

**UNIVERSIDAD      AUTONOMA      METROPOLITANA**

**DIVISION   DE   CIENCIAS   BASICAS   E   INGENIERIA**

**DEPARTAMENTO DE QUIMICA**

**SIMULACION DE REDES POROSAS POR METODOS DE  
MONTE CARLO**

**TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN QUIMICA**

**ASPIRANTE: ING. SALOMON CORDERO SANCHEZ**

**ASESOR CIENTIFICO: DR. FERNANDO ROJAS GONZALEZ**



**MEXICO, D.F.**

**OCTUBRE DE 1998**

---

**UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA**

**AREA DE FISICOQUIMICA DE SUPERFICIES**

**SIMULACION DE REDES  
POROSAS POR METODOS  
DE MONTE CARLO**

**TESIS DE MAESTRIA EN QUIMICA**

**SALOMON CORDERO SANCHEZ**

**1998**

# I N D I C E

<b>Introducción</b>	1
<b>Capítulo 1. Conceptos Básicos y Modelos de Redes Porosas</b>	5
1.1 Clasificación y descripción de medios porosos	5
1.1.1 Descripción	5
1.1.2 Clasificación	6
1.2 Modelos de representación de estructuras porosas	6
1.2.1 Modelos de poros no interconectados	8
1.2.2 Modelos de redes	8
1.2.3 Redes monovariadas	10
1.3 Descripción dual	11
1.3.1 Distribución dual de tamaños de elementos	13
1.3.2 Principio de Construcción	13
1.3.3 Leyes de autoconsistencia	14
1.3.4 Deducción de la función de correlación $\phi(R_S, R_B)$	15
1.3.5 Correlación y segregación de tamaños de elementos	19
1.3.6 Clasificación de estructuras porosas de acuerdo a la descripción dual	21
<b>Capítulo 2. Simulación de Redes Porosas</b>	23
2.1 Método Autoconsistente Mejorado	24
2.1.1 Generación aleatoria de tamaños de enlaces a partir de un tamaño predeterminado de sitio	25
2.1.2 Generación aleatoria de tamaños de sitios a partir de un tamaño predeterminado de enlace	27
2.1.3 Conexión de tamaños de elementos	28
2.2 Método de Monte Carlo Puro	32
2.2.1 Formulación de conceptos básicos	32
2.2.2 Expresión para la densidad de probabilidad $P(x)$	34
2.2.3 Expresión para la probabilidad de transición $W(x \rightarrow x')$	35
2.2.4 Estado final de equilibrio	38
2.2.5 Establecimiento del método	39

<b>Capítulo 3. Resultados del Método Autoconsistente Mejorado para la Simulación de Redes Porosas</b>	40
3.1 Autoconsistencia, verosimilitud y certificación de redes simuladas por el Método ISC	40
3.2 Presentación de resultados	42
3.2.1 Distribuciones duales de tamaños	44
3.2.2 Densidades de probabilidad condicional	44
3.3 Discusión de resultados	61
3.3.1 Distribuciones duales de tamaños	61
3.3.2 Densidades de probabilidad condicional	63
3.3.3 Anisotropía	64
<b>Capítulo 4. Resultados del Método de Monte Carlo Puro para la Simulación de Redes Porosas</b>	69
4.1 Limitaciones de la metodología convencional	69
4.2 Desarrollo de una metodología para manejo de traslapes elevados	70
4.3 Presentación de resultados	73
4.3.1 Secuencias de cambios de estado	74
4.3.2 Evaluación de condiciones de equilibrio	77
4.4 Discusión de resultados	91
4.4.1 Condiciones de equilibrio	91
4.4.2 Densidades de probabilidad condicional	92
4.4.3 Secuencias de cambios de estado	92
4.4.4 Anisotropía	94
<b>Conclusiones</b>	104
<b>Perspectivas Futuras</b>	106
<b>Referencias</b>	107
<b>Glosario de símbolos y abreviaturas</b>	110

## I N T R O D U C C I O N

Dentro de la naturaleza existen materiales llamados “porosos”. Algunos ejemplos de éstos son los tejidos animales y vegetales, o diversos tipos de arenas y rocas, como las calcitas o las dolomitas. En forma artificial el hombre también ha sintetizado materiales de tipo poroso, como ejemplo se tienen las sílices, papeles, carbones, vidrios, geles, etc. La característica fundamental que distingue a este tipo de materiales es su estructura interna, la cual se encuentra formada por poros o espacios vacíos que se encuentran interconectados entre sí de manera caótica a manera de red.

La estructura interna de los materiales porosos ha permitido que el hombre obtenga amplio provecho de éstos, extendiéndose su utilización hacia una amplia gama de aplicaciones: catalizadores, columnas cromatográficas, filtros, adsorbentes, intercambiadores iónicos, membranas de separación, substratos en celdas de combustible, aislantes térmicos, etc. Asimismo, procesos industriales tan importantes como la extracción de petróleo o la explotación de recursos acuíferos, dependen de las características morfológicas del subsuelo poroso.

Para un aprovechamiento óptimo de los materiales porosos, y para obtener un entendimiento preciso de los fenómenos fisicoquímicos que toman lugar en éstos (condensación y evaporación capilar, imbibición y drenaje de fluidos, intrusión y retracción de mercurio, etc.) se hace necesaria la adopción de un modelo simple pero adecuado que pueda describir su estructura. Si no se contara con una idea pertinente acerca de la estructura sería muy difícil realizar un modelado o una interpretación apropiada de dichos fenómenos. Sin embargo, el estudio de los sólidos porosos encuentra su mayor dificultad precisamente en su descripción morfológica.

La descripción de sólidos porosos, realizada hasta ahora, ha incluido los siguientes aspectos: (i) el estudio puramente teórico de los poros individuales de geometría sencilla y de los fenómenos capilares que ocurren dentro de ellos [1-5], (ii) la caracterización del espacio poroso combinando la simulación teórica y modelos analíticos con técnicas experimentales [6-12], o bien (iii) la determinación de la topología de estos materiales por medio de procedimientos

experimentales novedosos que no dependen de ningún tipo preconcebido de estructura porosa [13-16].

Hoy en día [5, 17, 18] se piensa firmemente que la topología de la estructura porosa influye tan seriamente sobre el desarrollo de los procesos capilares y de adsorción, que debería ser incorporada de alguna manera dentro de las descripciones teóricas que describan tales medios desordenados. Los parámetros texturales que describen dicha topología incluyen cantidades globales como la porosidad, la densidad real y el área específica, y también información tan detallada como las geometrías de los poros y de la red interconectada que se forma entre ellos, las correlaciones de tamaño existentes entre dichos huecos de acuerdo a su posición espacial, la conectividad (i.e. el número de elementos huecos que están conectados a un poro dado) o la función de distribución de los mínimos (en sección transversal) que constituyen los cuellos, estrecheces o capilares que rodean a las cavidades porosas y que permiten su interconexión.

Un modelo novedoso que describe la estructura de los materiales porosos es el propuesto por el Profesor Vicente Mayagoitia [19], el cual introduce, como rasgos principales, una función de correlación de tamaños de poro con base en una descripción dual del espacio poroso en la que se distinguen dos tipos distintos de elementos huecos: los sitios (cavidades) y los enlaces (pasajes o capilares). Este modelo ha probado ser uno de los que describe con mayor certeza la realidad geométrica y topológica dentro de un medio poroso real. Prueba de ello son sus diversas aplicaciones para: (i) concebir [20, 21], representar [22] y clasificar [23] diversas morfologías de redes porosas, (ii) entender y predecir mecanismos de procesos capilares [23-26] (condensación y evaporación capilar, intrusión de mercurio, imbibición, desplazamiento inmiscible, etc.), (iii) determinar la textura de materiales porosos [27, 28], y (iv) contemplar diversos fenómenos verificados en superficies heterogéneas (equilibrio de adsorción, difusión superficial, quimisorción, velocidad de reacción de la fase adsorbida y caracterización) [29-31]. Asimismo, el modelo también ha sido aplicado a otra clase de sistemas desordenados tales como agregados ramificados [32] y densos [33] resultantes de la transición sol-gel, y polímeros [34].

Con el modelo del Profesor Mayagoitia es posible también la simulación por métodos de Monte Carlo de redes porosas o superficies heterogéneas que representen la estructura de un medio poroso o de una superficie de adsorción [22, 35-37]. Estos trabajos de simulación han

tenido un antecedente de trabajo de 10 años de investigación. Los últimos dos tipos de métodos de simulación, que han destacado por su eficiencia, son: el Método Autoconsistente Mejorado (Método ISC) [36] y el Método de Monte Carlo Puro [37], este último aplicado hasta la fecha únicamente a la simulación de superficies de adsorción.

El Método ISC utiliza un generador de tamaños de sitios y enlaces para asignar tamaños a éstos elementos mediante una secuencia determinista de tipo Markoviana (secuencia de eventos donde la probabilidad de cada evento depende únicamente de la de los que lo preceden), en tanto que el Método de Monte Carlo Puro utiliza un conjunto definido de valores energéticos de sitios y enlaces que se asignan de manera sistemática a los elementos de la superficie mediante un proceso de cambios de configuración que culminan en un estado de equilibrio del sistema.

Con el Método ISC se han logrado simular redes porosas en dos dimensiones para tamaños de red de hasta  $3 \times 10^6$  elementos y cualquier grado de correlación entre tamaños de elementos huecos. Sin embargo, los resultados obtenidos para redes altamente correlacionadas [36] hacen necesario una aplicación del método en redes de mayor tamaño a fin de averiguar si las premisas establecidas en este método se aplican a redes con un grado de correlación elevado.

El Método de Monte Carlo Puro ha logrado simular superficies heterogéneas con diferentes niveles de correlación entre sitios y enlaces energéticos. Sin embargo, este método ha encontrado impedimentos para poder simular superficies heterogéneas altamente correlacionadas, y necesita desarrollarse un criterio concreto para determinar cuando es alcanzado el estado de equilibrio en el que el proceso de simulación concluye. Por otra parte, se hace necesario extender su aplicación a la simulación de redes porosas.

En este trabajo se persiguen los siguiente objetivos: Construir redes porosas de gran tamaño en dos dimensiones utilizando el Método ISC, y de este modo, averiguar si las premisas propuestas en este método se aplican en redes altamente correlacionadas. Extender las aplicaciones del Método de Monte Carlo Puro en la simulación de redes porosas, resolver sus limitaciones para construir estructuras desordenadas altamente correlacionadas y averiguar las condiciones bajo las cuales se alcanza el estado de equilibrio.

El trabajo se organiza de la manera siguiente: En el Capítulo I se presenta una revisión bibliográfica de los modelos de representación del espacio poroso propuestos hasta la fecha, así

como los conceptos teóricos que conducen a la formulación de la descripción del espacio poroso propuesto por el Profesor Mayagoitia. En el capítulo II se describen los Métodos de construcción de redes porosas ISC y Monte Carlo Puro. En el capítulo III se exponen y discuten los resultados obtenidos con el Método ISC. Finalmente, en el capítulo IV quedan expuestos y se discuten los resultados obtenidos con el Método de Monte Carlo Puro.

**C A P I T U L O 1**

**C O N C E P T O S B A S I C O S**

**Y**

**M O D E L O S D E R E D E S P O R O S A S**

**1.1 Clasificación y descripción de medios porosos**

**1.1.1 Descripción**

Un material se considera poroso cuando en éste se distinguen dos tipos distintos de volúmenes: un volumen sólido y un volumen hueco o vacío. El volumen hueco se compone de poros, los cuales se encuentran distribuidos e interconectados entre sí de manera desordenada. Los poros pueden encontrarse inmersos dentro de una matriz formada por la parte sólida del material (sólidos esponjosos) o bien distribuidos dentro de los espacios existentes entre varias partículas sólidas empacadas (sólidos corpúsculares).

Los sólidos porosos naturales cumplen, en general, con dos características [5]:

- a) Los poros deben encontrarse saturados por algún tipo de fluido como aire, agua, aceite o por alguna mezcla de diferentes fluidos.
- b) El sistema formado por los poros debe ser capaz de transportar una o varias fases fluidas.

### **1.1.2 Clasificación**

No existe una, sino diversas clasificaciones de sólidos porosos. Una de las clasificaciones mayormente utilizadas es la propuesta por Dubinin [38, 39]. Esta clasificación se basa en el tamaño de poros (ver tabla 1).

También se suele clasificar a los materiales porosos en función de la forma geométrica de sus poros (ver tabla 2) [40].

## **1.2 Modelos de representación de estructuras porosas**

La incorporación de un modelo físico que describa y represente adecuadamente la distribución del espacio poroso constituye uno de los aspectos fundamentales para el entendimiento de los fenómenos fisicoquímicos verificados dentro de un material poroso.

Para caracterizar la estructura de un sólido poroso comúnmente se utiliza la sorción de gases o la porosimetría de mercurio. Ambos métodos generan como datos principales curvas de presión capilar, las cuales contienen información valiosa sobre la estructura porosa del material, pero en forma confusa. Si no se cuenta con un modelo adecuado para representar esta estructura, difícilmente pueden interpretarse de manera correcta esos datos experimentales.

Un modelo teórico que describe adecuadamente la estructura real de un sólido poroso es aquel que toma en cuenta tanto las características geométricas como las topológicas del espacio hueco; las características geométricas se refieren al tamaño y forma de los poros, así como a la rugosidad de las paredes; las características topológicas se refieren a la forma como se encuentran conectados los poros entre sí, y a las posibles correlaciones espaciales que pudieran existir entre los distintos tamaños de poro.

**Tabla 1.-** Clasificación de Sólidos porosos de acuerdo al tamaño de poros

<b>Tipo</b>	<b>Tamaño de poro</b>
Sólidos Microporosos	Menor a 2 nm
Sólidos Mesoporosos	Mayor a 2 nm y menor a 50 nm
Sólidos Macroporosos	Mayor a 50 nm

**Tabla 2.-** Clasificación de Sólidos porosos de acuerdo a la forma geométrica de sus poros

<b>Modelo</b>	<b>Ejemplos</b>
Poros en forma de glóbulos	Negro de humo, aerosiles, xerogeles, aerogeles, bayerita, arena, etc.
Poros en forma de placas paralelas	Talco, Micas, Hidromicas, Carbon activado (microporos), Oxido de Hierro, Oxido de Magnesio, Grafito, etc.
Poros en forma de rodillos	Pentaóxido de vanadio, boehmita, Dióxido de Zirconio, papel, geles de Oxido de Tungsteno
Poros en forma de capilares cilíndricos	Endelita, vasos animales y vasos vegetales
Poros en forma de tintero	Vidrios porosos, carbones activados (mesoporos), Oxido de Hierro reducido, etc.

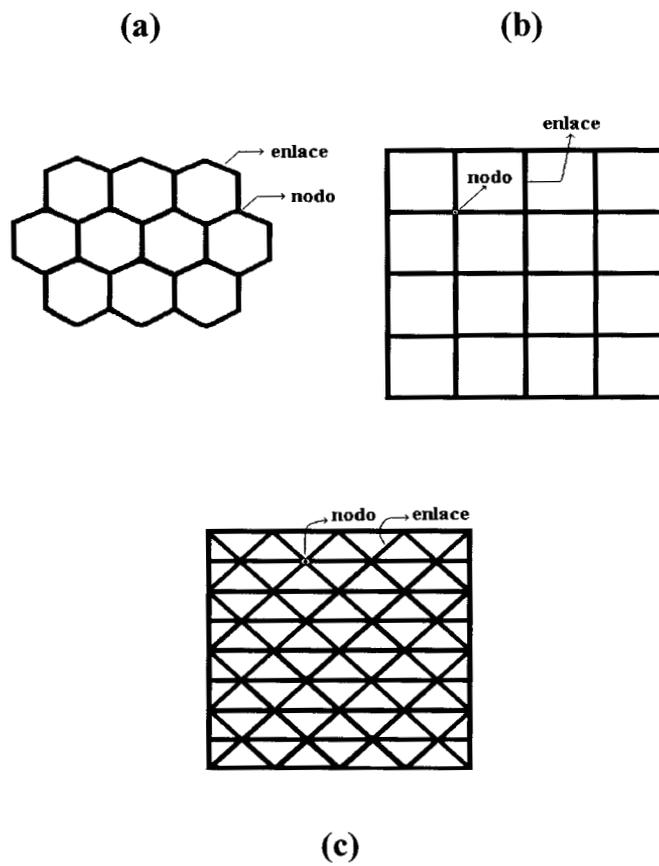
### 1.2.1 Modelos de poros no interconectados

Una primera aproximación para representar al espacio poroso es aquella donde se representa a los poros como una colección de tubos capilares no interconectados entre sí, con longitud constante y diámetro variable [41]. Tradicionalmente este tipo de modelo se ha utilizado para calcular la distribución de tamaño de poros durante un estudio con sorción de gases o con porosimetría de mercurio [42-46]. Sin embargo, dicho modelo dista bastante de reflejar adecuadamente la estructura real de un sólido poroso, ya que no toma en cuenta los efectos de red producidos por la interconexión de poros.

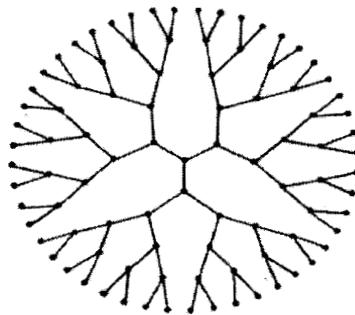
### 1.2.2 Modelos de redes

Otro tipo de modelos más realistas son los de redes porosas. En éstos, se considera al espacio hueco del sólido como una colección de poros con geometría definida (tamaño y forma geométrica) interconectados entre sí a manera de red mediante cierto tipo de conectividad. Comúnmente se utilizan poros con geometría cilíndrica o poros con geometría esférica. Una vez que queda definido el tipo de geometría los poros se distribuyen sobre un arreglo espacial; generalmente, el arreglo que se utiliza consiste de una red cúbica formada por nodos y enlaces (ver figura 1) con número de coordinación constante (número de enlaces por nodo).

Otro tipo de arreglo ampliamente utilizado es la red o árbol de Bethe [47-49]. En esta estructura se utiliza un número de coordinación constante ( $C$ ). La red consiste de un sitio origen, desde el que emanan  $C$  enlaces que lo conectan a sus  $C$  sitios vecinos, a partir de cada uno de los cuales emanan, a su vez,  $C-1$  enlaces además del conducente al origen. Este esquema es infinito. La figura 2 representa una porción de una red de Bethe con número de coordinación  $C = 3$ . Obsérvese que sólo existe una vía o camino para comunicar dos sitios cualesquiera de la red y que sólo los sitios de la superficie, infinitamente alejados del origen, poseen un único vecino. Este arreglo tiene la ventaja de poder ser tratado totalmente de manera analítica, pero presenta la desventaja de que no permite reconexiones entre poros.



**Figura 1.** Redes bidimensionales con diferentes números de coordinación. (a) coordinación 3. (b) coordinación 4. (c) coordinación 6.



**Figura 2.** Representación esquemática de una red o árbol de Bethe con número de coordinación 3.

### 1.2.3 Redes Monovariadas

En este tipo de modelos los poros se distribuyen sobre los enlaces de una red con número de coordinación constante, los cuales poseen un único tipo de geometría; frecuentemente se emplean poros con geometría cilíndrica [50-54] o poros en forma de placas paralelas [9,55]. El tamaño de poros queda definido por el diámetro del cilindro asociado al enlace y por su longitud. Cada enlace queda conectado a dos nodos cuyos volúmenes son considerados nulos. Generalmente la longitud del cilindro se mantiene constante, en tanto que se maneja como variable su diámetro. La heterogeneidad del espacio poroso se introduce asignando aleatoriamente tamaños de diámetro a los enlaces de la red a partir de una distribución de tamaños dada.

Generalmente se utiliza este modelo para simular procesos percolativos de tipo invasivo. El modelo presenta la ventaja de requerir un número mínimo de parámetros que definen al sistema: distribución de tamaño de poros, número de coordinación promedio y tamaño de red. Pero tiene las desventajas de no considerar los volúmenes de los nodos o sitios de la red, la influencia de éstos elementos sobre la topología del espacio poroso y las posibles correlaciones entre tamaños de poros.

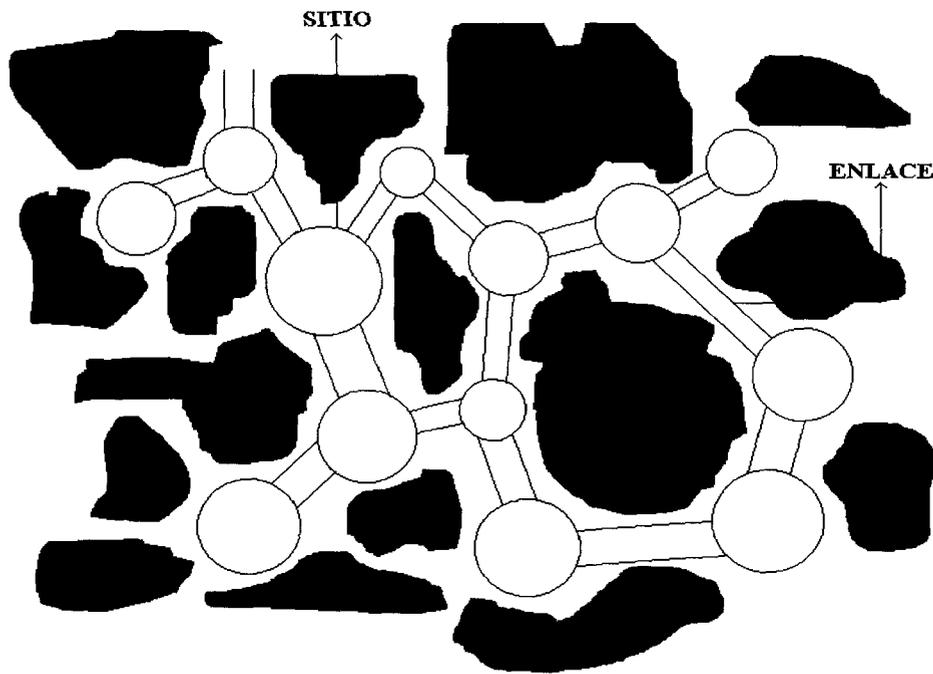
### 1.3 Descripción Dual [19]

En este modelo se establece que el espacio hueco se encuentra constituido por dos tipos distintos de elementos vacíos: los “*sitios*” y los “*enlaces*”. Ambos tipos de elementos se encuentran interconectados alternativa e inevitablemente entre sí a través de toda la estructura porosa. Los sitios constituyen cavidades o antros, en los que pueden confluír uno o más de los enlaces, que consisten en pasajes o simplemente ventanas por los que se comunican únicamente dos sitios (ver figura 3).

Esta concepción dual del espacio hueco convierte a este modelo en una descripción mucho más completa de la realidad topológica y geométrica de los materiales porosos con relación a la

propuesta por los modelos monovariados, donde el espacio vacío se describe únicamente en función de un sólo tipo de entidad porosa.

En algunos otros estudios también se ha propuesto una descripción dual del espacio vacío [7, 56-59], aunque, como veremos más adelante, la descripción dual propuesta por el Profesor Mayagoitia se distingue de los demás modelos en la forma deductiva como se estudian las correlaciones entre tamaños de elementos.

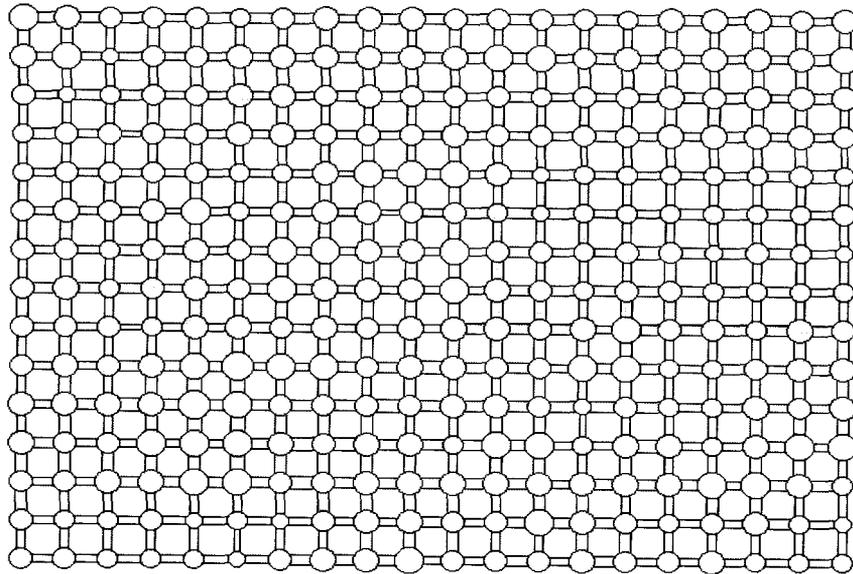


**Figura 3.** Representación esquemática del espacio poroso, en donde se distinguen los sitios y los enlaces.

Para efectos de simplicidad, el tamaño de cada elemento se define mediante una única cantidad,  $R$ . Para los sitios,  $R$  corresponde al radio de la esfera inscrita dentro del sitio (antro o cavidad), en tanto que para los enlaces,  $R$  se considera como el radio del círculo inscrito en la

sección mínima transversal del pasaje o ventana. Describir la geometría real de los sitios y de los enlaces de manera analítica, para un número estadísticamente representativo de elementos, resulta una tarea imposible, por lo que para efectos de estudio se describe a los sitios como esferas de radio  $R_S$  y a los enlaces, dada su función de pasajes, como cilindros de radio  $R_B$ . Por lo tanto, una red porosa puede visualizarse como una colección de esferas y cilindros huecos conectados alternativamente entre sí (ver figura 4).

En esta simplificación, los sitios se encuentran conectados entre sí por medio de los enlaces. A cada sitio de la red corresponde un determinado número enlaces que se denomina conectividad,  $C$ . Si todos los sitios de la red poseen la misma conectividad, la red porosa se denomina *regular*. Por otra parte cuando la conectividad de cada sitio varía a través del espacio, la red porosa se denomina *irregular*, y la conectividad del sistema se considera que está dada por una conectividad promedio  $\bar{C}$ .



**Figura 4.** Modelo de sitios y enlaces para una red porosa.

### 1.3.1 Distribución dual de tamaños de elementos

La descripción dual de elementos huecos hace necesario establecer una doble distribución de tamaños de poros: una correspondiente a los sitios y otra correspondiente a los enlaces. De esta forma se define a  $F_S(R_S)$  y a  $F_B(R_B)$ , como la función de distribución de tamaños normalizada de sitios y de enlaces, respectivamente, ambas con base en un número de elementos.

De esta forma, la probabilidad de encontrar un sitio de tamaño menor o igual a  $R_S$  es:

$$S(R_S) = \int_0^{R_S} F_S(R_S) dR_S \quad (1)$$

Así mismo, la probabilidad de encontrar un enlace de tamaño menor o igual a  $R_B$  es:

$$B(R_B) = \int_0^{R_B} F_B(R_B) dR_B \quad (2)$$

Gráficamente, las cantidades  $S(R_S)$  y  $B(R_B)$  representan, respectivamente, el área bajo la curva en una gráfica de las funciones de distribución de tamaños  $F_S(R_S)$ - $F_B(R_B)$  vs.  $R$ .

### 1.3.2 Principio de Construcción (PC)

Si se desea construir una red de manera autoconsistente, formada por sitios y enlaces, la cual reconozca la naturaleza morfológica y topológica de ambos elementos, surge de manera natural el siguiente “Principio de Construcción”: *el tamaño de un sitio debe ser más grande o al menos igual al tamaño de cualquiera de sus enlaces, o recíprocamente, un enlace debe ser menor o cuando mucho igual al tamaño de cualquiera de los dos sitios que conecta.*

### 1.3.3 Leyes de autoconsistencia

Dos leyes garantizan que se cumpla el Principio de Construcción a través de una red porosa:

La primera de estas leyes actúa de manera global sobre la red e impone una restricción sobre las distribuciones de sitios y de enlaces. Establece que se debe tener un número suficiente de enlaces de tamaños adecuados que puedan ser conectados a todos los sitios, pertenecientes a una distribución de tamaños dada. Matemáticamente se expresa del modo siguiente:

$$\text{Primera ley:} \quad B(R) \geq S(R) \quad \text{para cualquier } R \quad (3)$$

Gráficamente, esta primera ley implica que la distribución de enlaces siempre se debe de ubicar a la izquierda o cuando mucho totalmente traslapada con la distribución de sitios.

Aun cuando se tenga una colección apropiada de sitios y de enlaces, tanto en tamaño como en número, el Principio de Construcción puede ser violado si se mantiene un traslape ( $\Omega$ ) entre las distribuciones de ambos elementos, puesto que si se observara esta situación se tendría cierto número de sitios con tamaño menor al de ciertos enlaces, los cuales pudieran ser conectados entre sí.

De esta forma, surge una correlación entre tamaños de elementos, que implica que los eventos de encontrar un tamaño  $R_S$ , para un sitio conectado a un enlace de tamaño  $R_B$ , no son independientes. Así, la densidad de probabilidad de ocurrencia conjunta de los eventos anteriores es:

$$F(R_S \cap R_B) = F_S(R_S)F_B(R_B)\phi(R_S, R_B) \quad (4)$$

donde se introduce la función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$ . Si  $\phi(R_S, R_B) = 1$ , para toda  $R_S$  y toda  $R_B$ , los eventos anteriores serían independientes, y entonces la red se construiría completamente al

azar; pero si  $\phi(R_S, R_B) \neq 1$  los eventos se encontrarían correlacionados. La presencia de una correlación conduce a la formulación de una segunda ley, que matemáticamente se expresa como:

$$\text{Segunda Ley:} \quad \phi(R_S, R_B) = 0 \quad \text{para cualquier } R_S < R_B \quad (5)$$

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

$$\int_0^{R_S} \phi(R_S, R_B) F_B(R_B) dR_B = \int_{R_B}^{\infty} \phi(R_S, R_B) F_S(R_S) dR_S = 1 \quad (6)$$

la cual expresa la certeza de hallar: (i) para un sitio dado de tamaño  $R_S$ , un enlace de tamaño  $R_S$  o menor (lado izquierdo de la igualdad) y (ii) para un enlace dado de tamaño  $R_B$ , un sitio de tamaño  $R_B$  o mayor (lado derecho de la igualdad).

#### 1.3.4 Deducción de la función de correlación $\phi(R_S, R_B)$

Considérese la construcción de una red regular con conectividad  $C$ . Si se tiene un número dado de sitios podría construirse una red, con el máximo de aleatoriedad posible, en concordancia con el PC, si se asignan  $C/2$  enlaces a cada sitio de la distribución siguiendo el siguiente procedimiento [21]:

A partir de  $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$  se considera primero el conjunto de sitios que corresponden al menor tamaño de la distribución, y se les asignan a estas cavidades de tamaño particular, un conjunto equivalente en proporción de  $C/2$  enlaces por sitio. Estos enlaces pueden adoptar un tamaño al azar, aunque restringido por el PC y de acuerdo a la proporción disponible de ellos. Si la primera ley se ha obedecido, el procedimiento anterior siempre será posible, porque en todo momento existirá una provisión suficientemente grande de enlaces de tamaños más pequeños a los

de los sitios a los que se están conectando. El procedimiento continúa de tal forma que se van asignando enlaces a sitios de tamaño cada vez mayor. Cuando todos los sitios se hallen conectados entre sí no deberá quedar ningún enlace sin utilizar.

Un estadio intermedio de tal proceso de conexión se representa en la figura 5. Los enlaces gastados (área  $a'$ ) ya han sido asignados a los sitios más pequeños (área  $a$ ). Ciertos enlaces de tamaño menor a  $R_S$  (área  $b'$ ), escogidos totalmente al azar entre la fracción disponible (área  $c'$ ), se asignan a los sitios de tamaño entre  $R_S$  y  $R_S+dR_S$  (área  $b$ ). Como las curvas de distribución de tamaños de elementos están normalizadas, se obtienen las siguientes relaciones:

$$a = a' = S(R_S) \quad (7)$$

$$b = b' = F_S(R_S)dR_S = dS(R_S) \quad (8)$$

$$c = 1 - B(R_S) \quad (9)$$

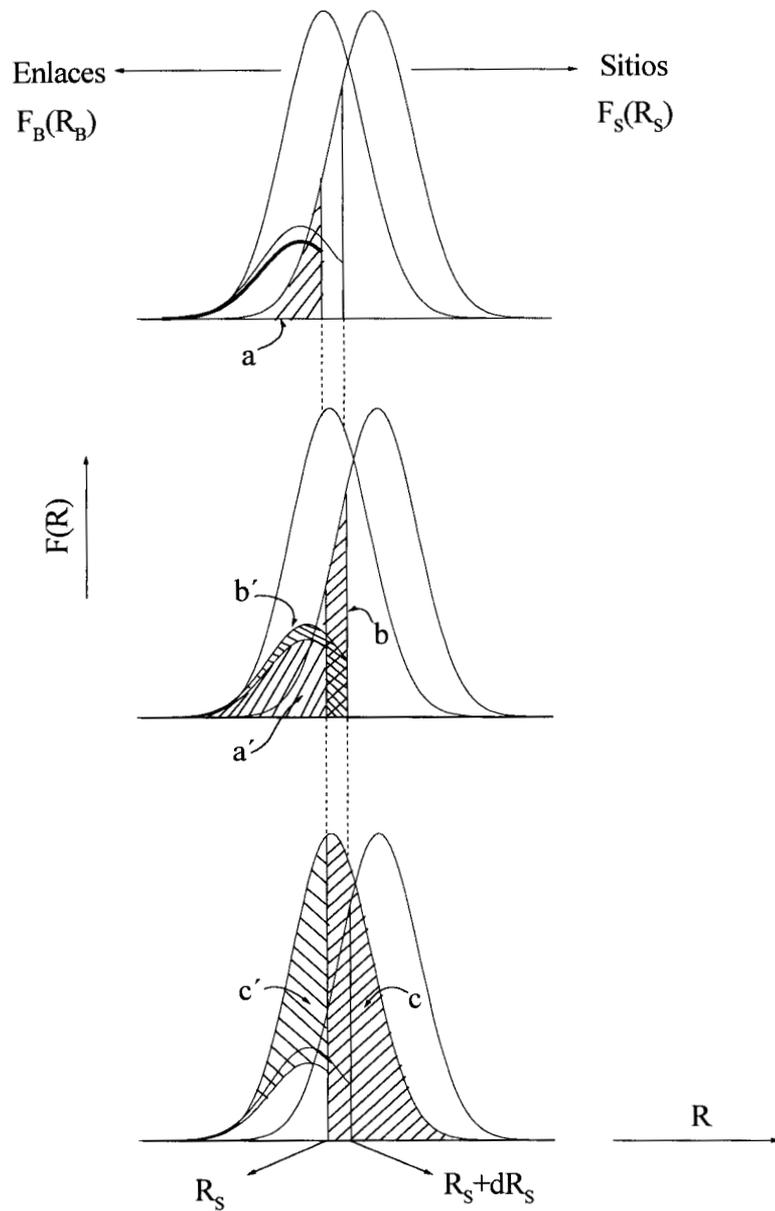
$$c' = B(R_S) - S(R_S) \quad (10)$$

La densidad de probabilidad condicional  $\rho(R_B/R_S)$ , de encontrar para un sitio de tamaño preestablecido  $R_S$ , uno de sus enlaces con tamaño  $R_B$ , es de acuerdo con la ecuación (4):

$$\rho(R_B/R_S) = F(R_S \cap R_B)/F_S(R_S) = F_B(R_B) \phi(R_S, R_B) \quad (11)$$

Los enlaces de un tamaño dado  $R_B$  se están gastando progresivamente (i.e., conectando a los sitios) a medida que sitios cada vez más grandes (a partir de aquellos de tamaño  $R_B$ ) los están requiriendo. La “función de gasto de enlaces”  $f(R_B, R_S)$ , para los enlaces de tamaño  $R_B$ , que han servido para conectar sitios de tamaño entre  $R_B$  y  $R_S$ , crece diferencialmente a lo largo del proceso de conexión de acuerdo a dos factores: (i) la fracción diferencial de nuevos sitios que se están conectando en ese momento  $dS(R_S)$ , y (ii) el requisito de que esos sitios posean cada uno en realidad  $C/2$  enlaces de tamaño  $R_B$ :

$$df(R_B, R_S) = \rho(R_B/R_S) dS(R_S) = F_B(R_B) \phi(R_S, R_B) dS(R_S) \quad (12)$$



**Figura 5.** Proceso de asignación para dos distribuciones de tamaño arbitrarias de sitios y enlaces,  $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$ .

La fracción de enlaces gastados, de todos los tamaños permitidos, para sitios de tamaño entre  $R_S$  y  $R_S + dR_S$ , es una cantidad diferencial, que se obtiene realizando una integración de  $df$  a lo largo de  $R_B$ , manteniendo  $R_S$  constante. Por lo tanto:

$$b' = \int_0^{R_S} df dR_B = dS(R_S) \quad (13)$$

Durante un intervalo diferencial, en el proceso de conexión, la relación entre la fracción de enlaces  $df$  (todos teniendo un tamaño específico  $R_B$ ), y la fracción total de enlaces  $dS(R_S)$  (que corresponde a todos los tamaños permitidos de enlace, ambas cantidades asignadas a sitios de tamaño  $R_S$ ), es idéntica a la relación entre la fracción de enlaces disponibles de tamaño  $R_B$  (aquellos que todavía no han sido asignados a ningún sitio),  $F_B(R_B) - f(R_B, R_S)$ , y la fracción de todos los enlaces disponibles de todos los tamaños permitidos (menores o iguales a  $R_S$ ),  $B(R_S) - S(R_S)$ :

$$\frac{df(R_B, R_S)}{dS(R_S)} = \frac{F_B(R_B) - f(R_B, R_S)}{B(R_S) - S(R_S)} \quad (14)$$

Esta expresión puede ser integrada sobre  $R_S$ , manteniendo  $R_B$  constante, entre los límites  $R_S = R_B, f=0$  y  $R_S \geq R_B, 0 < f < F_B(R_B)$ . Como  $R_B$  se ha mantenido constante,  $F_B(R_B)$  también está fijo. La integración conduce a la siguiente expresión para  $f(R_B, R_S)$ :

$$f(R_B, R_S) = F_B(R_B) \left[ 1 - \exp \left( \int_{S(R_B)}^{S(R_S)} \frac{dS}{B-S} \right) \right] \quad (15)$$

A partir de las ecuaciones (15), (14) y (12) se encuentra, finalmente, la siguiente expresión para  $\phi(R_S, R_B)$ :

$$\phi(R_S, R_B) = \frac{\exp\left(-\int_{S(R_B)}^{S(R_S)} \frac{dS}{B-S}\right)}{B(R_S) - S(R_S)} = \frac{\exp\left(-\int_{B(R_B)}^{B(R_S)} \frac{dB}{B-S}\right)}{B(R_B) - S(R_B)} \quad (16)$$

Esta expresión para  $\phi(R_S, R_B)$  satisface la ecuación 6. Algunas propiedades interesantes de  $\phi(R_S, R_B)$  son las siguientes [29]:

$$\phi(R_S, R'_B) = \phi(R_S, R_B) \exp\left[-\int_{S(R'_B)}^{S(R_B)} \frac{dS}{B-S}\right] \quad (17)$$

donde  $R_B$  y  $R'_B$  pueden tomar cualquier valor de la distribución de tamaños de enlaces.

$$\phi(R'_S, R_B) = \phi(R_S, R_B) \exp\left[-\int_{B(R_S)}^{B(R'_S)} \frac{dB}{B-S}\right] \quad (18)$$

donde  $R_S$  y  $R'_S$  pueden tomar cualquier valor de la distribución de tamaños de sitios.

### 1.3.5 Correlación y segregación de tamaños de elementos

La función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$  es una de las aportaciones más importantes de la descripción dual. Esta variable se encuentra directamente relacionada al traslape que pudiese existir entre las distribuciones de sitios y enlaces. Cuando se tiene una red porosa cuyas distribuciones de sitios y enlaces mantienen un traslape cero, no existe correlación alguna entre tamaños de elementos, es decir, la manera como se distribuyen los distintos tamaños de elementos a través del espacio es totalmente aleatoria. Por el contrario, cuando aparece un traslape entre las distribuciones, se hace evidente una correlación entre tamaños de elementos, por medio de la cual

los tamaños de los distintos elementos de la red porosa ejercen influencia sobre el tamaño de sus elementos vecinos, a fin de cumplir con el PC. De este modo, se tiene un efecto de segregación mediante el cual se forman zonas compuestas por elementos de tamaño similar, es decir, coexisten regiones en donde se agrupan sitios y enlaces de tamaño pequeño, junto con otras compuestas por elementos de tamaño intermedio y aún otras formadas por elementos de tamaño grande. Dicho efecto de segregación aumenta con el valor del traslape existente entre las distribuciones de sitios y enlaces, siendo débil para traslapes bajos y fuerte para traslapes elevados, alcanzando su valor máximo cuando el valor del traslape es igual a uno.

La correlación entre tamaños de elementos es uno de los factores claves para explicar el comportamiento de ciertos procesos, como lo es la percolación de un fluido en un medio poroso. Así, se tiene que el grado de correlación existente entre tamaño de poros ejerce una influencia decisiva sobre el umbral de percolación. De este modo, procesos como la imbibición y el drenaje, o experimentos como la porosimetría de mercurio, pueden ser mejor comprendidos si se estudia correctamente este efecto [58-62].

Por medio de la función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$  es posible formular ecuaciones básicas de probabilidad. Así, se tiene que la probabilidad condicional de que dado un tamaño de enlace  $R_B$ , uno de sus sitios tenga un tamaño entre  $R_S$  y  $R_S + dR_S$ , es:

$$P(R_S/R_B) = F_S(R_S) \phi(R_S, R_B) dR_S \quad (19)$$

A su vez, la Probabilidad condicional de que, dado un sitio de tamaño  $R_S$ , uno de sus enlaces posea un tamaño entre  $R_B$  y  $R_B + dR_B$  es la siguiente:

$$P(R_B/R_S) = F_B(R_B) \phi(R_S, R_B) dR_B \quad (20)$$

Asimismo, se pueden derivar expresiones más complejas. Como por ejemplo, la probabilidad conjunta de tener un sitio de tamaño entre  $R_S$  y  $R_S + dR_S$ , con uno de sus enlaces con tamaño entre  $R_{B1}$  y  $R_{B1} + dR_{B1}$  y otro con tamaño entre  $R_{B2}$  y  $R_{B2} + dR_{B2}$ , sería:

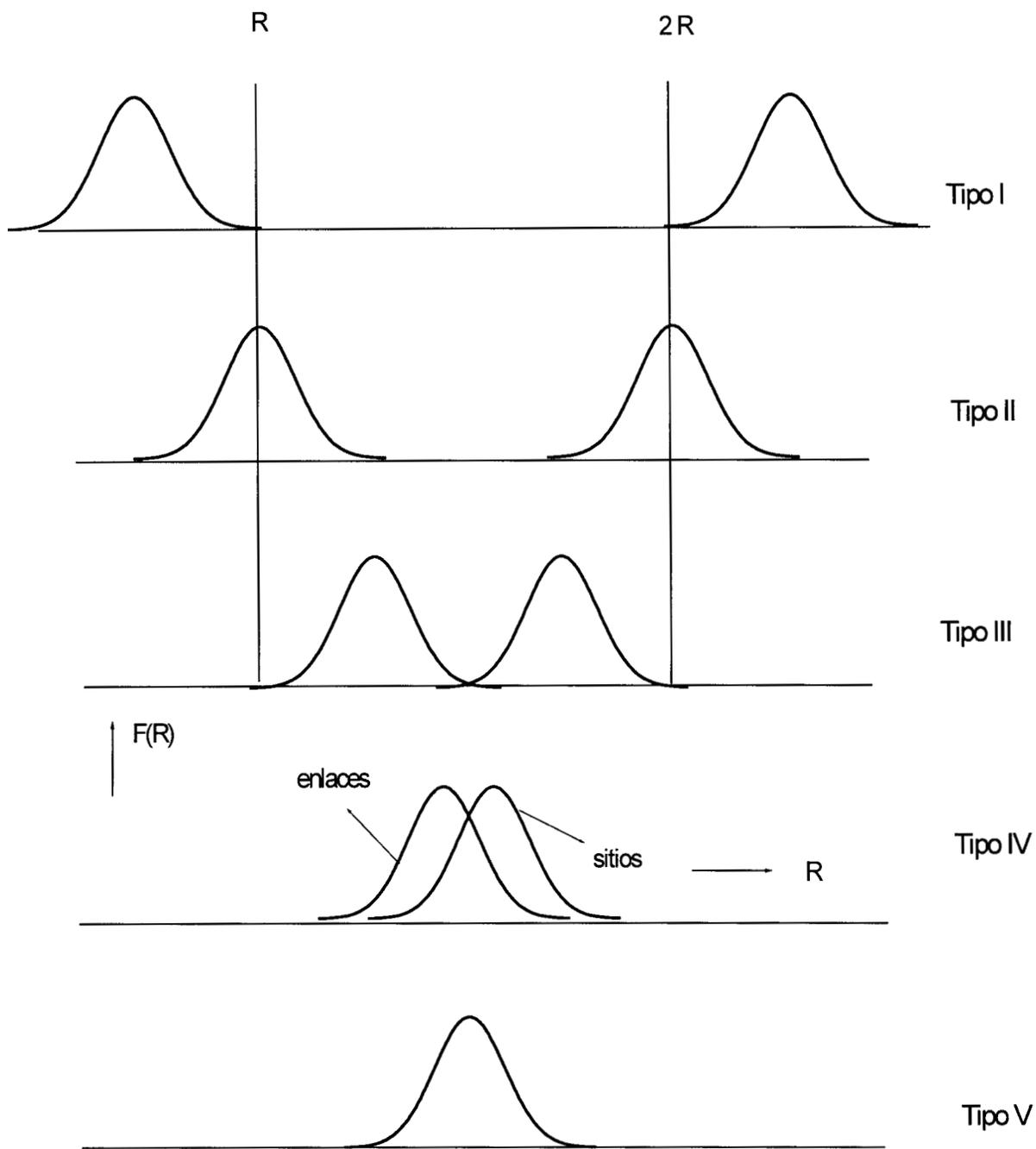
$$P(R_S \cap R_{B1} \cap R_{B2}) = F_S(R_S) F_B(R_{B1}) \phi(R_S, R_{B1}) F_B(R_{B2}) \phi(R_S, R_{B2}) dR_S dR_{B1} dR_{B2} \quad (21)$$

o también, la probabilidad conjunta de tener un sitio de tamaño entre  $R_{S1}$  y  $R_{S1} + dR_{S1}$  conectado a otro de tamaño entre  $R_{S2}$  y  $R_{S2} + dR_{S2}$  a través de un enlace de tamaño entre  $R_B$  y  $R_B + dR_B$ :

$$P(R_{S1} \cap R_B \cap R_{S2}) = F_S(R_{S1}) F_B(R_B) \phi(R_{S1}, R_B) F_S(R_{S2}) \phi(R_{S2}, R_B) dR_{S1} dR_{S2} dR_B \quad (22)$$

### 1.3.6 Clasificación de estructuras porosas de acuerdo a la descripción dual

A partir del traslape existente entre las distribuciones de tamaños de sitios y enlaces, y con base en las características capilares de éstos dos últimos elementos, se pueden establecer cinco tipos distintos de estructuras porosas [23]. En los tres primeros tipos de estructuras el valor del traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces, vale cero. En el primer tipo, el tamaño del sitio más chico de la distribución de sitios es por lo menos dos veces mayor que el enlace más grande de la distribución de enlaces (ver figura 6). El segundo tipo corresponde a la situación más frecuente de traslape cero (situación intermedia entre los tipos I y III, ver figura 6). En el tercer tipo, el tamaño del sitio más grande de la distribución de sitios es mayor que el doble del tamaño del enlace más pequeño de la distribución de enlaces (ver figura 6). En el cuarto tipo (que es el caso más común en la naturaleza) se tiene un traslape intermedio entre las distribuciones de sitios y enlaces (ver figura 6). Finalmente, en el quinto tipo se tiene un traslape casi completo entre las distribuciones de sitios y enlaces (ver figura 6).



**Figura 6.** Clasificación de estructuras porosas de acuerdo a la descripción dual.

## C A P I T U L O 2

### S I M U L A C I O N D E R E D E S P O R O S A S

Los métodos de simulación por Monte Carlo mediante el uso de computadoras han constituido en los últimos años una herramienta fundamental para entender y predecir las propiedades y características de diversos fenómenos físicos. Su aplicación se extiende en campos tan diversos como lo son la Biología, la Física, la Ingeniería, Matemáticas, Química, etc. Asimismo, la simulación por Monte Carlo ha ayudado a complementar los estudios experimentales y teóricos sobre fenómenos fisicoquímicos, cuyas propiedades dinámicas o de equilibrio son difíciles de entender y predecir por medios puramente analíticos, o difíciles de constatar de manera experimental [63]. Este tipo de métodos persigue una descripción probabilística mediante la adopción de un modelo físico que simule el sistema sobre el cual los fenómenos estudiados toman lugar. La herramienta básica de estos métodos se encuentra en los generadores de números aleatorios, de ahí el nombre de Monte Carlo.

Los medios porosos no han escapado a la simulación por Monte Carlo, donde uno de los aspectos claves es la descripción de la estructura de este tipo de materiales. Los métodos más simples de simulación de redes porosas, formadas por sitios y enlaces, incorporan el carácter desordenado de estas estructuras utilizando un generador aleatorio de tamaños de poro, basado en distribuciones de sitios y enlaces con *traslape cero*. De esta forma, se asignan independientemente y en forma aleatoria tamaños tanto a los sitios como a los enlaces, generándose una red con distribución espacial de tamaños de poros totalmente aleatoria.

Sin embargo, el proceso de simulación se complica cuando se consideran *redes correlacionadas* (cuando se tiene un traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces). Algunos autores han abordado este problema usando métodos muy ingeniosos. Por ejemplo, Tsakiroglou y Payatakes [59] idearon un método para generar redes con correlaciones entre primeros elementos vecinos, asignando aleatoriamente tamaños a los sitios de una red cúbica y escogiendo tamaños a los enlaces dependiendo del tamaño de los sitios que comunican. Burganos y Payatakes [64]

diseñaron un método para construir redes con un grado de correlación elevado, asignando aleatoriamente tamaños a una fracción de sitios, a los que denominan semillas, los cuales influyen sobre el tamaño de sus sitios vecinos al restringir sus tamaños a una pequeña área de la distribución de sitios, definida por el tamaño del sitio semilla. No obstante, esos métodos y otros parecidos [7, 57], establecen una correlación de tipo empírica o determinista, y sus métodos de construcción de redes no son lo suficientemente versátiles para permitir cualquier tipo de correlación.

Para simular una red porosa, que tenga consistencia con la descripción dual, es necesario utilizar un Método de Monte Carlo que genere una estructura porosa compatible con el Principio de Construcción y cuyo proceso de conexión de elementos sea compatible con la Primera y Segunda Ley de la teoría dual. De esta forma, sólo se generarían redes porosas cuyas distribuciones de tamaños de sitios y de enlaces sean compatibles con la Primera Ley y cuya distribución espacial de éstos dos elementos obedezca la función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$ . El objetivo sería alcanzar un máximo de aleatoriedad permitido por el PC para los tamaños de los elementos en la red porosa.

Dentro de los métodos de simulación de redes porosas, generados a partir de la descripción dual, destacan por su eficiencia dos de ellos, el Método Autoconsistente Mejorado (Método ISC) y el Método de Monte Carlo Puro. A continuación se describen cada uno de estos dos Métodos.

## **2.1 Método Autoconsistente Mejorado [36]**

Este Método es de naturaleza determinista, ya que los distintos tamaños de los elementos de la red se generan de manera sucesiva y dependiendo del tamaño del elemento que le antecede en el proceso de generación. El método tiene su origen en el Método Autoconsistente [22, 35], y surgió con la necesidad de reconocer la forma intrincada en como se conectan los sitios y los enlaces entre sí para formar una red porosa. Dos eventos básicos determinan el proceso de generación de tamaños de elementos: la generación de un tamaño de enlace a partir de un tamaño

predeterminado de sitio y la generación de un tamaño de sitio a partir de un tamaño predeterminado de enlace.

### 2.1.1 Generación aleatoria de tamaños de enlaces a partir de un tamaño predeterminado de sitio

Supóngase que se tiene una distribución de sitios y una distribución de enlaces que cumplen con la primera ley proveniente del PC y las cuales mantienen un traslape  $\Omega$  entre sí. Definamos a  $b_1$  y  $b_2$  como los tamaños del enlace más pequeño y más grande de la de distribución de enlaces, respectivamente, y a  $s_1$  y  $s_2$  como los tamaños del sitio más pequeño y más grande de la distribución de sitios, respectivamente (ver figura 7). Si se escoge un tamaño de sitio  $R_S$ , a partir de la distribución correspondiente, la probabilidad de que le sea asignado un enlace cuyo tamaño cumpla con el Principio de Construcción, es decir con un tamaño dentro de los límites  $b_1$  y  $R_S$ , es de acuerdo a la ecuación (6):

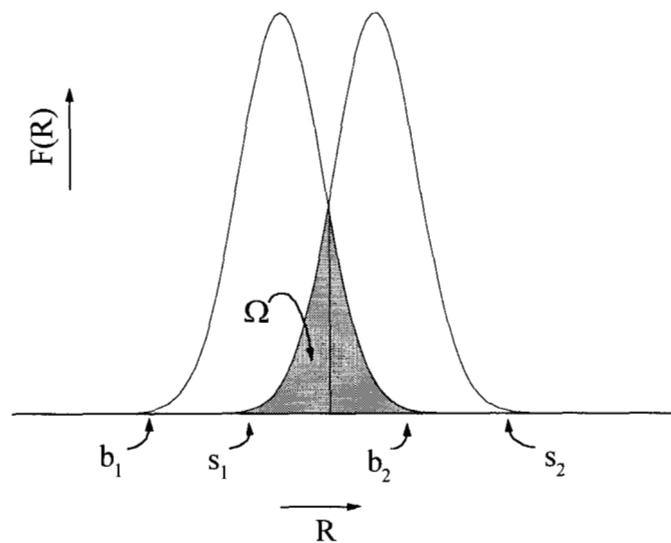
$$\int_{b_1}^{R_S} \phi(R_S, R_B) F_B(R_B) dR_B = 1 \quad (23)$$

Lo que significa que dado cualquier tamaño de sitio existe la total certeza de encontrar un tamaño de enlace apropiado, para ese tamaño de sitio, siempre y cuando se escoja ese tamaño de enlace dentro de todos los tamaños compatibles con el PC.

Si cambiamos el valor del límite inferior de la ecuación anterior por la variable  $R_B$ , quedaría, entonces:

$$\int_{R_B}^{R_S} \phi(R_S, R_B) F_B(R_B) dR_B = \text{RANDOM} \quad (24)$$

donde  $R_B$  es un tamaño de enlace cuyo valor puede variar entre los límites  $b_1$  y  $R_S$  y  $RANDOM$  es una función cuyo valor puede encontrarse entre los límites 0 y 1. Cuando  $R_B$  es igual a  $R_S$ , la función anterior vale cero ( $RANDOM$  igual a cero); si  $R_B$  es igual a  $b_1$ , la función vale 1 ( $RANDOM$  igual a uno).



**Figura 7.** Representación de las variables  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $s_1$  y  $s_2$  para dos distribuciones arbitrarias de sitios y enlaces con un valor de traslape  $\Omega$ .

Aplicando las propiedades anteriores de la ecuación (24), puede desarrollarse un Método de Monte Carlo para escoger, con el máximo de aleatoriedad permitido por el PC, un tamaño de enlace  $R_B$ , a partir de un tamaño predeterminado de sitio  $R_S$ , siguiendo la siguiente metodología:

- a).-Se escoge aleatoriamente un número sobre una base normalizada ( $RANDOM$ ).
- b).-A continuación, por medio de la ecuación (24), se calcula el valor correspondiente de  $R_B$ , asociado al valor del  $RANDOM$  y al valor de  $R_S$ .

La metodología anterior puede aplicarse para distribuciones de sitios y enlaces que cumplan con la Primera Ley del principio de Construcción. Cuando se tiene el caso de distribuciones con  $\Omega=0$  la ecuación (24) queda reducida a:

$$\int_{R_B}^{R_S} F_B(R_B) dR_B = \text{RANDOM} \quad (25)$$

### 2.1.2 Generación aleatoria de tamaños de sitios a partir de un tamaño predeterminado de enlace

A partir de un tamaño dado de enlace, la probabilidad de que le sea asignado un sitio, con un tamaño permitido por el PC, es:

$$\int_{R_B}^{s_2} F_S(R_S) \phi(R_S, R_B) dR_S = 1 \quad (26)$$

Si el limite superior de la integral anterior es sustituido por una variable  $R_S$ , cuyo valor puede encontrarse entre los limites  $R_B$  y  $s_2$ , la ecuación anterior queda:

$$\int_{R_B}^{R_S} F_S(R_S) \phi(R_S, R_B) dR_S = \text{RANDOM} \quad (27)$$

Dadas las características de la ecuación (26), la función anterior vale cero cuando se tiene  $R_S$  igual a  $R_B$  (RANDOM igual a cero) y vale uno cuando  $R_S$  es igual a  $s_2$  (RANDOM igual a uno). A partir de las características de la ecuación (27), puede desarrollarse el siguiente Método de Monte Carlo para generar tamaños de sitios, con el máximo de aleatoriedad permitido por el PC, a partir de un valor predeterminado de tamaño de enlace,  $R_B$ :

Se escoge aleatoriamente un número sobre una base normalizada (RANDOM). A continuación se calcula el valor correspondiente de  $R_s$ , asociado al valor de RANDOM y al tamaño  $R_B$ , por medio de la ecuación (27).

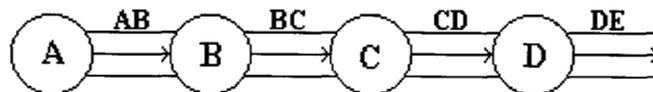
Cuando se tiene el caso de distribuciones de sitios y enlaces con  $\Omega=0$ , los cálculos para el procedimiento anterior se simplifican, puesto que la ecuación 27 queda reducida a:

$$\int_{R_B}^{R_s} F_s(R_s) dR_s = \text{RANDOM} \quad (28)$$

### 2.1.3 Conexión de tamaños de elementos

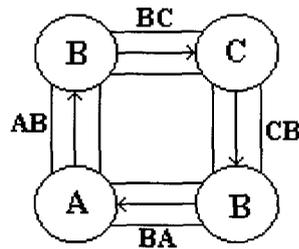
El proceso de interconexión de elementos (sitios y enlaces) es uno de los aspectos más originales del Método ISC.

Considérese un proceso de generación de tamaños de sitios y enlaces de tipo Markoviano (proceso en el que el tamaño de cada elemento se restringe únicamente por el de los elementos que lo preceden), en el que se sigue la secuencia señalada en la figura 8 por medio de las ecuaciones (24) y (27).



**Figura 8.** Secuencia inconsistente de generación de tamaños de sitios y enlaces.

La influencia que mantiene el tamaño del sitio A, sobre el tamaño de los demás elementos, disminuye a medida que aumenta la distancia entre estos. Así, la correlación que mantiene el tamaño del sitio A con el del enlace DE es menor a la que guarda ese mismo sitio con el enlace AB. Sin embargo, si conectáramos el sitio A con el enlace DE, dado el caso de que los tamaños de ambos elementos cumplan con el PC, la correlación que mantendrían no sería la adecuada, puesto que sus tamaños deben de observar una correlación de primeros vecinos. Asimismo, todos los demás elementos se encontrarían en un estado erróneo de correlación. Una manera de conectar ocho elementos entre sí (4 sitios y 4 enlaces), de manera cíclica, manteniendo un estado de interacción apropiado entre sus tamaños, sería siguiendo una ruta de conexión como la mostrada en la figura 9. De esta manera, sólo serían permitidas aquellas secuencias donde el tamaño del enlace BA genere al del sitio A, el cual previamente ya ha sido fijado.



**Figura 9.** Secuencia consistente de generación de tamaños de sitios y enlaces.

Si se construye una red porosa, utilizando una secuencia de generación de tamaños de tipo Markoviana, es preciso que los distintos tamaños de los elementos mantengan un estado de interacción apropiado al momento que se conectan unos con otros. Cuando se desarrolló el Método Autoconsistente [22] el estado de correlación que se alcanzaba entre los distintos tamaños de los elementos no era el correcto. Esa situación se hacía evidente en el calculo de los momentos estadísticos de las distribuciones de sitios y de enlaces generadas durante el proceso de construcción de la red. Dichas cantidades, cuando el valor del traslape era elevado, divergían

considerablemente con respecto a los valores esperados [36], lo cual derivaba de la utilización de una secuencia de conexión de elementos inapropiada (recuérdese el ejemplo de la figura 8).

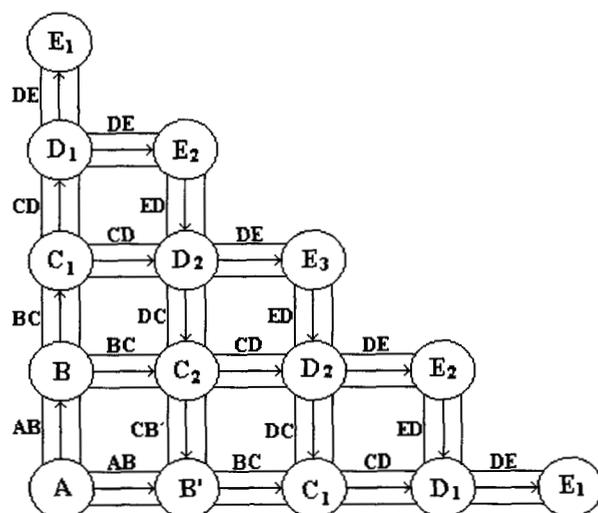
El Método ISC corrige las fallas del Método Autoconsistente incorporando una secuencia de conexión de tamaños de elementos que garantiza que las correlaciones entre los distintos tamaños de elementos se encuentren en concordancia con la situación topológica de cada elemento dentro de la red.

Para construir una red cuadrada regular con  $C=4$  el procedimiento que se sigue es el siguiente:

- 1) Se fija aleatoriamente el tamaño de un sitio
- 2) Con las ecuaciones (24) y (27) se determinan de manera secuencial tamaños de sitios y de enlaces hasta completar una fila con las dimensiones deseadas (observar la figura 10, secuencia  $A \rightarrow B' \dots \rightarrow E_1$ ).
- 3) Se repite un procedimiento similar al del paso 2, sólo que ahora se completa una columna a partir del primer sitio de la primera fila (observar figura 10, secuencia  $A \rightarrow B \dots \rightarrow E_1$ ).
- 4) Los tamaños de los elementos restantes de la red se determinan siguiendo una secuencia de conexión que genere los tamaños de los elementos de la red previamente determinados. Tómese como ejemplo la generación de los tamaños de los enlaces BC, CB y del sitio  $C_2$  de la figura 10. La secuencia de conexión indicada es  $B \rightarrow BC \rightarrow C_2 \rightarrow CB' \rightarrow B'$ , lo cual implica que sólo serán permitidos tamaños para los enlaces BC y CB y para el sitio  $C_2$  que generen aleatoriamente el tamaño del sitio  $B'$ , previamente fijado con anterioridad.

Utilizando una secuencia de generación de tamaños de elementos, como la anteriormente descrita, se establece una correlación de tipo jerárquica dentro de la red porosa, en donde los elementos se correlacionan con mayor fuerza cuanto más cerca se encuentren unos con otros. Cada elemento generado, durante este proceso de construcción, ejerce una influencia de primer orden con sus primeros vecinos, de segundo orden con sus segundos vecinos, de tercer orden con sus terceros vecinos, etc. Por ejemplo, en la figura 10, la correlación existente entre el sitio A y el sitio  $C_2$  es de segundo orden, pues la secuencia de conexión señalada entre los dos anteriores

elementos es:  $A \rightarrow B \rightarrow C_2$ ; asimismo, la correlación existente entre los sitios A y  $D_1$  es de tercer orden, pues la secuencia de construcción señalada es  $A \rightarrow B \rightarrow C_1 \rightarrow D_1$ . Nótese que los sitios  $C_2$  y  $B'$  mantienen una correlación de primer orden, puesto que la secuencia de construcción seguida es:  $A \rightarrow B \rightarrow C_2 \rightarrow B'$ .



**Figura 10.** Secuencia de generación de tamaños de elementos con el Método ISC para una red porosa con  $C=4$  en dos dimensiones.

Si se desea construir una red porosa regular en tres dimensiones se debe de utilizar un procedimiento equivalente al descrito anteriormente. Como es de esperar, los ciclos de conexión de elementos serían más complicados con relación a los empleados en el caso de redes en dos dimensiones, e involucrarían una mayor cantidad de elementos. Hasta la fecha no se han simulado redes porosas en tres dimensiones utilizando el Método ISC. En el presente estudio, debido a los objetivos del trabajo, sólo se simularon redes porosas en dos dimensiones. Con base en lo anterior

no se describirá, en el presente trabajo, un procedimiento para construir redes porosas en tres dimensiones, pero estas pueden construirse de acuerdo a las premisas del Método ISC.

## 2.2 Método de Monte Carlo Puro [37]

Este método considera a una red porosa como un sistema que guarda un estado definido por las interacciones existentes entre los tamaños de los sitios y de los enlaces. La distribución espacial de tamaños de elementos con el máximo de aleatoriedad permitido por el Principio de Construcción corresponde a un estado de equilibrio que es factible de ser alcanzado por medio de transiciones que modifiquen la distribución espacial de tamaños de elementos. Basado en los postulados anteriores, el método propone someter a una red porosa, con tamaños de elementos definidos y con una distribución espacial de tamaños de elementos totalmente arbitraria (con independencia del PC), a una serie de cambios de estado por medio de *transiciones* que modifiquen las distribuciones espaciales de tamaños de sitios y de enlaces, con objeto de llegar finalmente a un estado de equilibrio, en el que la interacción entre los tamaños de elementos sea la más probable de acuerdo a la descripción dual.

### 2.2.1 Formulación de conceptos básicos

Considérese una red porosa cuyas distribuciones de tamaños de elementos sean conocidas. Si dentro de la red porosa no existiesen correlaciones espaciales entre los distintos tamaños de elementos, la distribución espacial de los sitios y de los enlaces sobre la red podría describirse únicamente a través de  $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$ , respectivamente. Sin embargo, si existiesen correlaciones espaciales entre tamaños de elementos, la distribución espacial de los sitios y de los enlaces no podría describirse tomando en cuenta únicamente a  $F_S(R_S)$  y a  $F_B(R_B)$ .

Ahora consideremos una red porosa regular con conectividad  $C$  formada por  $N$  sitios y  $M$  enlaces, ambos elementos con tamaños definidos, los cuales se encuentran distribuidos

espacialmente en forma arbitraria a través de la red. Cada uno de los sitios y de los enlaces de la red se identifican con los sufijos 1, 2,....., N y 1, 2,....., M, respectivamente. Inicialmente, los tamaños de elementos de la red cuentan con un valor definido por las densidades de distribución de tamaños  $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$ , y las cantidades  $B(R_B)$  y  $S(R_S)$  cumplen con la primera ley de la teoría dual. La red porosa se encuentra con una configuración espacial de tamaños de elementos representada por el conjunto  $x_0$  y correspondiente a ese estado inicial:

$$x_0 = \{R_{S1}, R_{S2}, \dots, R_{SN}, R_{B1}, R_{B2}, \dots, R_{BM}\} \quad (29)$$

donde  $R_{Si}$  y  $R_{Bi}$  son los tamaños del sitio  $i$  y del enlace  $i$  de la red, respectivamente.

Aunque el estado inicial del sistema  $x_0$  cuenta con los valores adecuados para  $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$ , la configuración espacial de los sitios y de los enlaces no es la correcta, puesto que la distribución espacial de tamaños de elementos de la red fue impuesta en forma totalmente arbitraria. Para cambiar la configuración espacial de la red porosa hacia una que tenga la configuración correcta, es decir aquella con los valores más probables de correlaciones espaciales entre tamaños de elementos, es necesario cambiar la distribución espacial de los sitios y de los enlaces de la red por medio de una serie de cambios de estado del sistema, que conserven los valores iniciales de  $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$  y que nos lleven del estado inicial  $x_0$  a un estado final de equilibrio  $x_F$ . Es decir, se seguiría una secuencia de cambios de estado en los que la distribución espacial de tamaños de elementos de la red sea modificada, y donde el estado del sistema vaya de un estado inicial  $x_0$ , pasando por una serie de estados intermedios,  $x_1, x_2, \dots$ , etc., hasta llegar finalmente a un estado final de equilibrio  $x_F$ , en el que las correlaciones espaciales de los tamaños de los sitios y de los enlaces sean aquellas con el máximo de aleatoriedad permitido por el PC:

$$x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots \rightarrow x_F \quad (30)$$

Dentro del proceso anterior, cualquier estado “ $x$ ” del sistema cuenta con una densidad de probabilidad de existencia  $P(x)$ . Si se efectuase un cambio de estado, que condujese del estado  $x$

al estado  $x'$ , la probabilidad de transición,  $W(x \rightarrow x')$ , para ese cambio de estado, quedaría expresada del modo siguiente [65]:

$$W(x \rightarrow x') = \min \left\{ 1, \frac{P(x')}{P(x)} \right\} \quad (31)$$

La expresión anterior indica que si el estado  $x'$  cuenta con una densidad de probabilidad de existencia  $P(x')$  mayor a la del estado  $x$ ,  $P(x)$ , la probabilidad de transición,  $W(x \rightarrow x')$ , cuenta con una probabilidad igual a uno. Y cuando la densidad de probabilidad de existencia  $P(x')$  sea menor a  $P(x)$ , la probabilidad de transición  $W(x \rightarrow x')$ , vendrá dada por el cociente  $P(x')/P(x)$ .

De este modo, cualquier cambio entre dos estados, comprendidos entre el estado inicial  $x_0$  y el estado final  $x_F$ , se lleva a cabo con una probabilidad dada por la ecuación (31).

A continuación buscaremos una expresión que describa a la variable  $P(x)$ :

### 2.2.2 Expresión para la densidad de probabilidad $P(x)$

De acuerdo a la Teoría Dual, las correlaciones espaciales entre los tamaños de los elementos de la red se describen introduciendo la función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$ . De esta forma, la densidad de probabilidad de encontrar un sitio de tamaño  $R_S$  unido a un enlace de tamaño  $R_B$ , sería:

$$F(R_S \cap R_B) = F_S(R_S) F_B(R_B) \phi(R_S, R_B) \quad (32)$$

Si asumimos que el estado probabilístico de la red se puede describir en términos de las correlaciones espaciales existentes entre los elementos primeros vecinos, la densidad de probabilidad  $P(x)$ , del estado  $x$ , se escribiría:

**En términos de los sitios:** 
$$P(x) = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^C F(R_{Si} \cap R_{Bk}^i) \quad (33)$$

**En términos de los enlaces:** 
$$P(x) = \prod_{j=1}^M \prod_{k=1}^2 F(R_{Sk}^j \cap R_{Bj}) \quad (34)$$

donde los superíndices “i” y “j” se refieren, respectivamente, al k-ésimo enlace del sitio i y al k-ésimo sitio del enlace j. Otras expresiones equivalentes a las dos anteriores son las siguientes:

**En términos de los sitios:** 
$$P(x) = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^C F_{Si}(R_{Si}) F_{Bk}^i(R_{Bk}^i) \phi(R_{Si}, R_{Bk}^i) \quad (35)$$

**En términos de los enlaces:** 
$$P(x) = \prod_{j=1}^M \prod_{k=1}^2 F_{Sk}^j(R_{Sk}^j) F_{Bj}(R_{Bj}) \phi(R_{Sk}^j, R_{Bj}) \quad (36)$$

Así, la densidad de probabilidad  $P(x)$ , del estado  $x$  del sistema, queda descrita por medio de la función bivariada  $F(R_{Si} \cap R_{Bk}^i)$  o  $F(R_{Sk}^j \cap R_{Bj})$ , según sea el caso.

### 2.2.3 Expresión para la probabilidad de transición $W(x \rightarrow x')$

La manera más simple de cambiar la distribución espacial de tamaños de elementos, en una red porosa, consiste en intercambiar los tamaños de un sitio  $R_{Si}$  y un sitio  $R_{Sj}$ , escogidos aleatoriamente dentro de la red. En consecuencia, el estado inicial  $x$  y el estado final  $x'$  quedarían respectivamente (ver figura 11):

$$x = \{R_{S1}, \dots, R_{Si}, \dots, R_{Sj}, \dots, R_{SN}\} \quad (37)$$

$$x' = \{R_{S1}, \dots, R_{Sj}, \dots, R_{Si}, \dots, R_{SN}\} \quad (38)$$

Otra forma sencilla de cambiar la distribución espacial de tamaños de elementos consiste en intercambiar los tamaños de un enlace  $R_{Bl}$  y un enlace  $R_{Bm}$ , ambos escogidos aleatoriamente dentro de la red. En consecuencia, el estado inicial y final quedarían respectivamente:

$$x = \{R_{B1}, \dots, R_{Bl}, \dots, R_{Bm}, \dots, R_{BM}\} \quad (39)$$

$$x' = \{R_{B1}, \dots, R_{Bm}, \dots, R_{Bl}, \dots, R_{BM}\} \quad (40)$$

Utilizando la ecuación (35) la cantidad  $P(x')/P(x)$  quedaría, para el intercambio de tamaños de los sitios  $i$ -ésimo y  $j$ -ésimo:

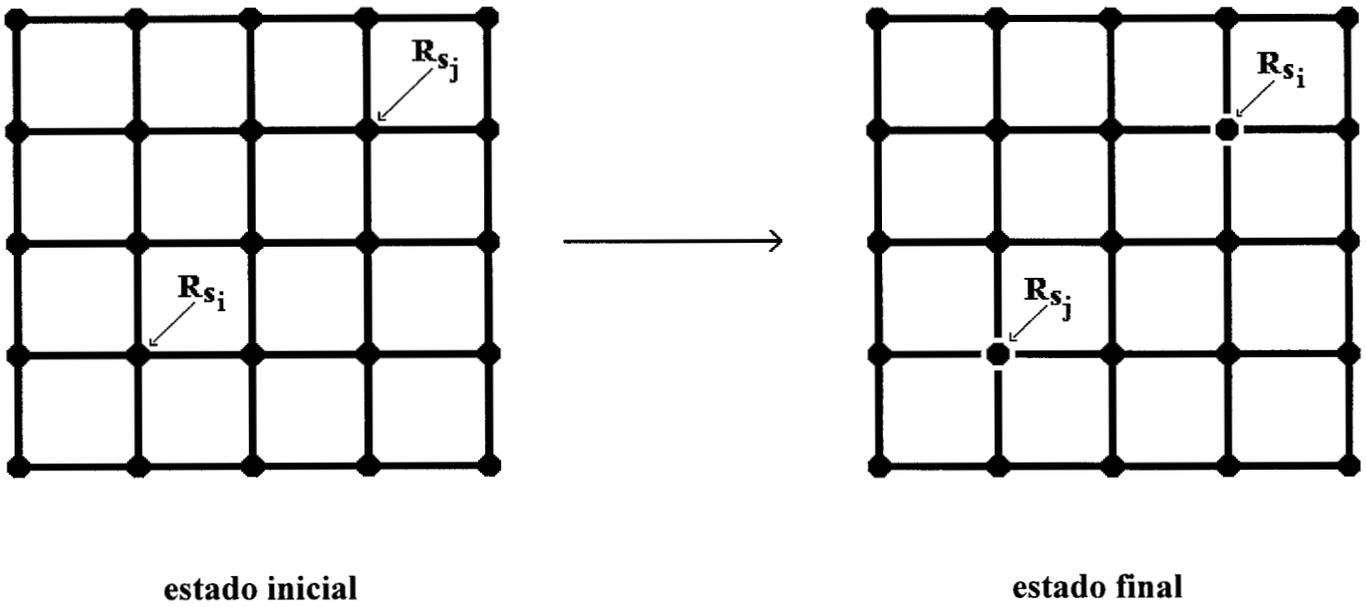
$$\frac{P(x')}{P(x)} = \prod_{k=1}^c \frac{\phi(R_{Sj}, R_{Bk}^i) \phi(R_{Si}, R_{Bk}^j)}{\phi(R_{Si}, R_{Bk}^i) \phi(R_{Sj}, R_{Bk}^j)} \quad (41)$$

y para el intercambio de los enlaces  $l$ -ésimo y  $m$ -ésimo, utilizando la ecuación 36,  $P(x')/P(x)$  quedaría:

$$\frac{P(x')}{P(x)} = \prod_{k=1}^2 \frac{\phi(R_{Sk}^m, R_{Bl}) \phi(R_{Sk}^l, R_{Bm})}{\phi(R_{Sk}^l, R_{Bl}) \phi(R_{Sk}^m, R_{Bm})} \quad (42)$$

Usando las propiedades de la función  $\phi(R_S, R_B)$ , señaladas en las ecuaciones 17 y 18, las ecuaciones (41) y (42) se transforman en la siguiente expresión:

$$\frac{P(x')}{P(x)} = \begin{cases} 1 & \text{si el PC se respeta para el estado } x' \\ 0 & \text{si el PC es violado para el estado } x' \end{cases} \quad (43)$$



**Figura 11.** Cambio de configuración en una red porosa mediante el intercambio de tamaños entre un “sitio i” y un “sitio j”.

por lo tanto,  $W(x \rightarrow x')$  tendrá únicamente dos valores:

$$W(x \rightarrow x') = \begin{cases} 1 & \text{si el PC se respeta para el estado } x' \\ 0 & \text{si el PC es violado para el estado } x' \end{cases} \quad (44)$$

La ecuación anterior se explicará enseguida. Si se intenta efectuar un cambio de estado en la red porosa, intercambiando el tamaño del sitio  $i$ -ésimo con el del sitio  $j$ -ésimo, la transición para ese cambio de estado sólo será válida si y sólo si el tamaño del sitio  $i$ -ésimo es mayor o igual al de cada uno de los enlaces  $R_{B_1}^j, R_{B_2}^j, \dots, R_{B_C}^j$ ; y además, el tamaño del sitio  $j$ -ésimo es mayor o igual al de cualquiera de los enlaces  $R_{B_1}^i, R_{B_2}^i, \dots, R_{B_C}^i$ . Análogamente, si se intenta efectuar un cambio de estado, intercambiando los tamaños de los enlaces  $l$ -ésimo y  $m$ -ésimo, la transición

para el cambio de estado sólo será válida si y sólo si el tamaño del enlace  $m$ -ésimo es menor o igual al de cualquiera de los dos sitios  $R'_{S1}$  y  $R'_{S2}$ ; y además, el tamaño del enlace  $l$ -ésimo es menor o igual al de cualquiera de los sitios  $R^m_{S1}$  y  $R^m_{S2}$ .

Consecuentemente, si se inicia una serie de cambios de estado sobre una red porosa, que conduzcan desde un estado inicial con distribución espacial arbitraria de tamaños de elementos (con independencia del PC), hasta un estado final de equilibrio con valores correctos de correlaciones espaciales entre tamaños de elementos, sólo serán válidas aquellas secuencias en las que los estados intermedios, que conduzcan al estado final de equilibrio, procedan de transiciones en donde la redistribución espacial de tamaños de elementos obedezca en todo momento el Principio de Construcción. Es decir, *sólo serán válidos aquellos cambios de estado que involucren una redistribución espacial de tamaños de sitios y de enlaces de la red porosa, en donde se respete el Principio de Construcción*. Cualquier cambio de estado o perturbación que conduzca a un rearrreglo espacial de tamaños de elementos donde el PC sea violado, posee en consecuencia, una probabilidad de transición igual a cero.

#### **2.2.4 Estado final de equilibrio**

Cuando se haya alcanzado el estado final de equilibrio en una red porosa, para las correlaciones entre tamaños de elementos, cualquier perturbación permitida del sistema no modificará el estado de interacción promedio entre los distintos tamaños de elementos. Lo anterior indica que si se lleva a cabo una serie de transiciones permitidas sobre una red porosa, una vez que se haya alcanzado el estado final de equilibrio, los valores para las correlaciones espaciales entre los distintos tamaños de elementos, evaluada sobre todos los posibles elementos de la red, no cambiarán significativamente, sólo fluctuarán sobre determinados valores promedio. En el estado inicial, los valores posibles para la función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$ , obviamente no eran los esperados de acuerdo a la descripción dual. En el estado final de equilibrio, los valores posibles para la función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$  serán aquellos que predice la descripción dual, y cualquier perturbación permitida sólo conducirá a configuraciones del sistema en los que todos los

valores posibles para  $\phi(R_S, R_B)$  sólo fluctuarán sobre algún valor promedio. Finalmente, el número de configuraciones de la red porosa en el estado final de equilibrio alcanzará un valor máximo.

### **2.2.5 Establecimiento del método**

A partir de las consideraciones anteriores puede establecerse el siguiente procedimiento para simular una red porosa regular a través del Método de Monte Carlo puro:

- 1.- Con base en las densidades de distribución de tamaños  $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$  propuestas, se genera el número requerido para los distintos tamaños de sitios y enlaces necesarios para construir una red porosa de la dimensión deseada (2-D o 3-D).
- 2.- Arbitrariamente (con independencia del PC) se asignan tamaños para todos los sitios y los enlaces de la red porosa.
- 3.- Se somete a la red porosa a una serie de cambios de estado a través de transiciones mediante el intercambio de tamaño entre dos sitios o entre dos enlaces.
- 4.- El sistema alcanzará el estado de equilibrio final cuando los valores posibles para la función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$  coincidan con los esperados de acuerdo a la descripción dual. Será en ese momento cuando las transiciones sobre el sistema terminarán.

## C A P I T U L O 3

# RESULTADOS DEL METODO AUTOCONSISTENTE MEJORADO PARA LA SIMULACION DE REDES POROSAS

Como quedó señalado en la parte introductoria, el presente trabajo se limita al estudio de redes porosas en dos dimensiones. También se afirmó que uno de los objetivos era la construcción de redes porosas de gran tamaño. Para cumplir este último fin se construyeron redes con distintos números de elementos (sitios + enlaces): desde  $3 \times 10^4$  hasta  $3 \times 10^6$  elementos.

Como también se señaló en el capítulo II, el Método Autoconsistente Mejorado, a diferencia del Método de Monte Carlo Puro, genera de manera secuencial los distintos tamaños para los sitios y los enlaces de la red porosa, por lo tanto, la forma como se examina la verosimilitud de las redes porosas construidas por este método difiere con respecto a la del Método de Monte Carlo Puro. A continuación se analiza este punto.

### **3.1 Autoconsistencia, verosimilitud y certificación de redes simuladas por el Método ISC**

Una vez construida una red porosa, utilizando algún Método de Monte Carlo, ésta debe de observar ciertas características que garanticen la calidad del procedimiento de simulación o construcción de la red porosa. En este trabajo se consideran las siguientes características: autoconsistencia, verosimilitud y certificación [36]. La autoconsistencia indica si la red porosa obedece algún principio o regla básica para la asignación de tamaños a los distintos elementos de la red; en este estudio dicha regla básica de asignación de tamaños viene dada por el Principio de Construcción. En particular, la autoconsistencia de la red se introduce en el Método ISC al

considerar un ciclo cerrado de asignación (en este caso de cuatro sitios y cuatro enlaces) en el que el tamaño del sitio de partida (establecido de antemano al escogerlo aleatoriamente de acuerdo a la distribución de partida) es de nuevo alcanzado a través de una secuencia de tipo cíclica (tal y como se explico en la sección 1.3 del capítulo 2)<sup>1</sup>. La verosimilitud se refiere a si la asignación de tamaños de elementos de la red fue desarrollada con el máximo de aleatoriedad posible. En el Método ISC la verosimilitud se pretende cumplida mediante el uso de las ecuaciones (24) y (27) para la asignación aleatoria de sitios y enlaces, respectivamente. Por último, la certificación indica si los distintos tamaños de los elementos de la red porosa se encuentran en correspondencia con ciertos parámetros estadísticos fijados al principio del proceso de construcción de la red porosa, y que garanticen la verosimilitud de las redes. En trabajos anteriores la certificación de las redes porosas construidas por el Método ISC era evaluada analizando únicamente la concordancia entre los momentos estadísticos de las distribuciones de tamaños de sitios y enlaces fijadas en las ecuaciones (24) y (27) ( $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$ , respectivamente) y los de las distribuciones de tamaños generadas en la red porosa. Sin embargo, una certificación de redes con base únicamente en los momentos estadísticos de las distribuciones generadas de elementos resulta insuficiente, puesto que éstas cantidades solamente nos proporcionan una información de tipo global sobre la distribución espacial de los elementos de la red porosa, más no en la forma como se encuentran conectados entre sí los sitios y los enlaces a través del espacio poroso. Una manera de examinar que tan verosímil es la forma como se encuentran interconectados los sitios y los enlaces entre sí es analizando la correlación existente entre tamaños de elementos. De este modo, de acuerdo a la descripción dual, los valores calculados para la función de correlación  $\phi(R_S, R_B)$ , sobre todos los posibles tamaños de elementos involucrados en la red, deberán de coincidir con los que predice esta teoría.

Con base en los argumentos anteriormente expuestos la certificación de las redes porosas, simuladas por el Método ISC, se efectuó examinando tanto los momentos estadísticos de las distribuciones de sitios y enlaces producidas, así como los valores de las funciones de densidad de probabilidad condicional de encontrar un tamaño para un enlace, dado un tamaño para un sitio, y

---

<sup>1</sup> Pueden existir muchos otros ciclos diferentes, con mayor número de elementos involucrados, que también podrían ser utilizados, y por cuya mayor complejidad producirían redes con mayor autoconsistencia, aunque esto incrementaría

de encontrar un tamaño para un sitio, dado un tamaño para un enlace,  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ , respectivamente.

### 3.2 Presentación de resultados

Se utilizaron distribuciones de sitios y enlaces de tipo Gaussiana, tomando en cuenta que muchos materiales porosos presentan este tipo de distribución de tamaños de poro. Se manejaron los siguientes valores de traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces: 0.31, 0.61, 0.84 y 0.92, procurandose de esta manera estudiar redes porosas con valores bajos de traslape (0.31), valores intermedios (0.61) y valores altos (0.84 y 0.92). Para cada uno de los traslapes estudiados se construyeron redes porosas regulares en dos dimensiones con  $C=4$  para los tamaños 100x100 sitios (10,000 sitios + 20,000 enlaces), 500x500 sitios (250,000 sitios + 500,000 enlaces) y 1000x1000 sitios (1,000,000 sitios y 2,000,000 enlaces).

El equipo de computo con que se llevó a cabo el trabajo computacional consistió de una máquina Silicon Graphics Indigo 2, con procesador R8000 de 180 MHz.

En la tabla 3 se presentan los parámetros estadísticos de las 4 distribuciones Gaussianas seleccionadas y los tiempos de computo aproximados para la construcción de las redes porosas. La simulación de redes por el Método ISC es relativamente lenta, en términos del tiempo computacional, debido a la exigencia de que los ciclo cerrados (4 sitios y 4 enlaces) deban cumplir con lo establecido en la sección 1.3 del capítulo 2.

---

significativamente el tiempo de computo para la simulación de las redes.

**Tabla 3.** Tiempos aproximados de computo para la construcción de redes por el Método ISC

Parámetros (unidades arbitrarias)	Tamaño	Tiempo(horas)
$\Omega=0.31$ RMS=500 (tamaño medio de sitios) RMB=400 (tamaño medio de enlaces) $\sigma=50$ (desviación estándar, tanto para sitios como para enlaces)	100x100	0.16
	500x500	4.5
	1000x1000	18
$\Omega=0.61$ RMS=450 (tamaño medio de sitios) RMB=400 (tamaño medio de enlaces) $\sigma=50$ (desviación estándar, tanto para sitios como para enlaces)	100x100	0.16
	500x500	4.5
	1000x1000	18.5
$\Omega=0.84$ RMS=500 (tamaño medio de sitios) RMB=400 (tamaño medio de enlaces) $\sigma=50$ (desviación estándar, tanto para sitios como para enlaces)	100x100	0.16
	500x500	4
	1000x1000	16
$\Omega=0.92$ RMS=500 (tamaño medio de sitios) RMB=400 (tamaño medio de enlaces) $\sigma=50$ (desviación estándar, tanto para sitios como para enlaces)	100x100	0.116
	500x500	2.5
	1000x1000	13.5

### 3.2.1 Distribuciones duales de tamaños

Como se había señalado anteriormente, las distribuciones duales (sitios y enlaces) de tamaños, generadas durante el proceso de construcción de las redes, resultan cantidades de sumo interés, ya que nos proporcionan información de tipo global sobre la forma como se encuentran distribuidos los tamaños de los distintos elementos a través del espacio poroso. En las figuras 12 a 14 se muestran los gráficos para las distribuciones de sitios y enlaces generadas durante el proceso de construcción de las redes porosas (en líneas llenas), así como los de las distribuciones iniciales fijadas (en líneas punteadas) al inicio del proceso de simulación ( $F_S(R_S)$  y  $F_B(R_B)$  en las ecuaciones (24) y (27), respectivamente).

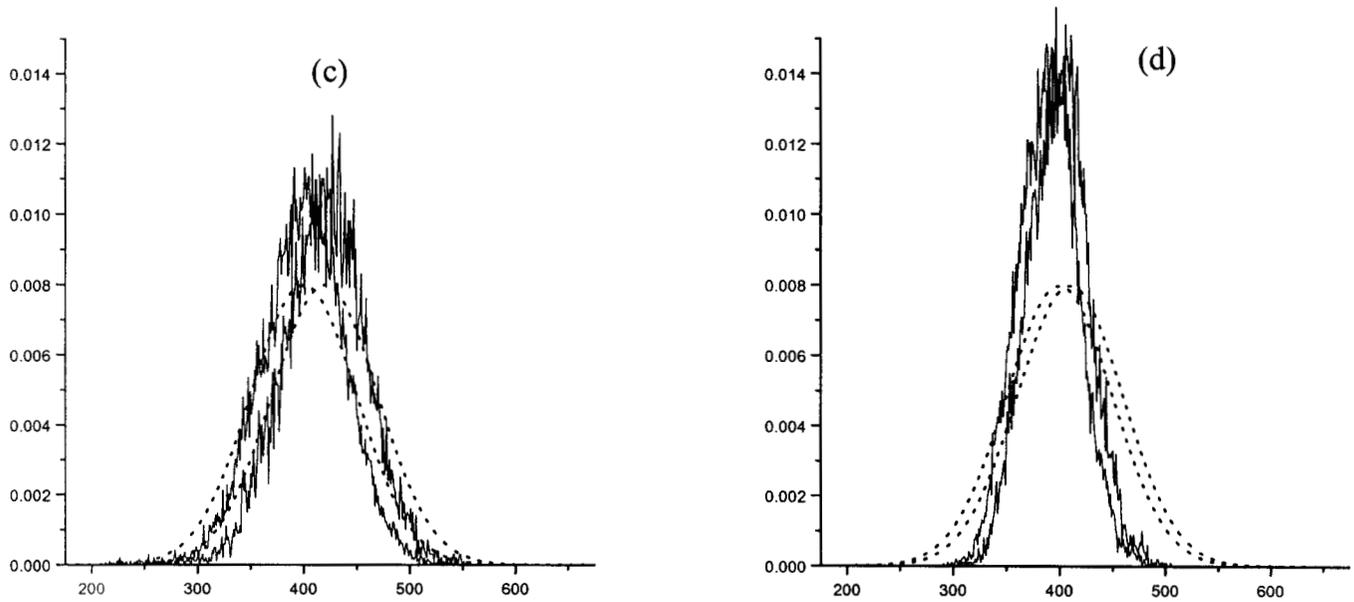
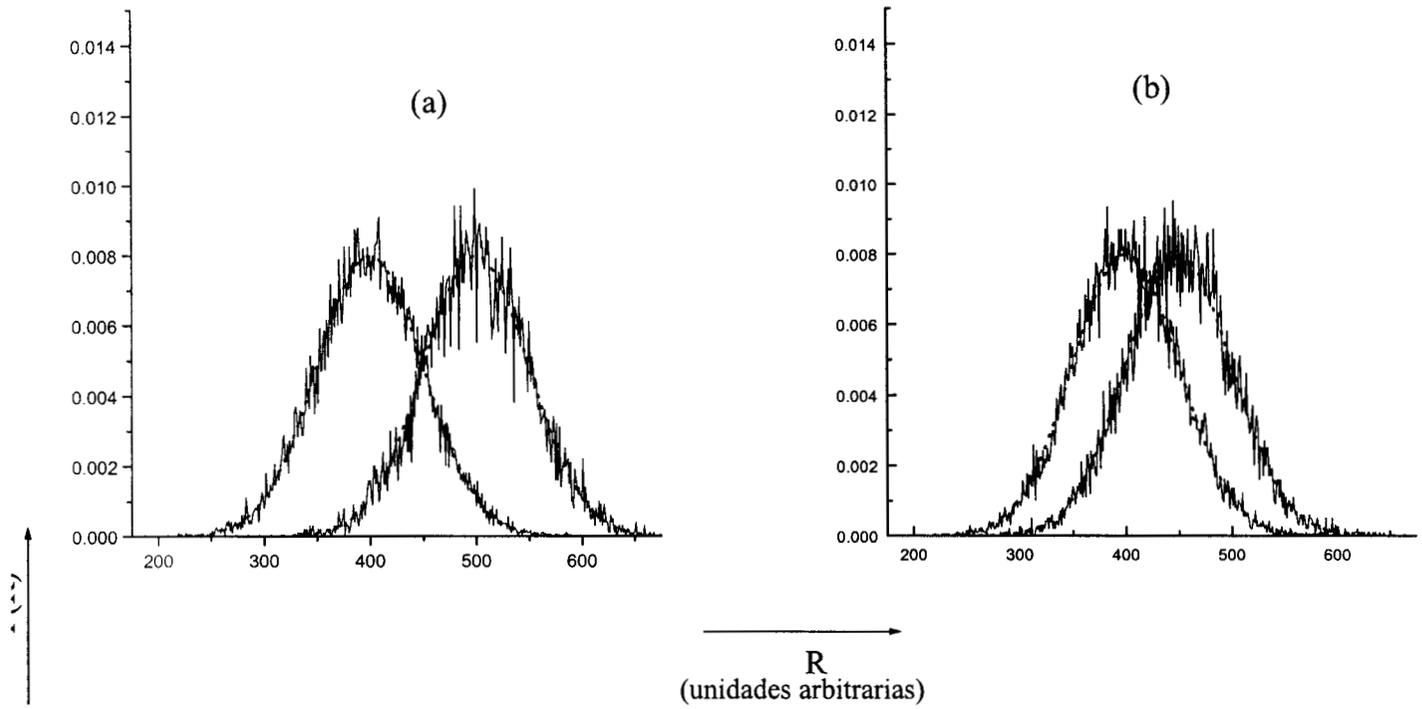
También, se muestran en las tablas 4, 5 y 6 los valores de los momentos estadísticos para estas distribuciones de sitios y enlaces generadas, así como los respectivos valores analíticos de partida.

### 3.2.2 Densidades de probabilidad condicional

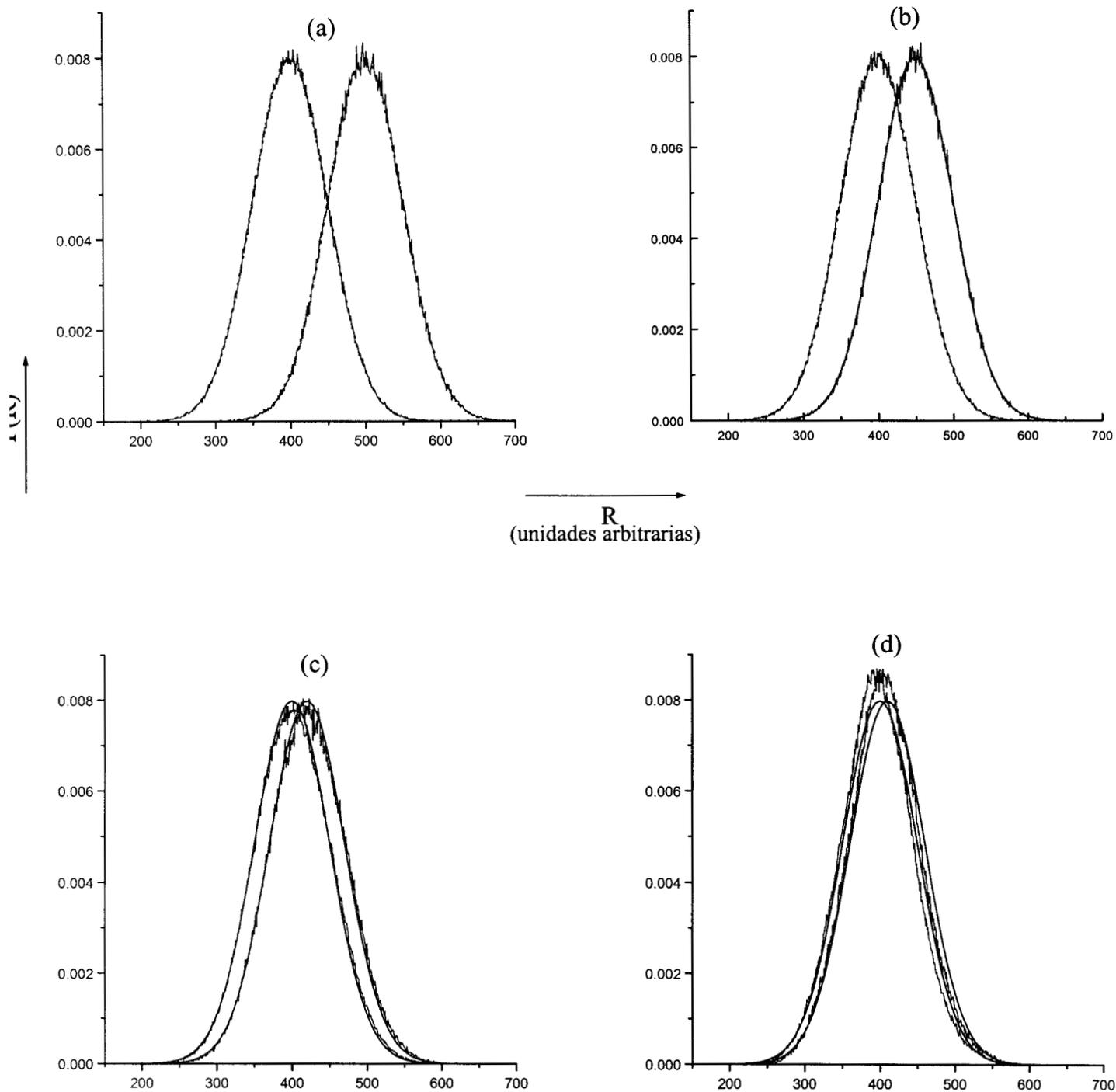
Otras cantidades de interés, como se había señalado anteriormente, son las ya citadas densidades de probabilidad condicional de tamaños de elementos  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ . Estas nos proporcionan información sobre la forma como se encuentran conectados y correlacionados entre sí, a través del espacio poroso, los distintos tamaños de elementos de la red porosa. Además, implícitamente nos indican si la forma de la función de correlación  $\phi(R_B, R_S)$ , obtenida durante el proceso de construcción de la red, concuerda con los valores previstos (recuérdese la forma de la ecuación (11)). En las figuras 15 a 20 quedan presentados los gráficos para las densidades de probabilidad condicional de tamaños de enlace a partir de un tamaño dado de sitio,  $\rho(R_B/R_S)$ , y de tamaños de sitio a partir de un tamaño dado de enlaces,  $\rho(R_S/R_B)$ . Se tomaron como elementos muestra, para estas dos cantidades, tres tamaños representativos de elementos, para cada una de las redes construidas. Los sitios que se escogieron para calcular  $\rho(R_B/R_S)$  son los que

corresponden a los tamaños  $RMS - \sigma$ ,  $RMS$  y  $RMS + \sigma$ . Los enlaces que se fijaron para obtener  $\rho(R_S/R_B)$  son aquellos que tienen como tamaños los valores  $RMB - \sigma$ ,  $RMB$  y  $RMB + \sigma$ .

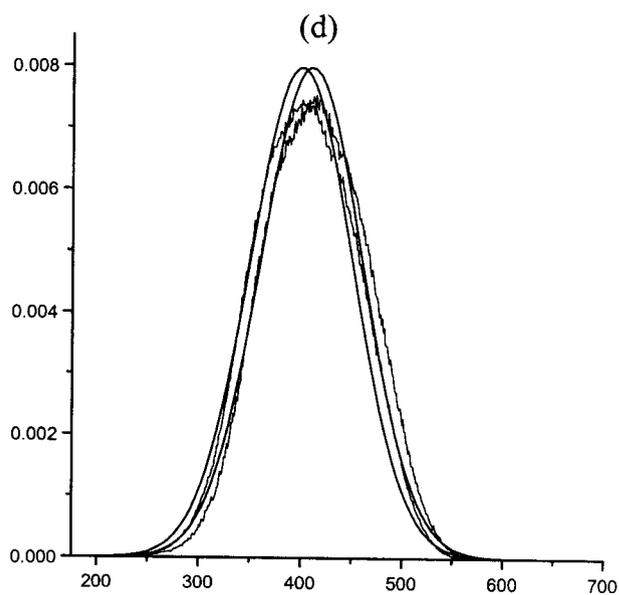
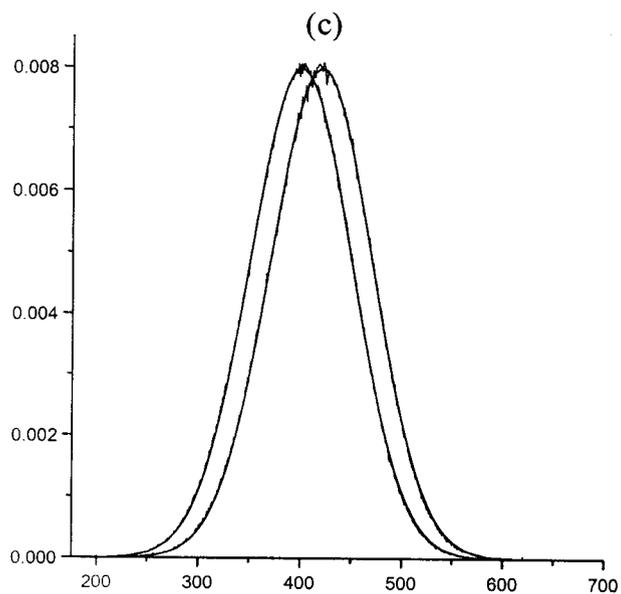
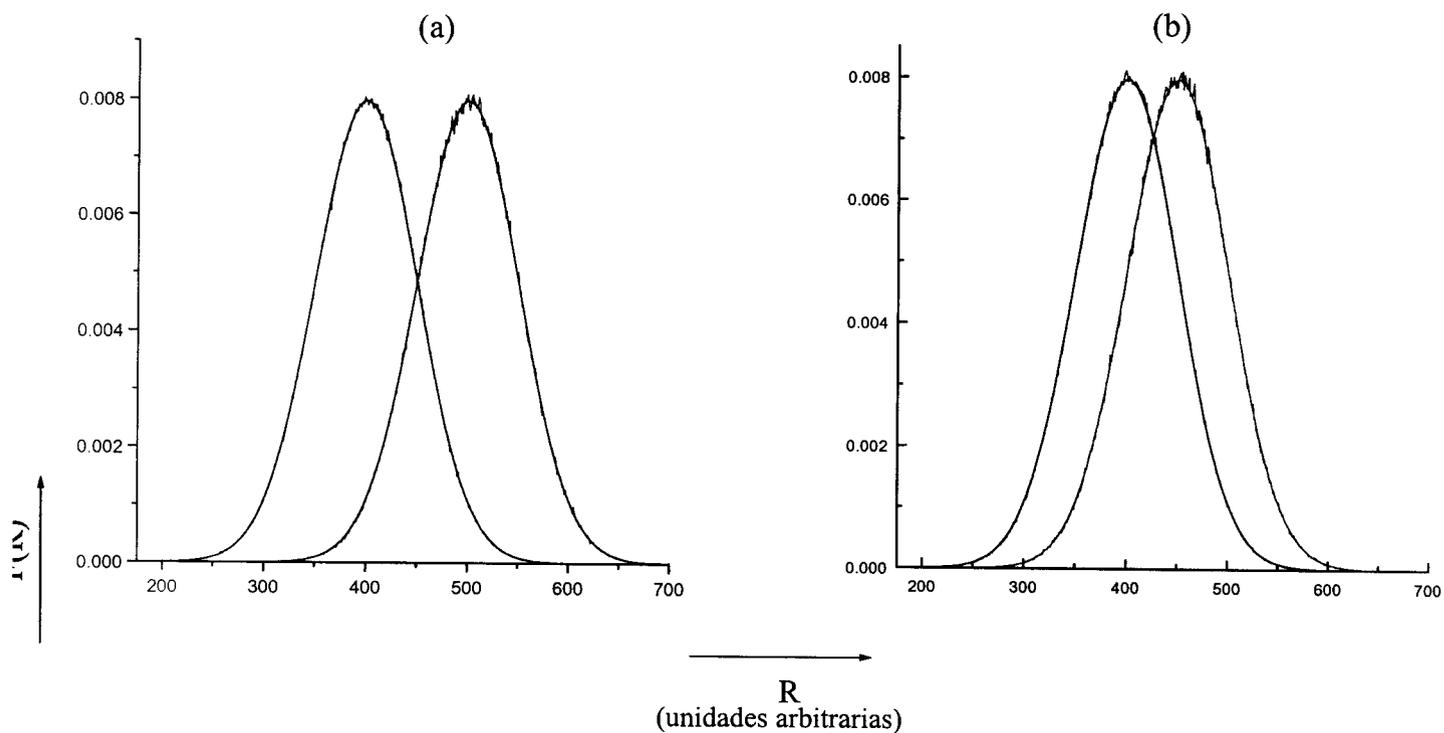
Finalmente, en las tablas 7, 8 y 9 se presentan los valores de los momentos estadísticos calculados para la densidad de probabilidad condicional de tamaños de sitio y de tamaños de enlace generadas a partir del tamaño medio de enlaces,  $RMB$ , y del tamaño medio de sitios,  $RMS$ , respectivamente.



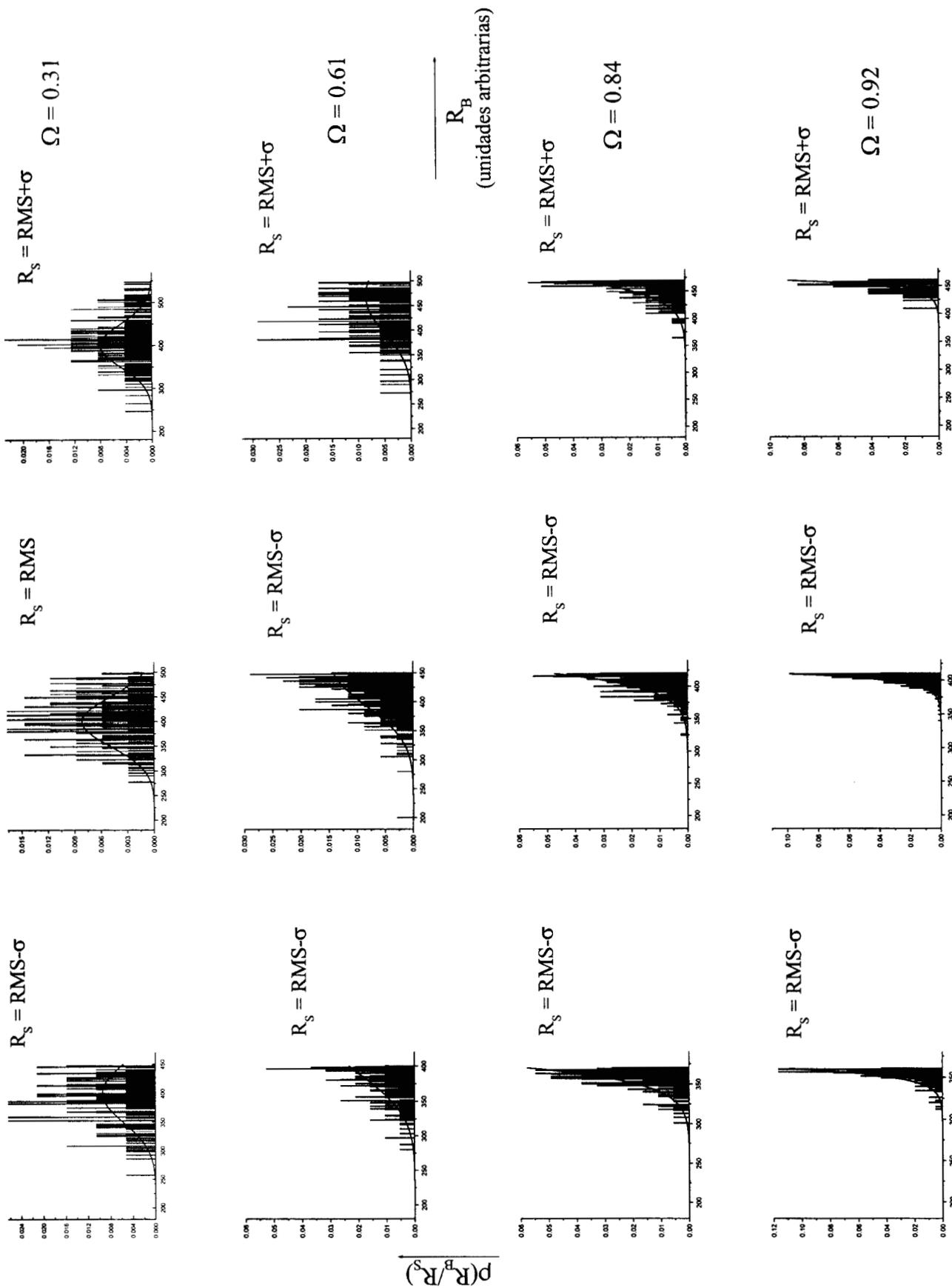
**Figura 12.** Distribuciones duales de tamaños de sitios y enlaces para redes de 100x100. (a)  $\Omega=0.31$ , (b)  $\Omega=0.61$ , (c)  $\Omega=0.84$  y (d)  $\Omega=0.92$ . Las distribuciones originales de inicio se representan por líneas punteadas, las distribuciones por Monte Carlo se representan por líneas continuas



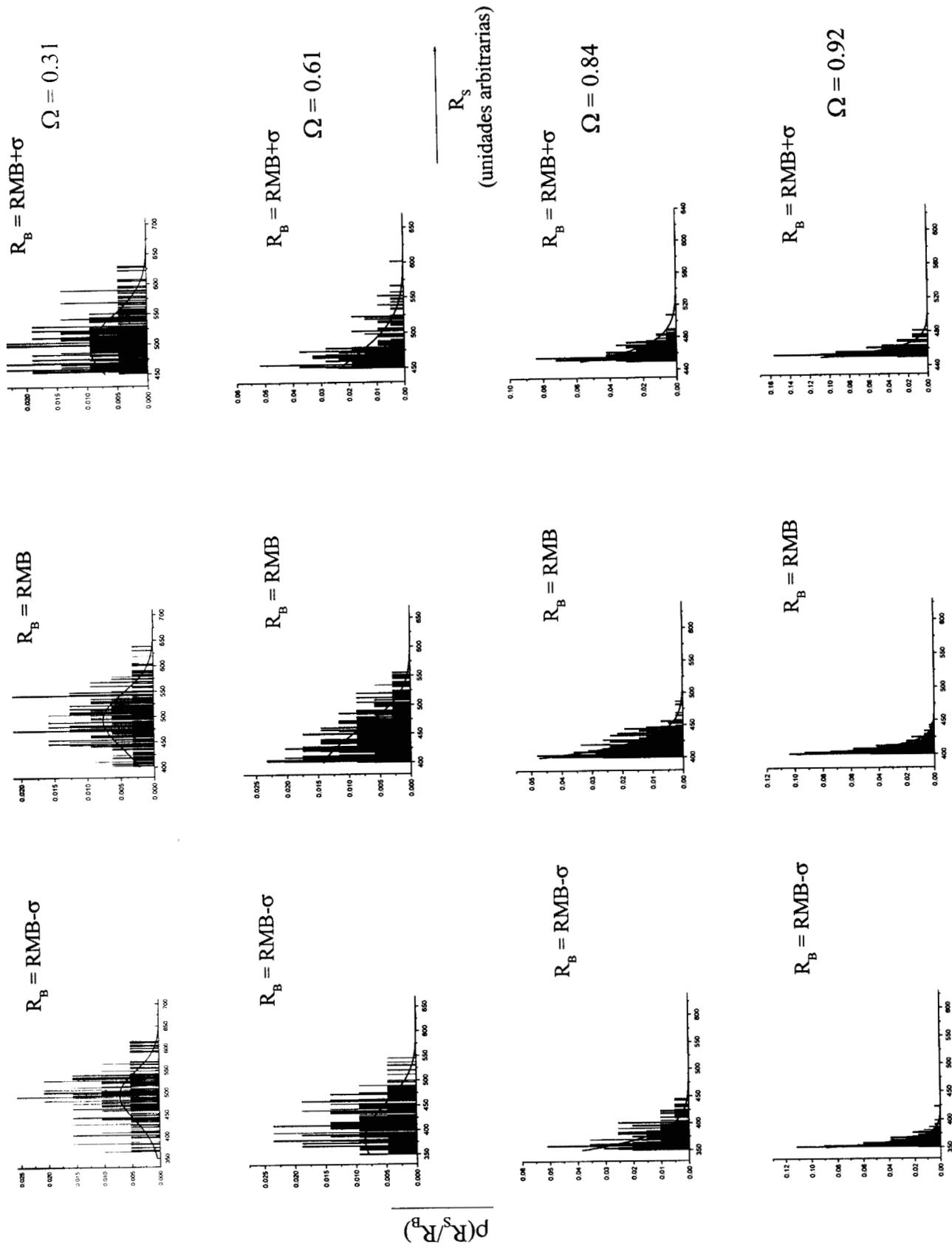
**Figura 13.** Distribuciones duales de tamaños de sitios y enlaces para redes de 500x500. (a)  $\Omega=0.31$ , (b)  $\Omega=0.61$ , (c)  $\Omega=0.84$  y (d)  $\Omega=0.92$ . Las distribuciones originales de inicio se representan por líneas punteadas y las distribuciones por Monte Carlo con líneas continuas.



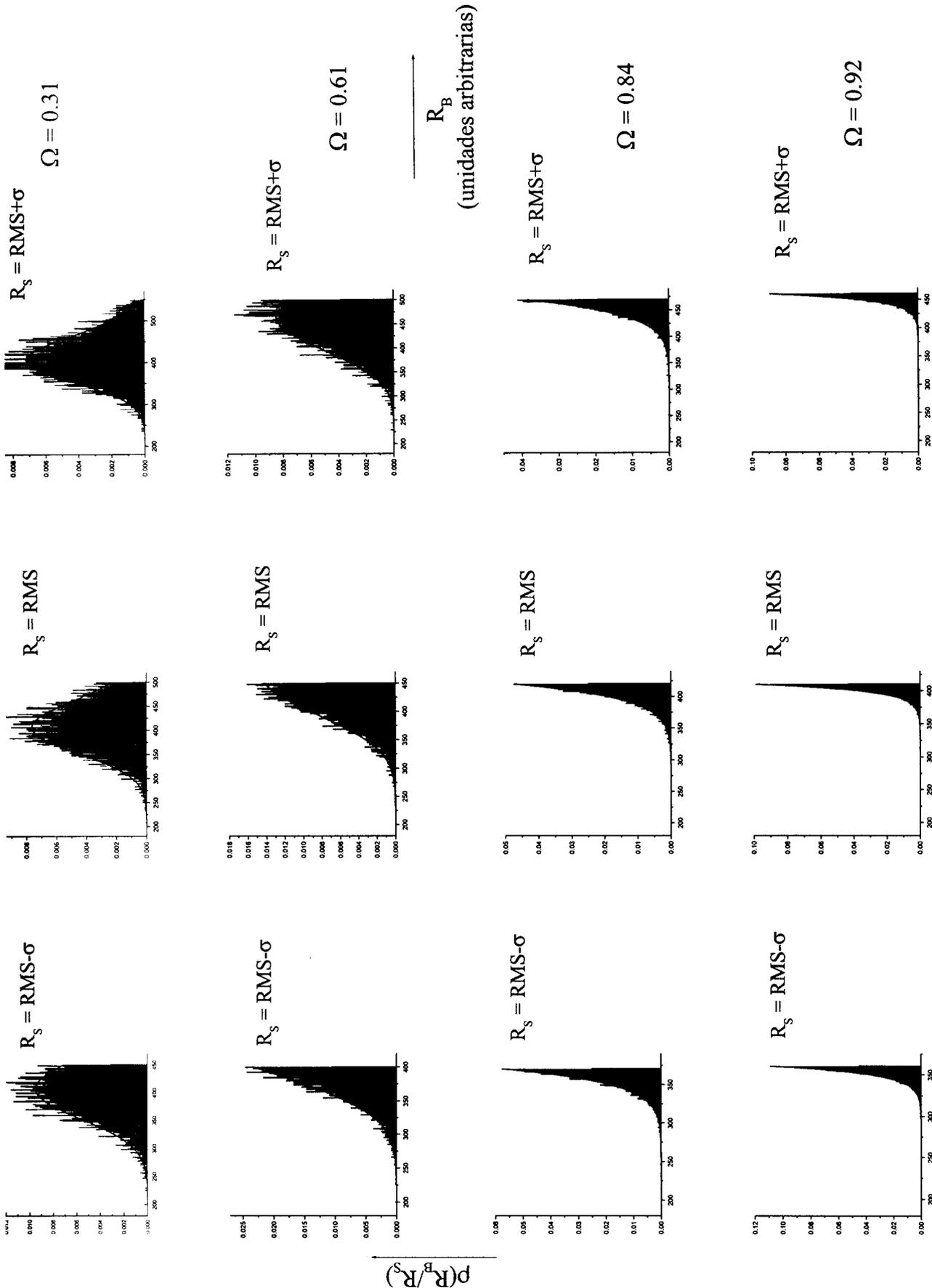
**Figura 14.** Distribuciones duales de tamaños de sitios y enlaces para redes de  $1000 \times 1000$ . (a)  $\Omega=0.31$ , (b)  $\Omega=0.61$ , (c)  $\Omega=0.84$  y (d)  $\Omega=0.92$ . Las distribuciones originales de inicio se representan por líneas punteadas, las distribuciones por Monte Carlo con líneas continuas.



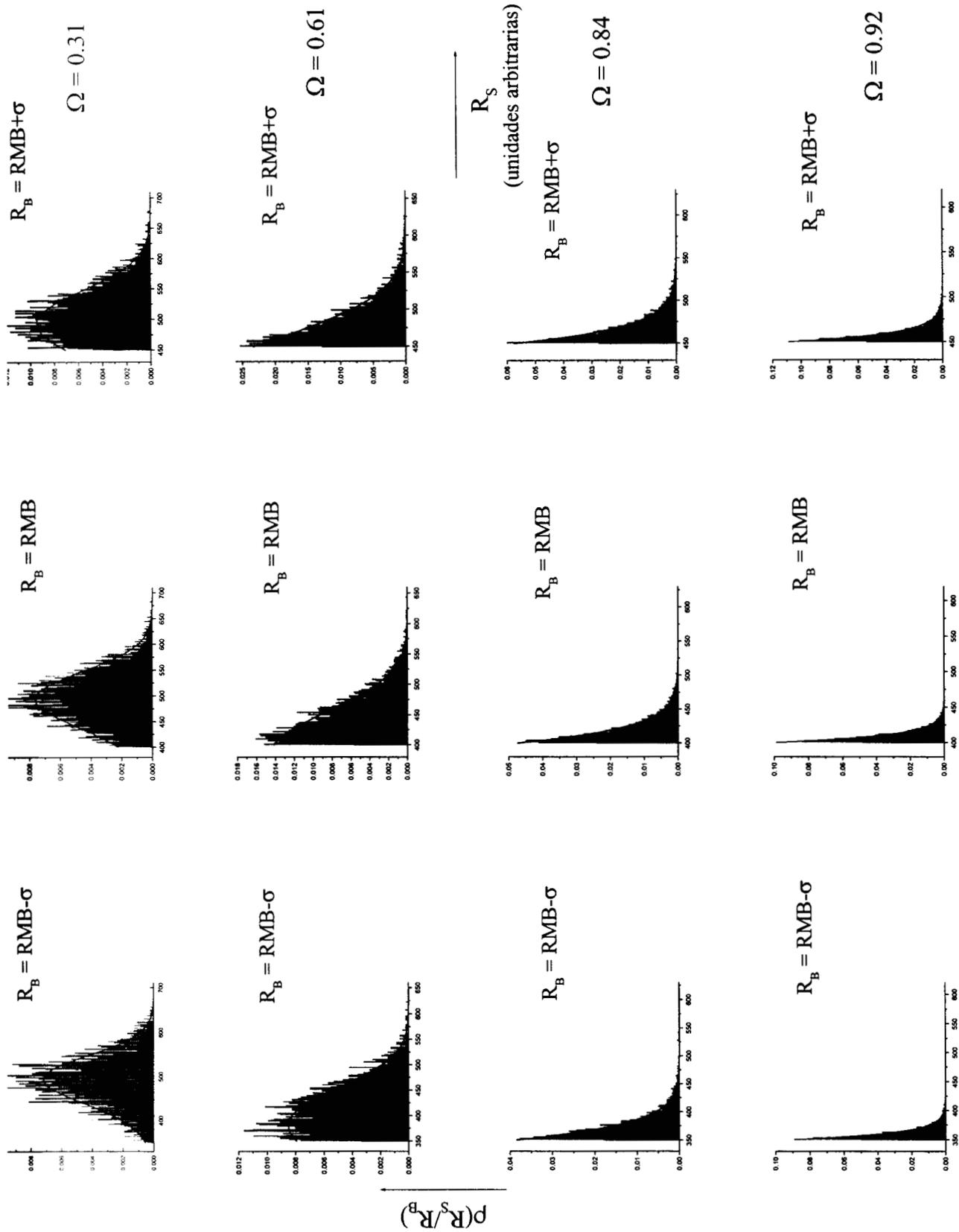
**Figura 15** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de enlaces a partir de diversos tamaños de sitios,  $\rho(R_B/R_S)$ , para redes de  $100 \times 100$ , construidas por el Método ISC, a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencia



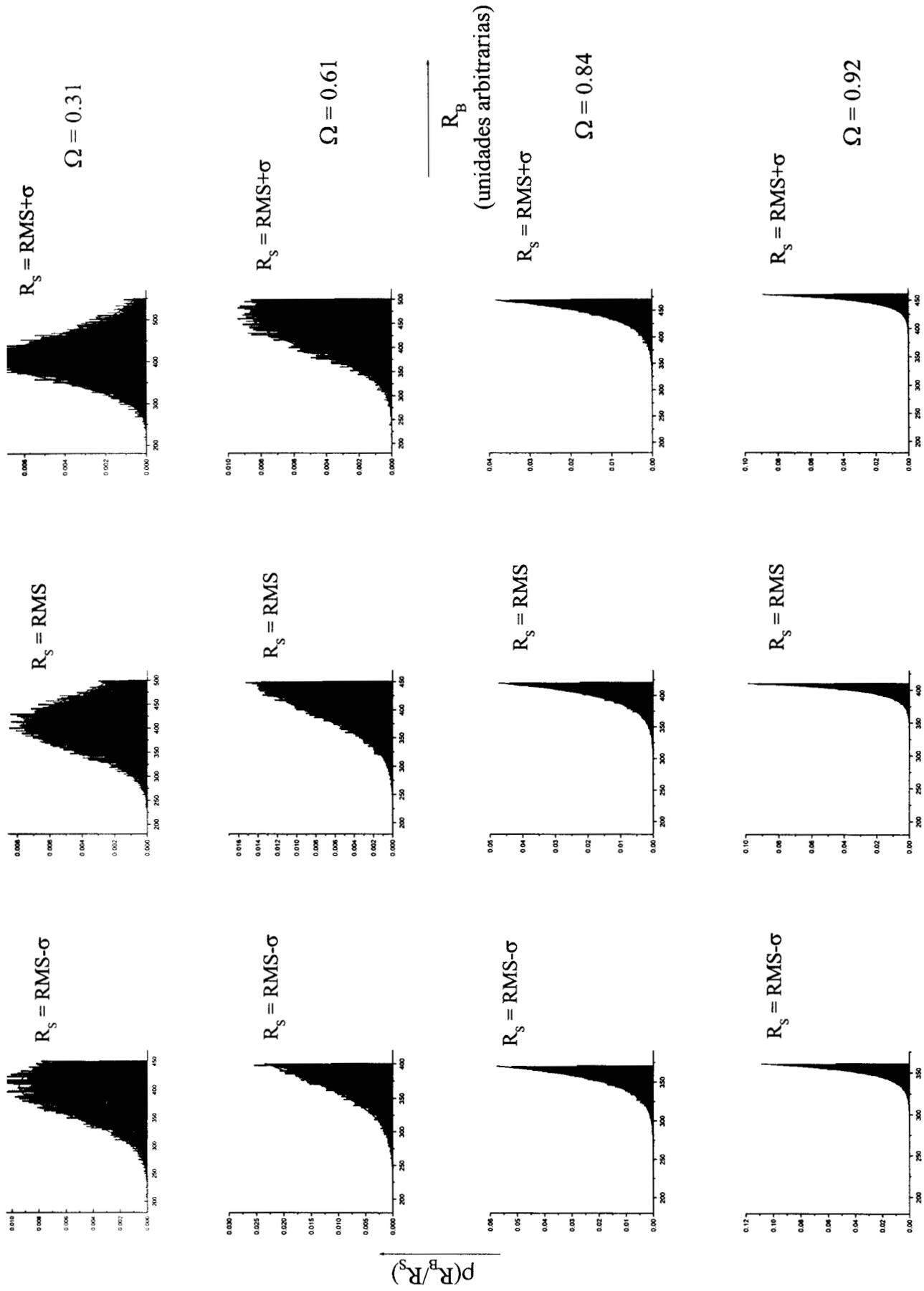
**Figura 16** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de sitios a partir de diversos tamaños de enlaces,  $\rho(R_s/R_B)$ , para redes de  $100 \times 100$ , construidas por el Método ISC, a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencias



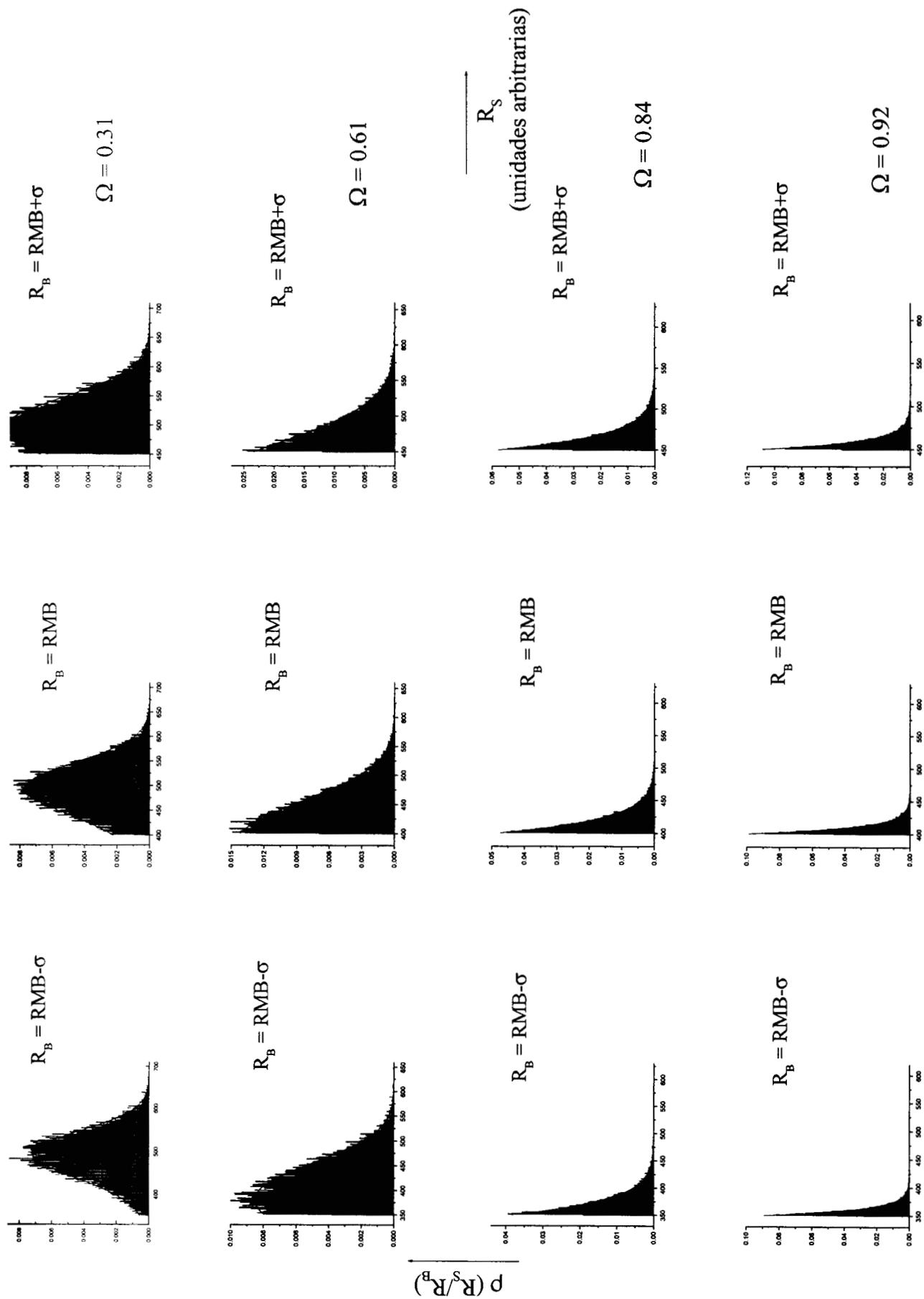
**Figura 17** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de enlaces a partir de diversos tamaños de sitios,  $\rho(R_B/R_S)$ , para redes de 500x500, construidas por el Método ISC, a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan con líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencia



**Figura 18** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de sitios a partir de diversos tamaños de enlaces,  $\rho(R_s/R_B)$ , para redes de 500x500, construidas por el Método ISC, a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencias



**Figura 19** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de enlaces a partir de diversos tamaños de sitios,  $\rho(R_B/R_S)$ , para redes de 1000x1000, construidas por el Método ISC, a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan con líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencia



**Figura 20** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de sitios a partir de diversos tamaños de enlaces,  $\rho(R_S/R_B)$ , para redes de  $1000 \times 1000$ , construidas por Método ISC, a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencia

**Tabla 4.** Comparación de momentos estadísticos de la distribución dual de tamaños obtenida por el Método ISC contra valores Gaussianos de partida, para redes de 100x100 sitios (unidades arbitrarias)

Red  $\Omega = 0.31$

Valor	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_s$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	500	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	500.093	50.070	-0.01374	2.9768	399.909	50.001	0.00308	2.9698

Red  $\Omega = 0.61$

Valor	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_s$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	450	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	450.729	49.410	0.04998	3.0359	400.748	49.097	0.03552	2.9954

Red  $\Omega = 0.84$

Valor	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_s$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	420	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	418.966	39.634	-0.16189	3.4452	399.428	39.781	-0.18322	3.4628

Red  $\Omega = 0.92$

Valor	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_s$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	410	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	399.314	28.297	0.08711	2.9396	389.297	28.276	0.06530	2.9366

**Tabla 5.** Comparación de momentos estadísticos de la distribución dual de tamaños obtenida por el Método ISC contra valores Gaussianos de partida, para redes de 500x500 sitios (unidades arbitrarias)

Red  $\Omega = 0.31$

Valor	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_s$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	500	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	500.118	50.048	0.00159	2.9893	400.026	49.942	0.00115	2.9930

Red  $\Omega = 0.61$

Valor	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_s$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	450	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	449.987	50.062	0.00388	3.0026	400.012	50.107	0.00104	2.9879

Red  $\Omega = 0.84$

Valor	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_s$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	420	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	421.495	50.941	0.05009	2.9089	401.461	50.880	0.05028	2.9264

Red  $\Omega = 0.92$

Valor	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_s$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	410	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	406.722	48.244	0.10029	3.0370	396.669	48.217	0.09736	3.0343

**Tabla 6.** Comparación de momentos estadísticos de la distribución dual de tamaños obtenida por el Método ISC contra valores Gaussianos de partida, para redes de 1000x1000 sitios (unidades arbitrarias)

Red  $\Omega = 0.31$

	SITIOS				ENLACES			
Valor	RMS	$\sigma_S$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	500	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	500.148	49.893	0.00485	2.9948	400.082	49.953	-0.00644	2.9884

Red  $\Omega = 0.61$

	SITIOS				ENLACES			
Valor	RMS	$\sigma_S$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	450	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	450.113	49.828	0.00409	2.9973	400.143	49.826	-0.00198	2.9964

Red  $\Omega = 0.84$

	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_S$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	420	50	0	3.0	400	50	0.0000.0	3.0
ISC	419.437	50.014	-0.02351	3.0014	399.403	49.985	-0.02726	3.0001

Red  $\Omega = 0.92$

	SITIOS				ENLACES			
	RMS	$\sigma_S$	Sesgamiento	Cuadratura	RMB	$\sigma_B$	Sesgamiento	Cuadratura
Requerido	410	50	0	3.0	400	50	0.0	3.0
ISC	414.908	50.210	0.01482	2.6585	404.945	50.239	0.01493	2.6577

**Tabla 7.** Momentos estadísticos de la distribución de tamaños de elementos para densidades de probabilidad condicional,  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ , para redes de 100x100 construidas por el Método ISC

Red  $\Omega = 0.31$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.003337	0.002783	0.185515	1.517378	0.003337	0.002783	0.185515	1.517378
Monte Carlo	0.003322	0.004252	1.357352	4.307979	0.003322	0.004333	1.455706	5.022402

Red  $\Omega = 0.61$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.004028	0.004739	0.886745	2.280121	0.004028	0.004739	0.886745	2.280121
Monte Carlo	0.003984	0.005875	1.603399	5.193262	0.003984	0.005579	1.413742	4.201117

Red  $\Omega = 0.84$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.004653	0.009785	2.571166	9.050217	0.004653	0.009785	2.571166	9.050217
Monte Carlo	0.004525	0.009857	2.576788	9.512853	0.004525	0.009684	2.236586	7.191155

Red  $\Omega = 0.92$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.005000	0.015369	3.964224	19.308512	0.005000	0.015369	3.964224	19.308512
Monte Carlo	0.004739	0.014242	3.742980	17.873487	0.004739	0.015672	4.225838	21.800579

**Tabla 8.** Momentos estadísticos de la distribución de tamaños de elementos para densidades de probabilidad condicional,  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ , para redes de 500x500 construidas por el Método ISC

Red  $\Omega = 0.31$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.003337	0.002783	0.185515	1.517378	0.003337	0.002783	0.185515	1.517378
Monte Carlo	0.003322	0.002833	0.259958	1.689061	0.003322	0.002876	0.317107	1.740434

Red  $\Omega = 0.61$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.004028	0.004739	0.886745	2.280121	0.004028	0.004739	0.886745	2.280121
Monte Carlo	0.003984	0.004732	0.938012	2.435148	0.003984	0.004722	0.971138	2.590303

Red  $\Omega = 0.84$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.004653	0.009785	2.571166	9.050217	0.004653	0.009785	2.571166	9.050217
Monte Carlo	0.004525	0.009359	2.450696	8.241753	0.004525	0.009407	2.540807	8.875800

Red  $\Omega = 0.92$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.005000	0.015369	3.964224	19.308512	0.005000	0.015369	3.964224	19.308512
Monte Carlo	0.004739	0.014071	3.790412	17.827705	0.004739	0.014245	3.723247	17.000668

**Tabla 9.** Momentos estadísticos de la distribución de tamaños de elementos para densidades de probabilidad condicional,  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ , para redes de 1000x1000 construidas por el Método ISC

Red  $\Omega = 0.31$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.003337	0.002783	0.185515	1.517378	0.003337	0.002783	0.185515	1.517378
Monte Carlo	0.003322	0.002805	0.215654	1.559753	0.003322	0.002831	0.240509	1.564453

Red  $\Omega = 0.61$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.004028	0.004739	0.886745	2.280121	0.004028	0.004739	0.886745	2.280121
Monte Carlo	0.003984	0.004716	0.921075	2.398691	0.003984	0.004700	0.910843	2.357996

Red  $\Omega = 0.84$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.004653	0.009785	2.571166	9.050217	0.004653	0.009785	2.571166	9.050217
Monte Carlo	0.004525	0.009401	2.540119	8.969858	0.004525	0.009425	2.530922	8.842243

Red  $\Omega = 0.92$

Valor	$\rho(R_B/R_S)$ $R_S=RMS$				$\rho(R_S/R_B)$ $R_B=RMB$			
	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento	1 <sup>er</sup> Momento	2 <sup>o</sup> Momento	3 <sup>er</sup> Momento	4 <sup>o</sup> Momento
Analítico	0.005000	0.015369	3.964224	19.308512	0.005000	0.015369	3.964224	19.308512
Monte Carlo	0.004739	0.014285	3.866721	18.581568	0.004739	0.014183	3.797030	17.853409

### 3.3 Discusión de Resultados

#### 3.3.1 Distribuciones duales de tamaños

Interesantes observaciones pueden efectuarse a partir de los resultados expuestos anteriormente. Si observamos las distribuciones duales de tamaños, generadas en las redes porosas construidas, representadas en las figuras 12, 13 y 14, es evidente que mantienen una concordancia con respecto a los valores esperados (distribuciones duales de inicio). El grado de concordancia mejora cuando se tienen valores de traslape bajos o intermedios (0.31 y 0.61), y difiere a medida que aumenta el valor del traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces (0.84 y 0.92). Asimismo, los valores de las distribuciones de tamaños, obtenidas con la simulación por Monte Carlo, fluctúan con respecto a ciertos valores promedio, el nivel de fluctuación aumenta cuando se tienen tamaños de red pequeños (100x100) y disminuye a medida que aumenta el tamaño de las redes (500x500 y 1000x1000). Por otro lado, si se examinan los valores de los momentos estadísticos, tablas 4 a 6, es notoria una tendencia general de coincidencia entre los valores obtenidos por las simulaciones por Monte Carlo y los valores analíticos; esta coincidencia mejora a medida que aumenta el tamaño de la red y a medida que disminuye el valor del traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces. Es interesante resaltar que los momentos estadísticos de las redes de 100x100, con traslapes 0.84 y 0.92, presentan valores para el primero y segundo momentos (media y desviación estándar, respectivamente) sumamente alejados con respecto a los valores analíticos esperados. Todos los puntos anteriores quedarán explicados a continuación.

Las fluctuaciones entre los valores de las distribuciones duales obtenidas con la simulación por Monte Carlo, con respecto a los valores analíticos, pueden explicarse en términos del número de elementos en las redes porosas. Estas fluctuaciones disminuyen a medida que aumenta el número de elementos en las redes ( $3 \times 10^4$  elementos, red de 100x100;  $7.5 \times 10^5$  elementos, red de 500x500; y  $3 \times 10^6$  elementos, red de 1000x1000), puesto que a medida que se tiene un mayor número de elementos, las redes porosas se tornan estadísticamente más representativas. Con base en lo anterior hay que señalar que las fluctuaciones son mayores para el caso de los sitios que para

los enlaces (particularmente notable en la figura 14). No hay que olvidar que en las redes porosas construidas se tiene un doble número de enlaces que de sitios, por lo que el tamaño de las muestras de tamaños de enlaces son dos veces mayores a las de los sitios. La falta de concordancia entre los momentos estadísticos de las redes de  $100 \times 100$ , con valores de traslape 0.84 y 0.92, se explica, principalmente, debido al alto grado de correlación existente entre los distintos tamaños de elementos. Esta situación produce un efecto de segregación de tamaños de elementos, es decir, se forman diferentes zonas en las que coexisten sitios y enlaces de tamaño similar. El tamaño o longitud de estas zonas es tan grande (para los traslapes 0.84 y 0.92), que afectan significativamente a los dos primeros momentos de las distribuciones de sitios y enlaces de las redes porosas (tamaño medio y desviación estándar, respectivamente). Es decir, un tamaño de red de  $100 \times 100$  es insuficiente para albergar a todas las posibles zonas de coexistencia de elementos de tamaño similar, y sólo cuando aumenta el tamaño de la red ( $500 \times 500$  y  $1000 \times 1000$ ) se logra la existencia de todas esas posibles zonas, y consecuentemente, los valores de los momentos estadísticos, para las redes con valores de traslape alto, mejoran notablemente, como se observa en las tablas 5 y 6. Es importante también señalar, que aunque se tiene un excelente acuerdo entre los momentos estadísticos de las simulaciones por Monte Carlo y los valores esperados, cuando se trabaja con redes porosas de tamaño grande ( $500 \times 500$  y  $1000 \times 1000$ , respectivamente), aún se advierte una ligera divergencia entre estos dos tipos de valores, cuando se tienen valores de traslape alto, 0.84 y 0.92. Estas divergencias pueden atribuirse a la falta de exactitud matemática con que se trabajan las ecuaciones de generación aleatoria de tamaños de sitios y enlaces (ecuaciones 24 y 27), pero mejorando la eficiencia de los cálculos matemáticos, utilizados en los programas computacionales (efectos de redondeo de cifras decimales, operaciones de división de números, principalmente), seguramente los momentos estadísticos, para valores altos de traslape, mejorarán.

### 3.3.2 Densidades de probabilidad condicional

Interesantes observaciones se pueden señalar también por medio de los resultados obtenidos para las densidades de probabilidad condicional  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ . Si observamos las figuras 15 a 20, donde se representan de manera gráfica estas cantidades, para cada una de las redes construidas, podemos advertir que la concordancia entre los valores por Monte Carlo y los valores analíticos aumenta a medida que se incrementa el valor del traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces. Lo anterior puede explicarse debido a que el alto grado de correlación existente entre los distintos tamaños de sitios y enlaces reduce significativamente el intervalo de posibles tamaños de elementos que pueden encontrarse conectados entre sí. De tal forma, que al reducirse este intervalo la representación estadística de los elementos conectados se incrementa, para un tamaño de sitio o enlace dado, según sea el caso. También, en estas figuras, y en las tablas 7, 8 y 9, es posible advertir que a medida que aumenta el tamaño de las redes porosas, y con ello la representatividad estadística, la concordancia entre los valores obtenidos por Monte Carlo y los esperados, aumenta significativamente. De esta forma, en las figuras 15 y 16, que corresponden a redes de  $100 \times 100$ , la concordancia es apenas perceptible, y en las figuras 19 y 20, correspondientes a las redes de  $1000 \times 1000$ , la concordancia es magnífica; asimismo, esta tendencia se observa también en los valores de los momentos estadísticos (tablas 7 a 9).

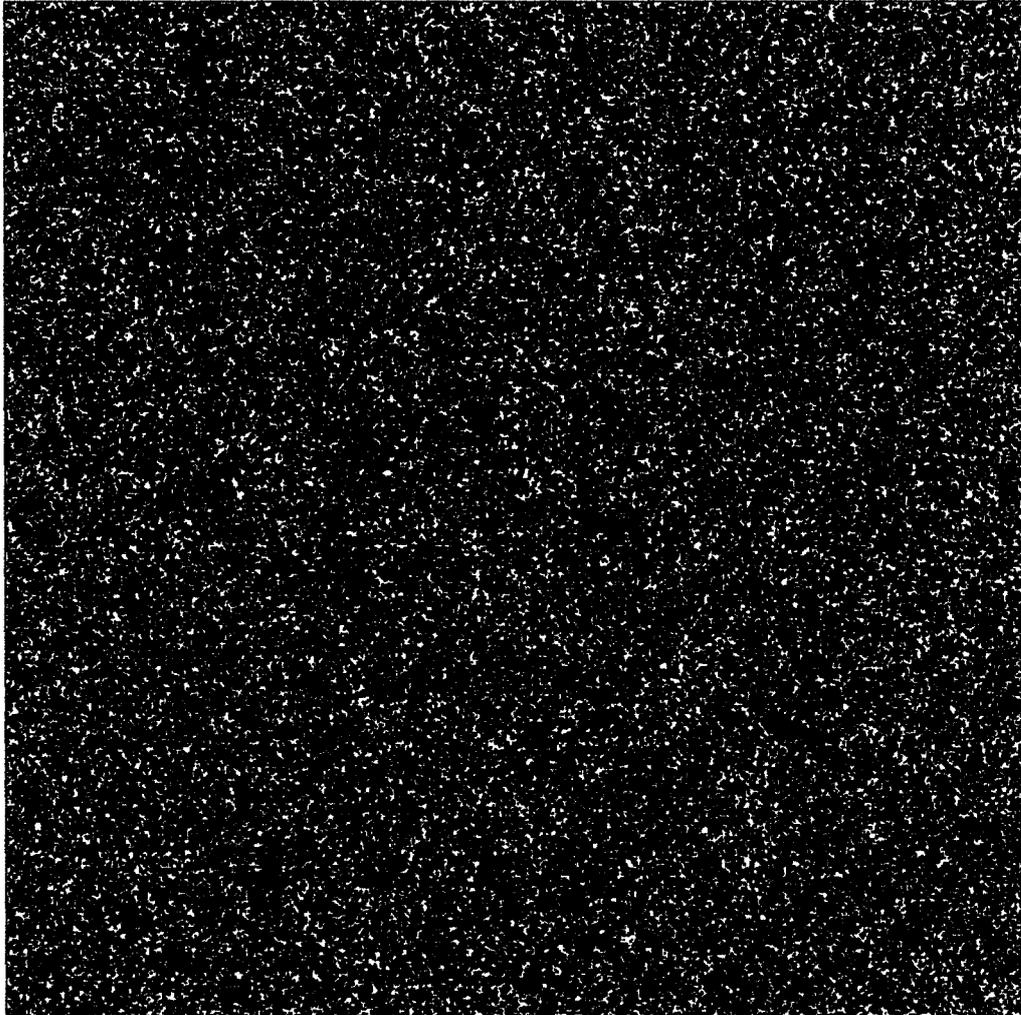
Las observaciones anteriores son sumamente importantes. Se puede inferir que los sitios y los enlaces de las redes porosas se encuentran conectados entre sí de acuerdo a la forma como se esperaba, desarrollándose, entre los tamaños de elementos de las redes porosas, las correlaciones espaciales previstas de acuerdo a la función de correlación  $\phi(R_B, R_S)$ . Sin embargo, el Método de construcción ISC tiene sus limitaciones para representar adecuadamente un medio poroso, como se verá enseguida.

### 3.3.3 Anisotropía

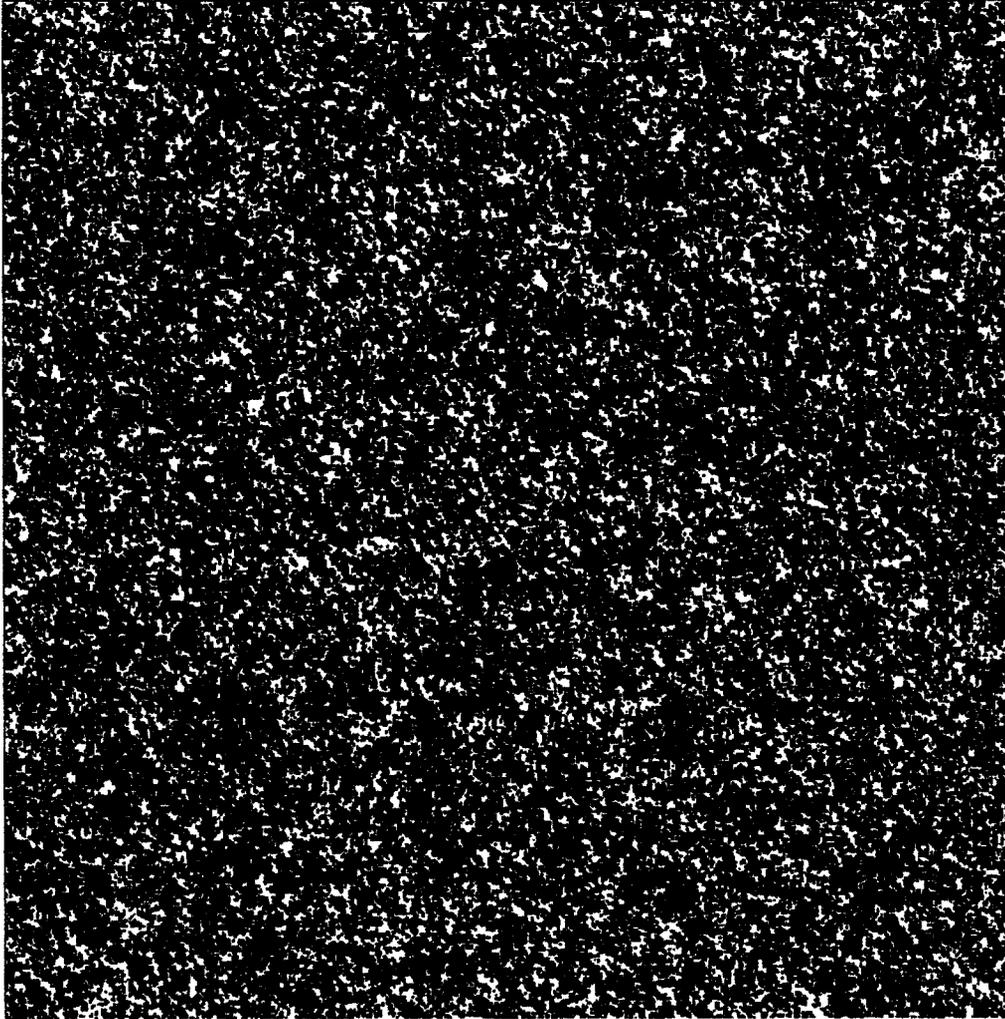
Como se ha señalado en este estudio, cuando existe traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces se establece una correlación entre tamaños de elementos, que conduce a un efecto de segregación entre tamaños de elementos, que involucra la formación de zonas en las que coexisten elementos de tamaño similar. Si en estas zonas los tamaños se encuentran reunidos entre sí en función de alguna orientación espacial preferida, se tiene entonces un efecto de *anisotropía* entre las correlaciones de tamaños de elementos de la red porosa. Es decir, la función de correlación entre tamaños de elementos se transforma en una variable dependiente no sólo de la distancia entre los tamaños involucrados, sino que también de la dirección entre tamaños de elementos. Obsérvese las figuras 21 a 24, en éstas se representan los sitios de las redes construidas de tamaño 500x500, clasificados mediante tres colores que corresponden, respectivamente, a los sitios de tamaño pequeño, mediano y grande (puesto que se manejaron distribuciones Gaussianas los sitios de tamaño pequeño son aquellos menores a  $RMS - 0.43\sigma$ ; los de tamaño mediano, aquellos mayores a los pequeños y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ ; y los de tamaño mayor, aquellos mayores a los de tamaño mediano<sup>2</sup>). Se advierte, en estas figuras, una orientación espacial preferida para las distintas zonas de segregación de tamaños de elementos, sobre todo para valores de traslape elevado (0,84 y 0.92), por lo tanto, como se señaló anteriormente, las redes presentan anisotropía. Esta situación se produce, básicamente, debido a la utilización de una secuencia direccionada para la asignación de tamaños a los elementos de las redes porosas (ver Capítulo 2 sección 2.1.3). El seguir una secuencia, o trayectoria, para asignar tamaños de elementos, orienta espacialmente las correlaciones entre tamaños de elementos. Como se verá en el siguiente capítulo, la anisotropía puede reducirse utilizando un tipo de metodología distinta para la asignación de tamaños de elementos.

---

<sup>2</sup> El valor de 0.43 tiene como objeto la existencia de fracciones en número de elementos similares para los tamaños menores, medianos y grandes. El área bajo la curva gaussiana es la misma para los intervalos comprendidos entre los siguientes tres pares de valores:  $RMS - 3\sigma$  y  $RMS - 0.43\sigma$ ,  $RMS - 0.43\sigma$  y  $RMS + 0.43\sigma$ , y,  $RMS + 0.43\sigma$  y  $RMS + 3\sigma$ .



**Figura 21.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega=0.31$ , construida por el Método ISC. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS=500$  y  $\sigma=50$  (unidades arbitrarias).



**Figura 22.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega=0.61$ , construida por el Método ISC. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS=450$  y  $\sigma=50$  (unidades arbitrarias).



**Figura 23.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega=0.84$ , construida por el Método ISC. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $\text{RMS} - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $\text{RMS} - 0.43\sigma$  y menores a  $\text{RMS} + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $\text{RMS} + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $\text{RMS}=420$  y  $\sigma=50$  (unidades arbitrarias).



**Figura 24.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega=0.92$ , construida por el Método ISC. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS=410$  y  $\sigma=50$  (unidades arbitrarias).

## C A P I T U L O 4

# RESULTADOS DEL METODO DE MONTE CARLO PURO PARA LA SIMULACION DE REDES POROSAS

### 4.1 Limitaciones de la Metodología Convencional

La Metodología para simular redes porosas con el Método de Monte Carlo Puro, descrita en la sección 2.5 del capítulo 2, resulta conveniente para simular redes porosas con bajos valores de traslape o intermedios, pero presenta limitaciones para simular redes porosas con altos valores de traslape (aproximadamente mayores a 0.8). Básicamente, el problema consiste en que cuando se tiene un valor de traslape elevado entre las distribuciones de elementos, el número de transiciones configuracionales a las que se somete una red porosa para alcanzar el estado de equilibrio<sup>3</sup>, tiende a un valor infinito. La situación anterior se hace evidente si se examina el efecto del incremento del traslape entre las distribuciones de elementos, sobre el número de transiciones necesarias para cambiar la configuración de una red porosa desde un estado inicial, con distribución espacial de tamaños de elementos totalmente aleatoria (y contradictoria con el PC), hasta un estado final, en el que todos los sitios y los enlaces, obedezcan el Principio de Construcción. No hay que olvidar que la configuración inicial de una red porosa, con traslape  $\Omega$  y distribución espacial de tamaños de elementos totalmente aleatoria, necesariamente contiene cierto porcentaje de elementos que no cumplen con el PC, de tal forma que este porcentaje crecerá con el valor del traslape. A continuación se detallan los resultados obtenidos sobre redes de

---

<sup>3</sup> O estado de máxima entropía configuracional correspondiente a sitios y enlaces conectados con distribuciones preestablecidas de tamaño.

tamaño 500x500 sitios,  $C = 4$ , con distribuciones de tamaños de elementos de tipos Gaussianas y con los mismos parámetros estadísticos y valores de traslape utilizados en el capítulo anterior.

Para la red porosa con  $\Omega=0.31$  se requirieron 300 Pasos de Monte Carlo (PMC) para que el sistema alcanzase un estado en el que todos los sitios y los enlaces obedezcan el PC (definiéndose un paso de Monte Carlo como un número de transiciones, tanto con probabilidad cero como con probabilidad uno, igual al número total de elementos de la red porosa, sección 2.3, capítulo 2).

La red con  $\Omega=0.61$  necesitó cerca de 6,000 PMC para que el 99.9% de los sitios cumplan con el PC. Si subsecuentemente se sometía a la red porosa a un mayor número de transiciones, difícilmente se incrementaba el porcentaje anterior. Por lo tanto, el número de transiciones necesarias para que todos los elementos de la red porosa obedezcan el PC resultaba ser una cantidad tendiente a infinito.

La situación anterior se agudizó bastante para el caso de la red con  $\Omega=0.84$ . Se requirieron 20,000 PMC para que el 91% de los sitios cumplan con el PC. El incremento del porcentaje de estos sitios se convirtió en una tarea imposible, dado que difícilmente se reducía el porcentaje de elementos que violaban el PC si se sometía a la red a un mayor número de PMC.

En virtud de los resultados anteriores, no se examinó el caso para la red con  $\Omega=0.92$ . Puesto que el resultado obtenido hubiera sido obvio: se incrementaría considerablemente el porcentaje de elementos sin cumplir el PC, con respecto al caso de la red con  $\Omega=0.84$ , y el número de transiciones necesarias, para que el sistema alcanzase el estado final deseado, resultaría ser una cantidad tendiente a infinito

## **4.2 Desarrollo de una metodología para manejo de traslapes elevados**

Con base en los resultados anteriores se propuso un mecanismo novedoso para eliminar las inconsistencias existentes en la simulación de redes con valores altos de traslape. Este mecanismo modifica la secuencia de estados intermedios por los que transita la red porosa, desde el estado inicial, caracterizado por una distribución espacial totalmente aleatoria de tamaños de elementos, hasta el estado final de equilibrio, donde el grado de correlación de tamaños de elementos

corresponde a las condiciones impuestas por el valor del traslape existente entre las distribuciones de elementos. De acuerdo a este nuevo mecanismo los estados intermedios del sistema, por los que transitan las redes, deben de caracterizarse por un incremento paulatino del grado de interacción entre tamaños de elementos de la red porosa, a medida que éstos se aproximen al estado final de equilibrio. En cierta forma, el proceso de cambios de estado sobre las redes porosas, toma algunas de las características de un proceso reversible, en donde cualquier perturbación sobre las condiciones del sistema debe de ser efectuada de manera lenta y paulatina, permitiéndose de esta forma, que el sistema transite por una secuencia de estados intermedios de equilibrio, que conduzcan desde el estado inicial hasta el estado final del sistema. Para conseguir el objetivo anterior se propuso lo siguiente:

Supóngase que se tienen los estados intermedios  $x_1$  y  $x_2$ , pertenecientes a la secuencia de cambios de estado que conducen del estado inicial  $x_0$  hasta el estado final  $x_F$  (véase la expresión 30 del capítulo 2). La probabilidad de transición del estado  $x_1$  al estado  $x_2$ ,  $W(x_1 \rightarrow x_2)$ , será igual a uno si la correlación entre tamaños de elementos en el estado  $x_2$  es ligeramente superior a la del estado  $x_1$ , y será igual a cero para cualquier otra clase de condiciones. Por ejemplo, se puede fijar para el estado  $x_1$  una condición de interacción de tamaños de elementos como la siguiente:

Para cualquier sitio  $i$  de la red porosa y cualquiera de sus  $k$ -ésimos enlaces:

$$R_{Si} + z_1 \geq R_{Bk}^i \quad k = 1, 2, \dots, C \quad (45)$$

de manera equivalente, para cualquier enlace  $l$  de la red porosa y cualquiera de sus  $k$ -ésimos enlaces:

$$R_{Bl} - z_1 \leq R_{Sk}^l \quad k = 1, 2 \quad (46)$$

en donde  $z_1$  es una constante positiva que incrementa o decrementa, el tamaño de un sitio o de un enlace, respectivamente. Asimismo, para el estado  $x_2$ , las expresiones equivalentes serían:

Para cualquier sitio  $i$  de la red porosa y cualquiera de sus  $k$ -ésimos enlaces:

$$R_{Si} + z_2 \geq R_{Bk}^i \quad k = 1, 2, \dots, C \quad (47)$$

y para cualquier enlace  $l$  de la red porosa y cualquiera de sus  $k$ -ésimos enlaces:

$$R_{Bl} - z_2 \leq R_{Sk}^l \quad k = 1, 2 \quad (48)$$

Con objeto de que el grado de interacción entre tamaños de elementos en el estado  $x_2$  sea mayor al del estado  $x_1$ ,  $z_2$  y  $z_1$  deberán cumplir con la siguiente condición:

$$z_2 < z_1 \quad (49)$$

Generalizando, para cualquier transición,  $W(x' \rightarrow x'')$ , que conduzca del estado  $x'$  al estado  $x''$  (con  $z'' < z'$ ), tendrá una probabilidad igual a uno si el intercambio de tamaños entre un sitio  $i$  y un sitio  $j$  de la red porosa cumple con lo siguiente:

$$R_{Si} + z'' \geq R_{Bj}^k \quad k = 1, \dots, C \quad (50)$$

$$R_{Sj} + z'' \geq R_{Bi}^k \quad k = 1, \dots, C \quad (51)$$

y se tendrá una probabilidad igual a cero si no se cumple con lo anterior. De forma equivalente, para el intercambio de tamaños entre un enlace  $l$  y un enlace  $m$  de la red porosa,  $W(x' \rightarrow x'')$  tendrá una probabilidad igual a uno si se cumple durante el intercambio de tamaños con lo siguiente:

$$R_{Bl} - z'' \leq R_{Sk}^m \quad k = 1, 2 \quad (52)$$

$$R_{Bm} - z'' \leq R_{Sk}^l \quad k = 1, 2 \quad (53)$$

y tendrá una probabilidad igual a cero para cualquier otro tipo de intercambio de tamaños de enlaces.

Con base en lo anteriormente expuesto, puede establecerse una metodología para que una red porosa, con un traslape  $\Omega$ , alcance paulatinamente el estado final de equilibrio, partiendo desde un estado inicial con distribución espacial totalmente aleatoria de tamaños de elementos. Esto se lograría disminuyendo gradualmente el valor de  $z$  cada cierto número definido de PMC. Procurando que para cada valor de  $z$ , todos los elementos de la red porosa se ajusten a lo establecido en las ecuaciones (45) y (46). Podría partirse con un valor de  $z$  tendiente a la cantidad  $b_2 - s_1$  (donde  $b_2$  es el tamaño del enlace más grande de la distribución de enlaces y  $s_1$  el tamaño del sitio más pequeño de la distribución de sitios), y reducirse gradualmente el valor de  $z$ , hasta terminar con un valor igual a cero. De esta forma, al inicio de la secuencia, cuando el valor de  $z$  tiende a  $b_2 - s_1$ , el sistema alcanzaría un grado de correlación mínimo entre tamaños de elementos (similar a una condición de traslape bajo, si es que al tamaño de cualquier sitio de la red porosa se le sumara la cantidad  $z$  correspondiente a ese estado); y cuando  $z$  tienda a cero, se alcanzarían estados intermedios con correlaciones entre tamaños de elementos muy similares al estado de equilibrio del sistema (áquel que corresponda al valor de  $\Omega$  existente entre las distribuciones de sitios y enlaces de la red porosa).

### **4.3 Presentación de resultados**

Se construyeron redes porosas con los mismos parámetros estadísticos y con los mismos traslapes estudiados en el Método ISC (ver capítulo 3 sección 3.2). Se manejaron los tamaños de red de 100 x 100 y 500 x 500. A diferencia de los resultados presentados en el capítulo pasado no se construyeron redes de tamaño 1000 x 1000, debido a que el tamaño 500x500 presenta una buena representación estadística (ver los resultados del capítulo 3). El equipo de computo utilizado fue el mismo que se señaló en el capítulo anterior.

### 4.3.1 Secuencias de cambios de estado

Cada una de las redes porosas simuladas partió desde un estado inicial caracterizado por una distribución espacial de tamaños de elementos, totalmente aleatoria (arbitraria).

Las redes con  $\Omega = 0.31$  utilizaron una secuencia de cambios de estado con un valor constante de  $z = 0$ , requiriéndose 300 PMC para que el sistema alcanzase una configuración en la que tanto los sitios como los enlaces cumplieran con el PC, tal y como se señaló en la sección 4.1. Posteriormente, se sometió a las redes a otros 10,000 PMC, para asegurarse que el sistema alcanzase las condiciones de equilibrio.

Para las redes con  $\Omega = 0.61$  fueron necesarios 4000 PMC para que todos los elementos de las redes porosas obedezcan el PC. El valor de  $z$  (ecuaciones 47 a 50) varió a través de la secuencia de cambios de estado en la forma como se describe en la tabla 10. Posteriormente, se sometió al sistema a otros 10,000 PMC a fin de asegurarse que el sistema alcanzase las condiciones de equilibrio.

**Tabla 10.** Secuencia utilizada para la simulación de redes con  $\Omega=0.61$  utilizando el Método de Monte Carlo Puro.

Valor de $z$	No. PMC	elementos sin cumplir el PC
$0.7\sigma$	1,000	54%
$0.4\sigma$	1,000	48%
$0.2\sigma$	1,000	35%
$0\sigma$	1,000	0%
Total PMC	4,000	-

Para la simulación de las redes con  $\Omega = 0.84$  se requirieron 10,000 PMC, utilizando la secuencia descrita en la tabla 11, para que todos los elementos del sistema obedezcan el PC. Posteriormente, se sometió al sistema a otros 10,000 PMC a fin de asegurarse que las redes alcanzasen las condiciones de equilibrio.

Finalmente, para la simulación de las redes con  $\Omega=0.92$  se requirieron 24,000 PMC, utilizando la secuencia descrita en la tabla 12, para que todos los elementos del sistema obedezcan el PC. Posteriormente, se sometió al sistema a otros 10,000 PMC a fin de asegurarse que las redes alcanzasen configuraciones de equilibrio.

**Tabla 11.** Secuencia utilizada para la simulación de redes con  $\Omega=0.84$  utilizando el Método de Monte Carlo Puro.

Valor de z	No. PMC	elementos sin cumplir el PC
$1.2\sigma$	1,000	79%
$1.0\sigma$	1,000	80%
$0.8\sigma$	1,000	81%
$0.6\sigma$	1,000	78%
$0.4\sigma$	1,000	74%
$0.2\sigma$	1,000	61%
$0.1\sigma$	1,000	43%
$0.06\sigma$	1,000	30%
$0.02\sigma$	1,000	13%
$0\sigma$	1,000	0%
Total PMC	10,000	-

**Tabla 12.** Secuencia utilizada para la simulación de redes con  $\Omega=0.92$  utilizando el Método de Monte Carlo Puro.

Valor de z	No. PMC	elementos sin cumplir el PC
1.6 $\sigma$	1,000	82%
1.4 $\sigma$	1,000	84%
1.2 $\sigma$	1,000	85%
1.0 $\sigma$	1,000	87%
0.8 $\sigma$	1,000	86%
0.6 $\sigma$	1,000	86%
0.4 $\sigma$	1,000	84%
0.3 $\sigma$	1,000	81%
0.24 $\sigma$	1,000	79%
0.18 $\sigma$	1,000	74%
0.14 $\sigma$	1,000	69%
0.1 $\sigma$	1,000	62%
0.08 $\sigma$	2,000	55%
0.06 $\sigma$	2,000	48%
0.04 $\sigma$	2,000	37%
0.02 $\sigma$	3,000	23%
0 $\sigma$	3,000	0%
Total PMC	24,000	-

### 4.3.2 Evaluación de condiciones de equilibrio

Para examinar el número de transiciones necesarias, bajo las cuales las redes porosas simuladas alcanzaron las condiciones de equilibrio, se examinaron los valores de las cantidades  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ , sobre dos tipos de configuraciones. La primera de estas configuraciones correspondió al número mínimo de PMC para que todos los elementos de cada una de las redes obedecieran el PC (ver la sección 4.3.1). El segundo de estos estados, se tomó con un número adicional de 10,0000 PMC, con respecto al primer estado (ver la sección anterior). De esta forma, se compararon los valores analíticos junto con los calculados en las redes porosas, de los momentos estadísticos para las funciones  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ , tomando como muestras elementos con un tamaño de sitio igual a RMS y un tamaño de enlace igual a RMB, respectivamente. Se presentan en las tablas 13 a 16 los resultados encontrados.

**Tabla 13.** Momentos estadísticos de la distribución de tamaños de elementos para densidades de probabilidad condicional,  $\rho(R_B/R_S)$ , para redes de tamaño 100x100 construidas por el Método de Monte Carlo Puro. Valores correspondientes al primero y segundo estado. Se tomaron como elementos muestra tamaños de sitios igual RMS.

$\Omega = 0.31$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.003984	0.003993	0.003984
2	0.004043	0.002570	0.004375
3	1.058936	-0.085948	1.036448
4	4.419462	1.609703	3.489124

$\Omega = 0.61$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.004975	0.005022	0.004975
2	0.005792	0.004783	0.005842
3	1.211608	0.578084	1.109653
4	4.331243	1.840492	3.614308

$\Omega = 0.84$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.005848	0.006006	0.005848
2	0.010420	0.010727	0.0107862
3	2.073477	2.14600	2.236056
4	7.107091	6.825371	7.768018

$\Omega = 0.92$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.006211	0.006545	0.006211
2	0.015174	0.017268	0.015537
3	2.738688	3.375370	3.025245
4	9.719788	14.465364	12.130739

**Tabla 14.** Momentos estadísticos de la distribución de tamaños de elementos para densidades de probabilidad condicional,  $\rho(R_S/R_B)$ , para redes de tamaño 100x100 construidas por el Método de Monte Carlo Puro. Valores correspondientes al primero y segundo estado. Se tomaron como elementos muestra tamaños de enlaces igual RMB.

$\Omega = 0.31$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.003984	0.003993	0.003984
2	0.004328	0.002570	0.004068
3	0.919959	-0.085948	0.989033
4	3.149956	1.609703	3.448679

$\Omega = 0.61$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.004975	0.005022	0.004975
2	0.006102	0.004783	0.005961
3	1.484691	0.578084	1.273896
4	6.062718	1.840492	4.101280

$\Omega = 0.84$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.005848	0.006006	0.005848
2	0.010201	0.010727	0.011151
3	2.219784	2.146000	2.294155
4	7.951709	6.825371	7.772573

$\Omega = 0.92$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.006211	0.006545	0.006211
2	0.015571	0.017268	0.015449
3	2.892473	3.375370	2.980716
4	10.649449	14.465364	11.864936

**Tabla 15.** Momentos estadísticos de la distribución de tamaños de elementos para densidades de probabilidad condicional,  $\rho(R_B/R_S)$ , para redes de tamaño 500x500 construidas por el Método de Monte Carlo Puro. Valores correspondientes al primero y segundo estado. Se tomaron como elementos muestra tamaños de sitios igual RMS.

$\Omega = 0.31$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.003984	0.003993	0.003984
2	0.002683	0.002570	0.002677
3	0.101317	-0.085948	0.139264
4	1.804138	1.609703	1.893773

$\Omega = 0.61$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.004975	0.005022	0.004975
2	0.004744	0.004783	0.004748
3	0.506754	0.578084	0.485355
4	1.699328	1.840492	1.685100

$\Omega = 0.84$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.005847	0.006006	0.005848
2	0.010019	0.010727	0.010027
3	1.780014	2.14600	1.783078
4	4.959095	6.825371	4.945240

$\Omega = 0.92$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.006211	0.006545	0.006211
2	0.015581	0.017268	0.015397
3	2.850303	3.375370	2.843126
4	10.312988	14.465364	10.277711

**Tabla 16.** Momentos estadísticos de la distribución de tamaños de elementos para densidades de probabilidad condicional,  $\rho(R_S/R_B)$ , para redes de tamaño 500x500 construidas por el Método de Monte Carlo Puro. Valores correspondientes al primero y segundo estado. Se tomaron como elementos muestra tamaños de enlaces igual RMB.

$\Omega = 0.31$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.003984	0.003993	0.003984
2	0.002702	0.002570	0.002642
3	0.080108	-0.085948	0.051596
4	1.780281	1.609703	1.807680

$\Omega = 0.61$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.004975	0.005022	0.004975
2	0.004789	0.004783	0.004733
3	0.543358	0.578084	0.512289
4	1.769307	1.840492	1.714825

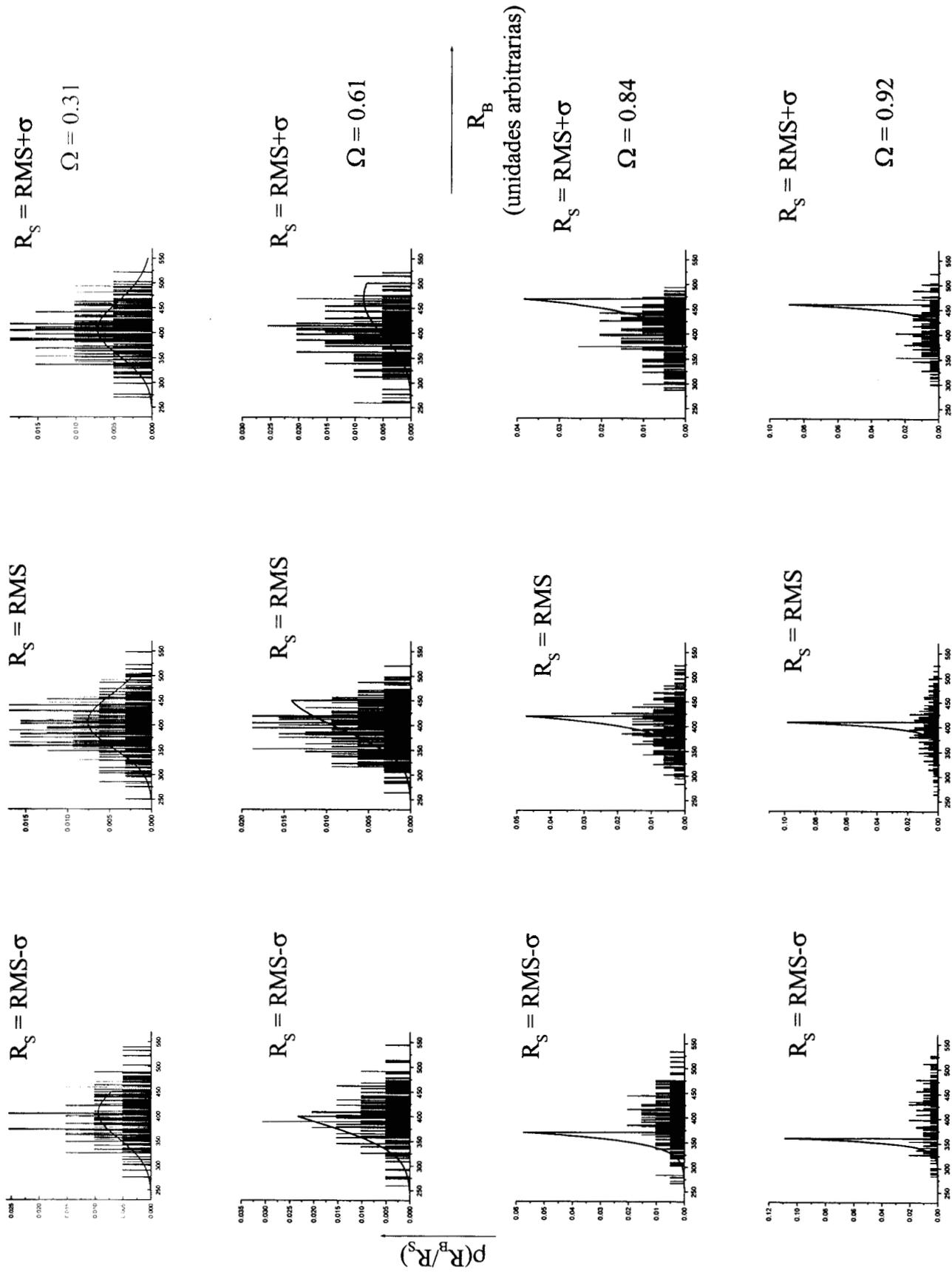
$\Omega = 0.84$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.005848	0.006006	0.005848
2	0.010062	0.010727	0.009882
3	1.759615	2.14600	1.771296
4	4.807109	6.825371	4.969060

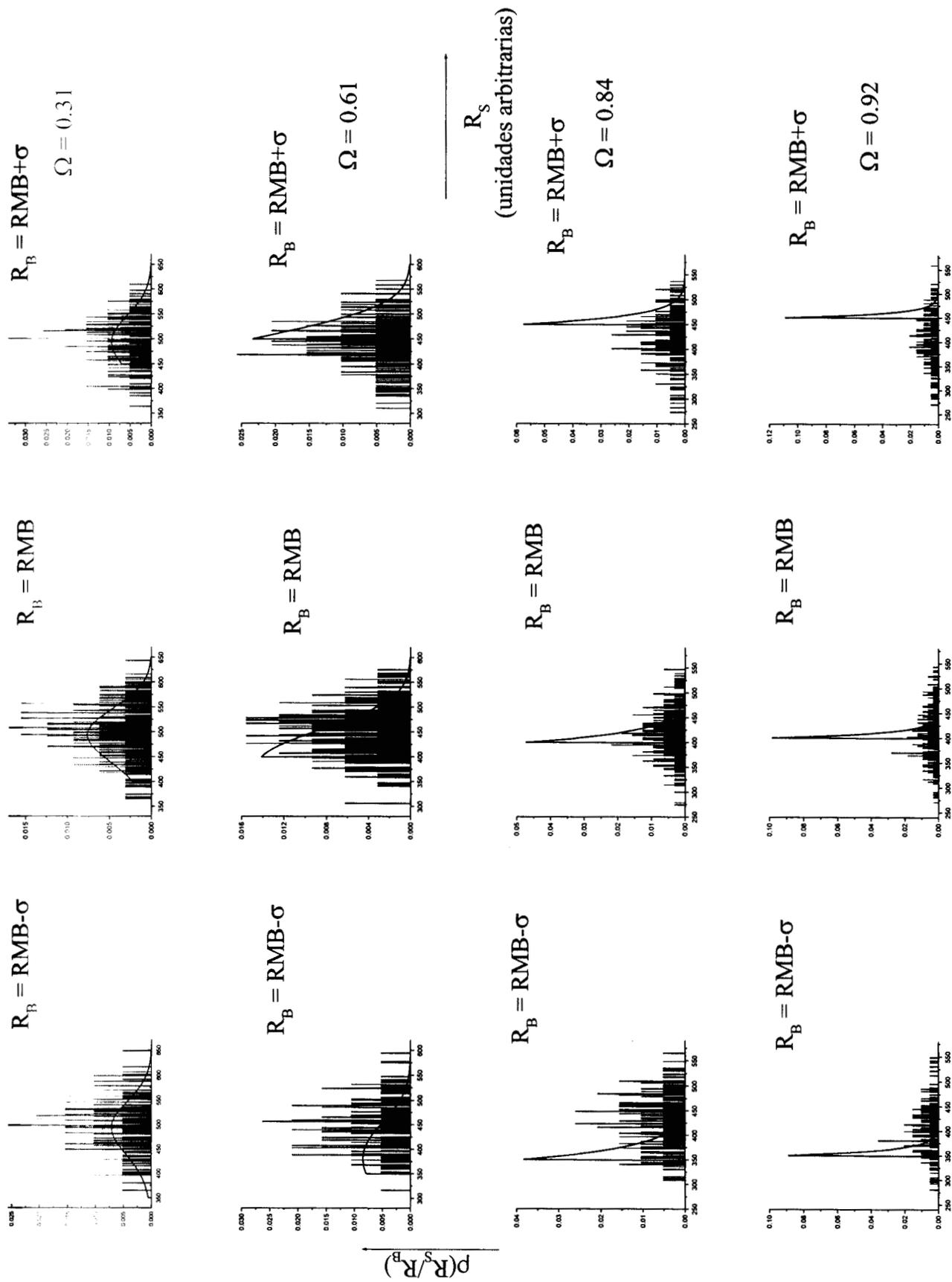
$\Omega = 0.92$

Momentos estadísticos	Estado 1	Valor analítico	Estado 2
1	0.006211	0.006545	0.006211
2	0.015408	0.017268	0.015444
3	2.804544	3.375370	2.846577
4	10.115720	14.465364	10.294991

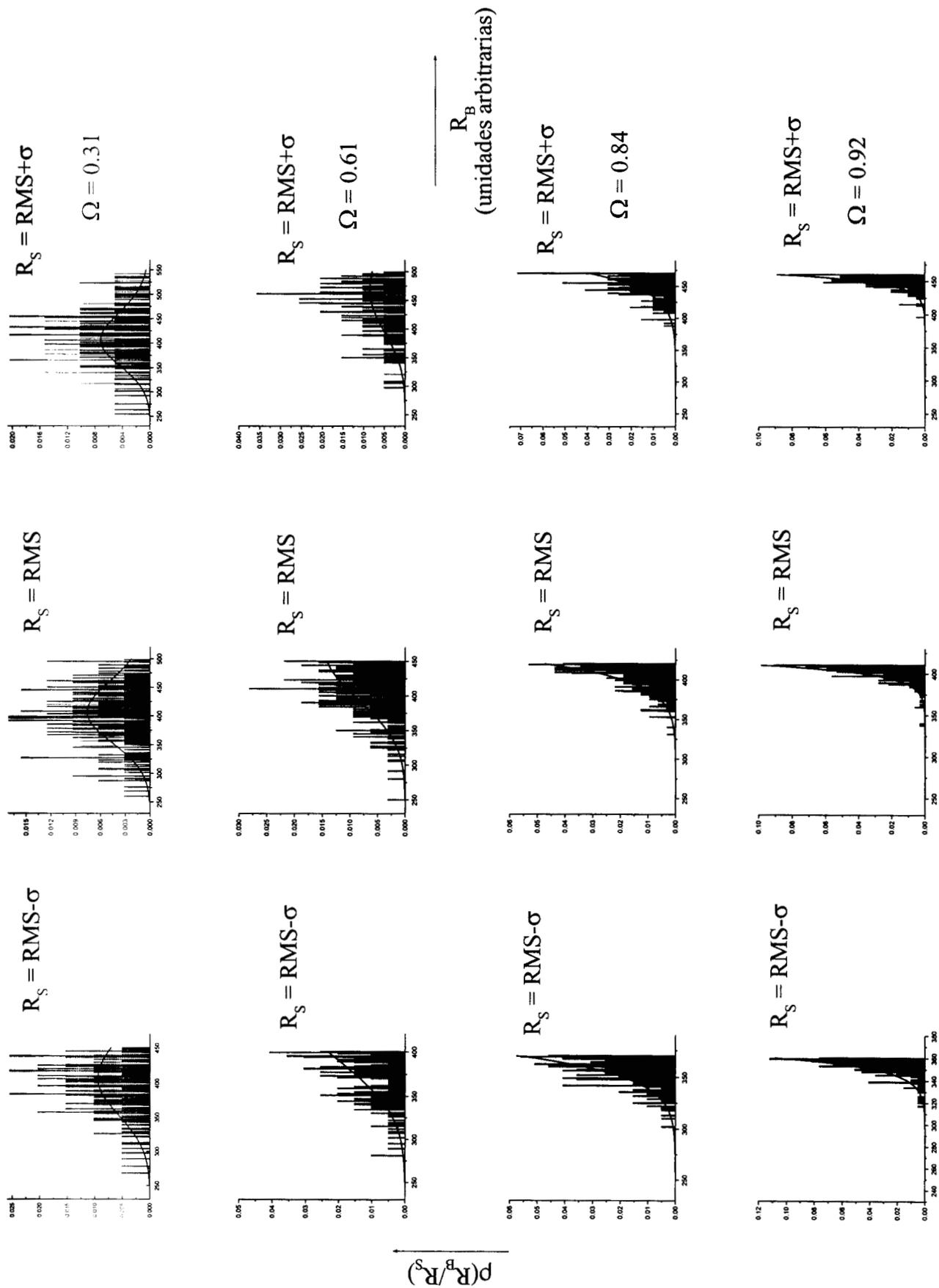
Finalmente, con objeto de observar la forma como el sistema evoluciona desde un estado inicial, caracterizado por una distribución espacial de tamaños de elementos totalmente aleatoria, hasta un estado de equilibrio, donde las correlaciones espaciales entre tamaños de elementos se ajustan a las predicciones de la teoría dual, se muestran en las figuras 25 a 32 la representación de los valores  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ , en comparación con los valores analíticos, tomando como muestras tres tamaños de sitios y tres tamaños de enlaces, para los estados iniciales y finales de las redes porosas (los estados finales corresponden al segundo estado señalado en el párrafo anterior).



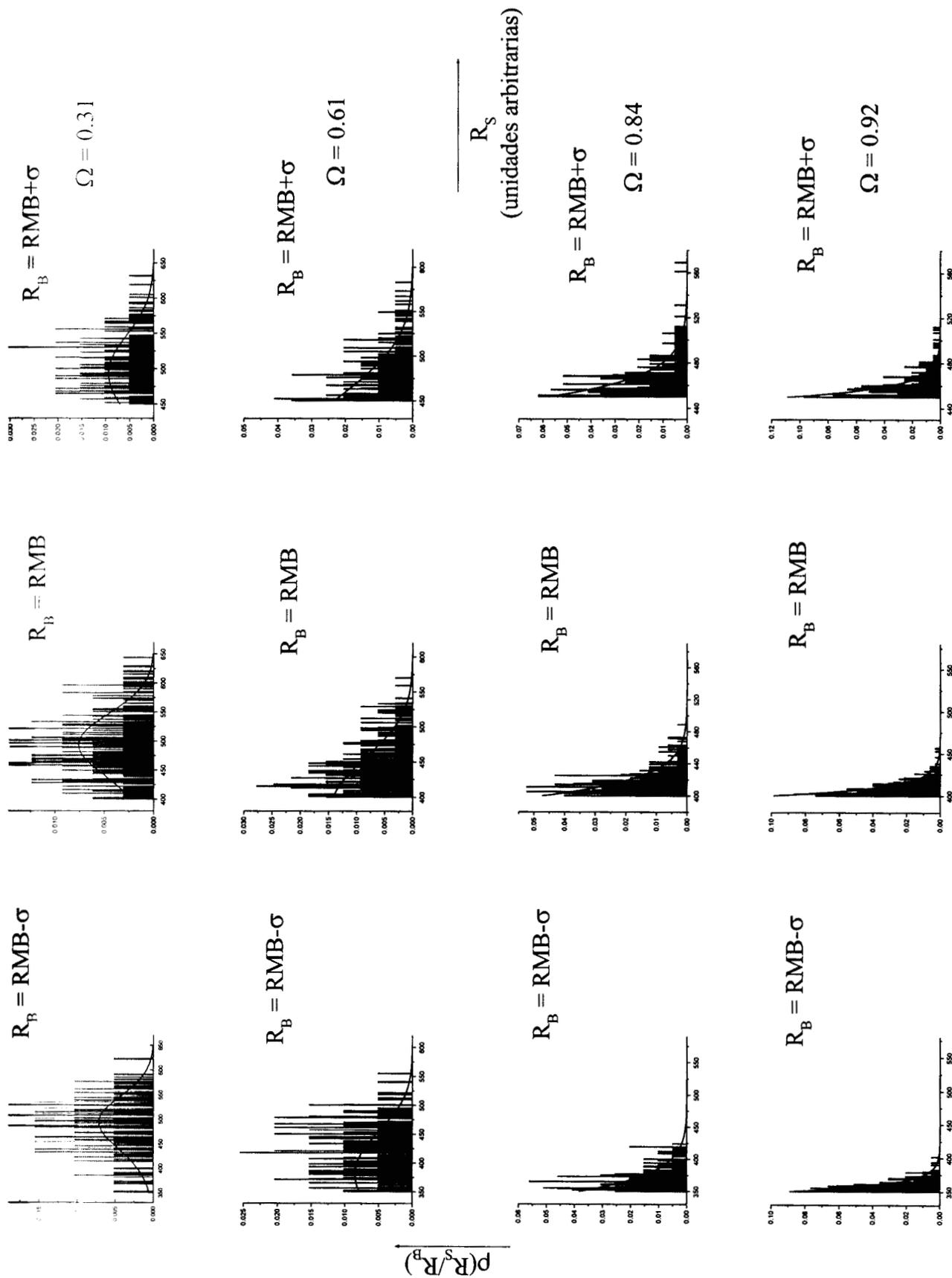
**Figura 25.** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de enlaces a partir de diversos tamaños de sitios,  $\rho(R_B/R_S)$ , para los estados iniciales de redes de  $100 \times 100$ , simuladas por el Método de Monte Carlo Puro. Se presentan resultados a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores encontrados en las redes en forma de histogramas de frecuencias.



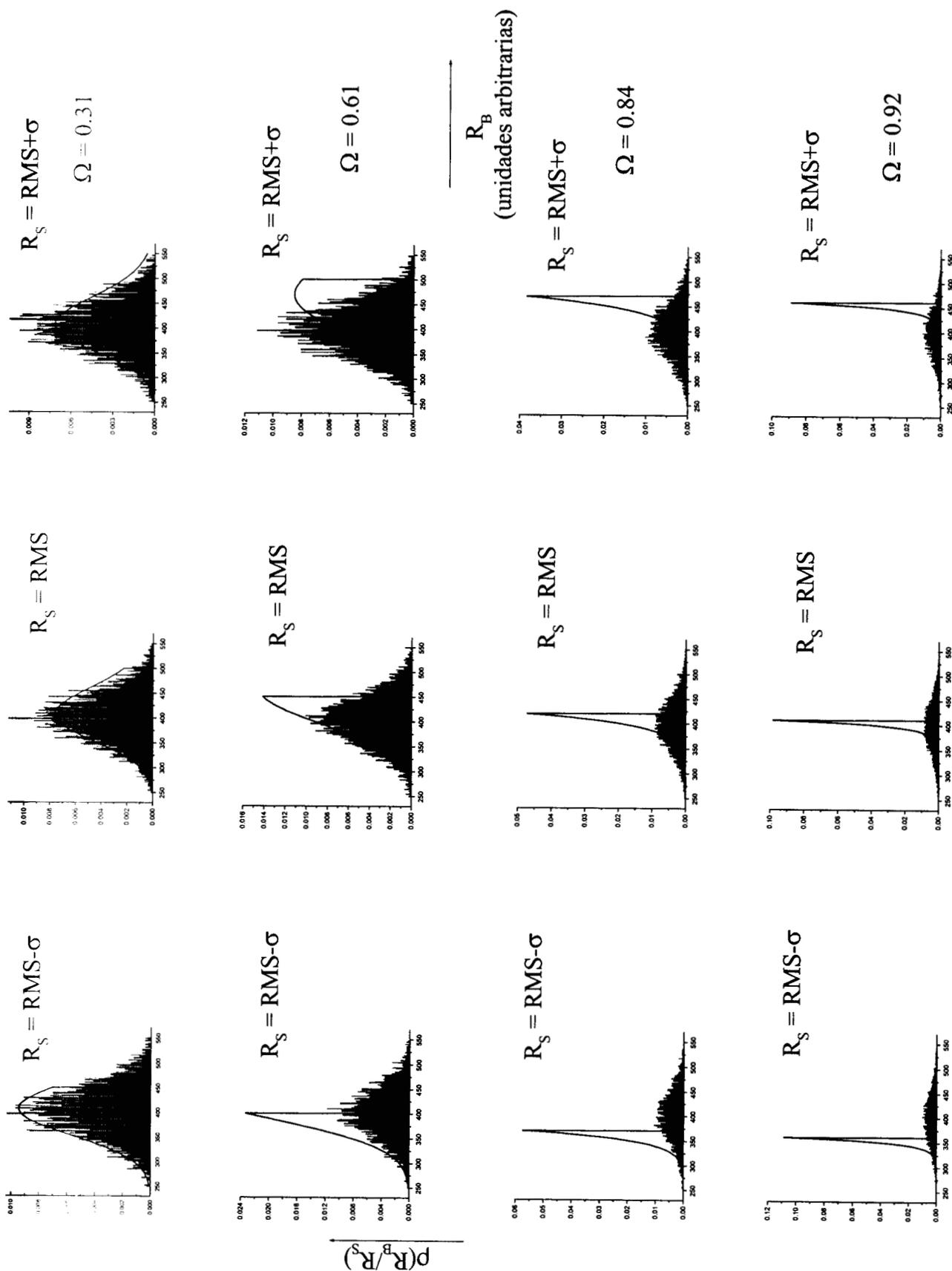
**Figura 26.** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de sitios a partir de diversos tamaños de enlaces,  $\rho(R_S/R_B)$ , para los estados iniciales de redes de  $100 \times 100$ , simuladas por el Método de Monte Carlo Puro. Se presentan resultados a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores de las redes en forma de histogramas de frecuencias.



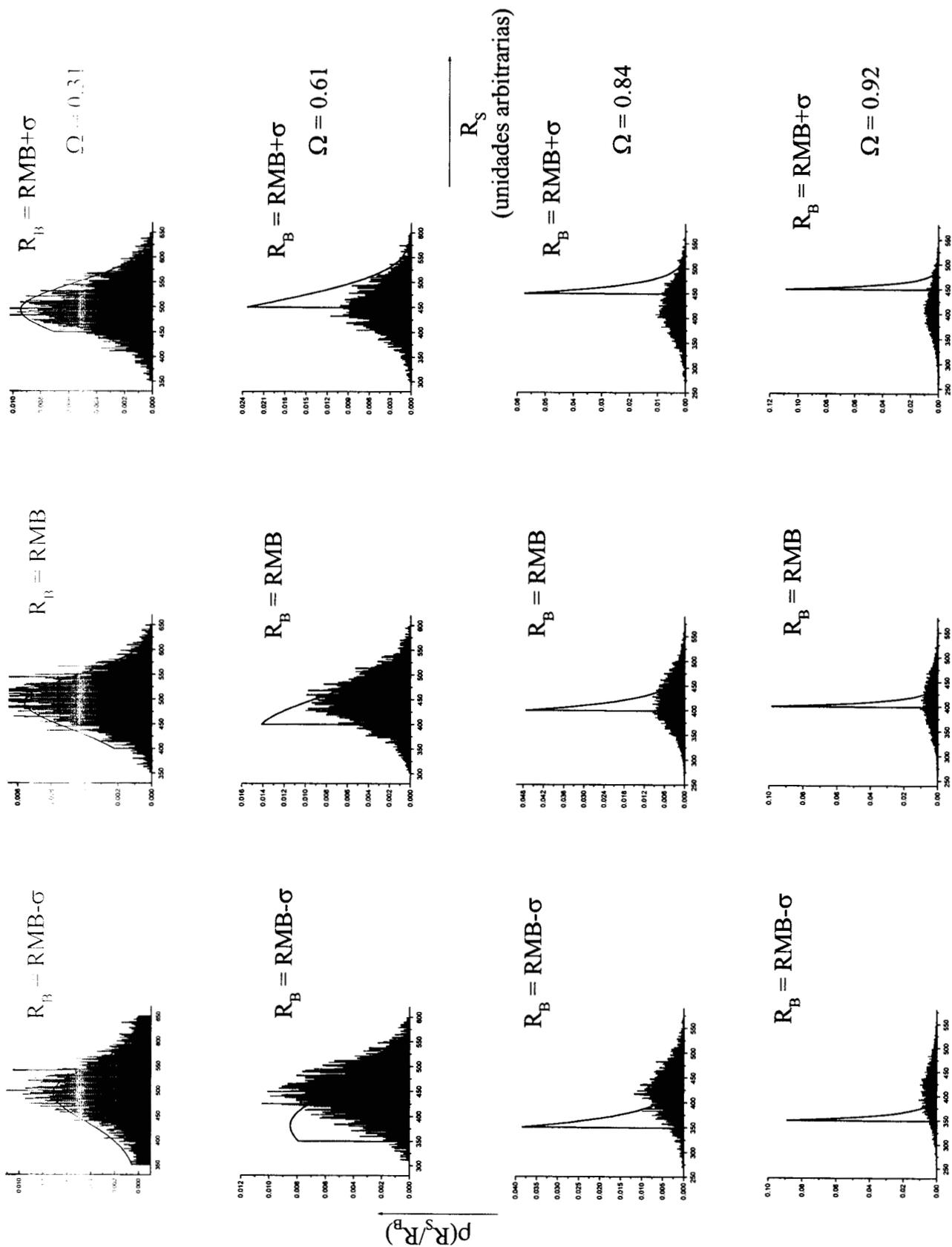
**Figura 27.** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de enlaces a partir de diversos tamaños de sitios,  $\rho(R_B/R_S)$ , para los estados de equilibrio de redes de 100x100, simuladas por el Método de Monte Carlo Puro. Se presentan los resultados a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencia.



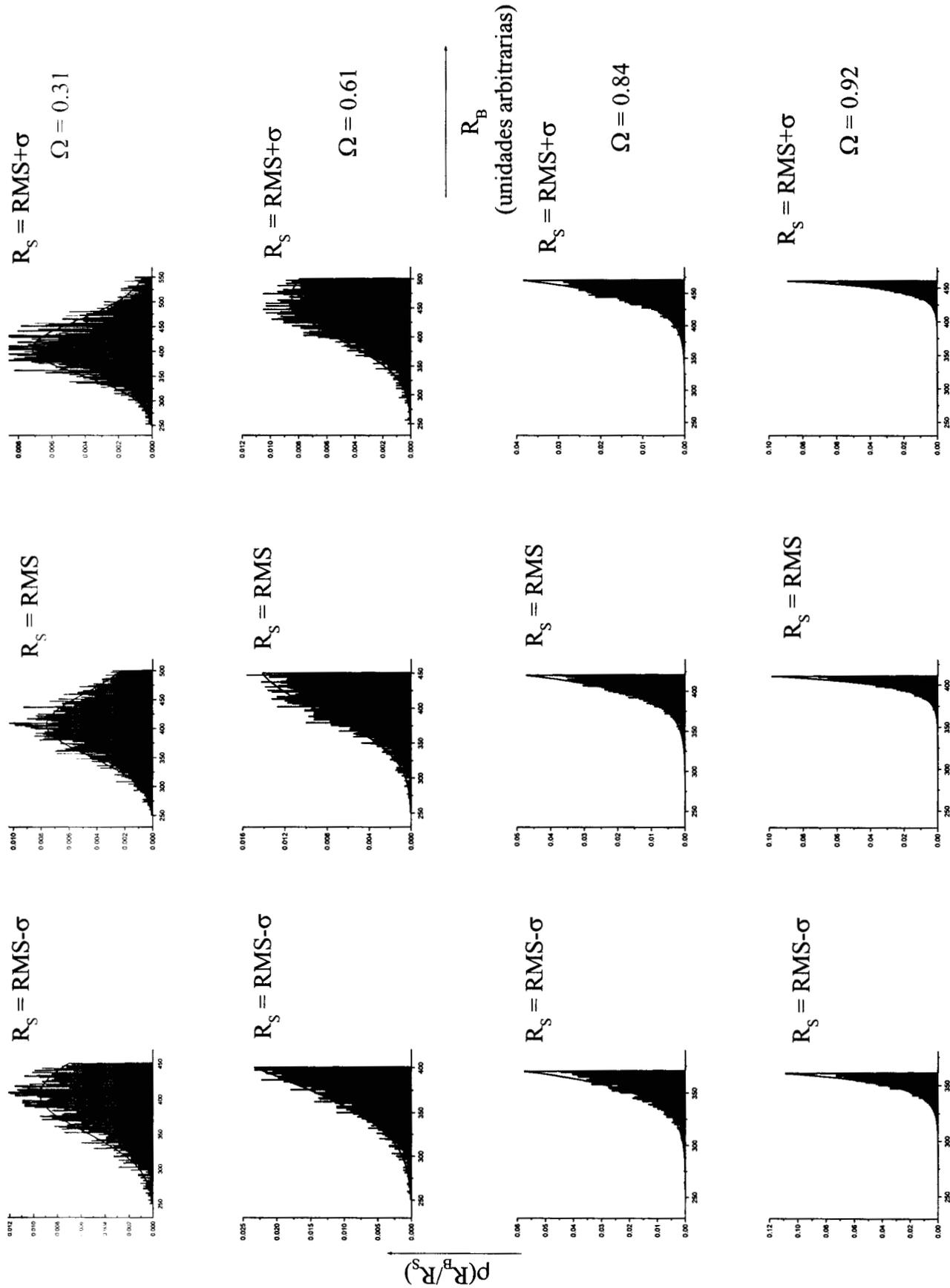
**Figura 28.** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de sitios a partir de diversos tamaños de enlaces,  $\rho(R_S/R_B)$ , para los estados de equilibrio de redes de  $100 \times 100$ , simuladas por el Método de Monte Carlo Puro. Se presentan los resultados a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencia.



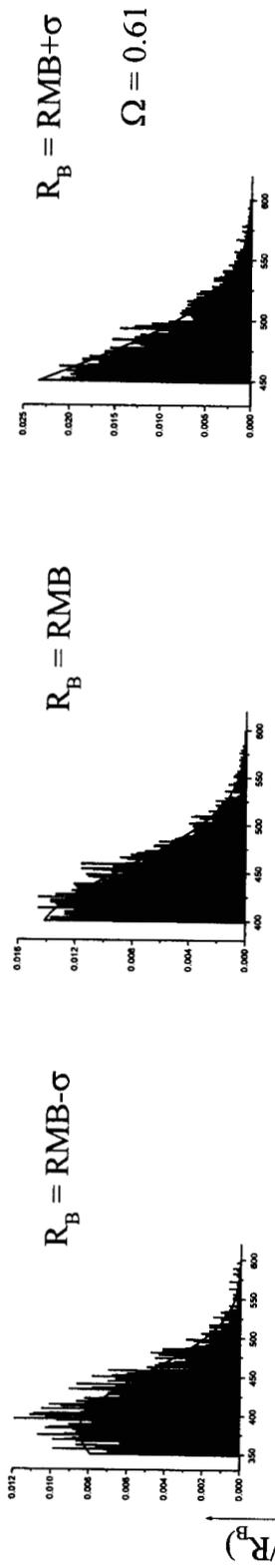
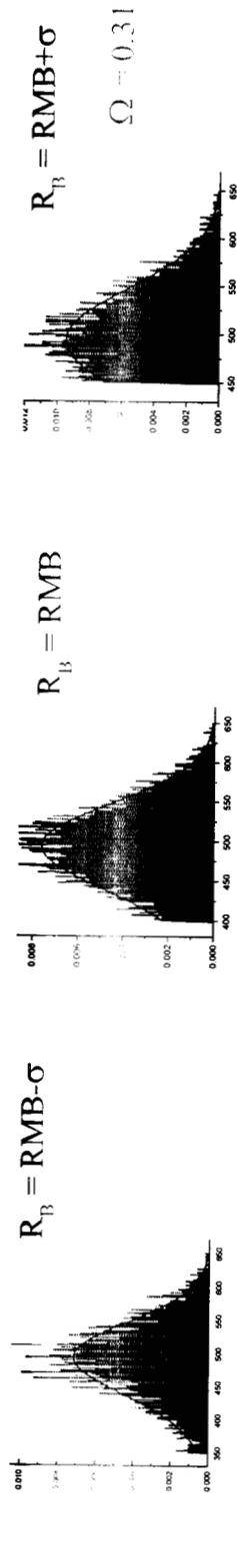
**Figura 29.** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de enlaces a partir de diversos tamaños de sitios,  $\rho(R_B/R_S)$ , para los estados iniciales de redes de 500x500, a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores de las redes en forma de histogramas de frecuencia.



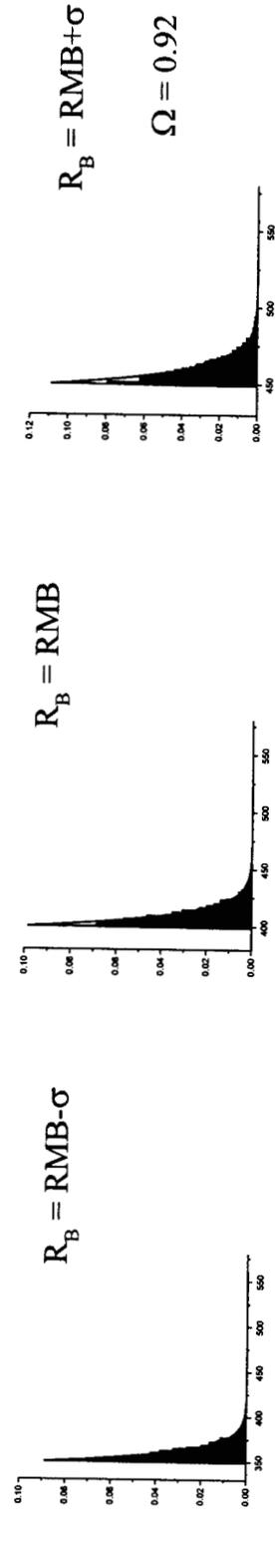
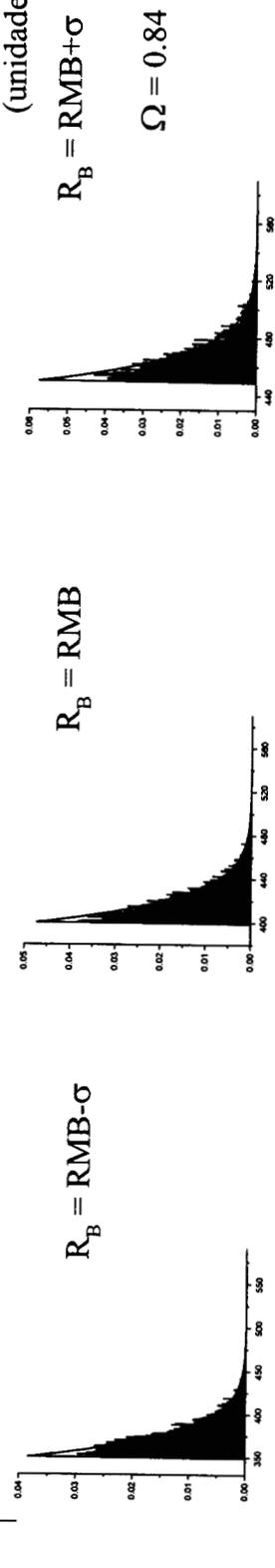
**Figura 30.** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de sitios a partir de diversos tamaños de enlaces,  $\rho(R_S/R_B)$ , para los estados iniciales de redes de  $500 \times 500$ , a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores de las redes en forma de histogramas de frecuencias.



**Figura 31.** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de enlaces a partir de diversos tamaños de sitios,  $\rho(R_B/R_S)$ , para redes de 500x500, construidas por el Método de Monte Carlo Puro, a distintos valores de traslaje. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencias.



$R_S$   
(unidades arbitrarias)



**Figura 32.** Densidades de probabilidad condicional de tamaños de sitios a partir de diversos tamaños de enlaces,  $\rho(R_S/R_B)$ , para redes de  $500 \times 500$  construidas por el Método de Monte Carlo Puro, a distintos valores de traslape. Los valores analíticos se representan por líneas continuas y los valores por Monte Carlo en forma de histogramas de frecuencia.

## 4.4 Discusión de resultados

### 4.4.1 Condiciones de equilibrio

Muy interesantes resultados se obtuvieron con la simulación de redes porosas utilizando el Método de Monte Carlo puro. Primeramente, hay que señalar el número de transiciones necesarias para que cada una de las redes alcancen sus condiciones de equilibrio. Si observamos los resultados expuestos en las tablas 13 a 16, se hace evidente que los valores de los momentos estadísticos evaluados en los estados 1 y 2 (definidos en la sección anterior), mantienen sólo un grado de fluctuación mínimo entre sí, es decir, son muy similares. Tampoco se observa alguna tendencia general en cuanto a cuáles de los momentos de estos dos estados mantienen mayor semejanza con los valores analíticos correspondientes; en algunas ocasiones son los momentos estadísticos del estado 1, los más semejantes a los valores analíticos, y en otras ocasiones, lo son los del estado 2. Todo esto nos lleva a suponer que cuando una red se somete a una serie de transiciones, ésta habrá alcanzado sus condiciones de equilibrio cuando todos los elementos obedezcan el PC; no se hace necesario un número de PMC adicionales. Es decir, las correlaciones entre tamaños de elementos se ajustarán a lo establecido en la función  $\phi(R_S, R_B)$  cuando todos los elementos de las redes obedezcan el PC; y en adelante, cualquier otro tipo de transición, sobre la red, no modificará significativamente este grado de interacción. Los valores de la función  $\phi(R_S, R_B)$ , evaluada sobre todos los posibles valores sólo fluctuarán ligeramente con respecto a ciertos valores promedio. Por lo tanto, mediante las secuencias señaladas en las tablas 10 a 12, redes con distribuciones Gaussianas y traslapes 0.61, 0.84 y 0.92, respectivamente, habrán alcanzado sus condiciones de equilibrio, y con 300 PMC una red con traslape 0.31. Es interesante señalar que las secuencias mantienen independencia con respecto al tamaño de las redes.

#### 4.4.2 Densidades de probabilidad condicional

Sorprendente es la manera como cada una de las redes evolucionaron desde condiciones de total aleatoriedad hasta un grado de interacción en concordancia con el respectivo valor del traslape. Si se observan las figuras 25 a 32, puede advertirse el cambio que experimentan las redes, desde sus estados iniciales hasta sus estados finales; siendo la evolución particularmente sorprendente para las redes con traslape elevado.

De acuerdo a los valores de los momentos estadísticos de las funciones  $\rho(R_B/R_S)$  y  $\rho(R_S/R_B)$ , en las tablas 13 a 16, puede advertirse que la coincidencia entre los valores esperados y los valores calculados mejora cuando aumenta el tamaño de las redes, para el caso de las redes con traslape bajo e intermedio (0.31 y 0.61, respectivamente); sin duda debido a que una red de tamaño 500 x 500 es sustancialmente más representativa que una de tamaño 100 x 100, en términos estadísticos. Sin embargo, para el caso de las redes con traslape alto (0.84 y 0.92, respectivamente) no es tan apreciable la situación anterior. Aunque para ambos tamaños la coincidencia es bastante buena, no se advierte un grado de mayor concordancia cuando el tamaño de la red aumenta, siendo esta una situación que no se había presentado para el caso de los resultados del Método ISC. Esta situación puede explicarse en términos de las diferencias existentes entre las estructuras generadas por los dos tipos de método. Esto último se explicará más adelante en la sección 4.4.4.

#### 4.4.3 Secuencias de cambios de estado

Las modificaciones efectuadas sobre las secuencias de cambios de estado resultaron ser bastante efectivas para que las redes alcanzasen sus condiciones de equilibrio, lográndose eliminar totalmente las inconsistencias señaladas en la sección 4.1. Como se señaló en la sección 4.3.1, el número de PMC necesarios para que las redes alcanzaran sus condiciones de equilibrio, creció con el valor del traslape. Si se observan las secuencias, se advertirá también que a medida que las redes se acercaban a sus condiciones de equilibrio, la reducción en el valor de  $z$  se hacía cada vez

menor. De esta forma se presentan situaciones contrastantes; por ejemplo, para la secuencia de las redes con  $\Omega = 0.31$ , el valor de  $z = 0$  se mantuvo constante a lo largo de todo el proceso, requiriéndose un número de sólo 300 PMC; mientras que para las redes con  $\Omega=0.92$ , el valor de  $z$  cambió sustancialmente a lo largo de todo el proceso (desde  $z = 1.6\sigma$ , hasta  $z = 0$ ), con un total de 24,000 PMC. La efectividad lograda con este procedimiento puede encontrarse relacionada con los resultados señalados en la sección 4.1. A medida que se incrementa el valor del traslape el número de PMC necesarios para reducir el número de inconsistencias, aumenta considerablemente. Puede inferirse, que a medida que el estado inicial de las redes se asemeje al estado de equilibrio, el número de transiciones necesarias para relajar la red, se reducirá, así como el valor inicial de  $z$ . De este modo, resulta relativamente sencillo aproximar al estado de equilibrio una red con traslape bajo; puesto que el grado de aleatoriedad en este estado se asemeja bastante al estado inicial. En el otro extremo, se tiene el caso de una red con traslape alto, en donde resulta una tarea relativamente difícil cambiar la configuración de la red, desde una condición inicial de total aleatoriedad, hasta un altísimo grado de correlación propio de una condición de traslape elevado. Cuando se tiene este último caso, resulta entonces efectiva la innovación señalada en este trabajo, tal vez porque de este modo se evitan asignaciones de tamaños sumamente inverosímiles para una situación de gran correlación de tamaños. Es decir, poco a poco se imponen a los elementos de la red asignaciones de tamaños de elementos vecinos con tamaño cada vez más semejante, a medida que se desarrolla el proceso de relajación. Imponer inicialmente a una red de traslape alto un valor de  $z = 0$ , produce entonces, al inicio de la secuencia de cambios de estado, situaciones en donde a un sitio de tamaño grande se le asignan tamaños de enlaces pequeños, lo cual resulta difícil de modificar a través del tiempo (PMC). Dado que para revertir esta última situación se necesitaría intercambiar el tamaño de ese sitio con el de uno de tamaño pequeño, lo cual es probable que ocurra, pero dado que el PC se debe de conservar a través de las transiciones, lo más probable es que ese sitio pequeño posea también enlaces de tamaño pequeño, por lo tanto, la situación final sería equivalente a la inicial.

Finalmente, hay que señalar que las secuencias presentadas en este trabajo no son las más óptimas, en cuanto a la minimización del número de PMC y manejo de los valores de la variable  $z$

en cada secuencia. Esto abre la posibilidad de optimizar las secuencias para cualquier valor de traslape, con objeto de reducir el número de PMC y por ende los tiempos de computo.

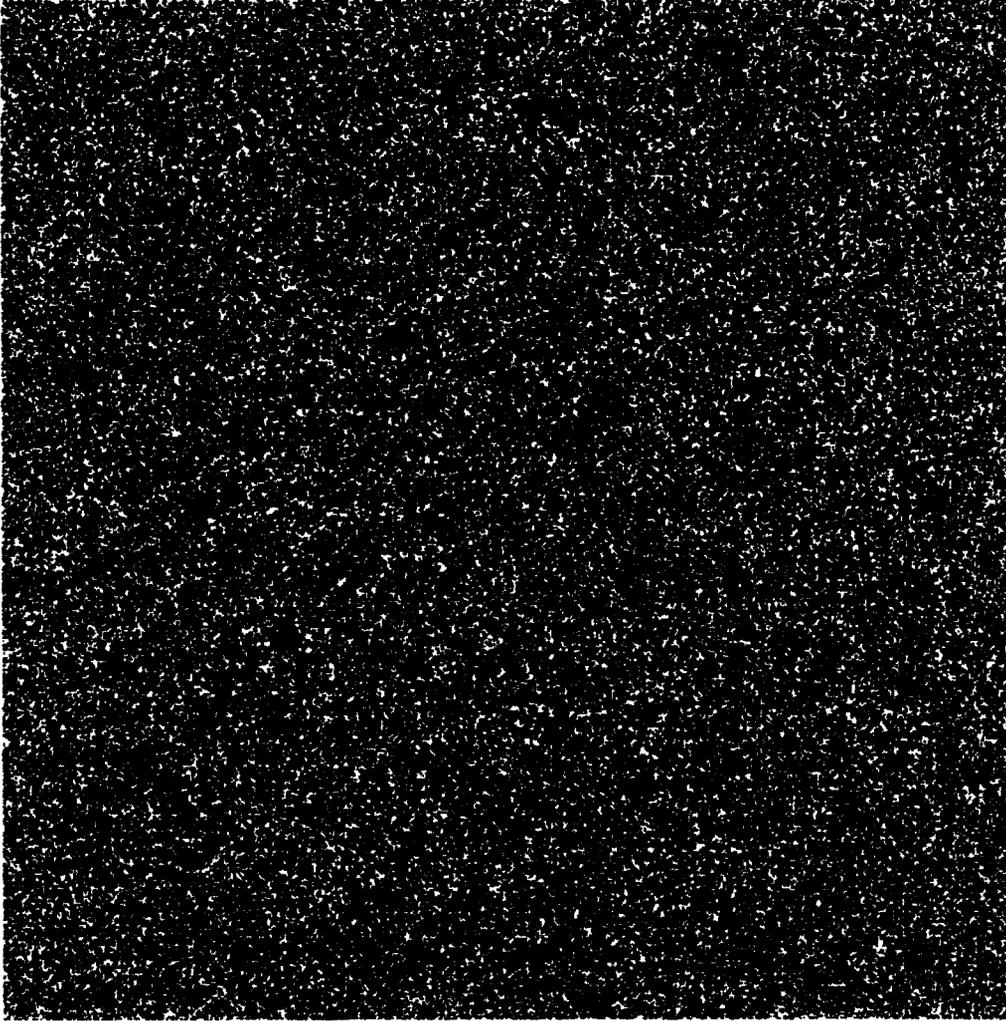
#### 4.4.4 Anisotropía

Resultados muy interesantes se encontraron evaluando cualitativamente esta propiedad de las redes porosas. Se había encontrado que para el caso de las redes construidas por el Método ISC se observaba una correlación de tamaños de elementos dependiente con la dirección (sección 3.3 del capítulo 3). Para el caso de las redes construidas con el Método de Monte Carlo Puro, la situación cambia sustancialmente. Obsérvese las figuras 33 a 36, en donde se representan de color verde las zonas formadas por sitios de tamaño pequeño (aquellos con tamaño menor a  $RMS - 0.43\sigma$ ); rojo, las compuestas por sitios de tamaño intermedio (aquellos mayores a los pequeños y menores a  $RMS - 0.43\sigma$ ); y con color amarillo las formadas por sitios de tamaño grande (aquellos con tamaño mayor al de los intermedios) para el estado 1 (véase la sección 4.3.2) de las redes obtenidas de tamaño 500x500. Puede advertirse en éstas que el grado de anisotropía se reduce considerablemente con respecto al caso de las redes del Método ISC. Con el Método de Monte Carlo Puro se construyen redes con un grado de isotropía bastante elevado, es decir con un grado de aleatoriedad superior al de las redes señaladas en el capítulo pasado. Este efecto, sin duda se consigue al utilizar una metodología en donde el tamaño de cada elemento depende del de todos los elementos que lo rodean, a diferencia del Método ISC, donde el tamaño de cada elemento se asigna de manera Markoviana, dependiendo del tamaño de los elementos que lo preceden en una secuencia direccionada.

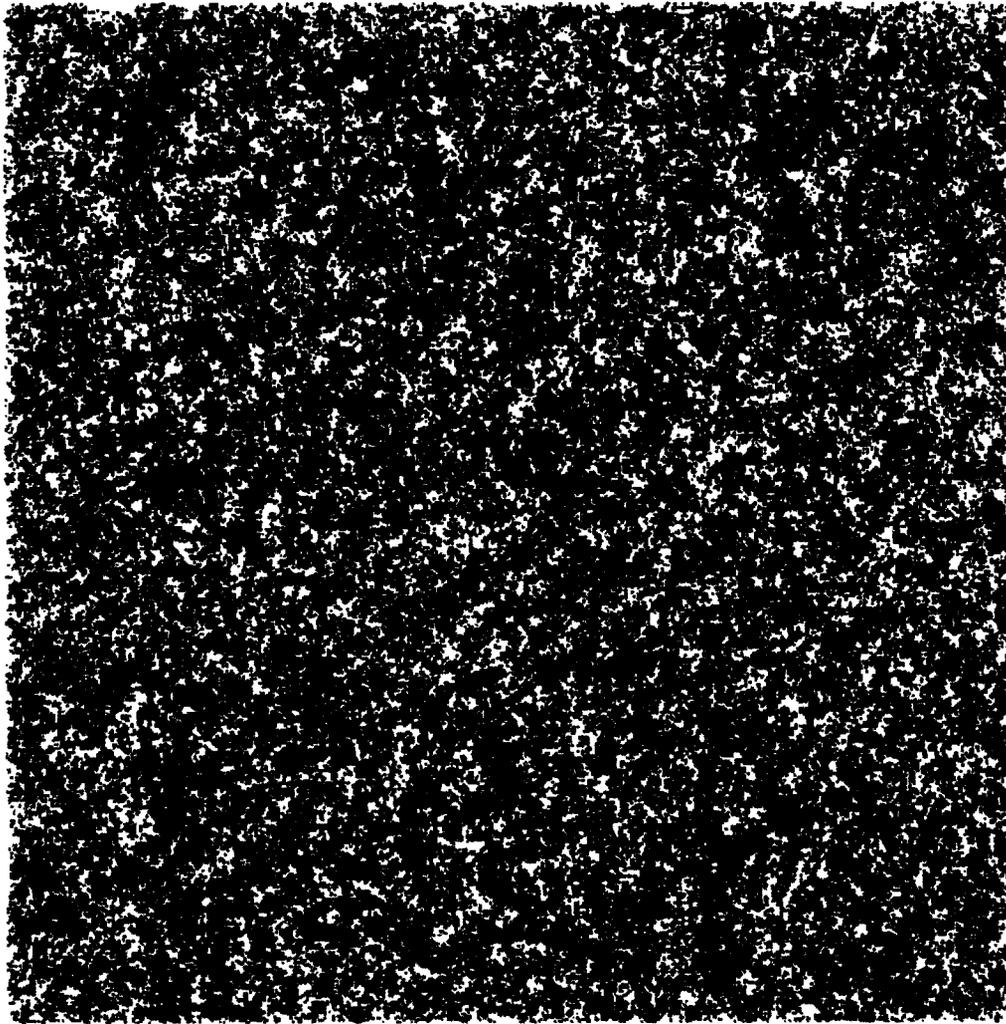
Interesante resulta también señalar la forma como se encuentran distribuidos a través del espacio poroso los distintos dominios o zonas de coexistencia de elementos con tamaño similar. En las figuras 33 a 36 puede observarse que los dominios formados por sitios de tamaño pequeño se encuentran separados de los de tamaño grande por medio de los de tamaño mediano (particularmente notable para el caso de las redes con traslape elevado). La situación anterior provoca que los dominios formados por elementos de tamaño pequeño y grande se encuentren

sumamente definidos en cuanto a su tamaño y forma, además de que presenten discontinuidad, y que los de tamaño mediano se encuentren ampliamente distribuidos, difusos y continuos a través de las redes porosas.

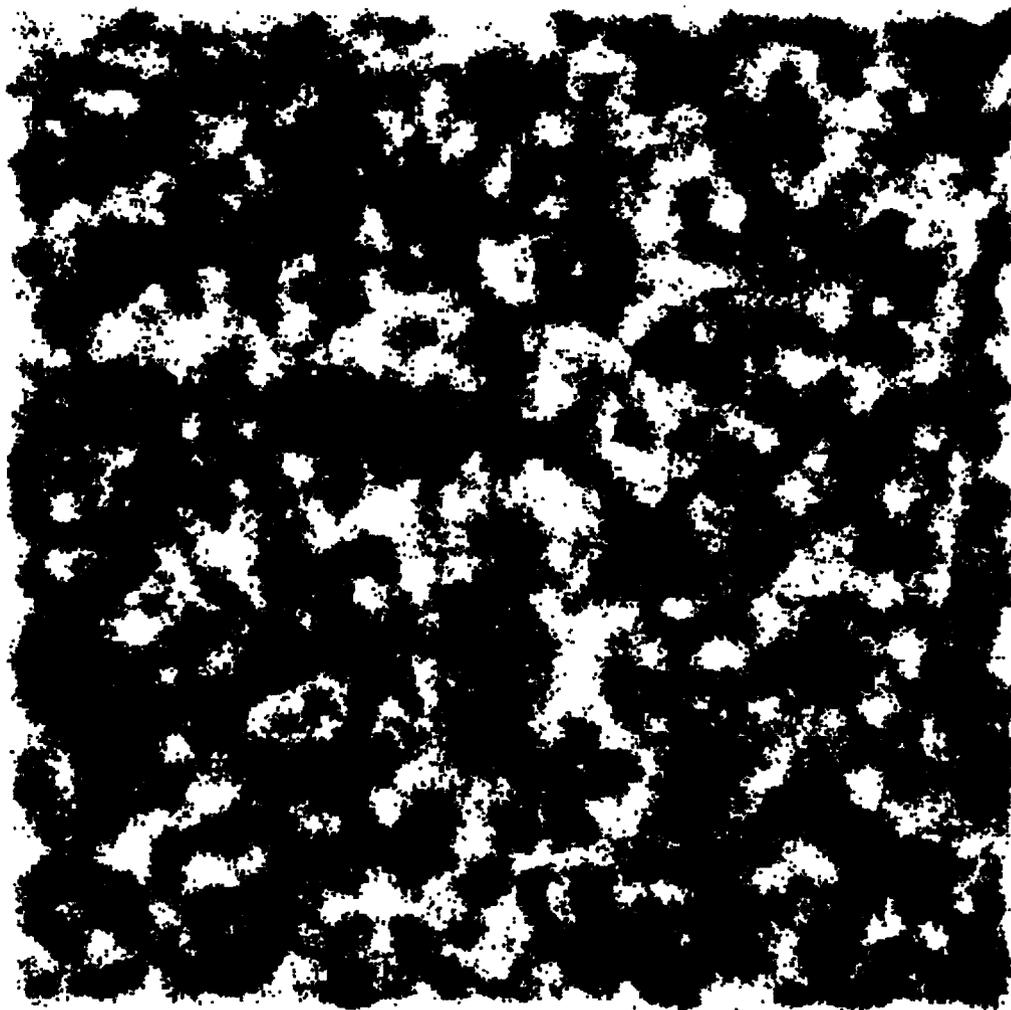
Sin embargo, la representación coloreada de tamaños de sitios permite observar algunos efectos importantes que no se habían tomado en consideración en trabajos anteriores. Obsérvese las figuras 37 a 40, en donde se representa lo mismo que en las figuras 33 a 36, solo que en este caso estas figuras corresponden al estado 2 de las redes (véase la sección 4.3.2). Ambos conjuntos de figuras corresponden a redes en equilibrio, pero con un número sustancialmente diferente de transiciones efectuadas sobre las redes. Sin embargo la forma y tamaño de las zonas formadas por elementos de tamaño similar, cambia de un conjunto a otro, para el caso de las redes con traslape mediano y elevado (0.61, 0.84 y 0.92, respectivamente). Cabe esperar si la situación anterior se debe a que dado el alto grado de correlación entre tamaños de elementos, un tamaño de red de 500x500 es insuficiente para que coexistan en equilibrio todas las zonas de segregación de tamaños; lo que podría explicar en parte la falta de coincidencia que se esperaría entre los valores de los momentos estadísticos con respecto a los valores analíticos de las redes de traslape elevado (ver la sección 4.4.2, redes de 500x500). Con base en lo anterior se hace necesario investigar en trabajos subsecuentes el efecto del tamaño de red y del tiempo de relajación con respecto al tamaño y forma de las zonas de segregación de tamaños de elementos, además de examinar cuantitativamente el grado de isotropía obtenido en una red con el Método de Monte Carlo Puro.



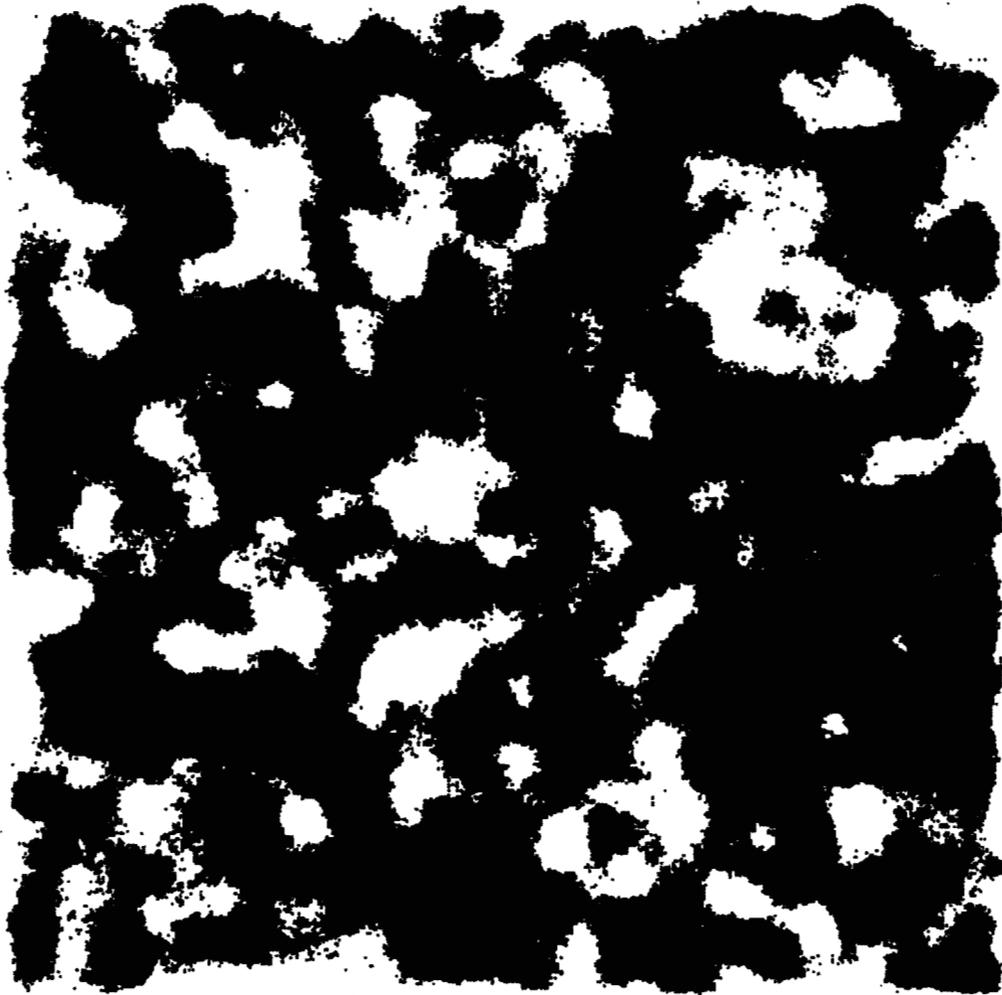
**Figura 33.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega = 0.31$ , construida por el Método de Monte Carlo Puro y correspondiente al primer estado de equilibrio. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS = 500$  y  $\sigma = 50$  (unidades arbitrarias).



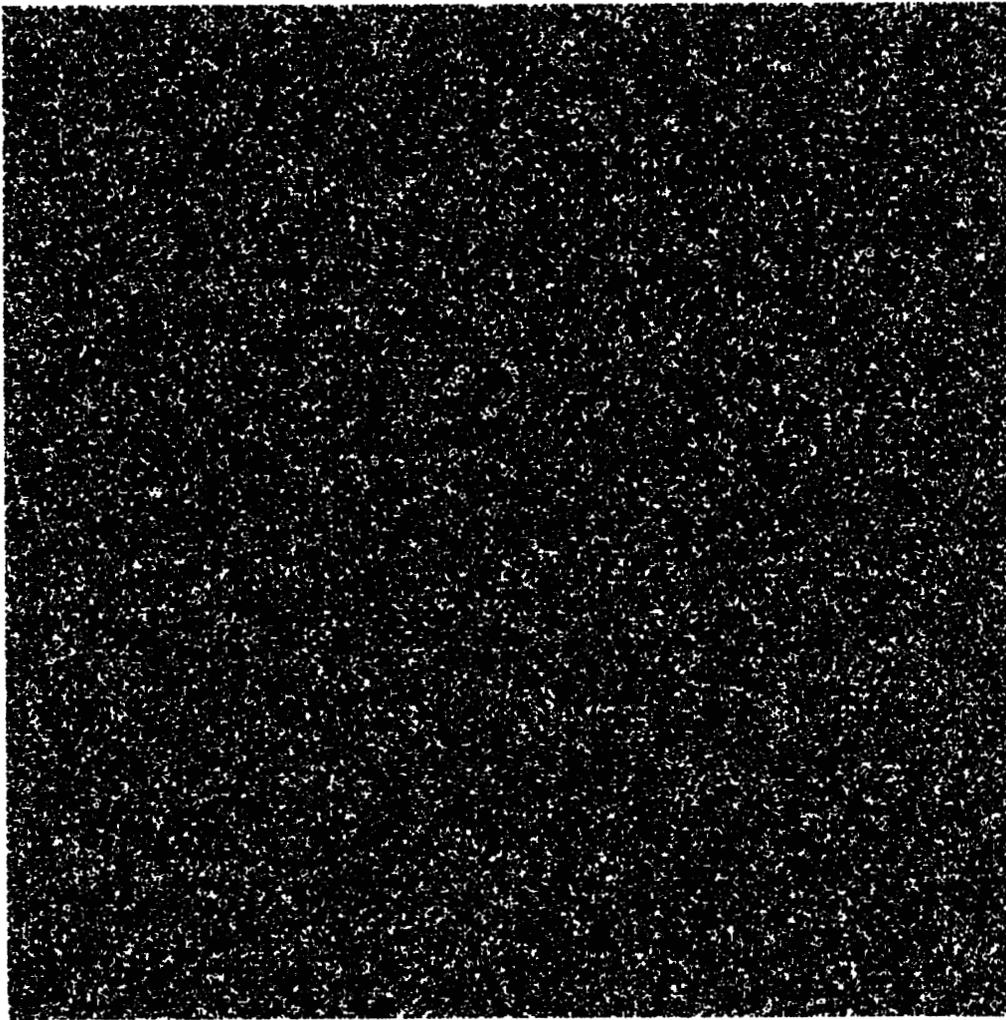
**Figura 34.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega = 0.61$ , construida por el Método de Monte Carlo Puro y correspondiente al primer estado de equilibrio. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS = 450$  y  $\sigma = 50$  (unidades arbitrarias).



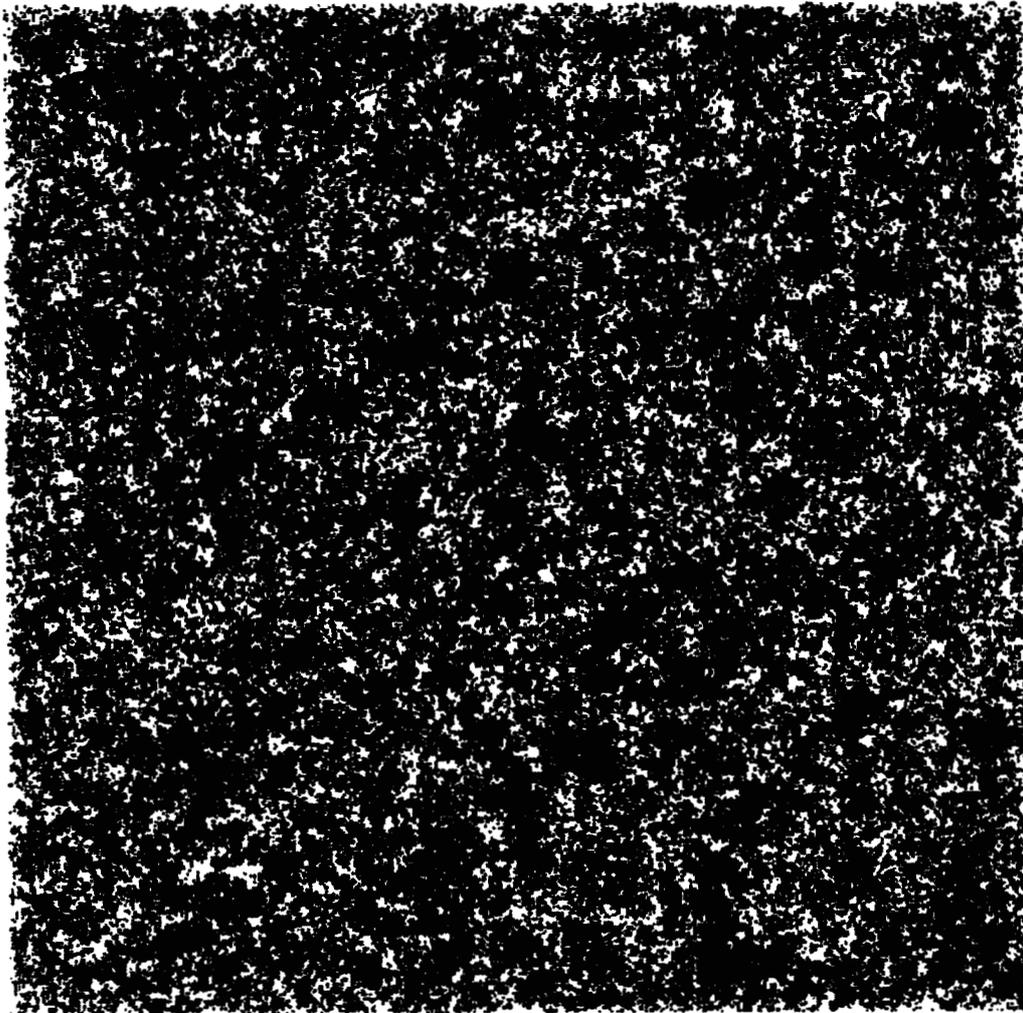
**Figura 35.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega = 0.84$ , construida por el Método de Monte Carlo Puro y correspondiente al primer estado de equilibrio. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS = 420$  y  $\sigma = 50$  (unidades arbitrarias).



**Figura 36.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega = 0.92$ , construida por el Método de Monte Carlo Puro y correspondiente al primer estado de equilibrio. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS = 410$  y  $\sigma = 50$  (unidades arbitrarias).



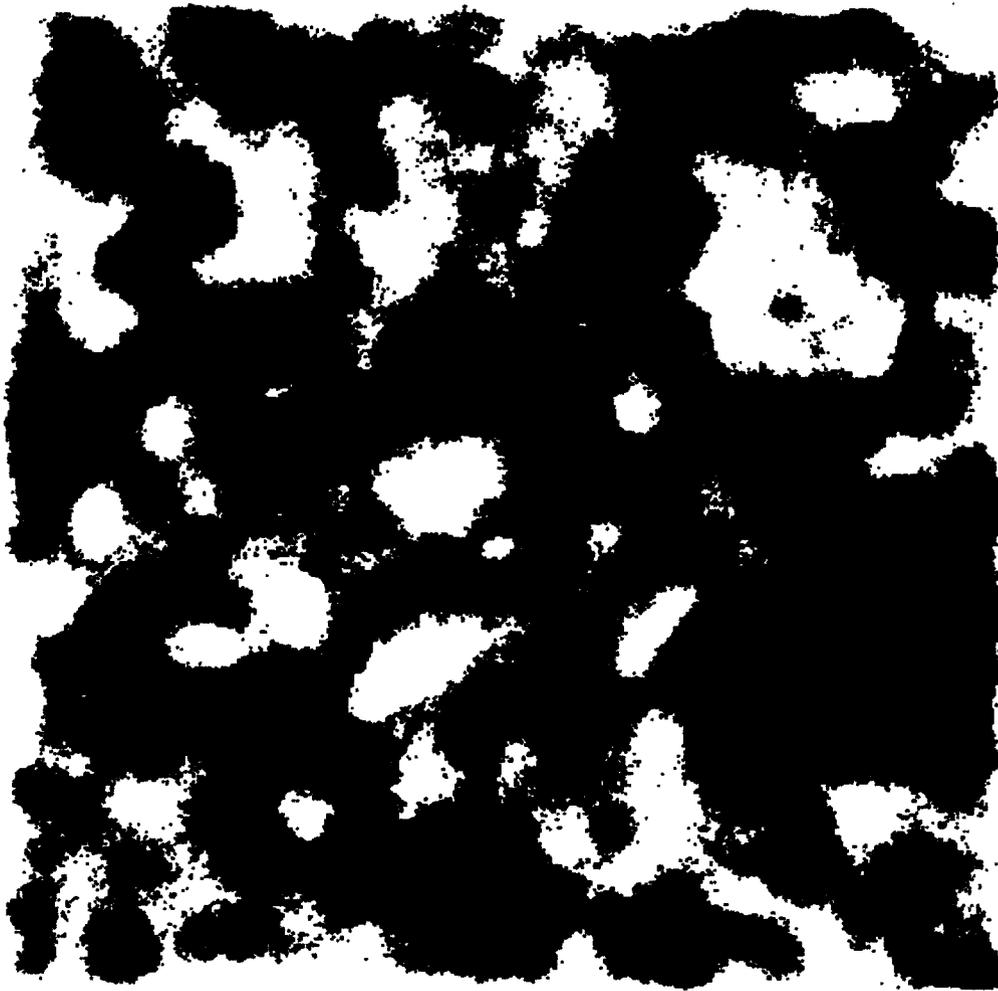
**Figura 37.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega = 0.31$ , construida por el Método de Monte Carlo Puro y correspondiente al segundo estado de equilibrio. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS = 500$  y  $\sigma = 50$  (unidades arbitrarias).



**Figura 38.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega = 0.61$ , construida por el Método de Monte Carlo Puro y correspondiente al segundo estado de equilibrio. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $\text{RMS} - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $\text{RMS} - 0.43\sigma$  y menores a  $\text{RMS} + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $\text{RMS} + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $\text{RMS} = 450$  y  $\sigma = 50$  (unidades arbitrarias).



**Figura 39.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega = 0.84$ , construida por el Método de Monte Carlo Puro y correspondiente al segundo estado de equilibrio. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS = 420$  y  $\sigma = 50$  (unidades arbitrarias).



**Figura 40.** Representación por colores de los tamaños de los sitios de la red porosa con  $\Omega = 0.92$ , construida por el Método de Monte Carlo Puro y correspondiente al segundo estado de equilibrio. El color verde representa a los sitios cuyo tamaño es menor a  $RMS - 0.43\sigma$ , el rojo a los mayores a  $RMS - 0.43\sigma$  y menores a  $RMS + 0.43\sigma$ , y el amarillo a los mayores a  $RMS + 0.43\sigma$ . Los enlaces no se muestran en la figura.  $RMS = 410$  y  $\sigma = 50$  (unidades arbitrarias).

## C O N C L U S I O N E S

Se efectuó una exploración sobre la construcción de redes porosas para valores de traslapes bajos ( $\Omega = 0.31$ ) intermedios ( $\Omega = 0.61$ ), y elevados ( $\Omega = 0.84$  y  $\Omega = 0.92$ ), entre las distribuciones de tamaños de sitios y enlaces. Para este fin, se utilizaron los métodos de simulación ISC (Autoconsistente Mejorado) y de Monte Carlo Puro. Los principios establecidos en la Descripción Dual de Medios Porosos, proveyeron los argumentos teóricos necesarios para la simulación de las redes porosas. Se construyeron redes de tamaño pequeño, i.e.  $3 \times 10^4$  elementos huecos (100 x 100 sitios) y también de tamaños mayores, i.e.  $7.5 \times 10^5$  (500 x 500 sitios) y  $3 \times 10^6$  elementos huecos (1000 x 1000 sitios). Los resultados conseguidos permiten establecer las siguientes conclusiones:

- El Método ISC permite una representación de un medio poroso con un grado de aleatoriedad en concordancia con la descripción dual. Esto queda demostrado con la certificación de las redes simuladas con base en el análisis de las funciones de distribución de tamaños de sitios y de enlaces obtenidas, y comparadas con las distribuciones de partida, así como de un análisis similar respecto a densidades de probabilidad condicional.
- Quedaron demostradas las premisas básicas establecidas por la teoría dual en la formulación de la autoconsistencia de redes en el Método ISC, que está basado en la asignación de tamaños de elementos con base en ciclos cerrados (en este caso para conectividad 4 se utilizó una secuencia cerrada de 4 sitios y 4 enlaces). Esto se demuestra observando los resultados satisfactorios obtenidos para las redes con valores de traslape elevados, sobre todo para los tamaños 500x500 y de 1000x1000 sitios. De esta forma, se demostró que el Método resulta conveniente para construir redes con cualquier valor de traslape entre las distribuciones de sitios y enlaces.
- Sin embargo el Método ISC y cualquier otro que utilice una secuencia de asignación de tamaños de tipo Markoviana presentan la desventaja de producir redes con un alto grado de anisotropía. Esto implica la construcción de redes con un grado de aleatoriedad inferior a las construidas por el Método de Monte Carlo Puro; aunque podrían ser utilizadas estas redes para simular estructuras isotrópicas.

- El Método de Monte Carlo Puro resulta conveniente para representar estructuras porosas con un grado de aleatoriedad satisfactorio, con relación a la descripción dual, como lo demuestra el análisis de las densidades de probabilidad condicional. Por otra parte, las estructuras obtenidas presentan un grado de isotropía considerablemente superior a los de las estructuras equivalentes construidas por el Método ISC, como lo demuestra la representación coloreada de tamaños de sitios (Figuras 33 a 40, capítulo IV).
- Se desarrolló una innovación en el Método de Monte Carlo Puro para extender su aplicación a redes con valores de traslape elevado. Se logró con ello una mejor comprensión sobre la forma como se encuentran distribuidos sobre el espacio poroso los distintos dominios o zonas de coexistencia de elementos de tamaño similar. Además se entendieron las razones por las cuales la metodología convencional se encontraba limitada para construir redes porosas con valores elevados de traslape.
- Se determinaron las condiciones bajo las cuales una red porosa simulada por el Método de Monte Carlo Puro alcanza un estado de equilibrio para las correlaciones espaciales predichas por la descripción dual. Dicho estado de equilibrio es alcanzado cuando la red porosa consigue un estado configuracional en el que todos sus elementos obedecen el Principio de Construcción.
- El estudio realizado en este trabajo abre la posibilidad de extender las aplicaciones de los Métodos de construcción de redes ISC y Monte Carlo Puro a la simulación de redes en tres dimensiones y redes irregulares (conectividad variable).

## P E R S P E C T I V A S F U T U R A S

Queda pendiente por investigar en estudios posteriores lo siguiente:

- Evaluación de condiciones de equilibrio referentes al tamaño y forma de los dominios o zonas de coexistencia de elementos con tamaño similar en redes simuladas por el Método de Monte Carlo Puro.
- Cuantificación del grado de isotropía en las redes simuladas por el Método de Monte Carlo Puro.
- Simulación en redes porosas de fenómenos como la condensación y evaporación capilar, imbibición y drenaje de fluidos e intrusión y retracción de mercurio.

## REFERENCIAS

- [1] de Boer, J.H. en Colston Papers, Vol. X: "*Structure and Properties of Porous Materials*", D.H. Everett y F.S. Stone, Eds., Butterworths, Londres (1958).
- [2] Everett, D.H. en Colston Papers, Vol. X: "*Structure and Properties of Porous Materials*", D.H. Everett y F.S. Stone, Eds., Butterworths, Londres (1958).
- [3] Everett, D.H. en "*The Solid-Gas Interface*", Vol. 2, E.A. Flood, Ed., Dekker, Nueva York (1967).
- [4] Gregg, S.J; Sing, K.S.W. "*Adsorption, Surface Area and Porosity*", Academic Press, Londres (1982).
- [5] Dullien, F.A.L. "*Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure*", Academic Press, Nueva York (1979); p 1.
- [6] Sahimi, M. "*Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*", VCH, Weinheim (1995).
- [7] Matthews, G.P.; Ridgway, C.J.; Spearing, M.C. *J. Colloid Interface Sci.* **1995**, 171, 8.
- [8] Spearing, M.C.; Matthews, G.P. *Transp. Porous Media* **1991**, 6, 71.
- [9] Seaton, N.A. *Chem. Eng. Sci.* **1991**, 46, 1895.
- [10] Liu, H. *Chem. Eng. Sci.* **1992**, 47, 4393.
- [11] Liu, H. *Chem. Eng. Sci.* **1994**, 49, 1869.
- [12] Tsakiroglou, C.D.; Payatakes, A.C. *J. Colloid Interface Sci.* **1991**, 46, 167.
- [13] Cox, M.A.A. *Chem. Eng. Sci.* **1991**, 46, 167.
- [14] Spanne, P.; Thovert, J.F.; Jacquin, C.J.; Lindquist, W.B.; Jones, K.W.; Adler, P.M. *Phys. Rev. Lett.* **1994**, 73, 2001.
- [15] Giona, M.; Adrover, A. *AIChE Journal* **1996**, 42, 1407.
- [16] Linand, C.; Cohen, M.H.; *J. Appl. Phys.* **1982**, 53, 4152.
- [17] Kwiecien, M.J.; Mac Donald; Dullien, F.A.L. *J. Microsc.* **1990**, 159, 343.
- [18] V. Mayagoitia, F. Rojas, I. Kornhauser, J. Chem. Soc. Faraday Trans. I, **1988**, 84, 801.
- [19] Mayagoitia, V.; Rojas, F.; Kornhauser, I. *Langmuir* **1993**, 9, 2748.

- [20] Mayagoitia, V.; Kornhauser, I. En *Principles and Applications of Pore Structural Characterization*; Haynes, J.M., Rossi-Doria, P., Eds.; Arrowsmith: Bristol, 1985; p 15.
- [21] Mayagoitia, V.; Cruz, M.J.; Rojas, F. *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1* **1989**, 85, 2071.
- [22] Cruz, M.J.; Mayagoitia, V.; Rojas, F. *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1* **1989**, 85, 2079.
- [23] Mayagoitia, V.; Rojas, F.; Kornhauser, I. *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1* **1988**, 84, 785.
- [24] Mayagoitia, V.; Gilot, V.; Rojas, F.; Kornhauser, I. *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1* **1988**, 84, 801.
- [25] Mayagoitia, V. En *Characterization of Porous Solids II*; Rodríguez-Reinoso, F., Rouquerol, J., Sing, K.S.W., Unger, K.K., Eds.; Elsevier: Amsterdam, 1991; p 51.
- [26] Mayagoitia, V.; Rojas, F.; Kornhauser, I.; Zgrablich, G.; Riccardo, J.L. En *Characterization of Porous Solids III (Studies in Surface Science and Catalysis, Vol. 87)*; Rouquerol, J., Rodríguez-Reinoso, F., Sing, K.S.W., Unger, K.K., Eds.; Elsevier: Amsterdam, 1994; p 141.
- [27] Mayagoitia, V.; Rojas, F. En *Fundamentals of Adsorption III*; Mersmann; A.B., Scholl, S.E., Eds.; The Engineering Foundation: New York, 1991; p 563.
- [28] Mayagoitia, V. *Catal. Lett.* **1993**, 22, 93.
- [29] Mayagoitia, V.; Rojas, F.; Pereyra, V.D.; Zgrablich, G. *Surf. Sci.* **1989**, 221, 394.
- [30] Mayagoitia, V.; Rojas, F.; Riccardo, J.L.; Pereyra, V.D.; Zgrablich, G. *Phys. Rev. B* **1990**, 41, 7150
- [31] Mayagoitia, V.; Kornhauser, I. En *Fundamentals of Adsorption IV*; Suzuki, M., Ed.; Kodansha: Tokyo, 1993; p 421.
- [32] Mayagoitia, V.; Domínguez, A.; Rojas, F. *J. Non-Cryst. Solids* **1992**, 147&148, 183.
- [33] Mayagoitia, V.; Rojas, F.; Kornhauser, I. *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **1994**, 2, 259.
- [34] Kuznetsova, G.B.; Mayagoitia, V.; Kornhauser, I. *Int. J. Polym. Mater.* **1993**, 19, 19.
- [35] Mayagoitia, V.; Cruz, M.J.; Rojas, F.; Kornhauser, I.; Zgrablich, G.; Pereyra, V. D. *Gas Sep. Purif.* **1992**, 6, 35.
- [36] Mayagoitia, V.; Rojas, F.; Kornhauser, I.; Pérez, H. *Langmuir* **1997**, 13, 1327.
- [37] Riccardo, J. L.; Steele, W.A.; Ramirez Cuesta, A.J.; Zgrablich, G. *Langmuir* **1997**, 13, 1064.
- [38] Dubinin, M.M. *Zhur. Phys. Chem.* **1960**, 34, 959.
- [39] Dubinin, M.M. *Chem. Rev.* **1960**, 60, 235.

- [40] Karnaukhov, A.P. “*Pore Structures and Properties of Materials*”, S. Modrý, Ed. Academia, Praga (1973), Vol. I; p A-23.
- [41] Washburn, E.W. *Phys. Rev.* **1921**, 17, 273.
- [42] Barret, E.P.; Joyner, L.G.; Hallenda, P.H. *J. Am. Chem. Soc.* **1951**, 73, 373.
- [43] Brunauer, S.; Mikhail, R. Sh.; Bodor, E.E. *J Colloid Interface Sci.* **1967**, 24, 451.
- [44] Broekhoff, J.C.P.; de Boer, J.H. *J. Catal.* **1967**, 9, 8
- [45] Broekhoff, J.C.P.; de Boer, J.H. *J. Catal.* **1967**, 9, 15.
- [46] Cranston, R.W.; Inkley, F.A. *Adv. Catal.* **1957**, 9, 143.
- [47] Ball, P.C.; Evans, R. *Langmuir* **1989**, 5, 714.
- [48] Mason, G. *Proc. R. Soc. London A* **1988**, 415, 453.
- [49] Efremov, D.K; Fenelov, V.B. In “*Characterizacion of Porous Solids II*”; F. Rodriguez-Reinoso *et al.*, Eds.; Elsevier, Amsterdam, 1991,p 115.
- [50] Liu, H.; Zhang, L.; Seaton, N.A. *J. Colloid Interface Sci.* **1993**, 156, 285.
- [51] Andrade, J.S.; Street, D.A.; Shibusa, Y.; Havlin, S.; Stanley, H.E. *Phys. Rev. E* **1997**, 55, 772.
- [52] Hirsch, L.M.; Thompson, A.H. *Phys. Rev. E* **1994**, 50, 2069.
- [53] Loh, K.C; Wang, D.I.C. *J. Chromatography A* **1995**, 718, 239.
- [54] Kainourgiakis, M.E.; Stubos, A.K.; Konstantinou, N.D.; Kanellopoulos, N.K.; Milisic, V. *J. Membrane Sci.* **1996**, 114, 215.
- [55] Liu. H.; Zhang, L.; Seaton, N.A. *Chem. Eng. Sci.* **1992**, 47, 4393.
- [56] Blunt, M.J; Scher, H. *Phys. Rev. E* **1995**, 52, 6387.
- [57] Mani, V.; Mohanty, K.K. *J. Colloid Interface Sci.* **1997**, 187, 45.
- [58] Ioannidis, M.A.; Chatzis, I. *J. Colloid Interface Sci.* **1993**, 161, 278.
- [59] Tsakiroglou, C.D.; Payatakes, A.C. *J. Colloid Interface Sci.* **1991**, 146, 479.
- [60] Mason, G.; Mellor, D.W. *J. Colloid Interface Sci.* **1995**, 176, 214.
- [61] Ioannidis, M.A.; Chatzis, I. *Water Resour. Res.* **1993**, 29, 1777.
- [62] Bryant, S.; Mason, G.; Mellor, D. *J. Colloid Interface Sci.* **1996**, 177, 88.
- [63] Binder, K. *Rep. Prog. Phys.* **1997**, 60, 448.
- [64] Burganos, V.N.; Payatakes A.C. *Chem. Eng. Sci.* **1992**, 47, 1383.
- [65] Metropolis, N.; Rosenbluth, M.N.; Teller, A.H. *J. Chem. Phys.* **1953**, 21, 1087.

## GLOSARIO DE SIMBOLOS Y ABREVIATURAS

PC	Principio de Construcción
Método ISC	Método Autoconsistente Mejorado
PMC	Paso de Monte Carlo (Número de transiciones igual al total de elementos de una red porosa)
$R_S$	Radio de sitios
$R_B$	Radio de enlaces
RMS	Tamaño medio de sitios
RMB	Tamaño medio de enlaces
$\sigma$	Desviación estándar
$s_1$	Tamaño mínimo de una distribución de tamaños de sitios
$s_2$	Tamaño máximo de una distribución de tamaños de sitios
$b_1$	Tamaño mínimo de una distribución de tamaños de enlaces
$b_2$	Tamaño máximo de una distribución de tamaños de enlaces
C	Conectividad (número de enlaces conectados a un sitio)
$F_S(R_S)$	Función normalizada de tamaños de sitios
$F_B(R_B)$	Función normalizada de tamaños de enlaces
$S(R)$	Probabilidad de encontrar un sitio de tamaño menor o igual a $R_S$
$B(R)$	Probabilidad de encontrar un sitio de tamaño menor o igual a $R_B$
$\Omega$	Traslape existente entre distribuciones de sitios y enlaces
$F(R_S \cap R_B)$	Densidad de probabilidad de ocurrencia conjunta de encontrar un tamaño $R_S$ para un sitio conectado a un enlace de tamaño $R_B$
$\phi(R_S, R_B)$	Función de correlación entre un sitio de tamaño $R_S$ y un enlace de tamaño $R_B$
$\rho(R_S/R_B)$	Densidad de probabilidad condicional de que dado un enlace de tamaño $R_B$ uno de sus sitios tenga un tamaño $R_S$

$\rho(R_B/R_S)$	Densidad de probabilidad condicional de que dado un sitio de tamaño $R_S$ uno de sus enlaces tenga un tamaño $R_B$
$f(R_B, R_S)$	Función de gasto de enlaces de tamaño $R_B$ para asignarse a sitios de tamaño $R_S$
N	Número de sitios en una red porosa
M	Número de enlaces en una red porosa
$x_i$	Estado configuracional “i” de tamaños de elementos de una red porosa
$W(x \rightarrow x')$	Probabilidad de transición en una red porosa para un cambio desde el estado inicial $x$ hasta el estado final $x'$
$P(x)$	Densidad de probabilidad de existencia del estado $x$ de una red porosa
z	Variable que incrementa en una cantidad constante el tamaño de los sitios de una red porosa