas.
- Un estudio adicional que debe hacerse sobre los sistemas correlacionados es encontrar cómo se afectan las propiedades energéticas del plegamiento de las secuencias HP, es decir, que tanto el medio correlacionado afecta a la cadena HP para encontrar su energía mínima durante su plegamiento.
- El mapeo de caminantes auto-evitantes es sin duda interesante pues son los candidatos más adecuados para modelar polímeros en ambientes tortuosos. Un medio diluido estará representado por redes numéricas con presencia de alta correlación y un medio concentrado por una red numérica con baja correlación, pero como se ha descrito la longitud de la cadena o del caminante auto-evitante es importante para considerar el tipo de medio en que se pretende que evolucione el polímero. Los estudios de polímeros sobre los sistemas correlacionados permitirán el modelaje del plegamiento de cadenas de proteínas, en términos de efecto del medio, y efectos de las interacciones entre aminoácidos a una distancia r .
- La caracterización de los sistemas generados en el espacio cuadrado 2D se realizarán en un espacio cúbico 3D considerando el efecto de la correlación sobre las propiedades estáticas y dinámicas.

APÉNDICES Y BIBLIOGRAFÍA

APÉNDICE A

Método de Monte Carlo y construcción de redes correlacionadas.

El método de *Monte Carlo* (MC) es un método estadístico numérico usado para aproximar expresiones matemáticas complejas y costosas de evaluar con exactitud. El método se llama así en referencia al Casino de Montecarlo que es “la capital del juego de azar”, en particular el juego de ruleta resulta ser un generador simple de números aleatorios.

Los métodos de Monte Carlo, como métodos estocásticos, sirven para estudiar sistemas moleculares, ej. la predicción de valores promedio de distribución de carga eléctrica en moléculas, constantes cinéticas de reacción, energías libres, constantes dieléctricas, coeficientes de compresibilidad, capacidades calóricas y cambios de estado, estudios de plegamiento de proteínas, interacción proteína–ligando y proteína-proteína (docking⁵⁷) [205], así como transporte de radiación sobre la atmósfera de la tierra y simulación de procesos sub-nucleares en física de altas energías. Cada método resulta particular según el campo de aplicación [206], en principio se puede decir que:

“Se introducen números aleatorios para los cálculos de las diferentes propiedades” [207].

Estos métodos han pasado de inductivos a la categoría de altamente deductivos. Los métodos de MC se distinguen de la dinámica molecular (técnica determinista), en donde se obtiene siempre el mismo resultado a partir de las condiciones iniciales, que no necesariamente deben ser las mismas, empleando las leyes de la física clásica (las leyes de movimiento de Newton).

En física cuántica y química cuántica se utiliza el MC para resolver los problemas que involucran múltiples cuerpos en donde el método de eigenvalores no tiene solución [208]: por ejemplo, PIMC (path integral Monte Carlo) [209], DMC (difusión Monte Carlo) [210], GFMC (Green's function Monte Carlo) [211] y VMC (variational Monte Carlo).

⁵⁷ Acoplamiento molecular. Método para predecir la conformación preferida de una molécula cuando se une a otra.

Existen varios métodos de Monte Carlo; por su generalidad pueden clasificarse como:

- Método cuántico (QMC).- Uso de trayectorias aleatorias para cálculo de funciones de onda y energías de sistemas cuánticos y cálculo de estructuras electrónicas usando como punto de partida la ecuación de Schrödinger.
- Método de la integral a lo largo de una trayectoria (PIMC). Permite el cálculo de integrales mecánico estadísticas-cuánticas, para obtener propiedades termodinámicas y constantes cinéticas usando como punto de partida la integral a lo largo de una trayectoria de Feynman.
- Método volumétrico (VMC). Uso de números aleatorios y cuasi-aleatorios para generar volúmenes moleculares y muestras del espacio de fase molecular.
- Método de simulación (SMC). Uso de algoritmos aleatorios para generar las condiciones iniciales de la simulación de trayectorias cuasi-clásicas o para introducir efectos estocásticos.
- Método clásico (CMC).- Aplicación de distribuciones de probabilidades para obtener propiedades termodinámicas, estructuras de energía mínima y constantes cinéticas.

Implementación de la matriz numérica o red

Se emplea el método de Monte Carlo clásico para construir dos distribuciones uniformes, una de elementos llamados sitios y otra para elementos llamados enlaces. Las distribuciones uniformes contienen elementos numéricos creados mediante el generador de números aleatorios del compilador en C.

La distribución de sitios tendrá los elementos necesarios impuestos por el tamaño de la red. Por ejemplo, para un arreglo numérico cuadrado (red en 2D), que considere $S = m$ sitios, tendrá m^2 elementos.

La distribución de los enlaces tendrá los elementos necesarios impuestos por la cantidad de sitios y la conectividad entre ellos (Capítulo I, Sección 1.2), en consecuencia si la conectividad entre sitios es de 4, se tendrán al menos $4 \times m^2$ elementos o cuatro veces más enlaces que los sitios.

Para la construcción de la red numérica, el modelo DSBM (modelo dual de sitios y enlaces) implementa un **principio de construcción** que restringe el uso de los elementos numéricos generados de las distribuciones uniformes de sitios y enlaces, considera que el tamaño de un sitio debe ser mayor o al menos igual que el tamaño cualquiera de los enlaces por medio de los cuales se encuentre conectado.

Se crea un arreglo numérico (matriz numérica de $m \times m$ elementos). El principio de construcción rechaza o acepta a los elementos que deberán conformar la red numérica, por ello el método de construcción de la red es pseudo-aleatorio, con el siguiente criterio:

Paso 1. Se extrae un número al azar de la distribución construida para sitios y se coloca como primer elemento del arreglo.

Paso 2. Se toma de la distribución de enlaces un elemento que debe cumplir con el principio de construcción, se coloca de manera contigua a la derecha del primer número.

Paso 3. Para el siguiente elemento se extrae un número de la distribución de sitios, condicionado al principio de construcción, y se coloca a la derecha de manera contigua.

Paso 4. Se repite el paso 2 y el 3, de tal manera que se van colocando los elementos alternados hasta tener los m sitios del primer renglón del arreglo numérico.

Paso 5. Se construye el siguiente renglón extrayendo un elemento de la distribución de sitios, que debe cumplir con el principio de construcción con respecto al primer elemento del primer renglón.

Paso 6. Se repite el paso 3 que debe cumplir el principio de construcción respecto al primer elemento del segundo renglón y al segundo elemento del primer renglón.

Paso 7. Se continúa con el criterio de alternar enlaces y sitios hasta completar la red siempre bajo el principio de construcción.

El principio de construcción se aplica siempre con el elemento inmediato considerando primeros vecinos.

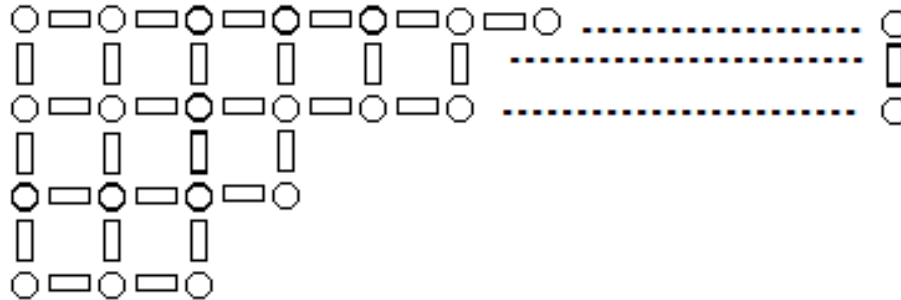


Figura A.1 Esquema de construcción de la red numérica utilizando el método de Monte Carlo clásico y el modelo dual de sitios y enlaces (DSBM).

Las redes cuadradas correlacionadas en el espacio 2D se generan con el lenguaje de programación C, el cual fue programado por el Dr. Raúl Horacio López el 20/08/1997 y fue modificado tiempo después para este trabajo.

APÉNDICE B

Dimensión de Hausdorff - Besicovitch

Para definir la dimensión de Hausdorff-Besicovitch o de similitud d_b primero se escoge una escala de medida sobre un objeto de interés [43]. Esta escala se representa como ε (épsilon). Como ejemplo una línea dividida en segmentos de longitud ε , cfr. Figura B.1:

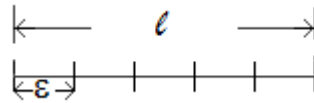


Figura B.1 Longitud de una línea dividida en segmentos de magnitud ε , con N segmentos.

su longitud total l estará definida por:

$$l(\varepsilon) = N(\varepsilon) \varepsilon \tag{b1}$$

donde $N(\varepsilon)$ es el número de veces que se aplica la escala ε , así la longitud de la línea esbozada en la Figura B.1 es 5ε .

Como se intuye en el caso de un área A se tiene que:

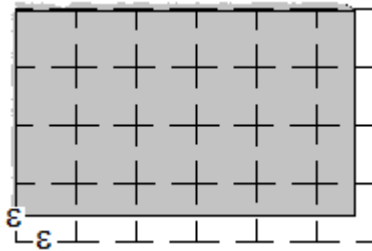


Figura B.2 Área dividida a partir de un cuadrado de lado ε .

el área total del cuadrado con elementos de área ε^2 es:

$$A(\varepsilon) = N(\varepsilon) \varepsilon^2 \tag{b2}$$

Análogamente para un volumen se tiene:

$$V(\varepsilon) = N(\varepsilon) \varepsilon^3 \quad (\text{b3})$$

También se deduce que se puede reducir la magnitud de la escala ε y la medida de longitud. El área o volumen se vuelven más precisas, por lo que se puede definir la medida M como:

$$M = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} N(\varepsilon) \varepsilon^{d_m} \quad (\text{b4})$$

y d_m resulta ser la dimensión del instrumento de medida, así $d_m = 1$ en el caso de rectas y $d_m = 2$ en el caso de áreas o planos. Así cuando ε (la escala) disminuye, el número de intervalos $N(\varepsilon)$ aumenta en razón inversa (ver Figura B.1) como:

$$N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-1} \quad (\text{b5})$$

Para un plano se tiene $N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-2}$, para la esfera $N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-3}$, así la relación de igualdad entre los intervalos $N(\varepsilon)$ y la escala ε es:

$$N(\varepsilon) = C \varepsilon^{-d_b} \quad (\text{b6})$$

donde C es una constante de proporcionalidad y d_b es la dimensión de similitud o de Hausdorff-Besicovitch y empleado ε como escala relativa a $\varepsilon = \varepsilon'/l$ y l la magnitud medida o $l = N(\varepsilon) \varepsilon^{d_m}$, aplicando esta última relación a la ecuación b6 y después en b5 se obtiene:

$$M = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} C N(\varepsilon) \frac{\varepsilon^{d_m}}{\varepsilon^{d_b}} \quad (\text{b7})$$

Para $M = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} C N(\varepsilon) \varepsilon^{d_m - d_b}$ se observa que si $d_m = d_b$, $M = C$, es decir la medida M está definida. Ahora para $d_m > d_b$ en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$, la medida será cero $M = 0$ y finalmente para $d_m < d_b$, la medida M es infinita, de ahí la necesidad de introducir la d_b en las magnitudes no medibles o cuantificables. Por ello es necesario el concepto de dimensión, los instrumentos de medida y el concepto mismo son insuficientes para sistemas con características fractales.

Para caracterizar sistemas fractales se utilizan diferentes herramientas, una de ellas es el método de conteo de cajas y otra es el método de desplazamiento de cajas como método multi-escala. Los cúmulos de percolación clásica exhiben propiedades fractales que se determinan como se indica en los Apéndices D y E.

APÉNDICE C

Algoritmo de Hoshen Kopelman

Es un algoritmo [130] para etiquetar cúmulos dentro de una cuadrícula, la cual representa una red regular de celdas: cada celda (sitio) dentro de la red puede estar ocupada (1) o vacía (0).

Un cúmulo es un grupo de sitios vecinos y ocupados, rodeado de sitios vacíos como se ve en la Figura C.1. El número de sitios de un cúmulo (que puede ser solo un sitio) o grupo de sitios ocupados, se puede considerar como s y el número de cúmulos dentro de la red como n . Aunque, los elementos representados con ceros y unos representan varios grupos de cúmulos, ninguno de ellos es un cúmulo percolante. Los sitios ocupados tienen una probabilidad de ocupación de p y los vacíos tienen una probabilidad de $(1-p)$. Los cúmulos son el resultado de etiquetar mediante el algoritmo de Hoshen-Kopelman un arreglo numérico que tiene una gran gama de valores numéricos, encontrados de manera lineal.

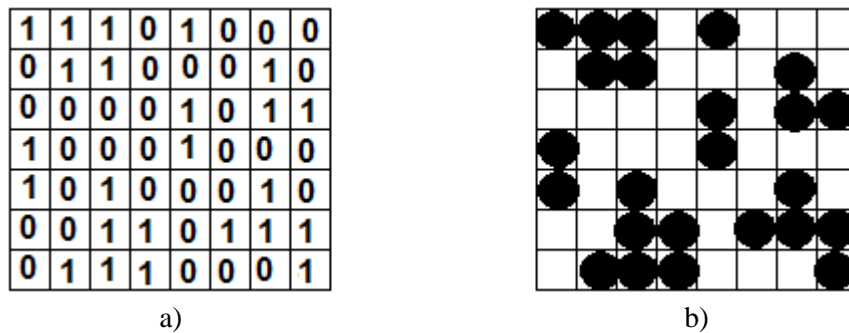


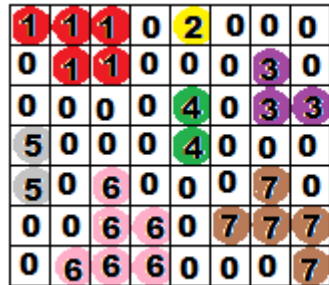
Figura C.1 a) Una red regular con celdas y valores asignados de 0 y 1. El 0 representa sitios vacíos y el 1 representa lugares ocupados y b) la misma red tiene marcado 7 cúmulos con elementos a primeros vecinos n_s : de la esquina superior izquierda hacia la derecha con $n_1 = 5$, $n_2 = 1$, $n_3 = 3$, $n_4 = 2$, $n_5 = 2$, $n_6 = 6$, $n_7 = 5$.

El algoritmo de Hoshen Kopelman funciona de la siguiente manera:

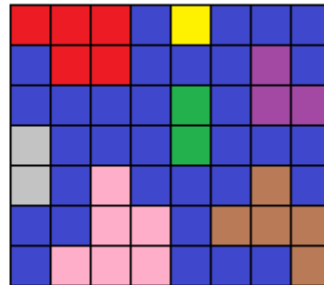
- inicia la búsqueda de valores numéricos coincidentes con el primer elemento de matriz a_{11} , como se muestra en la Figura C.2, obedeciendo un *criterio de magnitud numérica* (si cumple

es aceptado o de lo contrario es rechazado). En el caso de este trabajo, la métrica de aceptación y búsqueda es el radio o tamaño de sitios o un intervalo de tamaños,

- se hace la búsqueda, uno a uno con todos los elementos ocupados del primer renglón, un elemento numérico es aceptado cuando está colocado a primer vecino, entonces se le asigna una etiqueta igual a la del elemento anterior. En el caso de que este más lejano se marca con otra etiqueta diferente, generalmente las etiquetas son números en sentido ascendente,
- la búsqueda continua en el siguiente renglón, en caso de encontrarse un elemento aceptable a primer vecino se le coloca la misma etiqueta del vecino contiguo, pero si no es aceptable y se encuentra en una posición lejana se marca con una etiqueta diferente que no ha sido usada,
- se continúa con este criterio hasta agotar todos los elementos de la red,
- se obtiene una cantidad de cúmulos igual al número de etiquetas empleadas y
- el cúmulo más conectado y que conecta los extremos, superior e inferior, del arreglo numérico se conoce como cúmulo infinito de percolación o percolante.



a)



b)

Figura C.2 a) Etiquetado de cúmulos dentro de una red cuadrada en 2D, se han resaltado adicionalmente a las etiquetas con diferente color, a estos cúmulos también se les conoce como zonas de mojado y b) la zona etiquetada con cero se resalta en color azul y representa la zona no accesible, vacía o impermeable.

La Figura C.2 muestra el resultado de etiquetar una red cuadrada en el espacio 2D utilizando el algoritmo de Hoshen-Kopelman (cf. Figura 1a, Capítulo I). El algoritmo de Hoshen-Kopelman genera un entramado de manera lineal y utiliza una lista de etiquetas ascendente de los grupos contables creados sobre la marcha.

APÉNDICE D

Dimensión fractal (d_f) método de conteo de cajas

Los fractales matemáticos son auto-similares a cualquier escala de observación, es decir, son auto-similares. En la Figura D.1 se muestran algunos fractales matemáticos más comunes en la literatura.

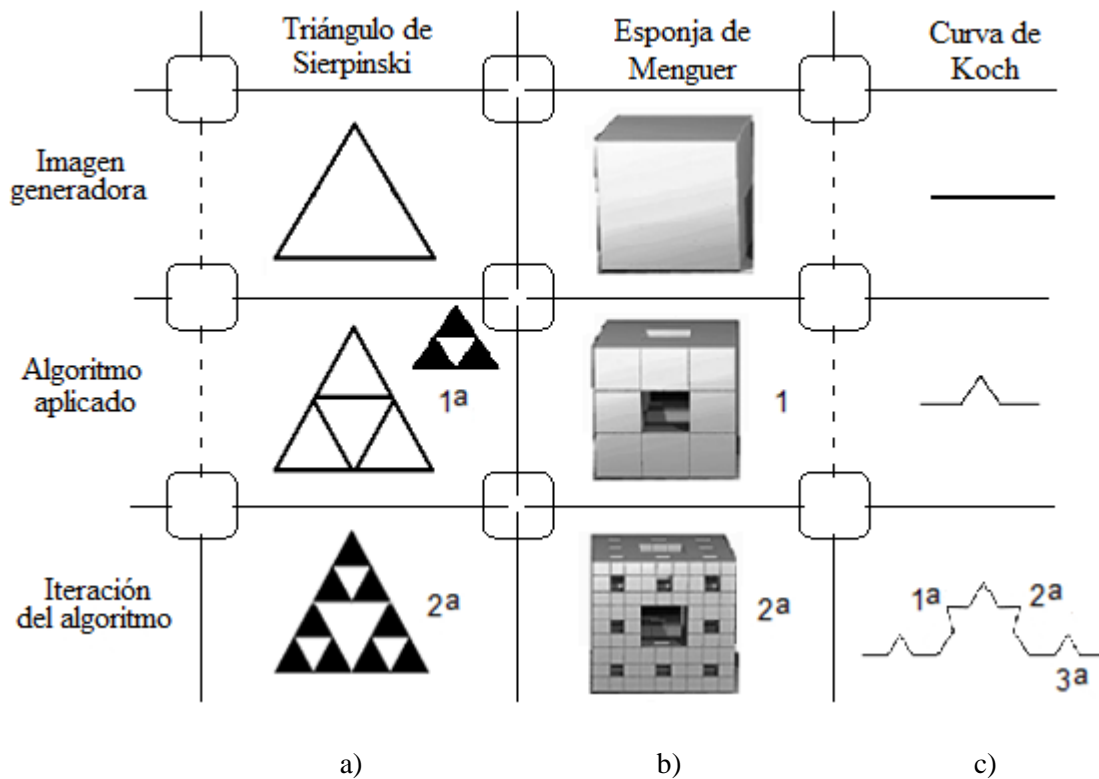


Figura D.1 Tres fractales matemáticos de mayor utilidad en la literatura: a) triángulo de Sierpinski, b) esponja de Menger, c) curva de Koch.

Fórmulas para fractales matemáticos:

- triángulo de Sierpinski; consiste en dividir un triángulo equilátero exactamente por la mitad, (si se colorean los triángulos resultantes de la división se observa mejor) el resultado:

triángulos resultantes = 3, número de divisiones = 2, se descarta el triángulo del centro $d_f = \log 3 / \log 2 = 1.58496$,

- esponja de Menger; consiste en dividir un cubo en 3 segmentos iguales, se remueven todos los cubos del centro de todas las caras, resultado: cubos iguales = 27, cubos removidos y descartados del mismo volumen = 7, estructura resultante $27-7=20$ (estructuras cubicas), numero de divisiones = 3, $d_f = \log 20 / \log 3 = 2.7268$, y
- curva de Koch, un segmento de una línea recta se divide en tres partes iguales, se descarta el fragmento central, se adicionan dos de igual longitud entre el espacio que deja el fragmento retirado, cantidad de segmentos después de retirar uno y agregar dos = 4, numero de divisiones = 3, $d_f = \log 4 / \log 3 = 1.26185$, luego se itera la forma obtenida.

El resultado de iterar dos veces a los fractales matemáticos se muestra en la Figura D.1. Los fractales matemáticos son autosimilares a todas las longitudes de escala, los fractales naturales no. Para el cálculo de la dimensión fractal de fractales no deterministas se emplea el método de conteo de cajas.

Se utiliza una escala de medida ε que es el lado de un cuadrado, esta escala, se relaciona con la dimensión euclídea de la siguiente manera: en un objeto la escala de medida ε (épsilon) es utilizada para el cálculo del valor geométrico o magnitud $N(\varepsilon)$ mediante:

$$N(\varepsilon) = \left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^D \quad (d1)$$

donde D representa la dimensión de la escala de medida ε . D corresponde a 0 para el punto, 1 para una recta, 2 para una superficie y 3 para un volumen. Si se generaliza la utilización del concepto de la dimensión D a los números fraccionarios se obtiene una dimensión fractal d_f ⁵⁸

En el método de conteo de cajas, el cálculo de la dimensión fractal se basa en el correspondiente conteo del número de cajas necesarias para cubrir un determinado conjunto (línea, superficie,

⁵⁸ *ibid*_nota 13.

volumen, patrón, etc.). La Figura D.2 muestra tanto lo mencionado como la magnitud $N(\varepsilon)$ en función del tamaño de escala ε de las cajas.

El correspondiente cálculo de la dimensión fractal es sólo válido en el intervalo en el que la relación entre $N(\varepsilon)$ y ε es una función de tipo potencia y se define bien por medio de la expresión $D = \log N(\varepsilon) / \log (1/\varepsilon)$, donde la forma usual propuesta por Mandelbrot es [155]:

$$D = \frac{-\log(N(\varepsilon))}{\log(\varepsilon)} \quad (d2)$$

y el problema principal es resolver $N(\varepsilon)$ para la zona de análisis con un lado ε de la siguiente manera:

- se escoge un tamaño de caja cuadrada de longitud $l = \varepsilon$,
- a partir de las cajas con medida $l = \varepsilon$ se realiza un cubrimiento de toda la imagen a analizar (ver Figura D.2),
- se cuenta el número de cajas que “interseccionan o que contienen parte de la imagen u objeto de estudio”. En este ejemplo el valor asignado a $N(\varepsilon) = 36$, y
- por último se repite el proceso para todos los valores de la escala de longitud ε_i posibles, donde $i = 1, 2, 3, \dots$, obteniendo los valores correspondientes $N(\varepsilon_i)$.

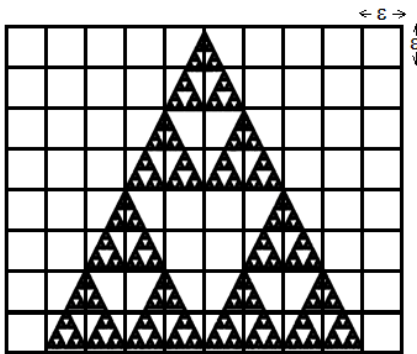


Figura D.2 Método de conteo de cajas o cuadrados que contienen parte de la imagen del triángulo de Sierpinski, con longitud y altura ε .

Usualmente se divide la caja inicial, es decir, la que es capaz de contener a toda la imagen entre 2, después entre 3, 4, 5, etc. Las divisiones deben ser cada vez más pequeñas. En el ejemplo de la

Figura D.2 se han utilizado 80 divisiones, de las cuales 36 contienen al objeto. La existencia de una dimensión fractal única se demuestra con una buena correlación de la recta haciendo una regresión lineal de los puntos $\log N(\epsilon_i)$ con respecto a $\log(\epsilon_i)$, lo cual se observa en la Figura D.3.

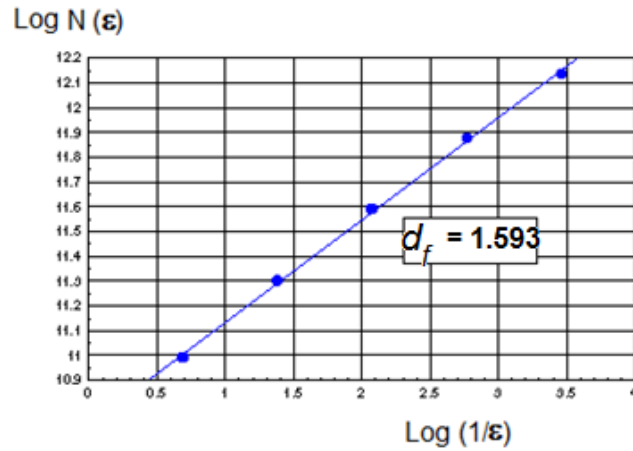


Figura D.3 Comportamiento gráfico de logaritmos para obtener la dimensión fractal del triángulo de Sierpinski (Figura D.1) por el método de conteo de cajas; la pendiente corresponde a la dimensión fractal. Analíticamente para este objeto $d_f = \log 3 / \log 2 = 1.5849$.

APÉNDICE E

Lagunaridad L - Método de desplazamiento de cajas

El método de desplazamiento de cajas tiene cierta similitud al método de conteo de cajas y se procede de la siguiente manera:

- se inicia con una caja de tamaño $r \times r$ como la mostrada en la parte superior del mapa binario, de tamaño M , de la Figura E.1. Los lugares ocupados están etiquetados con 1 y los vacíos con 0; los valores etiquetados con 1 representan la masa S en la caja,
- la caja se mueve a la derecha en la siguiente columna pixel por pixel, se cuenta la masa de la caja y se continúa hasta la última columna,
- el proceso se repite en el siguiente renglón moviendo la caja un pixel hacia abajo, se cuenta la masa y se avanza pixel a pixel hasta la última columna y el último renglón. Este hecho se puede ilustrar en la Figura E.1, y

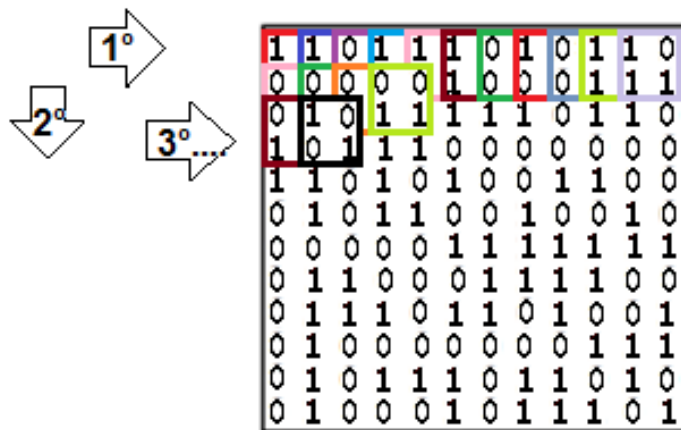


Figura E.1 Desplazamiento de una caja de tamaño $r \times r$ sobre un mapa binario de 12×12 pixeles [152, 212]. Las flechas indican el recorrido de la caja pixel por pixel.

- se incrementa el tamaño de la caja (ilustrado en el mapa binario Figura E.2a), por ejemplo, $2r \times 2r$. Se repite el procedimiento descrito para cada diferente tamaño de caja.

El tamaño de caja se incrementa hasta un máximo que corresponda al tamaño del objeto binarizado.

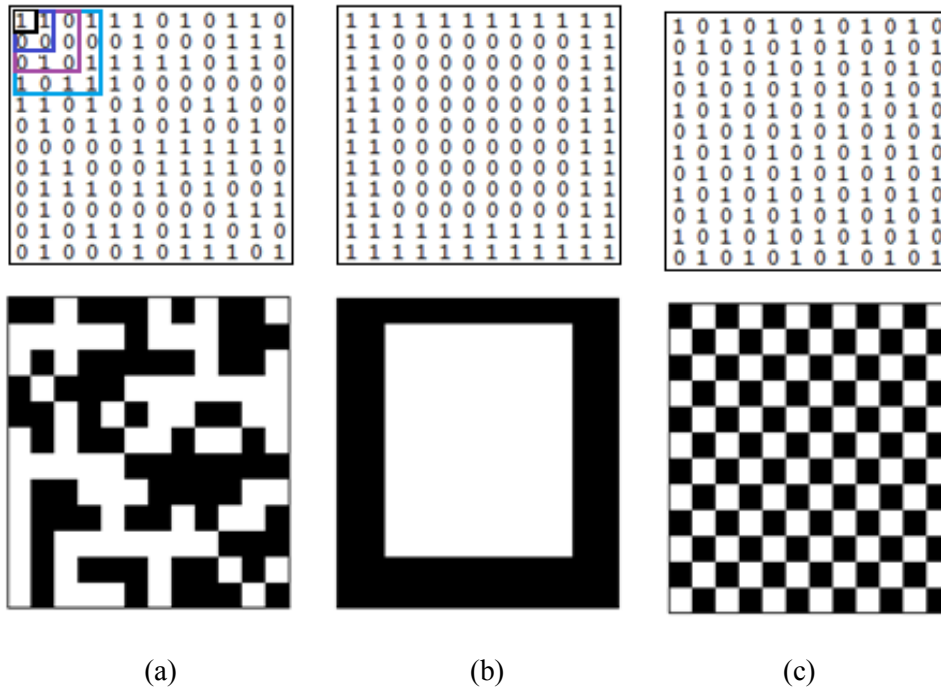


Figura E.2 Tres mapas binarios de $r = 12 \times 12$ (superior) y sus correspondientes imágenes en blanco y negro (inferior). Los números 1 y 0 representan lugares ocupados y vacíos, respectivamente. La fracción de ocupación para todos los mapas es de $\rho_c = 0.5$, en donde: a) mapa aleatorio con $L = 1.04$, b) mapa con un hueco $L = 1.810$ y c) mapa altamente regular $L = 1.0$ [48].

La probabilidad de la masa S contenida en cada tamaño de caja r está dada por:

$$P(S, r) = \frac{n(S, r)}{N(r)} \tag{e1}$$

donde $n(S, r)$ es el número de cajas de tamaño r deslizadas sobre el mapa binario con masa S y $N(r)$ es el número total de cajas de tamaño r para cubrir el mapa binario. Así el tamaño de la imagen mostrada en la Figura E.1 es $M = 12$ píxeles y $r = 2$ píxeles, entonces $N(r) = (M - r + 1)^2 = 121$ cajas, es decir, se necesitan 121 cajas para cubrir la imagen binaria. En esta distribución de

frecuencias de masas, el primer momento de la distribución, que corresponde a la suma de probabilidades con masa S para un tamaño dado de caja r , queda como:

$$E(S) = \sum SP(S, r) \quad (e2)$$

Mientras que el segundo momento que corresponde a la suma del cuadrado de probabilidades es:

$$E(S^2) = \sum S^2P(S, r) \quad (e3)$$

Entonces la medición de la lagunaridad para el desplazamiento de cajas de tamaño r es:

$$L(r) = \frac{E(S^2)}{E^2(S)} \quad (e4)$$

en donde $E^2(S)$ es el cuadrado del primer momento.

Para imágenes binarias que tienen 2 valores: 0 para lugares vacíos y 1 para espacios ocupados, se puede describir el segundo momento como:

$$E(S^2) = var(S) + E^2(S) \quad (e5)$$

y sustituyendo en la Ecuación e4 resulta:

$$L(r) = \frac{var(S)}{E^2(S)} + 1 \quad (e6)$$

donde $E(S)$ es la media y $var(S)$ es la varianza del número de píxeles ocupados por cada caja [50]. Los resultados de tres mapas binarios y sus correspondientes imágenes obtenidas mediante desplazamiento de cajas calculados con el software ImageJ 1.148s y el plugin Frac_Lac⁵⁹ se muestran en la Figura E.2. Aquí se observa que el mapa binario de mayor lagunaridad es el que corresponde a la Figura E.2b. La lagunaridad calculada con cajas que tienen un único tamaño r

es de valor limitado, por tanto, es de mayor utilidad el cálculo de la lagunaridad utilizando el desplazamiento de cajas en un amplio intervalo de tamaños, es decir, es necesario variar el tamaño de la caja.

⁵⁹ *Ibid* nota 15.

APÉNDICE F

Plegamiento de secuencias HP

El estudio del plegamiento de proteínas se ha vuelto un problema fundamental en el campo de la biología computacional, la bioinformática y en general en el estudio de los sistemas biológicos in silico. Sin embargo los estudios del plegamiento de secuencias hidrófobo-polar (HP), que imitan el fenómeno de plegamiento de proteínas, en espacios 2D y 3D solo se habían efectuado considerando medios homogéneos en que las secuencias HP se pliegan libremente sin restricción alguna, es decir, los medios carecen de restricciones con alto grado de. Así las únicas restricciones están dadas solo por la conectividad geométrica del sistema en que las rutas posibles de movimiento de los residuos se describen como caminos con conectividad triangular, cuadrada, hexagonal, cúbica, entre otros [1]. La Figura F.1 muestra un ejemplo de este hecho.

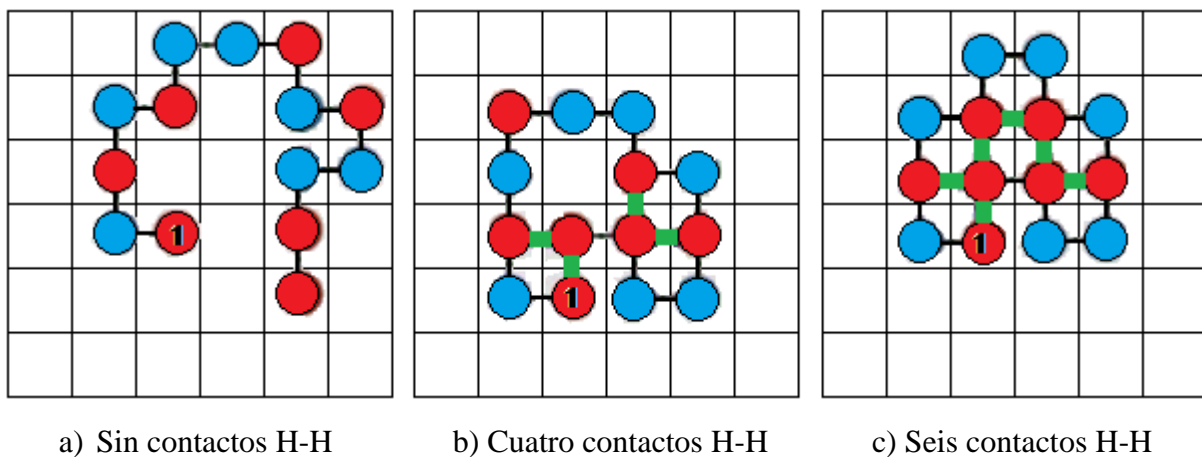


Figura F.1 Cadena de residuos HP en un medio homogéneo 2D [213], en color rojo se marcan los residuos hidrófobos (H), en color azul están marcados los residuos polares (P). El inicio de la cadena está marcado con el residuo número uno. Los posibles caminos en que las partículas pueden desplegarse son: adelante, arriba y abajo. Los vecinos consecutivos se encuentran sobre la cadena (conexiones en color negro) y los vecinos topológicos en las posiciones a primeros vecinos. En esta representación de a) hacia c) la cadena cambia de una estructura de cero contactos topológicos H-H a una de seis contactos entre vecinos topológicos H-H (conexiones en color verde), la que representa una conformación de mínima energía.

El modelo HP es un modelo simple de potencial de energía, con el cual se puede representar una cadena proteica, aprovechando el carácter químico de los aminoácidos con dos tipos: hidrófobo H o polar P y está inspirado en el efecto del colapso hidrófobo de las proteínas reales [214-216]. La secuencia de una cadena de aminoácidos se puede describir como:

$$S_i \in \{H, P\}, \text{ con } i = 1, 2 \dots n \quad (f1)$$

en donde n corresponde al tamaño de la cadena. Los criterios de optimización de energía en el modelo HP pueden considerarse de varias formas, algunos de ellos incluyen todos los tipos de puntajes para los términos de energía de interacción, utilizando la función de optimización:

$$F = f(e) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n e_{ij} \Delta_{ij} \quad (f2)$$

en donde e representa el valor de energía entre residuos ij, que en el caso más simple se tiene que: $e_{HH} = -1$, $e_{HP} = 0$ y $e_{PP} = 0$, otra alternativa puede ser: $e_{HH} = -1$, $e_{HP} = 0$, $e_{PP} = -0.5$, y donde:

$$\Delta_{ij} = \begin{cases} 1.0 & \text{si } i \text{ y } j \text{ son vecinos topológicos} \\ & \text{pero no vecinos consecutivos} \\ 0.0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

Alas y González-Pérez en 2016 [10] y González-Pérez et al. en 2017 [11], implementaron el estudio de secuencias HP en los medios obtenidos en este trabajo, empleando tres modelos para imitar el plegamiento de proteínas, considerando los medios como no homogéneos en similitud a los medios de los sistemas biológicos reales, los que son altamente atestados y tortuosos. Los tres modelos que ellos integran en su estudio son: el modelo hidrófobo polar (HP), Algoritmos evolutivos (EA) y el Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DSBM). El estudio y la discusión de

ambos artículos salen de los fines del presente trabajo y se deja a interés del lector, sin embargo de los resultados se destaca la parte en que contribuye el presente trabajo⁶⁰.

Alas y Gonzáles Pérez y González-Pérez et al, hacen un estudio del plegado de seis secuencias HP en 2D, considerando por un lado el espacio homogéneo y por otro el medio no homogéneo con una longitud correlación $\xi = 11.7$ y una $d_f = 1.764$. Las secuencias, su longitud y su valor óptimo de energía encontrado se muestran en la Tabla F.1.

Tabla F.1. Secuencias estudiadas en el espacio 2D, empleando los modelos hidrófobo polar (HP), Algoritmos evolutivos (EA) y el Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DSBM), en un cúmulo infinito de percolación de una red correlacionada con $\xi = 11.7$ y $d_f = 1.764$.

Secuencia	Longitud	Valor óptimo	Secuencia HP
S1	18	-8	(HP) ₂ H ₃ P ₃ H ₄ P ₂ H ₂
S2	20	-10	H ₃ P ₂ (HP) ₃ (PH) ₃ P ₂ H
S3	25	-16	H ₄ PH ₅ PH ₅ PH ₅ PH ₂
S4	36	-14	P ₃ H ₂ P ₂ H ₂ P ₅ H ₇ P ₂ H ₂ P ₄ H ₂ P ₂ HP ₂
S5	48	-23	P ₂ H(P ₂ H ₂) ₂ P ₅ H ₁₀ P ₆ (H ₂ P ₂) ₂ HP ₂ H ₅
S6	60	-36	P ₂ H ₃ PH ₈ P ₃ H ₁₀ PHP ₃ H ₁₂ P ₄ H ₅ PH ₂ PHP

Para cada secuencia se realizaron 10 experimentos independientes tanto en el espacio homogéneo y en el espacio no homogéneo en 2D, el comportamiento del plegado para cada secuencia se observa en la Figura F.2.

⁶⁰ Se reproducen los resultados con permiso de los autores.

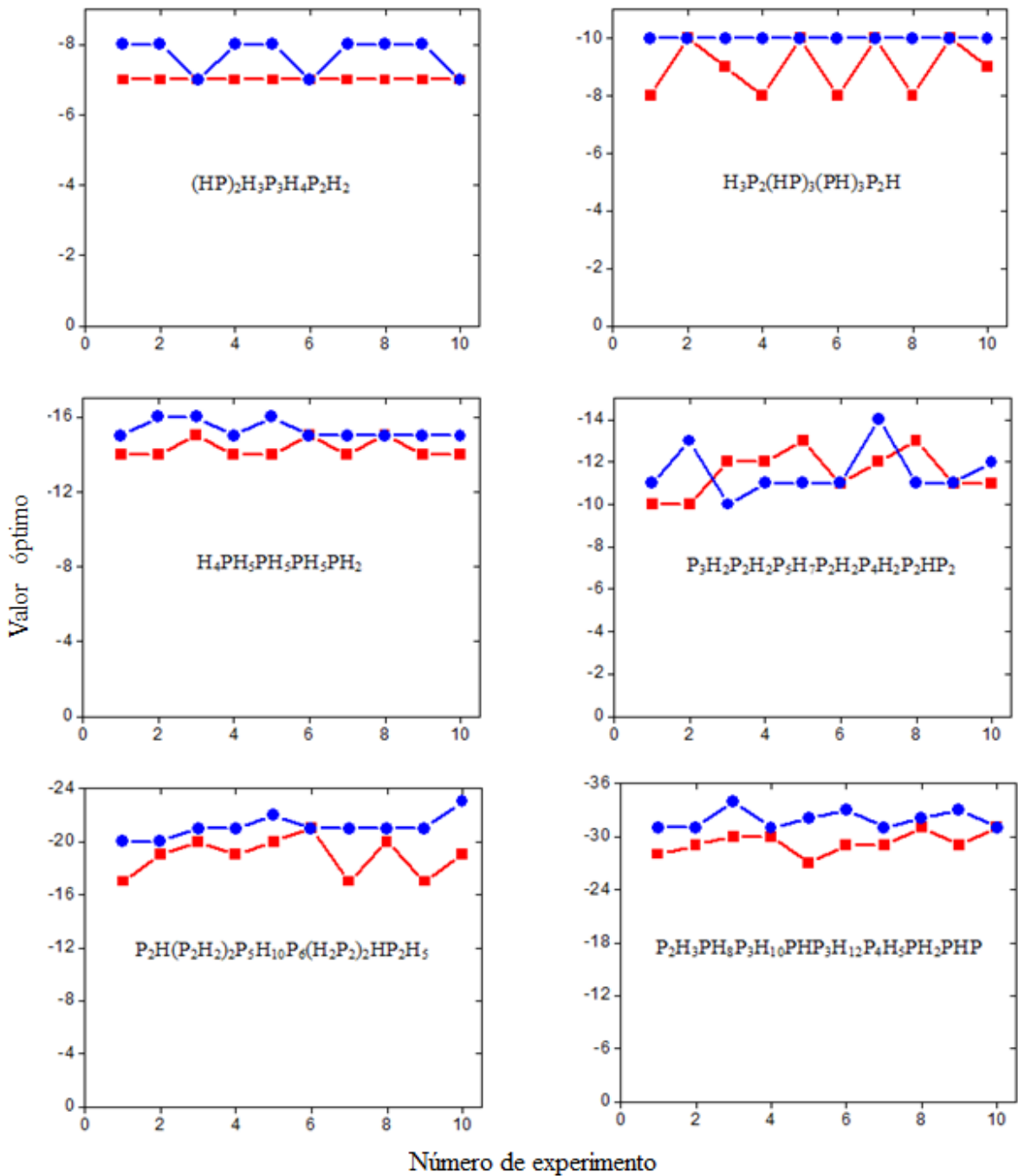


Figura F.2 Comportamiento de los diferentes experimentos durante el plegamiento de las secuencias HP en una red homogénea y en una red correlacionada con $\xi = 11.7$ y $d_f = 1.764$.

En la Figura F.2 se puede corroborar que las secuencias de prueba pliegan mejor sobre los espacios correlacionados, aunque en el caso particular de la secuencia S4 existen entrecruzamientos, la red correlacionada mejora el valor óptimo del plegado que se muestra en todos los casos en color azul.

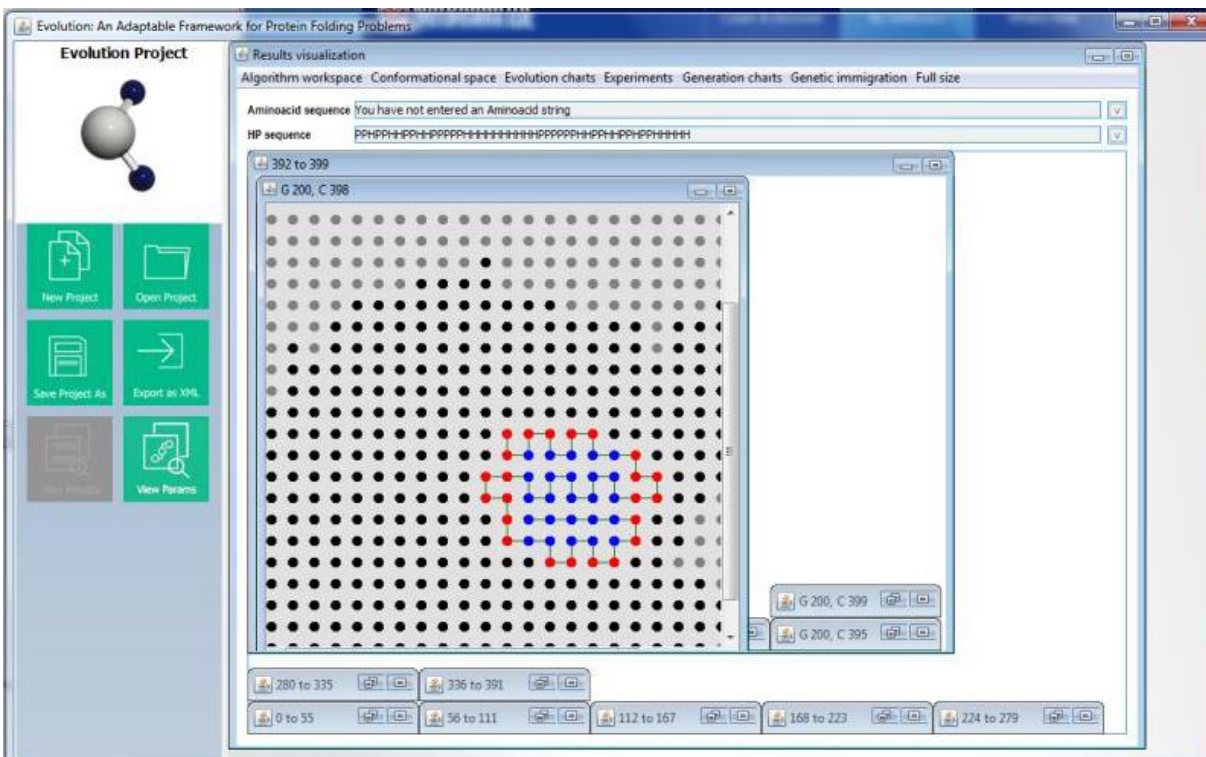


Figura F.3. Arreglo de la secuencia de 48 residuos HP. La puntuación óptima de 23 contactos topológicos H-H coloreados en azul representa un mínimo de energía de -23 sobre un grano del cúmulo infinito de percolación con $\xi = 11.70$ u. r.

La Figura F.3 ilustra una ventana de la plataforma *Evolution tool* en ella se muestra la conformación plegada de 48 HP sobre un grano del cúmulo de percolación infinita a longitud de correlación $\xi = 11.7$. La secuencia de 48 residuos tiene un mínimo de energía de -23, ver Tabla F.1. Esta figura destaca la disposición de un núcleo hidrófobo formado por vecinos topológicos H-H en color azul, los residuos polares P se muestran en color rojo, en color negro se representa el grano del cúmulo y en color gris el espacio vacío que no puede ser ocupado. Se concluyen varios aspectos importantes de este estudio utilizando una red correlacionada.

- Las redes correlacionadas construidas mediante el DSBM son capaces de describir medios aleatorios con diferentes estructuras topológicas y el plegado de secuencias HP se puede ejecutar mediante un algoritmo genético (GA).
- Los medios generados se implementaron en la plataforma bioinformática *Evolution* y los resultados muestran que las redes correlacionadas son más eficientes que las redes homogéneas para plegar correctamente secuencias HP en 2D.
- En todos los casos estudiados se obtienen mejores conformaciones o mejores valores óptimos de energía en las redes correlacionadas, las cuales representan al medio no homogéneo.
- Los resultados muestran que los medios modelados como redes correlacionadas afectan el plegado de las secuencias HP, en analogía se puede decir que el ambiente juega un papel crucial durante el proceso de plegamiento de proteínas en un medio biológico real como el citoplasma.

ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 1.1 Sistemas complejos jerarquizados y dinámicos: a) páginas de un sitio web y los enlaces dirigidos entre ellos, con 180 páginas de la web de una corporación y b) representación de un sistema neuronal. En ambos sistemas la conectividad varía al transcurrir el tiempo.....15
- Figura 1.2 Representación de gráficas: a) y b) conectividad variable y c) conectividad 3. En el caso de una red compleja o libre de escala, existen nodos dentro de la misma red que contienen una gran cantidad de conexiones de tal manera que no es simple contabilizarlas.....16
- Figura 1.3 Cantidad de nodos y de conexiones asociados a un grafo complejo. Se observa un decaimiento exponencial en la asignación de conexiones para los nodos.....17
- Figura 1.4 a) El brócoli romanesco es un ejemplo de fractal natural ($d_f = 1.7181$) y b) el fractal de Mandelbrot es un ejemplo de fractal matemático ($d_f = 1.2419$), ambos fractales aportan la propiedad de autosimilitud.....21
- Figura 1.5 Visión general del citoesqueleto del fibroblastos de la piel de ratón: a) núcleo celular ($d_f = 1.8535$ y $3 \mu\text{m}$) y b) frontera núcleo-citoplasma ($d_f = 1.8154$ y $0.15 \mu\text{m}$). La frontera muestra una continuidad del citoesqueleto hacia el interior del núcleo celular.....22
- Figura 1.6 Estados sin mezclar y mezclado de cadenas de polímeros con solvente. Esta representación corresponde a un modelo de malla discreto en donde los monómeros ocupan espacios contiguos a primeros vecinos en 2D. Los movimientos permitidos de los monómeros son adelante, izquierda o derecha, pero sin movimientos hacia atrás o en posiciones ocupadas.....28
- Figura 1.7 Red cuadrada de 20×20 sitios. En color rojo se observa el cúmulo (o región) percolante. La dirección de la percolación se lleva a cabo desde el extremo superior al inferior. Además, se observa que en este cúmulo existen zonas de menor área en donde ocurren estrangulamientos.....30
- Figura 1.8 Redes o mallas en 2D: a) cuadrada, b) hexagonal o de panal de abejas y c) triangular. Las líneas punteadas representan las direcciones de desplazamiento de una partícula y los círculos vacíos representan posiciones que pueden ser ocupadas.....32
- Figura 1.9 a) Un caminante auto-evitante en una red 2D arraigado en un punto, el movimiento está indicado por la flecha, por conveniencia el origen es (0,0) y b) el mismo caminante después de recorrer 2^{25} pasos. El movimiento del caminante se realiza a primeros vecinos.....38
- Figura 1.10 Imágenes de macromoléculas en solución [88]: a) Contorno de la cadena: 2-poli-vinilpiridina, un polímero aproximadamente de 204 nm y espesor aproximado de 0.4 nm en solución acuosa a tres pH's diferentes, adsorbidos sobre mica. En a) se puede ver como el

incremento de pH hace que el polímero se agregue formando glóbulos sobre la mica por efecto del medio y en b) se muestran zonas amplificadas a pH = 3.89 y 4.24.....39

Figura 1.11 a) Caminata aleatoria RW, b) caminata sin regreso NRRW y c) caminata auto-evitante SAW. Cada caminata consta de 1000 pasos. El caminante auto-evitante se muestra en escala reducida debido a que la distancia cuadrática media crece de manera exponencial como $N^{3/2}$43

Figura 1.12 Conteo de los posibles paseos en 2D para un caminante auto-evitante arraigado SAW de $N = 8$ partículas. El número de paseos por conteo es de $4 \times 3^{N-1} = 8748$. El primer paso se “sujeta” en cualquiera de las 4 posibilidades de la red, el siguiente considera 3 posibilidades, hasta agotar los n pasos o saltos, menos el anterior.....45

Figura 1.13 Posibles movimientos de una cadena de 3 partículas similares a la flexión de un alambre en 2D. La doble flecha indica como la figura d) puede obtenerse por rotación de b) en 90° a favor de las manecillas del reloj, mientras que c) es la reflexión de a). En ambos movimientos la partícula numerada con 2 representa un pivote.....47

Figura 1.14 Conteo de la cantidad de paseos auto-evitantes para un caminante desde 1 hasta 24 partículas referidos en la Tabla 1.2. Los paseos correspondientes a las líneas en negro (sin arraigo) y en rojo (arraigado) se obtienen por algoritmos computacionales. La tendencia marcada con la línea azul se obtiene mediante la enumeración formulada como $4 \times 3^{N-1}$48

Figura 1.15 El número medio de sitios disponibles para un caminante SAW, determinan la tasa de crecimiento de paseos, para N grande, $\mu^{(d)}$ es igual a 2.67919249.....49

Figura 1.16 Evolución de la distancia cuadrática media $\langle R_N^2 \rangle$ para paseos: aleatorios RW, sin inversión o retorno NRRW y auto-evitantes SAW. En donde este último crece como $N^{3/2}$. Por tal motivo el SAW mostrado en la Figura 1.11c está en una escala reducida.....50

Figura 2.1 Funciones de densidad uniforme: para enlaces, línea punteada, $B(-)$ y para sitios, línea continua, $S(-)$. El traslape Ω se representa por la zona sombreada: $\Omega = b_2 - s_1$. El traslape indica los tamaños que comparten ambas distribuciones: sitios y enlaces, $F(R) = \frac{1}{b_2 - b_1}$ representa el inverso de magnitud de la distribución uniforme, en este caso hemos representado la de enlaces.57

Figura 2.2 Representación de la conectividad de sitios con tamaño R_s y enlaces con tamaño R_B para elementos de red: a) y b) conectividad 4 en 2D y c) conectividad 6 en 3D. En a) y c) se observa como existen sitios y enlaces de diferente R pero conservando el principio de construcción.....61

Figura 2.3 Distribuciones de sitios e histogramas de frecuencias a diferente traslape entre sitios y enlaces: 1) $\Omega = 0.896$, 2) $\Omega = 0.875$ y 3) $\Omega = 0.0$, a) sitios de una columna de 1000 sitios, b) sitios de 10 columnas con 10,000 sitios y c) histograma de frecuencias para 1000 sitios. A cada columna de sitios le corresponde un color, como se puede apreciar mejor en b).....67

Figura 2.4 a) Imagen en niveles de gris del fragmento de una red numérica de 15×15 sitios convertida utilizando el software ImajeJ, b) red numérica que genera la imagen a). Para simplificar se ilustran a los valores de la red numérica con una cifra significativa después del punto decimal.....	69
Figura 2.5 Redes de sitios sin binarizar construidas mediante el DSBM para diferente traslape (tamaño de red $L = 1000$). Note que conforme se disminuye el traslape los elementos de la red se desagrupan, lo que hace que la imagen sea más homogénea.....	70
Figura 2.6 Comportamiento del coeficiente de correlación sitio-sitio para 10 redes con traslape $\Omega = 0.708$. La r_{ss} representa la distancia sitio-sitio. El trazo de la línea roja $C_{ss}(r)$ muestra la manera de cómo se puede obtener la longitud de correlación ξ entre sitios a una distancia r	75
Figura 2.7 Comportamiento de la función de correlación sitio-sitio para diferentes traslapos. La distancia r_{ss} nos indica el alcance de la interacción entre sitios de la red. A mayor traslape existe mayor interacción.....	76
Figura 2.8 Comportamiento ξ vs Ω de las redes construidas. A medida que se incrementa el traslape la interacción entre los sitios de la red aumenta. A traslape completo $\Omega = 1$ la interacción debe ser infinita.....	78
Figura 3.1 Los cúmulos de mojado se muestran en diferentes colores (lado izquierdo de cada panel) y los cúmulos percolantes están en color negro (lado derecho de cada panel) de cuatro redes numéricas, que permiten observar el incremento de la densidad de puntos a diferente correlación.....	84
Figura 3.2 Comportamiento del umbral de percolación en función de ξ , cada punto representa el promedio estadístico de 10 redes tomadas alrededor del promedio de 100 redes de manera que cumpla $ \bar{\rho} - \rho_i \rightarrow 0$	87
Figura 3.3 Comportamiento de los umbrales de percolación para las 100 redes con longitud de correlación de $\xi = 11.7$, el umbral promedio es de $\bar{\rho} = 0.5023$ el valor se puede estimar aproximadamente a la mitad de los valores de la gráfica. Los valores mostrados dan evidencia de la aleatoriedad en la construcción de los cúmulos infinitos de percolación.....	88
Figura 3.4 Comportamiento de los umbrales de percolación para las 100 redes con longitud de correlación de $\xi = 0$, $\bar{\rho} = 0.5929$ similar a $\rho = 0.5927$ reportado por la literatura. Nuevamente se observa la aleatoriedad en la construcción de los cúmulos infinitos de percolación.....	89
Figura 3.5 Tres cúmulos infinitos de percolación con sus respectivos granos, ρ_c representa la fracción ocupada de la red. A mayor longitud de correlación se observa un incremento de la densidad de pixeles ocupados por el objeto.....	90

Figura 3.6 Dimensión fractal <i>vs</i> longitud de correlación, se observa un comportamiento no inyectivo con correspondencia univoca, con dos tendencias una descendente hasta una longitud de correlación de $\xi = 11.7$ unidades y otra ascendente hasta $\xi = 37.977$ u.r.....	94
Figura 3.7 Imágenes obtenidas del estudio propuesto por Luo y Lin y de las referencias [47, 49], en las cuales se observan diferentes patrones con huecos: a) pequeños (Small), b) medianos (Middle), c) grandes (Large) y d) jerarquizados (Hierarchy) [48].....	96
Figura 3.8 Comportamientos de $\ln(L)$ <i>vs</i> $\ln(BS)$ de las imágenes mostradas en la Figura 3.6: a) el reportado por Lou y Lin y b) el obtenido con ImageJ. BS significa el tamaño de cajas (por sus siglas en inglés).....	97
Figura 3.9 Comportamiento de la lagunaridad en función del tamaño de caja para los cúmulos de percolación estudiados a diferente ξ . Se observan las curvas (Large) de comportamiento muy heterogéneo o muy lagunar con huecos grandes. Las curvas (Middle) que presentan pequeñas lagunas. Las curvas (Hierarchy) en donde existen lagunas o huecos que presentan una estructura jerarquizada (múltiples tamaños) y las curvas inferiores (Small) que corresponden a un comportamiento muy homogéneo, sin huecos o lagunas.....	99
Figura 3.10 Comportamiento de la lagunaridad en función del tamaño de caja para los cúmulos de percolación estudiados El valor de la pendiente negativa disminuye de manera proporcional al disminuir la longitud de correlación.....	101
Figura 4.1 Imágenes que muestran algunos cúmulos percolantes con fracción ocupada ρ_c a diferente longitud de correlación. La difusión del caminante aleatorio se muestra en las zonas en color rojo para 10,000 pasos.....	111
Figura 4.2 Desplazamiento del caminante aleatorio a diferentes longitudes de correlación. A mayor ρ aumenta el desplazamiento cuadrático medio del RW	112
Figura 4.3 Desplazamiento cuadrático medio del RW a $\xi = 0$ para cuatro cúmulos infinitos de percolación, obtenidos de redes que se pueden considerar estadísticamente homogéneas. El desplazamiento no es significativo hasta un traslape de 0.3.....	114
Figura 4.4 Dimensión fractal del caminante aleatorio en función de ξ . La partícula difunde más conforme los valores tienden a mayor ξ y a menor d_w ; el medio se muestra como continuo o sin obstáculos	115
Figura 4.5 Difusión del caminante aleatorio para $\xi = 37.977$ y $d_w = 2.431$. El desplazamiento cuadrático medio de estas redes es similar (cfr. Figura 4.2) y son las que tienen la mayor conectividad reportada en este trabajo.....	118
Figura 4.6 Difusión aleatoria del caminante RW en la misma red con $\xi = 37.977$ y $d_s = 1.481$. Aquí se ilustran cuatro caminantes o paseos aleatorios. El punto de origen se establece de forma aleatoria iniciando con una coordenada diferente de la red.....	119

Figura 4.7 Difusión del caminante aleatorio para cúmulos infinitos de percolación. De izquierda a derecha se presentan los cúmulos de mayor a menor ξ . Se mantiene la escala de las imágenes para apreciar la disminución de la d_s	121
Figura 4.8 Difusión del caminante aleatorio en dos cúmulos con similar dimensión fractal pero diferente ξ y lagunaridad. La dimensión espectral cambia para ambos cúmulos y es mayor cuando la lagunaridad aumenta.....	121
Figura 4.9 Comportamiento de d_s con respecto a la ξ . La dimensión espectral se comporta proporcional a la longitud de correlación, el comportamiento es casi lineal	122
Figura 4.10 Comportamiento de v_{SAW} en función de la ξ . No se espera un comportamiento constante del v_{SAW} , ya que es sensible a desordenes débiles de la estructura. Las estructuras fractales presentan mayor desorden y están más débilmente estructuradas por debajo de $\xi = 11.7$; después de este valor las estructuras presentan mayor orden y estructura (véase el Capítulo II).....	128
Figura 4.11 Comportamiento de la dimensión fractal del caminante auto-evitante en función de la ξ . En este comportamiento claramente se aprecian dos dominios, comportamiento muy similar al de la dimensión fractal en las redes utilizadas en este trabajo (ver Figura 3.5 del Capítulo II).....	129
Figura 4.12 Desplazamiento cuadrático medio para 1000 intentos a diferente longitud de correlación ξ . Estos caminantes permiten considerar la conveniencia de emplear solamente 1000 intentos o siembras sobre las diferentes rede correlacionadas.....	132
Figura 4.13 Desplazamiento cuadrático medio a diferentes intentos o siembras a una longitud de correlación $\xi = 37.977$. En este comportamiento se puede establecer que 5000 intentos son suficientes para obtener la curva suavizada.....	133
Figura 4.14 Desplazamiento cuadrático medio a diferentes longitudes de correlación para 10,000 intentos. Con estos intentos el tiempo de cálculo y recurso de cómputo son viables.....	134
Figura 4.15 Gráfica logarítmica $\log\langle r^2 \rangle$ vs $\log\langle t \rangle$ del desplazamiento cuadrático medio a diferentes longitudes de correlación para 10,000 intentos del NRRW. La parte lineal de las curvas se observa más definida, se utilizaron todos los datos del desplazamiento para cada ξ ..	135
Figura 4.16 Exponentes extremo a extremo de los NRRW's en función de la longitud de correlación. A diferencia del SAW se puede observar que en el NRRW no se forma un hombro en la curva (Figura 4.10).....	138
Figura 4.17 Exponentes extremo a extremo de los RW's en función de la longitud de correlación. Se puede observar que el comportamiento es similar al obtenido con los coeficientes del NRRW (Figura 4.16). En ambos caminantes, el inverso de los coeficientes extremo a extremo representan las dimensiones fractales correspondientes.....	139

Figura A.1 Esquema de construcción de la red numérica utilizando el método de Monte Carlo clásico y el modelo dual de sitios y enlaces (DSBM).....	156
Figura B.1 Longitud de una línea dividida en segmentos de magnitud ε , con N segmentos.....	157
Figura B.2 Área dividida a partir de un cuadrado de lado ε	157
Figura C.1 a) Una red regular con celdas y valores asignados de 0 y 1. El 0 representa sitios vacíos y el 1 representa lugares ocupados y b) la misma red tiene marcado 7 cúmulos con elementos a primeros vecinos n_s : de la esquina superior izquierda hacia la derecha con $n_1 = 5$, $n_2 = 1$, $n_3 = 3$, $n_4 = 2$, $n_5 = 2$, $n_6 = 6$, $n_7 = 5$	160
Figura C.2 a) Etiquetado de cúmulos dentro de una red cuadrada en 2D, se han resaltado adicionalmente a las etiquetas con diferente color, a estos cúmulos también se les conoce como zonas de mojado y b) la zona etiquetadas con cero se resalta en color azul y representa la zona no accesible, vacía o impermeable.....	161
Figura D.1 Tres fractales matemáticos de mayor utilidad en la literatura: a) triángulo de Sierpinski, b) esponja de Menger, c) curva de Koch.....	163
Figura D.2 Método de conteo de cajas o cuadrados que contienen parte del objeto del triángulo de Sierpinski, con longitud y altura ε	165
Figura D.3 Comportamiento gráfico de logaritmos para obtener la dimensión fractal del triángulo de Sierpinski (Figura D.1) por el método de conteo de cajas; la pendiente corresponde a la dimensión fractal. Analíticamente para este objeto $d_f = \log 3 / \log 2 = 1.5849$	166
Figura E.1 Desplazamiento de una caja de tamaño $r \times r$ sobre un mapa binario de 12×12 píxeles [152, 212]. Las flechas indican el recorrido de la caja pixel por pixel.....	167
Figura E.2 Tres mapas binarios de $r = 12 \times 12$ (superior) y sus correspondientes imágenes en blanco y negro (inferior). Los números 1 y 0 representan lugares ocupados y vacíos, respectivamente. La fracción de ocupación para todos los mapas es de $\rho_c = 0.5$, en donde: a) mapa aleatorio con $L = 1.04$, b) mapa con un hueco $L = 1.810$ y c) mapa altamente regular $L = 1.0$ [48].....	168
Figura F.1 Cadena de residuos HP en un medio homogéneo 2D (220), en color rojo se marcan los residuos hidrófobos (H), en color azul están marcados los residuos polares (P). El inicio de la cadena está marcado con el residuo número uno. Los posibles caminos en que las partículas pueden desplegarse son: adelante, arriba y abajo. Los vecinos consecutivos se encuentran sobre la cadena (conexiones en color negro) y los vecinos topológicos en las posiciones a primeros vecinos. En esta representación de a) hacia c) la cadena cambia de una estructura de cero contactos topológicos H-H a una de seis contactos entre vecinos topológicos H-H (conexiones en color verde), la que representa una conformación de mínima energía.....	171

Figura F.2 Comportamiento de los diferentes experimentos durante el plegamiento de las secuencias HP en una red homogénea y en una red correlacionada con $\rho = 11.7$ y $d_f = 1.764$174

Figura F.3. Arreglo de la secuencia de 48 residuos HP. La puntuación óptima de 23 contactos topológicos H-H coloreados en azul representa un mínimo de energía de -23 sobre un grano del cúmulo infinito de percolación con $\xi = 11.70$ u. r.....175

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1 Dimensión de inmersión (d_i) de una línea con $d_t = 1$	23
Tabla 1.2 Conteo de paseos auto-evitantes en 2D, en los paseos arraigados se distingue el inicio y el final del caminante como si se hubiese sembrado la primera partícula.....	46
Tabla 2.1 Se muestran los valores promedios de sitios, los tamaño inferior y superior de sitios. Los tamaños de enlaces son constantes: $b_1 = 8$ y $b_2 = 56$ unidades, $K=2.083 \times 10^{-2}$. El intervalo de tamaños de sitios es de 48 unidades.....	64
Tabla 2.2 Longitudes de correlación obtenidas a partir del comportamiento gráfico de la Función 2.15.....	77
Tabla 3.1 Umbrales de percolación de los cúmulos infinitos de percolación obtenidos a diferente ξ	86
Tabla 3.2 Porcentaje del área o de la masa ocupada de la red numérica por el cúmulo infinito de percolación para cada ξ	91
Tabla 3.3 Dimensiones fractales d_f obtenidas por medio de ImageJ para los cúmulos infinitos de percolación.....	92
Tabla 4.1 Valores de la pendiente m y de la dimensión del caminante aleatorio d_w a diferentes longitudes de correlación ξ	115
Tabla 4.2 Valores reportados en la literatura de la dimensión del caminante aleatorio (d_w) reportados por diferentes métodos [159]. Las siglas RS se refieren al método de Espacio Real, EE al método de Enumeración Exacta y MC al método de Monte Carlo clásico.....	116
Tabla 4.3 Valores obtenidos de la dimensión espectral para diferente ξ	122
Tabla 4.4 Valores de los exponentes extremo a extremo de SAW's en cúmulos de percolación 2D reportados en la literatura. Las abreviaciones corresponden a: FL = ecuación de Flory y afines, EE = enumeración exacta, RS = espacio real, RG = renormalización por teoría de grupos y MC = Monte Carlo.....	126
Tabla 4.5 Valores estimados de la dimensión fractal del caminante auto-evitante d_{SAW} para diferentes longitudes de correlación ξ	127
Tabla 4.6 Valores característicos para 10,000 intentos en los cúmulos infinitos de percolación construidos sobre las redes generadas.....	135

Tabla F1. Secuencias estudiadas en el espacio 2D, empleando los modelos hidrófobo polar (HP), Algoritmos evolutivos (EA) y el Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DSBM), en un cúmulo infinito de percolación de una red correlacionada con $\xi = 11.7$ y $d_f = 1.764$173

BIBLIOGRAFÍA

1. Dill KA. Theory for the folding and stability of globular proteins. *Biochem.* 1985; 24: p. 1501-1509.
2. Dimri VP. Fractal behaviour of the earth system. York SBHN, editor. The Netherlands: National Geophysical Research Institute; 2005.
3. Reeves H, Rosnay J, Coppens Y, Simonnet D. La historia más bella del mundo. 11th ed. Barcelona: Anagrama; 2008.
4. Lopez RH, Vidales AM, Zgrablich G. Fractal properties of correlated invasion percolation patterns. *Phys A.* 2003; 327: p. 76-81.
5. Vazquez BL, Ita dIT. Indices de Miller. 1st ed. UAM-Azcapotzalco, editor. Mexico D. F.: Distribucion Editorial; 2002.
6. Yoshio W, Eiichiro M, Kozo S. X-ray diffraction crystallography, Springer-Verlag, editor. Berlin Heidelberg: Springer Heidelberg Dordrecht London New York; 2011.
7. Domínguez A, Carlos F, Lopez RH, Vidales AM. 2D Automaton simulation of bubble growth by solute diffusion in correlated porous media. *Adsorption.* 2005; 11: p. 491-496.
8. Hans-Jorg V. Topological characterization of porous media. *Top of Por Med.* 2002;: p. 75-92.
9. Barrat A, Barthélemy M, Vespignani A. Dynamical processes on complex networks: Cambridge University Press; 2008.
10. Alas SJ, Gonzalez-Perez PP. Simulating the folding of HP-sequences with a minimalistic model in an inhomogeneous medium. *Byosystemns.* 2016 March; 142(143): p. 52-67.
11. Gonzalez-Perez PP, Orta DJ, Peña I, Flores CE, Ramirez JU, Beltrán H, et al. A computational approach to studying protein folding problems considering the crucial role of the intracellular environment. *J of Comp Biol.* 2017; 24(0): p. 1-19.
12. Yates FE. Order and Complexity in Dynamical Systems: Homeodynamics as a generalized mechanics for biology. *Math. Comp Modell.* 1994; 19(6-8).
13. Bertolledo A, Foulkes MM, Gercman B, Martin J, Fidalgo AP, Lindo AP. Ensayos sobre la verdad Argentina: Ediciones del signo; 2000.
14. Martínez G, Piñeiro G. Gödel (para todos) Argentina: Seix Barral; 2009.
15. Linage G, Montoya F, Sarmiento A, Showalter K, Parmananda P. Fibonacci order in the period-doubling cascade to chaos. *Phys Lett A.* 2006 July; 359.
16. Spinadel VMW. Fractales, segundo congreso internacional de matemáticas en la ingeniería y la arquitectura; Buenos Aires, Argentina. p. 113-122.
17. Rakocevic MM. Further Generalization of golden mean in relation to euler divine equation. *FME transactions (Belgrade, Serbia), New Series.* 2004; 32(2): p. 95-98.
18. P.Waliszewski, J.Konarski. A Mystery of the gompertz function. *Fractals in biology and medicine.* 2005; IV: p. 277-286.
19. Hasnain S, McClendon CL, Hsu MT, Jacobson MP. A New coarse-grained model for E. coli cytoplasm: Accurate calculation of the diffusion coefficient of proteins and observation

- of anomalous diffusion. *Plos One* | www.plosone.org. 2014 September; 9(9 e106466): p. 1-12.
20. Goychuk I, Kharchenko VO, Metzler R. How molecular motors work in the crowded environment of living cells: Coexistence and efficiency of normal and anomalous transport. *Plos One* | www.plosone.org. 2014 March; 9(3 e91700): p. 1-7.
 21. Chang HC, Lin YC, Kuo CT. A two-dimensional diffusion model quantifying intracellular transport with independent factors accounting for cytosol viscosity, binding, and steric hindrance. *Biochem Eng J*. 2008; 41: p. 217-227.
 22. Sih A, Hanser SF, McHugh KA. Social network theory: new insights and issues for behavioral ecologists. *Behav Ecol Sociobiol*. 2009;(63): p. 975–988.
 23. Holme P. Modern temporal network theory: a colloquium. *Eur Phys J. B*. 2015;(88): p. 234.
 24. Addison PS. *Fractals an chaos an illustrated course*, Phyladelphia Ba, editor.: Institute of physics; 1997.
 25. Yeung HY, Qin , Lee KM, Leung KS, Cheng CY. Quantification of porosity, connectivity and material density of calcium phosphate ceramic implants using micro-computed tomography. *Advanced Bioimaging Technologies in Assessment of the Quality of Bone and Scaffold Materials*. 2007;; p. 289-305.
 26. Losa AG, Merlini D, Nonnenmacher TF, Weibel R E. *Fractals in biology and medicine* Verlag B, editor. Germany: Birkhäuser; 2005.
 27. William M. Bootby. *An Introducction to diferenciabile manifolds and riemannian geometry*. Second Edition ed. Academic Press I, editor. Orlando, Florida: Harcourt Brace Jonanovich, Publishers; 1986.
 28. Ghoshal G. *Structural and dynamical properties of complex, networks* Michigan; 2009.
 29. Mandelbrot B. *La geometria fractal de la naturaleza*. 3rd ed. Metatemas , editor.: TusQuets; 2009.
 30. Sokal DA. *Monte Carlo Methods in statistical mechanics: Foundatios and news algorithms*. Nato ASI Series. 1997; 361: p. 131-192.
 31. Woo KY, Lee S. B. Monte Carlo study of self-avoiding walks on a percolation cluster. *Phys Rev A*. 1991; 44: p. 999.
 32. Scheider JJ, Kirkpatrick S. *Stochastic optimization*. 1st ed. Springer-Verlag , editor. Germany: Springer; 2006.
 33. Grabinsky G. *Teoria de la medida*. 1st ed. Unam FdC, editor. D. F.: Navegantes de la comunicacion grafica; 2013.
 34. Vargas WL, Pineda LM, Santaella LE. Rugosidad y textura de superficies, experimentos y simulaciones. *Ciencia e Ingenieria Neogradina*. 2006; 16(2): p. 54-66.
 35. Berry MV, Lewis ZV. On the Weierstrass-Mandelbrot fractal function. *Proc R Soc Lond A*. 1980; 370: p. 459-484.
 36. Gao J, Cao Y, Tung W, Hu J. *Multiscale analysis of complex time series: integration of chaos and random fractal theory, and beyond* Jhon Wiley and Sons. IP, editor. New Jersey: Wiley Interscience; 2007.
 37. Korvin G. *Fractals models in the earth sciences* Amsterdam N, editor.: Elsevier; 1992.

38. Falconer KJ, Marsh DT. Calsification of quiasi-circles by Hausdorf dimension. *Nonlinearity*. 1989; 2: p. 489-493.
39. Falconer KJ. The Hausdorff dimension of self-affine fractals. *Math Proc Camb Phil Soc*. 1988; 103(1/2): p. 339.
40. Forgacs G. On the possible role of cytoskeletal filamentous networks in intracellular signaling: an approach based on percolation. *J of Cell Sci*. 1995; 108: p. 2131-2143.
41. Rivera HE, Lopez VR. Geometria fractal y transformada de Fourier. *Scientia Et Technica*. 2011 Agosto; XVI(48).
42. Castañeda AE. Tauromaquia topológica. *Ciencia Ergo sum*. 2007 Nov-Feb; 14(3).
43. Garcia Vivas MJ, Chomiczak S, González A. Fractal theory and scale change effect: application for studying soil porosity. *Cadernos Lab. Xeolóxico de Laxe*. 1999; 24: p. 99-119.
44. Ortiz-Méndez U, Hinojosa-Rivera M. Geometria de fractales y autoafinidad en ciencia de materiales. *Ingenierias*. ; 1(1): p. 15-21.
45. Mandelbrot B. Self-affine fractals and fractal dimension. *Physica Scripta*. 1985; 32: p. 257-260.
46. Feagin RA, Wub XB, Feagin T. Edge effects in lacunarity analysis. *Ecol Model*. 2007 March; 201(3-4): p. 262–268.
47. Melo RHC, Vieira EdA, Conci. Characterizing the lacunarity of objects and image sets and its use as a technique for the analysis of textural patterns. *Lectures notes in computer science*. 2009; 156: p. 208-219.
48. Plotnick RE, Gardner RH, O'Neill RV. Lacunarity indices as measures of landscape texture. *Lands Ecol*. 1993; 8(3): p. 201-211.
49. With KA, King AW. Dispersal success on fractal landscapes: a consequence of lacunarity thresholds. *Lands Ecol*. 1999 Feb; 14(1): p. 73-82.
50. Plotnick RE, Gardner RH, Hargrove WW, Prestegard , Perlmutter. Lacunarity analysis: A general technique for the analysis of spatial patterns. *Phys L Rev E*. 1996 May; 53(5): p. 5461-5468.
51. Allain C, Cloitre. Characterizing the lacunarity of random and deterministic fractal sets. *Phys Rev A*. 1991 Sep.; 44(6): p. 3552-3558.
52. Flory PJ. *Statistical mechanics of chain molecules*; New York 1969.
53. Fler GJ, Cohen S, Scheutjens JM, Cosgrove , Vincent. *Polymers at interfaces*: Chapman & Hall; 1993.
54. Moctezuma N. EM. La teoría de Flory–Huggins en la ingeniería de soluciones. *ContactoS*. 2008;(68): p. 54-62.
55. de Gennes PG. Reptation of a polymer chain in the presence of fixed obstacles. *The J Chem Phys*. 1971 July; 55(2).
56. Berg Jvd. A note on percolation theory. *J Phys A: Math Gen*. 1982; 15: p. 605.
57. Forgacs G, Yook SH, Janmey PA, Jeong H, Burd CG. Role of the cytoskeleton in signaling networks. *J of cell sci*. 2004 May 18; 117(13): p. 2769-2775.

58. Luo L, Lin H. Lacunarity and fractal analyses of soil macropores and preferential transport using micro-X-ray computed tomography. *Vadose Zone Journal*. 2009 Jan 16; 8(1): p. 233-241.
59. Nimmo JR. Porosity and Pore Size Distribution. *Encyclopedia of Soils in the Environment*. 2004; 3: p. 295-303.
60. Kivotides D, Barenghi CF, Samuels DC. Fractal dimension of superfluid turbulence. *Phys Rev Lett*. 2001 Oct. 8; 87(15): p. 155301-1.
61. Pérez-Rea MdL, Horta-Rangel J, López-Cajún CS, López-Lara T, Hernández-Zaragoza JB, Castaño VM. Modelo híbrido de percolación y elemento finito para el análisis micromecánico de suelos. *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*. 2009 Agosto; 26(2): p. 335-346.
62. López RH. Caracterización de medios porosos y procesos percolativos y de transporte, Tesis Doctoral San Luis Argentina; 2004.
63. Stauffer D, Aharony A. *Introduction to percolation theory*. 2nd ed. Francis Ta, editor. Great Britain: Taylor and Francis group; 2003.
64. Isichenko MB. Percolation, statistical topography, and transport in random media. *Rev Mod Phys*. 1992 Oct; 64: p. 961.
65. Sahimi M. Muhammad Sahii, California UoS, editor.: Taylor & Francis; 1993.
66. Hunt A, Ewin R. *Percolation theory for flow in porous media*. Second Edition ed. Springer , editor. Berlin Heidelberg: Springer Verlag; 2009.
67. Alberts LJH. Inicial porosity of random packing, computer simulation. Delfi University of technology, Department of geotechnology; 2005.
68. Clisby N. Endless self-avoiding walks. *J of Phys A: Mathematical and theoretical*. 2013 March; 46.
69. Havlin S, ben-Abraham D. Diffusion in disordered media. *Adv in Phys*. 1987 May; 51(1): p. 187-292.
70. C T. Critical exponents and percolation thresholds in two-dimensional systems with a finite interplane coupling. *Phys Rev E*. 2002; 65(065104(R)).
71. Wolfgang P. *Statistical Mechanics* Enz CP, editor. New York: Dover; 1973.
72. Villalobos Garcia R. Estudio de la liberacion de farmacos desde sistemas matriciales inertes por medio de metodos de Monte Carlo. Efecto de la proporcion y de la distribucion espacial de los componenetes Mexico D. F.: Tesis Doctoral; 2005.
73. Piñeiro Redondo Y. Simulación de Monte Carlo de sistemas complejos en red Tesis Doctoral.; 2007.
74. Kim JW, Perfect E, Choi H. Anomalous diffusion in two-dimensional Euclidian and prefractal geometrical models of heterogeneous porous media. *Water Resources Research*. 2007 January 9; 43(W01405).
75. Turcotte DL. *Fractal behaviour of the earth system* Dimri VP, editor. Berlin Heidelberg: Springer- verlag; 2005.
76. Rincon L. *Introduccion a los procesos estocasticos*. 1st ed. UNAM FdC, editor. D. F.: Navegantes de la comunicacion grafica; 2012.

77. Binder K, Heermann DW. Monte Carlo simulation in statistical physics An Introduction. 3rd ed. Alemania: Springer Heidelberg; 1988.
78. Slade G. Self_avoiding walks. *The Mathematical Intelligencer*. 1994; 16(1): p. 29-35.
79. Fleming RJ. Monte Carlo studies of the excluded-volume problem in freely rotating polymer chains. *J Phys A: Gen Phys*. 1968; 1: p. 404.
80. Bin L, Neal M, Alan DS. Critical exponents, hyperscaling, and universal amplitude ratios for two- and three-dimensional self-avoiding walks. *J Stat Phys*. 1995; 80(3/4).
81. Beleño C, Yau K. *Polymers. Computational physics project*. Alemania: Universitat Bonn; 2010.
82. Xian RW. The transfer matrix approach to the self-avoiding walk in fractal spaces. *Phys A*. 1994;(205).
83. Slade G. Self avoiding Walk: A Brief Survey. In surveys in stochastic processes. In J. Blath PISR, editor. EMS series of congress reports,; 2009; Berlin Alemania. p. 1-20.
84. Blavatska V, Haydukivska K. Polymers in anisotropic environment with extended defects. *Eur Phys J, Special Topics*. 2013; 216: p. 191-198.
85. Guttmann AJ, Kennedy T. Self-avoiding walks in a rectangle. *J. Eng. Math*. 2014; 84: p. 201-208.
86. Guttmann AJ, Jacobsen JL. A series test of the scaling limit of self-avoiding walks. *Math ph arXiv 1306.1299*. 2013 June; 1: p. 1-19.
87. Kennedy T. Monte Carlo tests of stochastic loewner evolution predictions for the 2D self-avoiding walk. *Phys Rev Lett*. 2002 April; 88(13): p. 130601-1.
88. Roiter Y, Sergiy M. AFM single molecule experiments at the solid-liquid interface, in situ conformation of adsorbed exiled polyelectrolyte chains. *J Am Chem Soc*. 2005 Nov;(127): p. 15688-9.
89. Bachmann M, Janke W. Thermodynamics of lattice heteropolymers. *J Chem Phys*. 2004 April; 120(14): p. 6779.
90. Letters to the editor. Monte Carlo studies of the excluded-volume problem in freely rotating polymer chains. *J Phys A: Gen. Phys*. 1 404. 1968; 1.
91. Turban L. Generalised self-avoiding walk. *J Phys A: Math. Gen*. 16. 1983; 16: p. L643-L646.
92. Clisby N. Accurate estimate of the critical exponent μ for self-avoiding walks via a fast implementation of the pivot algorithm. *Phys Rev Lett*. 2010 Feb.; 104: p. 055702.
93. Dieter WH. *Theoretical Biophysics (still very sketch version): Institut Fur Theoretische Physik Universitat Heidelberg*; 2006.
94. Hilser V,J, Garcia-Moreno E,B, Terrence G, Oas K, G. G, Whitten ST. A statistical thermodynamic model of the protein ensemble. *Chem Rev*. 2006;(106): p. 1545–1558.
95. Pandey RB, Stauffer D. Fractal dimensionality and the number of visited sites of the ant in the labyrinth. *J Phys A: Math Gen*. 1983 Oct; 16(14): p. L511.
96. Hayes B. How to avoid yourself. *Computing science, American Scientist*. 1998 July-August; 86(4).
97. Kennedy T. The length of an SLE-Monte Carlo studies. *J Stat Phys*. 2007 August 13; 128: p.

- 1263-1277.
98. Conway AR, Guttmann AJ. On the growth of 1324-avoiding permutations. *Math.* 2014 May; 27.
 99. Sokal AD. Monte Carlo methods for the self-avoiding walk. New York: New York University, Physics; 1994. Report No.: 9405016.
 100. Conway AR, Guttmann AJ. Square lattice self-avoiding walks and corrections to scaling. *Phys Rev Lett* 1996, December; 77(26): p. 5284-5287.
 101. Ponitz A, Tittmann P. Improved upper bounds for Self-Avoiding walks in Z. *The electronic journal of combinatorics.* 2000 April; 7.
 102. Guttmann AJ, Jensen I, Whittington SG. Pulling adsorbed self-avoiding walks from a surface. *Journal of Physics A: Mat and Theor.* 2013 December; 47(1).
 103. Madras N, Sokal AD. The pivot algorithm: A highly efficient Monte Carlo method for the self-avoiding walk. *J Stat Phys.* 1988 Jan; 50(1-2): p. 109-186.
 104. Rosebluth M, Rosebluth AW. Monte Carlo calculation of the average extension of molecular chains. *J Chem Phys.* 1955 Dec 29; 23(2): p. 356.
 105. Mayagoitia V. Fundamentals of the textural catalyst. *Catal. Lett.* 1993; 22(1-2): p. 93-105.
 106. Zgrablich G, Mayagoitia V, Rojas F. Molecular processes on heterogeneous solid surfaces. *Langmuir.* 1996; 12(1): p. 129–138.
 107. Mayagoitia V, Rojas F, Kornhauser I, Prez-Aguilar H. Modeling of porous media and surface, structures: Their true essence as networks. *Langmuir.* 1997 March; 13(5): p. 1327–1331.
 108. Grossman SI, Flores Godoy JJ. *Algebra lineal.* Septima edicion ed. Mexico: Mc Graw Hill; 2012.
 109. Ojeda ML, Esparza JM, Campero A, Cordero S, Kornhauser , I. Rojas F. On comparing BJH and NLDFT pore-size distributions determined from N₂ sorption on SBA-15 substrate. *Phys Chem.* 2003 March; 5: p. 1859-1866.
 110. Esparza JM, Ojeda ML, Campero A, Domínguez A, Kornhauser I, F. Rojas A. N₂ Sorption scanning behavior of SBA-15. *Colloids Surf. A. Physicochem Eng. Aspects.* 2004 July; 241(1-3): p. 35-45.
 111. Thielemann JP, Schlögl R, Girgsdies F, Hess aC. Pore structure and surface area of silica SBA-15: influence of washing and scale-up. *Beilstein J. Nanotechnol.* 2011 Feb; 2.
 112. Bhattacharya S CBHFGK. Modeling micelle-templated mesoporous material SBA-15: atomistic model and gas adsorption studies. *Langmuir.* 2009 May; 19(25).
 113. Esparza SM. Estudio experimental y numérico de procesos de sorción de N₂ en sólidos porosos modelo México D. F: UAM-I; 2005.
 114. Moon SD. Monte Carlo simulation on adsorption properties of benzene, toluene, and p-xylene in MCM-41. *Bull. Korean Chem. Soc.* 2012; 33(8).
 115. López RH, Vidales AM, Zgrablich G. Percolation effects on adsorption-desorption hysteresis. *Langmuir.* 2000 July; 16(17): p. 6999–7005.
 116. Cordero S. Modelado de sólidos mesoporosos y de fenómenos de sorción de nitrógeno. Ciencias TdDe, editor. Iztapalapa D. F.: Universidad Autónoma Metropolitana; 2002.

117. García RV. Estudio de la liberación de fármacos desde sistemas matriciales inertes por medio de métodos de Monte Carlo. Efecto de la proporción y de la distribución espacial de los componentes Doctoral T, editor. Mexico D. F.: UAM-I; 2005.
118. Tsuneyoshi N, Kousuke Y, Orbach RL. Dynamical properties of fractal networks: Scaling, numerical simulations, and physical realizations. *Rev Mod Phys.* 1994 April; 66(2): p. 381.
119. Cordero S, KI, Domnguez A, Carlos F. Review: Site-bond network modeling of disordered porous media. *Part Part Syst Charact.* 2004 Sep; 21(2): p. 101–116.
120. Cordero SS. Simulación de redes porosas por metodos de Monte Carlo Iztapalapa, D.F.: UAm-I; 1998.
121. Riccardo JL, Pereyra V, Zgrablich G, Rojas F, Mayagoitia V, Kornhauser I. Characterization of energetic surface heterogeneity by a dual site-bond model. *Langmuir.* 1993 May.; 9(10): p. 2730–2736.
122. Zgrablich G, Zuppa C, Ciacera M, Riccardo JL, Steele WA. The effect of energetic topography on te structure of the absorbate. *Surf Sci.* 1996 January 5;(356): p. 257-267.
123. Gutierrez GE, Panteleeva O. Estadística descriptiva e inferencial con aplicaciones. 1st ed.: Nauka educación; 2010.
124. Cordero S, Dominguez A, Kornhauser I, López RH, Rojas F, Vidales AM, et al. On the universal behavior of sorption isotherms in disordered mesoporous solids. *Coll and Surf A: Physicochem. Eng. Aspects.* 2004; 241.
125. Carlos F, Lopez RH, Vidales AM, Dominguez A. 2D Automaton simulation of bubble growth by solute diffusionin correlated porous media. *Adsorption.* 2005; 11(1): p. 491-496.
126. Cruz R, Hidalgo R, Alas S, Dominguez A. *Adsorption Science & Technology, Materials Science and Technology p-255* Zhao C, editor.: Nova Publishers, New York; 2013.
127. 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.* 2011 Feb; 29(7): p. 663–676.
128. Daniel SB, Cécile F. Anomalous diffusion of proteins due to molecular crowding. *Biophys J.* 2005 November; 89: p. 2960-2971.
129. Traverso S. *Fractals in Biology and Medicine* Switzerland: Birkhäuser Verlag; 2005.
130. Hoshen J, Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Phys Rev B.* 1976 October; 14(8): p. 3438.
131. Yonezawa F, Sakamoto S. Percolation in two-dimensional lattices. I. R technique for the estimation of thresholds. *Phys Rev B.* 1989 July; 40(1): p. 636.
132. Martín-Herrero J, Peón-Fernández J. Alternative techniques for cluster labelling on percolation theory. *J Phys A: Math Gen.* 2000; 33: p. 1827.
133. Newman M,E,J, Ziff RM. A fast Monte Carlo algorithm for site or bond percolation. *Phys Rev E.* 2001 Jun; 64(1): p. 016706.
134. Al-Futaisia A, Patzeka TW. Extension of Hoshen–Kopelman algorithm to non-lattice environments. *Phys A.* 2003; 321(3-4): p. 665–678.
135. Ziff RM. Spanning probability in 2D percolation. *Phys Rev Lett.* 1992 November; 69(18): p. 2670.

136. Hidalgo-Olguín DR, Cruz-Vázquez RO, Alas-Guardado SJ, Domínguez-Ortiz A. Lacunarity of classical site percolation spanning clusters built on correlated square lattices. *Transp Porus Med.* 2015 January; 107(3): p. 717-729.
137. Hede B, Kertész J, Vicsek T. Self-affine fractal clusters: conceptual questions and numerical results for directed percolation. *J Stat Phys.* 1991 Aug; 64(3-4): p. 829-841.
138. Adolfo N. D. Posadas DG, Bittelli M, Vaz CMP, Flury M. Multifractal characterization of soil particle-size distributions. *Soil Sci Soc Am J.* 2001; 65(5): p. 1361-1367.
139. Strait BJ, Dewey TG. Multifractals and decoded walks: Applications to protein sequence correlations. *Phys Rev E.* 1995 Dec; 52(6): p. 6588.
140. Reuveni S, Granek R, Klafter J. Proteins: Coexistence of stability and flexibility. *Phys Rev Lett.* 2008 May.; 100(20): p. 208101.
141. Tejera E, Machado A, Rebelo I, Nieto-Villar J. Fractal protein structure revisited: Topological, kinetic and thermodynamic relationships. *Phys A.* 2009 Nov; 388(21): p. 4600-4608.
142. Moret MA, Santana MC, Jr EN, Zebende GF. Protein chain packing and percolation threshold. *Physica A.* 2006 Feb 15; 361(1): p. 250-254.
143. Moret MA, Miranda JGV, Nogueira-Jr E, Santana MC, Zebende GF. Self-similarity and protein chains. *Phys Rev E.* 2005 Jan 27; 71(1): p. 012901.
144. Banerji A, Ghosh I. Fractal symmetry of protein interior: what have we learned? *Cell Mol Life Sci.* 2011 Aug; 68(16): p. 2711-2737.
145. Enright MB, Leitner DM. Mass fractal dimension and the compactness of proteins. *Phys Rev E.* 2005 Jan.; 71(1): p. 011912.
146. Dewey TG. Protein structure and polymer collapse. *J Chem Phys.* 1993 Oct; 98(3): p. 2250.
147. Li H, Li Y, Chao H. Fractal analysis of protein chain conformation. *Int J Biol Macromol.* 1990; 12(1): p. 6-8.
148. Einstein AJ, Wu HS, Sanchez M, Gil J. Fractal characterization, of chromatin appearance for diagnosis in breast cytology. *J Pathol.* 1998; 185(4): p. 366-381.
149. Losa GA, Peretti V, Ciotola F, Cocchia N, Vico GD. *Fractals in biology and medicine* Basel BV, editor.: Birkhäuser Basel; 2005.
150. Rodríguez J, Prieto S, Ortiz L, Wiesner C, Díaz M, Correa C. Descripción matemática con dimensiones fractales de células normales y con anomalías citológicas de cuello uterino. *Rev. Cienc. Salud. Bogotá.* 2006 Sep; 4(1): p. 58-63.
151. Havlin AU, Shlomo N. Distributions and moments of structural. *J Stat Phys.* 1988; 52(1/2).
152. Myint SW, Lam N. A study of lacunarity-based texture analysis approaches to improve urban image classification. *Computers, environment and urban systems.* 2005 Sep; 29(5): p. 501-523.
153. Hovi JP, Aharony A, Stauffer D, Mandelbrot BB. Gap independence and lacunarity in percolation clusters. *Phys Rev Lett.* 1996 July; 77(5): p. 877.
154. Rammal R, Toulouse G. Random walks on fractal structures and percolation clusters. *J Physique Lett.* 1983; 44(1): p. 13 - 22.
155. ben-Avraham D, Havlin S. *Diffusion and reactions in fractals and disordered systems:*

- Cambridge University Press; 2004.
156. Sahimi M, Jerauld GR. Random walks on percolation clusters at the percolation threshold. *J Phys C: Solid State Physics*, 16(29), L1043. 1986; 16(29): p. L1043.
 157. Steiner E. Matemáticas para las ciencias aplicadas. 1st ed. Reverte , editor. España: Editorial Reverté; 2005.
 158. Majid I, Ben-Avraham D, Havlin S, Stanley HE. Exact-enumeration approach to random walks on percolation clusters in two dimensions. *Phys Rev B*. 1984 August; 30(3): p. 1626-1628.
 159. Blavatska V, Janke W. Walking on fractals, diffusion and self-avoiding walks on percolation clusters. *J Phys A: Math Theor*. 2009 Jan; 42(1): p. 015001.
 160. Alexander S, Orbach R. Density of states on fractals : « fractons ». *J Physique Lett*. 1982 september; 43(17): p. 625-631.
 161. Havlin S, Ben-Avraham D. Diffusion and fracton dimensionality on fractals and on percolation cluster. *J Phys A: Mat and Gen*. 1983; 16(13): p. L483.
 162. Havlin S, Ben-Avraham D, Sompolinsky H. Scaling behavior of diffusion on percolation clusters. *Phys Rev A*. 1983 March; 27(3): p. 1730.
 163. Havlin S, Ben-Avraham D. Diffusion and fracton dimensionality on fractals and on percolation clusters. *J Phys A: Math and Gen*. 1983; 16(13): p. L483.
 164. Argyrakis P, Kopelman R. Random walk on percolation clusters. *Phys Rev B*. 1984 January; 29(1): p. 511(R).
 165. McCarthy JF. Random walks on invasion percolation clusters. *J Phys A: Math and Gen*. 1988; 21(16): p. 3379.
 166. De La Campa R. La dimensión espectral de lo inconmensurable: Relecturas De Rulfo. *Revista Canadiense de Estudios Hispánicos*. 1998; 22(2).
 167. Calcagni G, Oriti D, Thurigen J. Dimensional flow in discrete quantum geometries. *Phys Rev D*. 2015; 91.
 168. Li B, Madras N, Sokal AD. Critical exponents, hyperscaling, and universal amplitude ratios for two- and three-dimensional self-avoiding walks. *J Statistical Phys*. 1995; 80(3/4): p. 661-764.
 169. Eizenberg N, Klafter JK. Critical exponents of self-avoiding walks in three dimensions. *Phys Rev B*. 1996-I March; 53(9).
 170. Derrida B. A self-avoiding walk on random strips. *J Phys A: Math Gen*. 1982;(15): p. L119-L125.
 171. Sahimi M. Self-avoiding walks on percolation clusters. *J Phys A: Math and Gen*. 1984; 17(7): p. L379.
 172. Roy AK, Blumen A. Theory of self-avoiding walks on percolation fractals. *J Stat Phys*. 1990 June; 59(5): p. 1581-1588.
 173. Roy AK, Chakrabarti BK. Scaling theory for the statistics of self-avoiding walks on random lattices. *J Phys A: Math and Gen*. 1987; 20(1): p. 215.
 174. Aharony A, Harris AB. Flory approximant for self-avoiding walks on fractals. *J Stat Phys*. 1989 February; 54(3): p. 1091-1097.

175. Lam PM. Exact series studies of self-avoiding walks on two-dimensional critical percolation clusters. *J Phys A: Math and Gen.* 1990; 23(16): p. L381.
176. Rintoul MD, Moon J, Nakanishi H. Statistics of self-avoiding walks on randomly diluted lattices. *Phys Rev E.* 1994 April; 49(4): p. 2790.
177. Vanderzande C, Komoda A. Critical behavior of self-avoiding walks on percolation clusters. *Phys Rev A.* 1992 April; 45(8): p. R5335(R).
178. Ordemann A, Porto M, Roman HE, Havlin S, Bunde A. Multifractal behavior of linear polymers in disordered media. *Phys Rev E.* 2000 June; 61(6): p. 6858.
179. Nakanishi H, Moon J. Self-avoiding walk on critical percolation cluster. *Phys A: Stat Mech and its Apps.* 1992 December; 191(1-4): p. 309-312.
180. Roman E, Ordemann H, Porto A, Bunde M, Havlin S. Structure of self-avoiding walks on percolation clusters at criticality. *Phil Mag Part B.* 1998; 77(5): p. 1357-1371.
181. Lam PM, Zhang ZQ. Self-avoiding walks on percolation clusters at criticality and lattice animals. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter.* 1984; 56(2): p. 155-159.
182. von FC, Blavatska V, Folk R, Holovatch Y. Where two fractals meet: The scaling of a self-avoiding walk on a percolation cluster. *Phys Rev E.* 2004 August; 70(3): p. 035104.
183. Janssen HK, Stenull O. Scaling behavior of linear polymers in disordered media. *Phys Rev E.* 2006; 75: p. 020801(R).
184. Roman HE, Dräger J, Bunde A, Havlin S, Stauffer D. Distributions of polymers in disordered structures. *Phys Rev E.* 1995 Dec; 52 Dec; 52: p. 6303.
185. Grassberger P. Recursive sampling of random walks: self-avoiding walks in disordered media. *J Phys A: Math Gen.* 1993; 26: p. 1023.
186. Kremer K. Self-avoiding-walks (SAW's) on diluted lattices, a Monte Carlo analysis. *Z. Phys. B - Condensed Matter.* 1981; 45(45): p. 149-152.
187. Kennedy T. A faster implementation of the pivot algorithm for self-avoiding walks. *J Stat Phys.* 2002 Feb.; 106(3-4): p. 407-429.
188. Yang-Ming Zhu ZHLYW. Self-avoiding walks on Sierpinski carpets. *Phys Lett A.* 1993; 177(3): p. 279-281.
189. Chan Yb, Rechnitzer A. A Monte Carlo study of non-trapped self-avoiding walks. *J Phys A: Math and theor.* 2012 September; 45(40): p. 1751-8121.
190. Luby-Phelps K. Cytoarchitecture and physical proprieties of cytoplasm; volume, viscosity, diffusion intracellular surface area. *International Review of Cytology.* 1999 Feb 28; 192: p. 189-221.
191. Zimmerman SB, Trach SO. Estimation of macromolecule concentrations and excluded volume effects for the cytoplasm of escherichia coli. *J Mol Biol.* 1991 Dec 5; 222(3): p. 599-620.
192. Ellis RJ, Minton AP. Cell biology: Join the crowd. *Nature.* 2003 Sep 4; 425: p. 27-28.
193. Minton AP. The influence of macromolecular crowding and macromolecular confinement on biochemical reactions in physiological media. *J Biol Chem.* 2001 Feb; 276(14): p. 10577-10580.
194. Rivas G, Ferrone F, Herzfeld J. Life in a crowded world. *EMBO reports.* 2004 Jan 1; 5(1):

- p. 23-27.
195. Kuznetsova IM, Zaslavsky BY, Breydo L, Turoverov KK, Uversky VN. Beyond the excluded volume effects: Mechanistic complexity of the crowded milieu. *Molecules*. 2015 Jan 14; 20(1): p. 1377-1409.
 196. Berg Bvd, Wain R, Dobson CM, Ellis RJ. Macromolecular crowding perturbs protein refolding kinetics: implications for folding inside the cell. *EMBO J*. 2000 Aug 1; 19(15): p. 3870-3875.
 197. Botta M, Haider S, Leung IX, Lio P, Mozziconacci J. Intra- and inter-chromosomal interactions correlate with CTCF binding genome wide. *Molec. Syst Biol*. 2010 Jan 1; 6(1): p. 426.
 198. Homouz D, Perham M, Samiotakis A, Cheung MS, Wittung-Stafshede P. Crowded, cell-like environment induces shape changes in aspherical protein. *Proc of the National Academy of Sciences*. 2008 Aug 19; 105(33): p. 11754–11759.
 199. Munishkina LA, Ahmad A, Fink AL, Uversky VN. Guiding protein aggregation with macromolecular crowding. *Biochem*. 2008 Jul 30; 47(34).
 201. Mittal S, Singh LR. Denatured state structural property determines protein stabilization by macromolecular crowding: A thermodynamic and structural approach. *PLoS ONE*. 2013 Nov 12; 8(11).
 201. Aon MA, Cortassa S. On the fractal nature of cytoplasm. *FEBS Letters*. 1994 May; 334(1): p. 1–4.
 202. Kurakin A. The self-organizing fractal theory as a universal discovery method: the phenomenon of life. *Theor Biol and Med Mod*. 2011; 8(4): p. 1-66.
 203. Vasilescu C, Olteanu M, Flondor P, Calin GA. Fractal-like kinetics of intracellular enzymatic reactions: a chemical framework of endotoxin tolerance and a possible non-specific contribution of macromolecular crowding to cross-tolerance. *Theor Biol Med Mod*. 2013; 10: p. 55.
 204. Lieberman-Aiden E, et al. Comprehensive mapping of long range interactions reveals folding principles of the human genome. *science*. 2009 Sep; 326(5950): p. 289-293.
 205. Gray JJ, Moughon S, Wang C, Schueler-Furman O, Kuhlman B, Rohl CA, et al. Protein-protein docking with simultaneous optimization of rigid-body displacement and side-chain conformations. *J Mol Biol*. 2003 Aug.; 1(331): p. 281-299.
 206. M.P. Morrissey, Ahmed Z, Shakhnovich. The role of cotranslation in protein folding: a lattice model study. *Polymer*. 2004; 45: p. 557-571.
 207. Binder K. Applications of Monte Carlo methods to statistical physics. *Rep Prog Phys*. 1997; 60: p. 487.
 208. Dimov IT, Karaivanova AN, Yordanova PI. Monte Carlo algorithms for calculating eigenvalues. *Lecture notes in statistics*. 1996; 127: p. 205-220.
 209. Tobias D, Tim S, Simon G, Alexey F, Michael B. Permutation blocking path integral Monte Carlo approach to the uniform electron gas at finite temperature. *The journal of chemical physics*. 2015 November 23; 143(204101).
 210. Brawer SA. A theory of dense liquids based on Monte Carlo simulations of very small clusters. *J Chem Phys* 1984 October 10; 82(4): p. 2091-2105.

211. Kausik C, John R. R, and Surendra S. A new Green's function Monte Carlo algorithm for the solution of the three-dimensional nonlinear Poisson–Boltzmann equation: Application to the modeling of plasma sheath layers. *Monte Carlo Methods & Applications*. 2012; 18(3): p. 265-273.
212. Jian L, Qian D, Caixin S. An improved box-counting method for image fractal dimension estimation. *Pattern Recognition*. 2009 Nov; 42(11): p. 2460–2469.
213. Hue Sun C, Dill K. The protein Folding Problem. *Physic Today*. 1993 Febrero; 1.
214. Young JC, Morarefi Ismail M, Hartl FU. Hsp90: a specialized but essential protein-folding tool. *JCB Mini-Review The J of Cell Biology*. 2001 Juli;(154).
215. Lau KF, Dill KA. A Lattice statistical mechanics model of the conformational and sequence spaces of proteins. *Macromol*. 1989; 22(10).
216. Thallapuranam Krishnaswamy SK, Chin Y. Monitoring protein folding at atomic resolution. *Acc Chem Res* 2004; 37.

Lacunarity of Classical Site Percolation Spanning Clusters Built on Correlated Square Lattices

David R. Hidalgo-Olguín · Rogelio O. Cruz-Vázquez ·
Salomón J. Alas-Guardado · Armando Domínguez-Ortiz

Received: 2 October 2014 / Accepted: 19 January 2015 / Published online: 3 February 2015
© Springer Science+Business Media Dordrecht 2015

Abstract Classical site percolation is studied on square pore networks generated through the dual site–bond model (DSBM). This model allows different strengths of correlations among the lattice elements in such a way that patches of sites and bonds with similar sizes are structured as correlations are setup. The typical size of these patches depends on the strength of correlations. The aim of this paper is to find whether the global patchy structure is responsible for the patterns found in classical percolation structures. To this end, we measure different static quantities of the correlated networks, such as correlation length, and fractal quantities of the spanning clusters. We observe a significant gap from the reported behavior. For instance, our results indicate that the fractal dimension of the spanning cluster is nonuniversal and changes with the network correlation. The DSBM is good to produce classical percolation clusters with different fractal dimension and different lacunarity behavior. Comparison with other authors' recent findings is presented.

Keywords Correlated networks · Correlation length · Percolation · Fractal dimension · Lacunarity

List of Symbols

a Slope of lacunarity behavior
b Intercept of lacunarity behavior

D. R. Hidalgo-Olguín · R. O. Cruz-Vázquez · A. Domínguez-Ortiz (✉)
Departamento de Química, UAM – Iztapalapa, P.O. Box 55-534, Mexico, D.F., Mexico
e-mail: doar@xanum.uam.mx

D. R. Hidalgo-Olguín
e-mail: david.ummachtiani@gmail.com

R. O. Cruz-Vázquez
e-mail: rogelio.quetzalli@gmail.com

S. J. Alas-Guardado
Departamento de Ciencias Naturales, UAM – Cuajimalpa, C.P. 05300 Mexico, D.F., Mexico
e-mail: salas@correo.cua.uam.mx

d_f	Fractal dimension
DSBM	Dual site–bond model
$F_B(R_B)$	Probability density functions by bonds
$F_S(R_S)$	Probability density functions by sites
$L(r)$	Feature lacunarity L for a box size r
l.u.	A linking unit
m	Number of pixels
M	Number of sites
n	Integer
$N(r)$	Number of boxes N of size r
P	Probability
R	Represent the “metric”
REV	Representative elementary volume
s_i	Threshold
\mathbb{Z}	Integers
μ	Mean value of sites distribution
ξ	Correlation length
ρ	Percolation threshold
ρ_C	Fraction occupied by the spanning cluster
Ω	Overlap between distribution functions site–bond

1 Introduction

The classical percolation theory deals with various properties of a disordered medium (Sahimi 1995; Ben-Avraham and Havlin 2004). This process is defined as a deterministic evolution on a random medium; then, we need to have a model of the medium to discuss percolation. Here, we assume that the medium can be represented by a weighted square network, as is customary in graph theory (c.f., e.g., Bondy and Murty 1982). Classical percolation over random weighted networks has been intensively studied in the last years, and its structural behavior has been established in term of quantities such as the classical percolation threshold, ρ , as well as the fractal dimension, d_f , and the lacunarity, $L(r)$, of the spanning cluster (Ben-Avraham and Havlin 2004). In the particular case of site percolation on random square networks, $\rho = 0.5927$, and $d_f = 91/48$. Many biological, chemical, and physical processes occur in porous media, and percolation spanning clusters are common models of these tortuous media (Bonny and Leuenberger 1991; Felipe et al. 2005). One of the underlying problems when modeling a process occurring in a tortuous medium is the statement of a network model of this medium. Any assumption made in the model introduces approximations and simplifications with respect to real problem. Thus, it is crucial to establish which are the main parameters affecting the behavior of the system under study to avoid unnecessary complication to describe the environment of evolution. Between a homogeneous medium (i.e., that depicting a very large correlation) and a random heterogeneous one (i.e., that depicting no correlation), there are a variety of different situations. It has now been realized that the network structures of most systems observed in industry and nature lie midway between being more disordered than homogeneous lattices, although more structured than random ones (López et al. 2007; Cordero et al. 2004). For example, spatial correlation is frequently observed in real porous media, and there is evidence that this variable exerts significant effects on the shape, and kinetics of phenomena occurring inside these media (Cruz et al. 2011; Dominguez et al. 2000). How does network topology change the structural properties

of percolation structures? This is a standing problem in many applications. The particular purpose of the present work is to study the classical percolation behavior on network square graphs characterized by different site-to-site correlation lengths, ξ , and find out how the percolation process is affected by this characteristic length. This quantity represents the mean extent (in lattice units, l.u.) of patches where network elements of similar weights coexist. Notably, percolation structural behavior is established in terms of ρ , ρ_c (fraction occupied by the spanning cluster), d_f , and $L(r)$. The latter measure is used to capture specific properties of fractals, which is related to the degree of homogeneity of a fractal, and to extend that it is translation invariant. Lacunarity is a measure designed to assist fractal analysis in case of images with similar fractal dimension. It was introduced by Mandelbrot when one could see qualitative differences in the mass distribution, i.e., differences in the amount of holes. In such case, lacunarities were proposed to differ (Mandelbrot 1982). Moreover, comparison with other authors' findings is presented.

This manuscript is planned as follows. First, the pertinent antecedents are briefly presented, and the variables used to characterize the structural behavior of the tortuous media are defined in the introduction section. Second, the particular program conceived to build the tortuous media (e.g., porous media) models, and to characterize their structure as fractals entities, is introduced. Finally, some selected numeric results related to the structure of spanning clusters are presented and discussed.

2 Method

The research method followed throughout this work may be subdivided into two procedures.

1. The creation of diverse numerical square lattices endowed with different degrees of spatial correlation among their constitutive entities. These lattices are constructed by means of a dual site–bond model, termed DSBM, and characterized via a numerical estimation of their ξ values (Felipe et al. 2005; Cruz et al. 2011).
2. Classical percolation clusters are formed on the correlated lattices; they are characterized as early signaled.

2.1 Networks Construction and Characterization

A porous network can be depicted by two kinds of interrelated elements: (1) sites, which represent nodes, pores, antrae, or cavities, and (2) bonds, which represent edges, throats, capillaries, or passages. The weights of sites and bonds in the network are chosen from prearranged lognormal population samples, one for sites and another for bonds. There is an overlap $\Omega \in [0, 1]$ between these distributions (Cordero et al. 2004). In Fig. 1, we can visualize the corresponding probability density functions by sites, $F_S(R_S)$, and bonds, $F_B(R_B)$, versus the property R , where R may represent an adsorption energy in the case of a solid surface (Riccardo et al. 1993) or the size of a site in the case of a porous medium (Mayagoitia et al. 1997).

In this work, we report results obtained from the method employed in López et al. (2000) for generating isotropic and correlated networks, which enabled to build square networks having $M \times M$ sites. In this case, we have used $M = 1,000$. Via a Monte Carlo method, the weights of network elements are chosen following a construction rule: The weight of a site is always larger than the weight of any of its delimiting bonds. A consequence of this rule is the formation of “patches” of sites and bonds having about the same weights when the value of Ω is relatively high. The extent of these patches grows as Ω increases. To investigate the way by

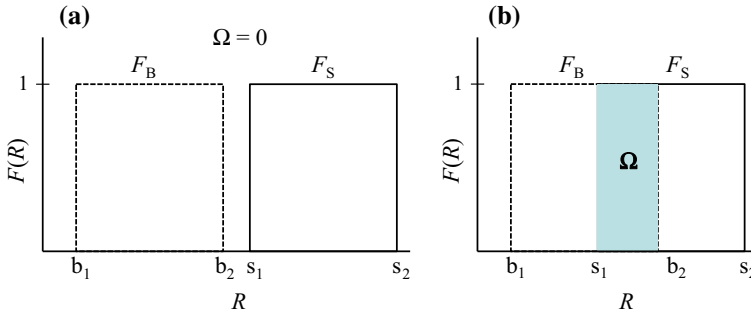


Fig. 1 Uniform probability density functions for sites (solid line) and bonds (dotted line): **a** not overlapping and **b** the shaded area denotes the overlap Ω between the distributions. F_B is defined at the range $b = [b_1, b_2]$ and F_S at the range $s = [s_1, s_2]$

which network elements are interconnected inside a simulated medium, a site-to-site weight correlation length, ξ is calculated by a Monte Carlo method introduced elsewhere (Felipe et al. 2005; Cruz et al. 2011). This way the DSBM produces weighted networks characterized by diverse degrees of correlation among network elements. For the same weight distribution, this method provides simulated dispersed media of different topological structures; in other words, the main advantage of the DSBM is that different topographies can be generated by varying one single parameter, Ω (Riccardo et al. 1993). Moreover, this model encourages the simulation of model porous media with more realistic features, since there exist a complete correspondence between pores (throats) and sites (bonds) (Mayagoitia et al. 1997).

2.2 Classical Percolation Clusters

Spanning classical percolation clusters have been constructed on the networks described above by means of a classical percolation procedure (Sahimi 1995; Ben-Avraham and Havlin 2004). Conversion of the network constituted by real values into a binary format is performed via the selection of a critical threshold figure as follows:

1. It is observed that the weight of the sites that form the network is scattered following a normal distribution with average value μ . A set of values, $\{\mu + 0.01n | n \in \mathbb{Z}\}$, are taken in the vicinity of μ ; the range of $n \in \mathbb{Z}$ is chosen to observe the percolation transition.
2. Taken each element of the previous set as a percolation threshold, the network is binarized in a phase A, if $s_i \leq \mu$, and another phase B, if $s_i > \mu$. Following the application of each threshold on the resulting binary arrangement, the existence of an infinite percolation cluster (i.e., a cluster connecting two opposite borders of the arrangement) is determined by using the cluster-labeling method offered by the command *Morphological Components* of Mathematica (version 8.0.4). It assigns an integer label to each cluster and computes the number of sites occupied by each one.
3. Finally, the critical percolation threshold, ρ , is the infimum value of the set of threshold values that can produce an infinite cluster.

In this way, we catch the percolation pattern at percolation transition. Besides the spanning cluster fractal dimension is computed. Fractal dimension d_f quantifies the degree of irregularity or fragmentation of an object with a spatial pattern. Here, d_f is estimated via the box-counting method (Rothschild 1998) implemented in ImageJ software¹. By covering the

¹ <http://rsbweb.nih.gov/ij/>; <http://rsb.info.nih.gov/ij/>.

feature with boxes of size r , the fractal dimension can be estimated from the slope of $\ln N(r)$ vs $\ln(r)$, following the relationship:

$$N(r) = \left(\frac{1}{r}\right)^{d_f} \tag{1}$$

where $N(r)$ is the number of boxes intersecting the feature of interest. Nonetheless, the fractal dimension alone is not sufficient to describe the geometry and properties of “lacunar” fractals (Mandelbrot 1982); another parameter, termed *lacunarity*, is required. In this work, lacunarity of the spanning cluster is computed via the gliding box algorithm (Allain and Cloitre 1991) implemented in the Frac Lac tool² of ImageJ. By covering the feature with boxes with size r , lacunarity L is calculated as a function of r :

$$L(r) = \frac{\sum_m m^2 P(m, r)}{[\sum_m m P(m, r)]^2} \tag{2}$$

where $P(m, r)$ is the probability that a box of size r contains m pixels of interest. Notice on Eq. (2) that the coverage achieved by each box is pondered. Lacunarity is strongly related to the size distribution and spatial repartition of the holes existing in the cluster structure. Roughly speaking, if a fractal has large gaps or holes, it has high lacunarity. On the other hand, if a fractal is almost translationally invariant, it has low lacunarity. Different fractals can be constructed that have a similar d_f value, but that look widely different because they have different lacunarity (Luo and Lin 2009). The lacunarity curve of a fractal should be a straight line on a double logarithmic scale (Allain and Cloitre 1991). This property could be a quite useful feature to tell whether self-similarity exists or not. The practical use of lacunarity has been explored in areas such as: archeology (Stevens et al. 2010), dentistry (Yaşar and Akgünlü 2005), ecology (Plotnick et al. 1993), food science (Valous et al. 2010), medical imaging (Al-Kadi and Watson 2008; Sener 2008), physics (Tolle et al. 2003), seismic studies (Vannucchi and Leoni 2007), and urban spatial analysis (Barros Filho and Sobreira 2008; Gorsich et al. 1996). Despite the promising potential of lacunarity as an index to characterize different structures or spatial patterns, it has received relatively little attention in the porous media literature (Plotnick et al. 1993). In the next section, the results of this study are presented showing the influence of graph topology on the structure of classical percolation patterns built on the network.

3 Results and Discussion

The Ω values used in this work were 14, $\Omega \in \{0.000, 0.104, 0.208, 0.292, 0.396, 0.500, 0.604, 0.708, 0.792, 0.833, 0.875, 0.885, 0.892, 0.896\}$, and 100 networks have been built for each Ω value. Then, each quantity presented as a function of Ω is an average over 100 realizations, and the standard deviation of the realization set is taken as the error of the measured quantity.

The ξ values computed in this work versus the values of Ω are presented in Fig. 2, and they are well fit by:

$$\xi = \begin{cases} 0.0 & \text{if } 0 \leq \Omega < 0.4 \\ 0.4e^{5.21\Omega^{3.77}} & \text{if } 0.4 \leq \Omega < 0.87 \\ 1.64e^{29.62\Omega^{20.42}} & \text{if } 0.87 \leq \Omega < 0.9 \end{cases} \tag{3}$$

² <http://rsbweb.nih.gov/ij/plugins/fraclac/fraclac.html>.

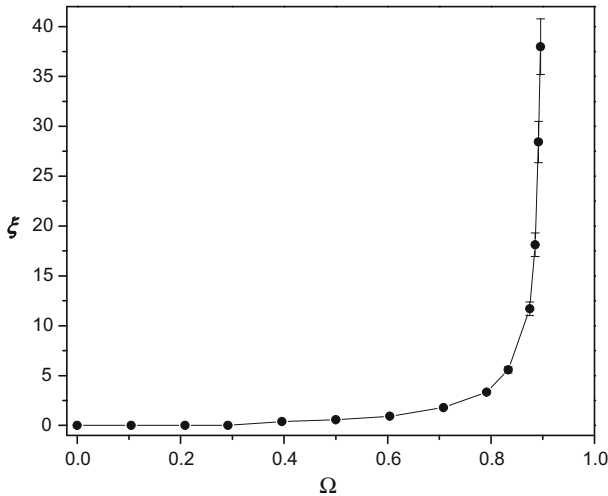


Fig. 2 Plot of the correlation length ξ (site-to-site) versus Ω . Numerical simulation results and best data fit

The method introduced by López et al. (2000) produces null correlation when $\Omega < 0.4$, and there is a clear increase of network correlation for $\Omega \geq 0.4$. Note also the strong increase of the error of ξ values for $\Omega \geq 0.87$. Typical examples of results regarding the influence of ξ on the pattern of a classical percolation spanning cluster are presented in Fig. 3, which shows the phase distribution of infinite percolation clusters constructed on networks characterized by different ξ values. Such visualizations show the classic characteristics of clusters generated by a classical percolation algorithm, i.e., irregular shapes together with some trapping of the original phase (Ben-Avraham and Havlin 2004). Notice also that there are two main consequences of the increase of ξ value: (1) the cluster grain size grows (c.f. Fig. 3), and (2) there is a grain densification (i.e., the microstructure is gradually lost as ξ value rises). The former consequence is the main cause of the error behavior observed on the results presented in this work when network spatial correlation increases. The number of grains forming the spanning cluster goes down as correlation increases. Then, the variation of the number of grains forming the spanning cluster is more notorious in correlated networks than in no correlated ones. This is translated into a more significant error for the measured quantities in highly correlated networks; in poorly correlated systems, this effect is not perceived. Note that ξ varies strongly in going from the least to the most correlated networks. $\xi \approx 0$ l.u. (l.u. is the distance between neighbors sites in the net) means that significant large regions where elements of similar weights can coexist are almost absent in this arrangement. However, the situation is radically different when $\xi \approx 38$ l.u.; in this case, patches spread over a region which is ca. 38 sites long and wide. Thus, this method provides numerical square networks characterized with different topologies ranging from $\xi = 0$ to $\xi \approx 38$ l.u. Given the size of the networks used in this study, i.e., $1,000 \times 1,000$, this ξ range is adequate for studying the consequences of network topology on the spanning cluster structure. In brief, the network size used in this work, viz. $M = 1,000$ sites, or l.u., is large enough to guarantee a good statistical representation (López et al. 2000), because the ξ values used here are very small with respect to network extent. Figure 4 shows the details of the grains formed in some spanning cluster structure observed in Fig. 3.

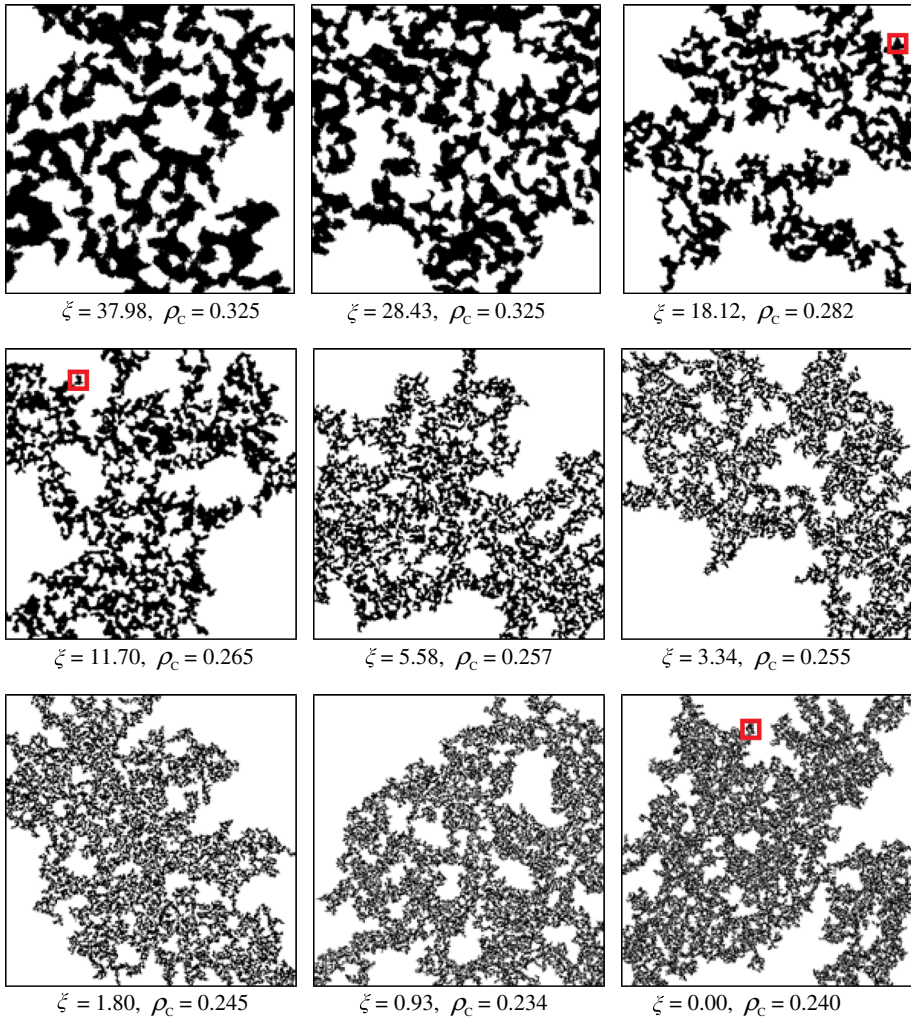


Fig. 3 Classical site percolation structures in $1,000 \times 1,000$ site networks. Figure provides an illustration of infinite clusters for some ξ values; and examples of cluster grains are enclosed in red

In general, we observe that network topology affects the percolation properties of the medium. Next, we consider the effects of this spatial correlation on a classical site percolation model. The critical percolation threshold, ρ , is a function of graph correlation. Figure 5 shows the observed behavior of the mean value of the critical threshold as a function of ξ . Once more, each critical threshold presented here corresponds to an average over 100 realizations. Note that, for $\xi = 0$, the critical threshold value is 0.5929, very near to 0.5927, the critical threshold reported in the literature for square random networks (c.f. Ben-Avraham and Havlin 2004). For $\xi \in [0, 12 \text{ l.u.}]$, a monotonous decrease of ρ value is observed. Next, for $\xi > 12 \text{ l.u.}$, we observe a monotonous increase of the percolation threshold. Changes in cluster structure are in charge of this behavior. In fact, the increase in ξ involves both, metric segregation and microstructure loss. Metric segregation produces that the grain forming the spanning cluster becomes bigger, and then, the progression of the clusters versus percolation

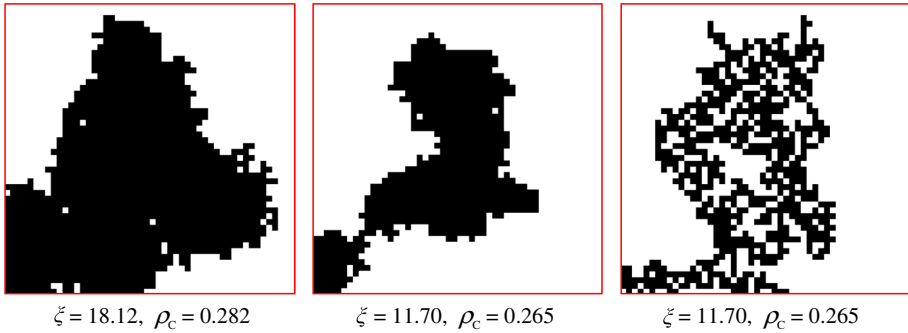


Fig. 4 Snapshots of the cluster grains enclosed in red in Fig. 3. These structures have 50×50 site networks. Notice that the number of grains forming the spanning cluster drops as the value of ξ rises

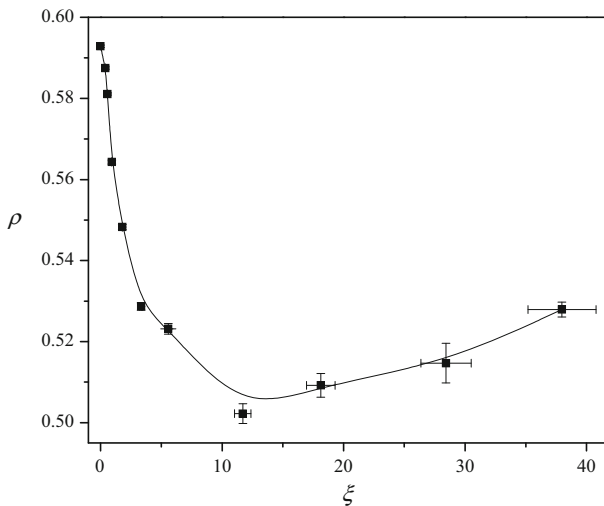


Fig. 5 Plot of the critical site percolation threshold for correlated square networks as a function of ξ . Data obtained from network simulation. Data fit is also presented

is more efficient, i.e., a more reduced number of grains have to be connected to network through, as consequence clusters fill the space more poorly, and a significant decreasing of percolation threshold is observed. This effect is dominant on networks with weakly or moderate correlation. After $\xi \approx 12$ l.u., a different change in the structure takes the control. As ξ value grows, progressively the spanning cluster loss texture (i.e., it becomes denser as ξ value rises), then the spanning cluster fulfill better the space, and as consequence, we observe an increase on the value of percolation threshold. This explanation is supported by direct visualization of cluster texture as function of ξ . Figure 3 shows representative examples of the results regarding the influence of ξ on the patterns of classical percolation clusters. Such visualizations show the typical characteristics of classical percolation clusters (Sahimi 1995; Ben-Avraham and Havlin 2004). The main point arising from Fig. 3 is that DSBM scheme employed in this work for network construction (López et al. 2000), based on the selection of the value of Ω value, is capable of creating a wide variety of topologies, as is

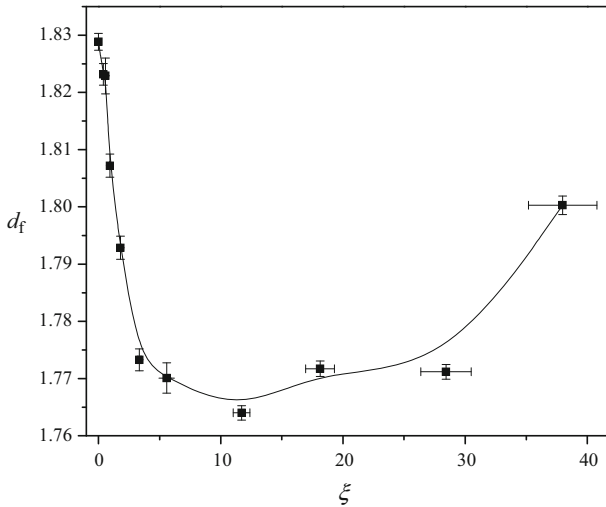


Fig. 6 Plot of the fractal dimension of spanning cluster, d_f versus ξ . Data obtained from network simulation. Data fit is also presented

evident from the percolating structures showed in Fig. 3. Note that, as previously mentioned, the grain and the density of the spanning cluster increase as network correlation grows.

Data presented in Fig. 5 is well fitted by:

$$\rho = \begin{cases} 0.392 + 0.047e^{-\frac{(\xi+t)}{51.391}} + 0.092e^{-\frac{(\xi+t)}{51.468}} + 0.066e^{-\frac{(\xi+t)}{1.714}} & \text{if } 0 \leq \xi \leq 11.7 \\ 0.491 + 9.249 \times 10^{-4}\xi & \text{if } 11.7 < \xi < 38 \end{cases} \quad (4)$$

with $t = 5.116 \times 10^{-9}$. Note that there are two zones with very different behaviors.

Next, to quantify the effects of network topology on the structure of percolation patterns, the information about spanning cluster complexity at different scales is presented in terms of fractal amounts such as d_f and $L(r)$. The information presented in Fig. 6 shows the dependence of d_f versus ξ , which supports previous observations. When ξ increases, (1) the cluster grain size goes up and (2) the detail of the structure is gradually lost. The fractal dimension is a function of both, the area occupied by the cluster, ρ_c , and the level of detail of the spanning cluster. The size of cluster grain increases and controls cluster structure in poorly correlated networks; then, d_f diminishes because the number of grains forming the spanning cluster, and then ρ_c , decreases; while the cluster densification becomes dominant in really correlated networks, where the space is better fulfilled by denser percolation clusters. Observe, on Fig. 6, the change of the measured data via box-counting method. Note that the obtained relationship is not injective, i.e., networks with different values of ξ can produce structures with very similar fractal dimension (see, e.g., clusters for $\xi = 5.58$, and $\xi = 28.43$ in Fig. 3, for both, $d_f \approx 1.773$). However, in spite of the last observation, it can be said that the method used here is capable of producing structures characterized by different d_f values.

Data presented in Fig. 6 is well fitted by:

$$d_f = \begin{cases} 1.764 + 0.068e^{\left(\frac{-\xi}{2.069}\right)} & \text{if } 0 \leq \xi \leq 11.7 \\ 1.767 + 1.0 \times 10^{-5}e^{\left(\frac{\xi}{4.901}\right)} & \text{if } 11.7 < \xi < 38 \end{cases} \quad (5)$$

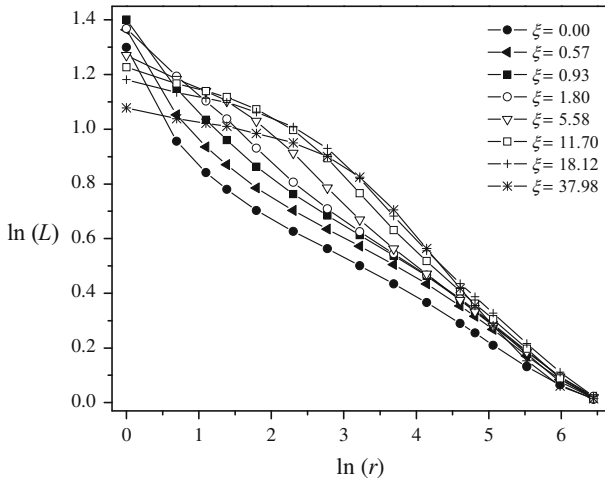


Fig. 7 Plot of the lacunarity of the spanning cluster, L versus r . Data obtained from network simulation

Note that there are two zones with very different behaviors.

The behavior of spanning cluster lacunarity as a function of box size, r , for different ξ values, is presented in Fig. 7. As explained by Luo and Lin (2009), lacunarity is a function of three factors:

- (1) The gliding box size. As the box size increases, data variance decreases. Thus, the same cluster has lower lacunarities as the box size grows, and this behavior is observed in Fig. 7. Lacunarities always decrease toward unity (i.e., $\ln[L(r)] = 0$) and remain constant afterward; this suggests that r has approached the representative elementary volume (REV) of the feature under study. For instance, in Fig. 7, for all the studied features, the size of the REV is reached when $\ln(r) > 6.5$. Notice that images with large-size pieces (i.e., characterized by big ξ value) present highest lacunarities.
- (2) The fraction of the space occupied by the feature, ρ_c . With similar spatial patterns, the lower the fraction, the higher the lacunarity. Data presented in Fig. 3 signals that ρ_c grows as ξ grows; then, lacunarity must grow when ξ grows. This behavior is not observed in Fig. 7, because the consequence of ρ_c is hidden by the effects (1) and (3).
- (3) The structure of the feature. Cluster densification means a diminution of holes population. Then, lacunarity decreases when ξ value increases. This behavior is observed in Fig. 7.

The rate of change of the log–log representation of the lacunarity function is an indicator of the textural properties along the range of scales that have been considered (Plotnick et al. 1993; Dong 2000). A fast decreasing rate of lacunarity functions corresponds to random or homogeneous structures that usually display concave-up shapes. The extreme case of this type of behavior corresponds to a regular set with equidistant points, and it gives a straight line with slope tending to be vertical. A slower rate decrease of lacunarity appears for clustered structures that show concave-down shapes. This type of log–log lacunarity graph usually falls rapidly to zero for a certain scale. This scale indicates typical cluster size. Between these two cases, log–log lacunarity can present slight concavity with little variations of the rate of change. A particularly interesting case of this behavior corresponds to graphs close to a straight line. They correspond to self-similar sets with fractal dimension related to the slope.

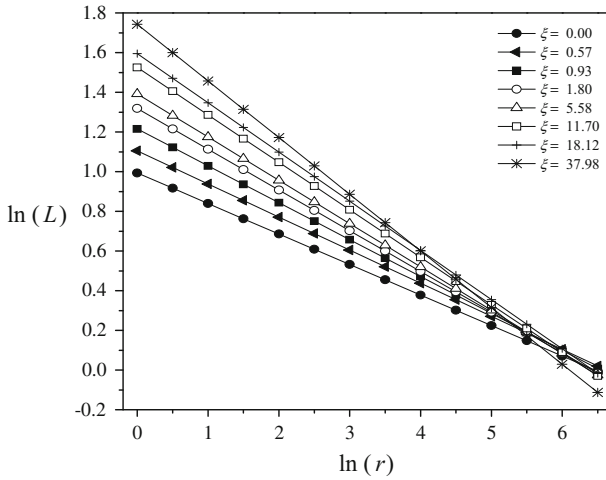


Fig. 8 Lacunarity behavior as a function of the box size r . For each system, for each ξ value, only the linear behavior is considered

This property can be used to determine the degree of self-similarity and to estimate the fractal dimension. Allain and Cloitre (1991) pointed out that lacunarity curve for a fractal should be a straight line. Note that this behavior is also observed in Fig. 7. Figure 8 shows only the fractal-like behavior presented by lacunarity curves. In this zone, lacunarity data are well fit by the equation of a line. Table 1 presents the equations of lines fitted to data presented in Fig. 8, for various ξ values, being a the line slope and b the y intercept.

There are different conducts. Note that the slope of the linear fit is more and more negative, from 0 to 38 l.u. Therefore, the method of construction used here can produce different fractal structures, and they can be well characterized by lacunarity measures, notably by the parameter a . Globally lacunarity has several positive attributes:

- (1) lacunarity function is sensitive to structural differences and reflects the size and spatial distribution of the features. It has the potential to differentiate one type of structure or pattern from another;
- (2) lacunarity function, as opposed to one single value (e.g., a fractal dimension), can be calculated to obtain size-dependent information; and
- (3) lacunarity is helpful in determining if self-similarity exists, and if a REV for a porous medium can be defined (percolation clusters are common models of fractal porous media).

In brief, from the numerical results of this study, it was found that DSBM is an efficient method to build fractal porous media endowed with diverse fractal dimension and different lacunarity behaviors. Finally, note that the obtained relationship between ξ and a is injective, i.e., networks with different values of ξ produce structures with different lacunarity behaviors (see, e.g., clusters for $\xi = 5.58$, and $\xi = 28.43$ in Fig. 3).

The porous media characterized in this work will be used in the study of diffusion in tortuous systems (Cruz et al. 2011). The behaviors of random and self-avoiding walkers will be analyzed. Such studies have applications in chemical kinetics (Meraz et al. 2004) and protein folding (De Gennes 1971) in fractal media.

Table 1 The equations of lines fitted to data presented in Fig. 8, for various ξ values

ξ	a	b
0.000	-0.154	0.994
0.571	-0.167	1.105
0.927	-0.186	1.215
1.799	-0.206	1.319
5.579	-0.218	1.393
11.700	-0.239	1.526
18.123	-0.248	1.595
37.977	-0.286	1.743

4 Conclusion

Although percolation in regular topologically random networks has been extensively studied, percolation in correlated networks is also of great interest, since in most practical situations one has to deal with such systems. In this work, we use the DSBM model to build correlated networks. This model is the simplest, to our knowledge, capable of describing random media with different topological structures. These are generated by varying a single parameter, Ω , the overlapping between the sites and bond probability densities, while the details of the porous medium will depend, of course, on the shape of these distributions. The parameter Ω can be associated to a correlation length ξ , in such a way that $\xi \rightarrow 0$ as $\Omega \rightarrow 0$ and $\xi \rightarrow \infty$ as $\Omega \rightarrow 1$. How does network topology affects the classical percolation properties of the medium? From this concept, it has been possible to build classical percolation spanning clusters with diverse d_f values and different lacunarity behaviors. In general, we observe that network topology affects the classical percolation properties of the medium, notably: (1) Percolation probability is a function of ξ , (2) fractal dimension of the spanning cluster is a function of ξ , and (3) lacunarity of the spanning cluster is a function of ξ .

Acknowledgments The authors wish to thank the Ministry of Education of Mexico (SEP-PROMEP) for the support awarded to the Academic Network “Diseño nanoscópico y textural de materiales avanzados”. Thanks are also due to the National Science and Technology Council of Mexico (CONACyT) for the economic support awarded under Project “Apoyo para el desarrollo del programa de fortalecimiento académico del posgrado de alta calidad, COFON 914009.” The use of computer facilities of Laboratorio de Supercómputo y Visualización en Paralelo (Cluster Aitzalao) of UAM-Iztapalapa is gratefully acknowledged.

References

- Al-Kadi, O.S., Watson, D.: Texture analysis of aggressive and nonaggressive lung tumor CE CT images. *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **55**(7), 1822–1830 (2008)
- Allain, C., Cloitre, M.: Characterizing the lacunarity of random and deterministic fractal sets. *Phys. Rev. A* **44**, 3552–3558 (1991)
- Barros Filho, M.N., Sobreira, F.J.A.: Accuracy of Lacunarity Algorithms in Texture Classification of High Spatial Resolution Images from Urban Areas. In: XXI ISPR Congress, Commission III, XXXVII-B3b, pp. 417–422. The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences, Beijing, China (2008)
- Ben-Avraham, D., Havlin, S.: *Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems*. Cambridge University Press, Cambridge (2004)
- Bondy, J.A., Murty, U.S.R.: *Graph Theory with Applications*. North-Holland, New York (1982)

- Bonny, J.D., Leuenberger, H.: Matrix type controlled release systems: percolation effects in non-swellable matrices. *Pharm. Acta Helv.* **66**, 160–164 (1991)
- Cordero, S., Kornhauser, I., Domínguez, A., Felipe, C., Esparza, J.M., Rojas, F., López, R.H., Vidales, A.M., Riccardo, J.L., Zgrablich, G.: Site-bond network modeling of disordered porous media. *Part. Part. Syst. Charact.* **21**, 101–116 (2004)
- Cruz, O., Hidalgo, R., Alas, S., Cordero, S., Meraz, L., López, R., Domínguez, A.: Is the Alexander-Orbach conjecture suitable for diffusion in correlated percolation clusters. *Adsorpt. Sci. Technol.* **29**(7), 663–676 (2011)
- De Gennes, P.G.: Reptation of a polymer chain in the presence of fixed obstacles. *J. Chem. Phys.* **55**(2), 572–579 (1971)
- Dong, P.: Test of a new lacunarity estimation method for image texture analysis. *Int. J. Remote Sens.* **21**(17), 3369–3373 (2000)
- Domínguez, A., Borries, S., Prat, M.: Gas cluster growth by solute diffusion in porous media: experiments and automaton simulation on pore network. *Int. J. Multiphase Flow* **26**, 1951–1979 (2000)
- Felipe, C., López, R.H., Domínguez, A.: 2D automaton simulation of bubble growth by solute diffusion in correlated porous media. *Adsorption* **11**, 491–496 (2005)
- Gorsich, D.J., Tolle, C.R., Karlsen, R.E., Gerhart, G.R.: Wavelet and fractal analysis of ground-vehicle images. *Wavelet Appl. Signal Image Process. IV* **2825**, 109 (1996)
- López, R.H., Vidales, A.M., Domínguez, A., Zgrablich, G.: How does a patchy network affect the structure of invading patterns. *J. Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* **300**, 122–128 (2007)
- López, R.H., Vidales, A.M., Zgrablich, G.: Correlated site bond ensembles statistical equilibrium and finite size effects. *Langmuir* **16**, 3441–3445 (2000)
- Luo, L., Lin, H.: Lacunarity and fractal analyses of soil macropores and preferential transport using micro-X-ray computed tomography. *Vadose Zone J.* **8**, 233–241 (2009)
- Mandelbrot, B.B.: *The Fractal Geometry of Nature*. Freeman, San Francisco (1982)
- Mayagoitia, V., Rojas, F., Kornhauser, I., Pérez-Aguilar, H.: Modeling of porous media and surface structure: their true essence as networks. *Langmuir* **13**, 1327–1331 (1997)
- Meraz, R.L., Vidales, A.M., Domínguez, A.: A fractal-like kinetics equation to calculate landfill methane production. *Fuel* **83**, 73–80 (2004)
- Plotnick, R.E., Gardner, R.H., O'Neill, R.V.: Lacunarity indices as measures of landscape texture. *Landsc. Ecol.* **8**, 201–211 (1993)
- Riccardo, J.L., Pereyra, V., Zgrablich, G., Rojas, F., Mayagoitia, V., Kornhauser, I.: Characterization of energetic surface heterogeneity by a dual site-bond model. *Langmuir* **9**, 2730–2736 (1993)
- Rothschild, W.G.: *Fractals in Chemistry*. Wiley, New York (1998)
- Sahimi, M.: *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*. VCH, New York (1995)
- Sener, B.: Lacunarity analysis of TEM images. In: Sener, B. (ed.) *Innovations in Chemical Biology*. Springer, Berlin (2008)
- Stevens, N.E., Harro, D.R., Hicklin, A.: Practical quantitative lithic use-wear analysis using multiple classifiers. *J. Archaeol. Sci.* **37**(10), 2671–2678 (2010)
- Tolle, C.R., McJunkin, T.R., Rohrbaugh, D.T., LaViolette, R.A.: Lacunarity definition for ramified data sets based on optimal cover. *Physica D* **179**(3–4), 129–152 (2003)
- Valous, N.A., Sun, D.W., Allen, P., Mendoza, F.: The use of lacunarity for visual texture characterization of pre-sliced cooked pork ham surface intensities. *Food Res. Int.* **43**(1), 387–395 (2010)
- Vannucchi, P., Leoni, L.: Structural characterization of the Costa Rica decollement: evidence for seismically-induced fluid pulsing. *J. Earth Planet. Sci. Lett.* **262**(3–4), 413–428 (2007)
- Yaşar, F., Akgünlü, F.: Fractal dimension and lacunarity analysis of dental radiographs. *Dentomaxillofac. Radiol.* **34**(5), 261–267 (2005)