

9  
24



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO.**

**ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS PROFESIONALES ACATLAN.**

**ESTUDIOS DE AGREGACIÓN COLOIDAL VIA  
SIMULACIÓN POR COMPUTADORA.**



**T E S I S** que para obtener el título de

**Lic. Matemáticas Aplicadas y Computación presenta:**

**GEORGINA ESLAVA GARCÍA.**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS PROFESIONALES "ACATLAN"

DIVISION DE MATEMATICAS E INGENIERIA  
PROGRAMA DE ACTUARIA Y M.A.C.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

SRITA. GEORGINA ESLAVA GARCIA  
Alumna de la carrera de M.A.C.  
P r e s e n t e .

Por acuerdo a su solicitud presentada con fecha 28 de octubre de 1993, me complace notificarle que esta Jefatura tuvo a bien asignarle el siguiente tema de Tesis: "Estudios de Agregación Coloidal, Vía Simulación por Computadora", el cual se desarrollará como sigue:

INTRODUCCION

CAP. I Dimensión Fractal de un Conjunto.

CAP. II Teoría y Simulación de Caminatas Aleatorias.

CAP. III Agregación Limitada por Difusión (DLA).

CAP. IV Agregación Coloidal Cúmulo-Cúmulo.

CONCLUSIONES.

ANEXO 'A'

BIBLIOGRAFIA.

Asimismo, fué designado como Asesor de Tesis DR. AGUSTIN E. GONZALEZ FLORES.

Ruego a usted tomar nota que en cumplimiento de lo especificado en la Ley de Profesiones, deberá presentar servicio social durante un tiempo mínimo de seis meses como requisito básico para sustentar Examen Profesional, así como de la disposición de la Coordinación de la Administración Escolar en el sentido de que se imprima en lugar visible de los ejemplares de la Tesis el título del trabajo realizado. Esta comunicación deberá imprimirse en el interior de la misma.

E.N.E.P. ACATLAN

A T E N T A M E N T E  
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"  
Acatlán, Edo. Méx. julio 3 de 1995

ACT. LAURA MARQUEZ BECERRA  
Jefe del Programa de Actuarias y M.A.C.  
MATEMATICA E INGENIERIA  
PROGRAMA DE ACTUARIAS Y M.A.C.

cg'

*A mis padres.*

*Como muestra de cariño y eterno agradecimiento  
por el apoyo y estímulos brindados.*

*Agradezco a la E.N.E.P. Acatlan, U.N.A.M.  
el haberme permitido ingresar a sus aulas  
en donde adquirí valiosos conocimientos.*

*Agradezco al Dr. Agustín E. González I.,  
el haberme asesorado durante la elaboración  
de este trabajo de investigación, a sí como  
por los conocimientos que me brindó,  
por su paciencia y apoyo.*

*Agradezco también a la Cia. CRAY Research  
por la beca otorgada para la realización de  
esta tesis (Proyecto No. SC100394).*

*Agradezco a mi esposo su  
paciencia, comprensión y  
estímulos brindados*

*Agradezco a mis hermanos  
el ánimo y apoyo otorgado.*

**GEORGINA ESLAVA GARCÍA**

---

**ESTUDIOS DE AGREGACIÓN COLOIDAL  
VÍA SIMULACIÓN POR COMPUTADORA.**

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.**

<b>INDICE.</b>
----------------

<b>INTRODUCCIÓN.</b> .....	1.
<b>CAPÍTULO 1 : DIMENSIÓN FRACTAL DE UN CONJUNTO.</b> .....	4.
1.1 Definición de fractal. ....	5.
1.2 Tipos de fractales. ....	6.
1.2.1. Fractales determinísticos. ....	7.
1.2.2. Fractales aleatorios. ....	11.
1.2.3. Fractales autoafines. ....	13.
1.3 Dimensión fractal. ....	14.
1.4 Métodos para determinar la dimensión fractal. ....	18.
1.4.1. Obteniendo la dimensión fractal mediante experimentos. ....	18.
1.4.2. Método de evaluación de datos numéricos. ....	20.
<b>CAPÍTULO 2 : TEORÍA Y SIMULACIÓN DE CAMINATAS ALEATORIAS.</b> .....	23.
2.1 Teoría de las caminatas aleatorias. ....	24.
2.1.1. Distancia extremo a extremo cuadrática media. ....	25.
2.1.2. Distribución de la distancia extremo a extremo en dos dimensiones. ....	27.
2.1.3. Distribución de la distancia extremo a extremo en tres dimensiones. ....	30.
2.1.4. Dimensión fractal de una caminata aleatoria. ....	33.
2.2 Simulación de caminatas aleatorias. ....	34.
2.2.1. Simulación de caminatas aleatorias en una red bidimensional. ....	34.
2.2.2. Simulación de caminatas aleatorias en una red tridimensional. ....	38.
2.2.3. Simulación de caminatas aleatorias en el espacio continuo bidimensional. ....	41.
2.2.4. Simulación de caminatas aleatorias en el espacio continuo tridimensional. ....	43.
<b>CAPÍTULO 3 : AGREGACIÓN LIMITADA POR DIFUSIÓN (DLA).</b> .....	46.
3.1. Agregación Limitada por Difusión en una red bidimensional. ....	50.
3.2. Agregación Limitada por Difusión en una red tridimensional. ....	55.
3.3. Agregación Limitada por Difusión en el espacio continuo bidimensional. ....	58.



<b>CAPÍTULO 4 : AGREGACIÓN COLOIDAL CÚMULO - CÚMULO.</b>	<b>66.</b>
4.1. Agregación Coloidal Cúmulo - Cúmulo en una red bidimensional.	70.
<b>CONCLUSIONES.</b>	<b>82.</b>
<b>ANEXO A.</b>	<b>i.</b>
A - I. Algoritmo de la simulación de caminatas aleatorias en una red bidimensional.	iii.
A - II. Algoritmo de la simulación de caminatas aleatorias en una red tridimensional.	iv.
A - III. Algoritmo de la simulación de caminatas aleatorias en el espacio continuo bidimensional.	vi.
A - IV. Algoritmo de la simulación de caminatas aleatorias en el espacio continuo tridimensional.	vii.
A - V. Algoritmo de la simulación de Agregación Limitada por Difusión en una red bidimensional.	viii.
A - VI. Algoritmo de la simulación de Agregación Limitada por Difusión en una red tridimensional.	xii.
A - VII. Algoritmo de la simulación de Agregación Limitada por Difusión en el continuo bidimensional.	xvi.
A - VIII. Algoritmo de la simulación de Agregación Coloidal Cúmulo-Cúmulo en una red bidimensional.	xxi.
<b>BIBLIOGRAFÍA.</b>	<b>85.</b>

## INTRODUCCIÓN.

*El estudio de sistemas coloidales ha tenido un gran auge en el mundo científico y tecnológico en las últimas décadas, debido a que el desarrollo industrial ha requerido de diversos productos y sustancias cuya composición contiene partículas coloidales, como por ejemplo papel, plástico, pinturas, caucho, productos alimenticios, telas, etc. La forma coloidal más sencilla tratada teóricamente es la esférica y muchos sistemas coloidales las contienen, como son emulsiones, látexes, dispersión de materiales poliméricos como caucho, goma y plásticos en agua, algunas moléculas de proteína, etc. Los estudios realizados en este trabajo de investigación son basados en esta forma, por la simplicidad en cuanto a manipulación que esta representa.*

*En estos sistemas existen uno o más componentes cuya dimensión aproximada es de  $1\text{nm}^1$  a  $1\mu\text{m}^2$  de diámetro, lo que quiere decir que el sistema contiene grandes moléculas y partículas individuales. La superficie de esas esferas está generalmente cargada electrostáticamente y, cuando hay un solvente ionizador, la fuerza de atracción de Van der Waals<sup>3</sup> es insuficiente a la fuerza de repulsión electrostática; entonces las esferas se mantienen alejadas unas de otras sin que sea posible que se peguen. Pero en el caso contrario se produce el fenómeno en que las partículas se pueden pegar con una probabilidad  $p$ ; a esto se le llama agregación. Además las partículas coloidales se encuentran en movimiento debido a la colisión aleatoria con las moléculas del medio en suspensión, con otras partículas y con las paredes del recipiente que las contiene. Debido a esto su dirección está constantemente cambiando, describiendo una trayectoria en zig-zag; a este movimiento aleatorio se le conoce como movimiento Browniano.*

*El reciente interés en este fenómeno ha sido dirigido hacia dos tipos de problemas, la agregación partícula - agregado y la agregación agregado - agregado. El primero de éstos es descrito por el modelo llamado Agregación Limitada por Difusión (D.L.A.), en donde el único cúmulo formado crece a expensas de las partículas que se difunden y se pegan a su contorno. Al segundo lo describe el modelo de Agregación Coloidal Limitada por Difusión (D.L.C.A.), también conocido como Agregación Cúmulo - Cúmulo, en donde las partículas y cúmulos del*

<sup>1</sup> 1 nanómetro (nm) =  $1 \cdot 10^{-9}$  m

<sup>2</sup> 1 micrómetro ( $\mu\text{m}$ ) =  $1 \cdot 10^{-6}$  m

<sup>3</sup> La fuerza de atracción de Van der Waals es la fuerza proveniente de las atracciones entre las moléculas que componen los coloides.

sistema se difunden simultáneamente y se pegan al contacto. Estos dos modelos generan agregados cuyas formas son conocidas como objetos fractales y en los cuales se calcula la dimensión fractal. Esta medida da información sobre la distribución de la masa del objeto en el espacio euclidiano de dimensión  $d$ .

Por lo tanto, la hipótesis que en esta tesis se pretende comprobar, se enuncia como un supuesto a continuación:

"Las partículas coloidales sufren un movimiento Browniano, el cual es una caminata aleatoria en el espacio. Estas partículas individuales al chocar se pegan formando cúmulos, los cuales a su vez efectúan caminatas aleatorias y se pegan con otros cúmulos."

Por consiguiente, el objetivo de este trabajo de investigación es el de introducir un algoritmo, cuyo funcionamiento sea basado en la hipótesis anterior, que describa la Agregación Coloidal vía simulación por computadora, y que proporcionen la fractalidad de los cúmulos formados, así como la descripción cinética de la formación de los mismos. Mediante el cual será posible comparar los resultados obtenidos de él con los de la realidad, para así establecer la certeza o falsedad de esa suposición.

Para ello, se hace uso de la técnica de simulación, como una alternativa para resolver el problema que surge de este estudio, por ser una forma numérica para conducir el experimento por medio de una computadora digital considerando modelos que describen el comportamiento del sistema en un periodo de tiempo. De esta manera, se lograrán simular y controlar las condiciones experimentales. Al mismo tiempo se podrán comprimir largos periodos de tiempo y se podrá experimentar sin exponerse a los errores en el mundo real.

Es por eso que en el desarrollo de este trabajo, primero se estudiarán caminatas aleatorias. En seguida pasamos a modelos de agregación no tan complicados como son la Agregación Limitada por Difusión, para finalizar con un modelo de agregación más complicado, pero muy apegado a la realidad, como es el Modelo de Agregación Cúmulo - Cúmulo.

Este trabajo de investigación ha sido estructurado en cuatro partes. En el Capítulo I se estudiará el concepto de fractal, los tipos de fractales existentes, la dimensión fractal y los métodos para determinarla, profundizando sólo en aquellos temas que sean necesarios para la comprensión de este trabajo. Pasando al Capítulo II, sobre Teoría y Simulación de Caminatas Aleatorias que se presentan en el proceso de difusión de las partículas coloidales, se estudiarán las caminatas vía simulación por computadora y se realizará paralelamente una comparación con la teoría. Posteriormente en el Capítulo III es estudiado el Modelo de Agregación Limitada por difusión (DLA), también conocido como agregación partícula - cúmulo, que es un primer paso para entender la agregación coloidal; se proporcionan algoritmos que describen dicho proceso en redes bi y tridimensionales, así como en el espacio continuo en dos dimensiones. Para finalizar se estudiará el modelo de Agregación Coloidal Limitada por Difusión (DLCA) o Agregación Coloidal Cúmulo-Cúmulo, tratado en el Capítulo IV. En ambos modelos se proporciona la dimensión fractal de los cúmulos formados por las simulaciones realizadas.

En seguida se presentan las conclusiones a las que se llegaron después de la investigación y realización de los algoritmos, además se incluye un anexo que contiene ocho algoritmos. Los cuatro primeros contienen los programas de las simulaciones de caminatas aleatorias en redes bi y tridimensionales y en el espacio continuo de dos y tres dimensiones; el quinto, sexto y séptimo presentan la codificación de las simulaciones del modelo de Agregación Limitada por Difusión (DLA) en redes de dos y tres dimensiones, así como en el espacio continuo bidimensional, respectivamente; por último, el octavo contiene el programa de la simulación de la Agregación Coloidal Limitada por Difusión en red de dos dimensiones (DLCA).

Estos algoritmos son codificados en lenguaje FORTRAN por ser un lenguaje compilador de alto nivel que se utiliza especialmente para la programación científica, ya que es el que más se asemeja al álgebra. El equipo en el que fueron compilados y corridos son estaciones de trabajo DEC y Silicon Graphics, del Instituto de Física, U.N.A.M.

Finalmente se enumera la Bibliografía correspondiente, que fue utilizada como consulta para la elaboración de esta tesis.

## **CAPÍTULO 1.**

### **DIMENSIÓN FRACTAL DE UN CONJUNTO**

## 1. DIMENSIÓN FRACTAL DE UN CONJUNTO.

### 1.1 DEFINICIÓN DE FRACTAL.

En la naturaleza existen gran variedad de formas irregulares o fragmentadas a tal extremo que resulta difícil y a veces imposible describirlas en el espacio euclidiano. Tal es el caso de las líneas de la costa de una isla oceánica, ya que no puede decirse que es circular o elíptica, tampoco puede ser utilizada alguna curva para representarla debido a su trayectoria Browniana. A este tipo de objetos se les denomina fractales, del latín fractus que significa fracción, fragmento, y es empleada para indicar irregularidad o fragmentación. Por lo tanto, desde el punto de vista cualitativo un fractal es un objeto rugoso, fragmentado, de forma irregular, con constantes disgregaciones e interrupciones o con cavidades u hoyos de diversos tamaño.

Aunque el término fractal ha sido conocido por los matemáticos desde hace mucho tiempo, no fue sino hasta los años setentas en que Benoit Mandelbrot introdujo el concepto de fractal físico, demostrando la gran variedad de formas geométricas que presentan estas estructuras, por ejemplo las caminatas aleatorias, los agregados, etc. y presentó importantes investigaciones sobre el tema en sus libros editados en 1975, 1977 y 1982. Sus aportaciones, esencialmente basadas en geometría, fueron aceptadas y utilizadas en muchas áreas de la ciencia, entre ellas la Química, Física, Matemáticas, Medicina, etc.

Como característica de estos objetos mencionaremos la autosimilaridad, que quiere decir que la estructura es invariable a cambios de escala; esto significa que si es tomada y aislada una porción del mismo, ésta presentará las mismas características que las del original. Por ejemplo, si observamos una fotografía tomada desde un aeroplano de la costa de Bretaña, se observan curvas cuya apariencia será muy similar a otra foto de la misma playa tomada a otra altura. Análogamente, un rama presentará una forma ramificada, con hoyos de diversos tamaños, al igual que la silueta del árbol del que fue extraída visto a distancia. De manera general la autosimilaridad se define de la siguiente manera, mostrando primero el concepto de similaridad.

En el espacio euclidiano  $R^k$ , una razón real  $r > 0$  determina una transformación de similitud, si esta transforma al punto  $x = (x_1, \dots, x_k)$  en el punto  $rx = (rx_1, \dots, rx_k)$ , y por lo tanto un conjunto  $S$  es transformado a  $r(S)$ .

Un conjunto acotado es autosimilar con respecto a una razón  $r$  y un entero  $N$ , cuando  $S$  es la unión de  $N$  subconjuntos no traslapados, cada uno de los cuales es congruente a  $r(S)$ . Congruente significa idéntico, excepto por desplazamiento y/o rotación. Por ejemplo la junta de Sierpinski que se ilustra en la figura 1.3, en la que  $r = 1/2$  y  $N = 3$ . En ella puede observarse que un subtriángulo presenta las mismas características que todos los demás subtriángulos contenidos en el original.

Para conjuntos no acotados,  $S$  es autosimilar con respecto a la razón  $r$ , cuando el conjunto  $r(S)$  es congruente a  $S$ .

En seguida se muestran los diferentes tipos de fractales, los cuales son clasificados por su forma y construcción.

## 1.2 TIPOS DE FRACTALES

En forma amplia podemos dividir a los fractales en dos grupos: de volumen y de superficie. Los fractales de volumen consideran a todos los elementos que componen al objeto, mientras que los de superficie sólo contemplan aquellos elementos que se sitúan en la frontera del mismo.

Por otra parte, debido a la gran variedad de formas geométricas que resultan de una amplia variedad de procesos de formación, es necesario clasificarlas en los siguientes tipos:

- 1.2.1. Fractales Determinísticos
- 1.2.2. Fractales Aleatorios
- 1.2.3. Fractales Autoafines

A continuación nos enfocaremos a la construcción de los mismos, por ser un rasgo importante en su geometría, y de esta forma se establecerán características y diferencias entre los tipos mencionados anteriormente.

### 1.2.1. Fractales Determinísticos.

Los fractales determinísticos, también conocidos como fractales matemáticos, son construidos bajo rígidas reglas que se establecen al inicio de un proceso iterativo infinito, exhibiendo formas regulares rigurosamente autosimilares que no se encuentran en el mundo real.

Inicialmente analizaremos la formación de fractales matemáticos en crecimiento y posteriormente en decrecimiento.

En general, cuando es construido un fractal matemático en crecimiento, inicialmente se dispone de una partícula semilla de tamaño  $a$  y una configuración dada (en esta se plantea la manera en que deben ser colocadas las partículas en cada etapa del proceso). Durante el primer periodo,  $k=1$ ,  $n-1$  copias de esa semilla son sumadas a la original y colocadas de tal forma que cumplan con la configuración establecida, así que el tamaño lineal del objeto resultante será  $La$ , siendo  $L$  el número de veces que cabe la semilla a lo largo de una línea recta arbitraria dibujada sobre el objeto fractal. En el periodo  $k=2$ , el conjunto de partículas del periodo  $k=1$  es sumado a sí mismo siguiendo la misma conformación; en esta iteración el número de partículas es  $n^2$  y el tamaño lineal de la estructura será  $L^2 a$ . En el  $k$ -ésimo periodo la misma regla es aplicada, cada conjunto de partículas obtenida en el periodo  $(k-1)$ -ésimo del objeto anterior es sumada así mismo, de tal forma que el  $k$ -ésimo objeto está formado de  $n^k$  unidades idénticas.

Un caso particular es el ejemplo presentado en la figura 1.1, en donde la partícula inicial es de tamaño la unidad y la configuración a seguir, consiste en sumar a cuatro de las partículas del periodo anterior en cuatro puntos de ella misma de la siguiente manera: dos en la parte superior, una cargada a la derecha y otra a la izquierda, las otras dos en la parte inferior tanto a



la derecha como a la izquierda, tal como se muestra en el periodo  $k=1$ . Como puede observarse en  $k=1$ , el número de partículas es  $n=5$  y el tamaño lineal es  $L=3$ ; mientras que para  $k=2$ ,  $n=25$  y  $L=9$ , así sucesivamente hasta el infinito. Obsérvese que la estructura crece en cada etapa.

En otras palabras, cuando hacemos el  $(k+1)$ -ésimo paso, las  $n$  subunidades de la  $k$ -ésima configuración que corresponden a la suma de la estructura obtenida en la  $(k-1)$ -ésima configuración en ella misma, son sumadas a sí misma. Entonces cuando  $k \rightarrow \infty$  tenemos como resultado un fractal matemático determinístico en crecimiento perfectamente autosimilar.

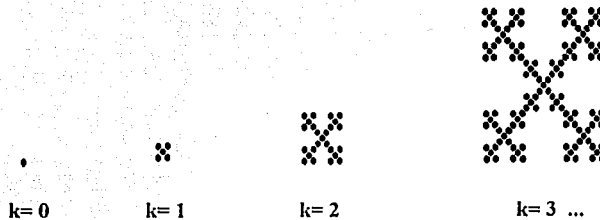


FIGURA 1.1

Se pueden generar gran variedad de configuraciones con ésta técnica; el fractal ilustrado en la figura 1.1 presenta una estructura de brazos abiertos y resulta semejante a algunos procesos de crecimiento. A este fractal se lo considera de volumen, si lo tomamos completo; pero si sólo es el contorno tendremos un fractal de superficie. Los fractales matemáticos son generados por un infinito número de iteraciones.

La construcción de fractales determinísticos originados por la eliminación de continuas divisiones (decrecimiento) se realiza de manera análoga al proceso anterior.

En el periodo inicial  $k=0$ , el objeto tiene un tamaño lineal inicial  $L=1$ . Durante la iteración  $k=1$ , éste es dividido o fragmentado en  $m$  partes iguales, de las cuales un cierto número  $v$  de esas divisiones será eliminado en un orden específico (es decir, cumplirá con una configuración dada al inicio), obteniendo así  $n=m-v$  fragmentos, por lo que cada porción resultante es una versión reducida de la estructura original, con el mismo factor  $1/m$  y tamaño lineal  $l$ . En el periodo  $k=2$ , los fragmentos resultantes del objeto obtenido de la iteración anterior

son divididos con la configuración dada en el paso  $k=1$ , por lo tanto se contarán con  $n^2$  subunidades, cada una contendrá un factor  $(1/m)^2$  y tamaño lineal  $l^2$ . Para el  $k$ -ésimo periodo, los fragmentos resultantes del objeto alcanzado en el  $(k-1)$ -ésimo periodo, son reemplazados por el objeto obtenido en  $k=1$ , siguiendo la configuración dada; con lo que obtendremos un objeto con  $n^k$  subunidades, cada una con un factor  $(1/m)^k$  y tamaño lineal  $l^k$ .

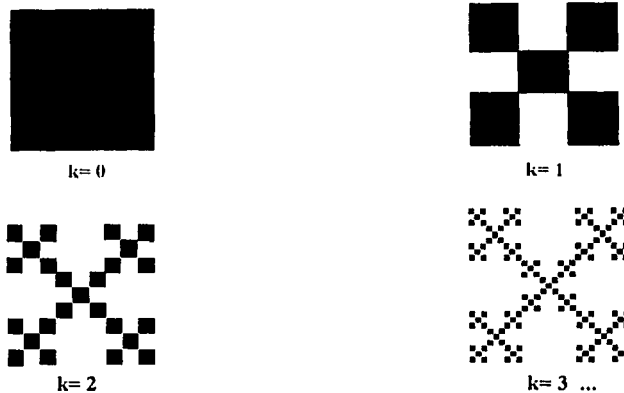


FIGURA 1.2

En el ejemplo de la figura 1.2, la construcción del objeto fractal se basa en la división de la estructura original en nueve partes iguales, de las cuales cuatro son eliminadas (como se muestra en el periodo  $k=1$ ), por lo tanto se tienen  $n=5$  subunidades, cada una de las cuales tendrá el mismo factor  $1/9$  y  $l=1/3$ . En las iteraciones siguientes cada porción sombreada es reemplazada por la configuración aplicada en la etapa  $k=1$ . Para el periodo  $k=2$ ,  $n=25$ , el factor de cada porción es de  $1/81$  y el tamaño lineal es de  $l=1/9$ , así sucesivamente. En este caso cuando  $k \rightarrow \infty$ , la figura tiende a no verse más y aparentemente desaparece.

En los anteriores ejemplos, se puede observar la característica de autosimilaridad, en la que no importa la escala en la que se observe el fractal, la estructura es invariable.

Como ejemplo de fractales determinísticos tenemos la junta de Sierpinski presentada en la figura 1.3.

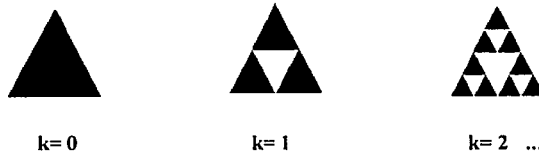


FIGURA 1. 3

Esta es una estructura fractal determinística en dos dimensiones y es considerada como el prototipo de redes fractales con una infinidad de subdivisiones. Para el periodo  $k=1$  la construcción consiste en fraccionar un triángulo equilátero de tamaño  $L$ , el cual es dividido por un triángulo menor de color claro, cuyos vértices corresponden al punto medio de los tres lados que conforman al original. Posteriormente, cada uno de los triángulos sombreados son divididos con la configuración obtenida en  $k=1$ . Este proceso es infinito.

Como pudo observarse, los fractales mencionados presentan un crecimiento o decrecimiento constante en todas las direcciones. Pero cuando se tiene el caso de que el factor de reducción  $1/m$  no es idéntico para todas las  $n$  copias, quiere decir que se tiene un factor  $1/m_i$ , donde  $m_i > 1$ , con  $i = 1, 2, \dots, n$ , para cada una de las subdivisiones resultantes del periodo anterior o un factor de crecimiento diferente para cada copia; entonces se trata de objetos fractales no uniformes.

Por ejemplo, en la figura 1.4 se muestra la construcción de un fractal matemático que presenta dos características: crecimiento y no uniformidad. Para la formación de este objeto se parte de la semilla, cuya configuración es una línea horizontal de tamaño  $2b$ , cortada en el centro por otra línea vertical de longitud  $2l$ , en donde  $l > b > 0$ . Para el periodo  $k=1$ , la parte que será añadida en las cuatro puntas de la semilla, es ella misma menos la parte inferior a partir de la intersección; para las puntas verticales esta sólo será rotada, pero para las horizontales además de rotarla se reducirá a un factor  $b/2$ . Para el periodo  $k=2$ , la figura resultante en el paso anterior es sumada a las cuatro puntas de sí misma, menos el palo inferior, rotándola en las posiciones verticales; cuando los brazos sean colocados horizontalmente, además de rotarlos, serán reducidos a un factor  $b/2$ . Así sucesivamente hasta el infinito. Nótese que el objeto crece más rápidamente verticalmente que horizontalmente debido a que  $l > b$ ; de aquí que sea no uniforme.

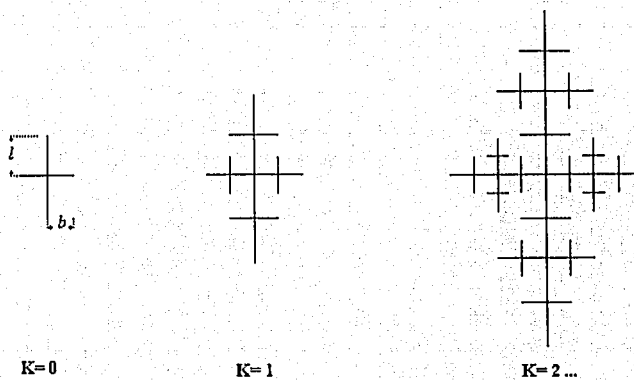


FIGURA 1. 4.

Resumiendo las características que presentan los fractales determinísticos, se tiene que son perfectamente autosimilares, su formación es iterativa e infinita, algunos presentan hoyos de diversos tamaños y no se encuentran en forma natural en el universo.

En seguida nos concentraremos en el estudio del crecimiento de fractales aleatorios en procesos físicos. Primero se establecerá la forma de generar fractales estocásticos simples en una forma análoga a los procesos anteriores.

### 1.2.2. Fractales aleatorios.

Las fluctuaciones aleatorias presentadas en los procesos físicos generalmente no crean estructuras de simetría perfecta, pero los fractales físicos son más o menos aleatorios con un alto nivel de simetría. Por esto, nos enfocaremos a la investigación sobre la construcción de los mismos, ya que el resultado de dicha construcción impone rasgos importantes en su geometría.

Considérese el ejemplo visto en la figura 1.2 con la siguiente modificación. El cuadrado es dividido en nueve partes de las cuales cuatro de ellas, elegidas aleatoriamente, son eliminadas. Así, a cada parte sombreada se aplica la misma configuración. En la figura 1.5 se muestra la estructura resultante después de tres iteraciones; como puede observarse la apariencia geométrica de las figuras 1.2 y 1.5 son completamente diferentes. Esta construcción representa solamente una simple versión de un posible fractal aleatorio.



FIGURA 1.5

La autosimilaridad puede ser observada directamente en un fractal determinístico, pero en el caso de estructuras aleatorias sólo podemos decir que son aproximadamente autosimilares. A diferencia de los fractales matemáticos, los fractales físicos son finitos y se encuentran en la naturaleza, como por ejemplo la costa de una isla oceánica con constantes fallas, la tierra erosionada que presenta grietas de diversos tamaños y formas, algunas colonias de bacterias exhiben formas fractales, los objetos porosos como esponjas y el queso suizo que contienen hoyos de varios tamaños, etc.

También, el movimiento aleatorio de una partícula representa un ejemplo de un proceso estocástico que conduce al crecimiento de estructuras fractales (la trayectoria que ésta describe es el típico ejemplo de fractales de línea). A este fenómeno también se le llama movimiento Browniano o difusivo. Otro ejemplo de fractales aleatorios son las formas que presentan los cúmulos formados por los modelos D.L.A. y D.L.C.A., que se estudiarán en capítulos posteriores.

Resumiendo las características de los fractales físicos tenemos que, su formación no sigue ningún patrón, durante este proceso interviene el factor de aleatoriedad, la autosimilaridad no es cumplida con exactitud y son objetos finitos.

### 1.2.3. Fractales Autoafines.

La autosimilaridad de un objeto es equivalente a las propiedades geométricas invariables bajo una escala isotrópica<sup>4</sup> de longitud, pero en muchos casos el crecimiento o formación de éstos resulta ser anisotrópico, es decir desbalanceado. A tales objetos se les conoce como fractales autoafines.

En el espacio Euclidiano de dimensión  $E$ , un vector de razones reales positivas  $r = (r_1, \dots, r_\delta, \dots, r_E)$  determinan una afinidad, si cada punto de  $x = (x_1, \dots, x_\delta, \dots, x_E)$  es transformado en

$$rx = (r_1 x_1, \dots, r_\delta x_\delta, \dots, r_E x_E),$$

por lo tanto un conjunto  $S$  es transformado en un conjunto  $r(S)$ .

Entonces, un conjunto acotado  $S$  es autoafin, con respecto al vector de razones  $r$  y un entero  $N$ , cuando  $S$  es la unión de  $N$  subconjuntos no traslapados, cada uno de los cuales es congruente a  $r(S)$ .

Un conjunto no acotado  $S$  es autoafin con respecto al vector de razones  $r$  cuando el conjunto  $r(S)$  es congruente a  $S$ .

La figura 1.6 ilustra una estructura autoafin en crecimiento, en el que la configuración de la semilla es anisotrópica. La estructura autoafin es producida en el límite  $k \rightarrow \infty$ .

---

<sup>4</sup> El término isotrópico se refiere a los cuerpos cuyas propiedades físicas son idénticas en todas las direcciones. Anisotrópico es lo opuesto a isotrópico.



FIGURA 1. 6

En la teoría general sobre fractales es posible obtener una cantidad no entera, que proporcione la medida aproximada del aspecto rugoso o fragmentado del objeto fractal, llamada dimensión fractal. Tal medida será tratada a continuación.

### 1. 3 DIMENSIÓN FRACTAL.

Otra propiedad de los fractales es la relativa a su volumen<sup>5</sup> con respecto a su tamaño lineal. Para analizarla se introduce la notación necesaria denotando a la dimensión del espacio euclidiano (donde se establece el fractal) con  $d$  y al volumen con  $V(l)$ . Para obtener el volumen  $V(l)$  de estos objetos se utilizan bolas de dimensión  $d$  y radio  $l$  con las cuales serán cubiertos, y utilizando la expresión

$$V(l) = N(l) l^d \quad (1.1)$$

se obtiene el volumen estimado, en donde  $N(l)$  representa el número de bolas de radio  $l$  necesarias (requerimiento mínimo) para cubrir al objeto completamente,  $l$  es menor que el tamaño lineal  $L$  de la estructura completa. El objeto se considera cubierto completamente si la región ocupada por las bolas lo incluye totalmente. Para objetos ordinarios,  $V(l)$  es un valor constante fácilmente de obtener, mientras que para fractales  $V(l) \rightarrow 0$  cuando  $l \rightarrow 0$ . Una alternativa para determinar a  $N(l)$  es considerar una red hipercúbica de dimensión  $d$ , en la que se establece el objeto, y en

<sup>5</sup> En esta sección, el término volumen se refiere a la medida de la magnitud o tamaño del cuerpo en  $d$  dimensiones.

donde el tamaño de cada celda es 1; entonces el número de caja-celdas que se encuentran ocupadas con el objeto puede ser usado para definir el valor de  $V(l)$ . A esta aproximación se le llama "cálculo por caja".

Como se observó anteriormente, el volumen de los fractales obtenido en una dimensión  $d$  del espacio euclidiano lleva a la conclusión de que son objetos que no tienen una dimensión entera, lo que se asume como dimensión fractal y que será designada por un número  $D$ , no entero.

Para el caso del crecimiento de fractales, considérese un objeto en la dimensión  $d$  de tamaño lineal  $L$  y de volumen  $V(L)$ , formado de unidades de tamaño  $a$ . Cuando se determina  $V(L)$ , la estructura es cubierta por bolas o cajas de tamaño unidad (por lo que se supone que  $l = a = 1$ ); por consiguiente  $V(L) = N(L)$ .

Para fractales donde  $l$  es fijo,  $D$  se define a través de  $N(l)$  como una función de decrecimiento  $l$ .

El hecho de que un objeto es un fractal matemático significa que  $N(L)$  y  $N(l)$  divergen cuando  $L \rightarrow \infty$  y  $l \rightarrow 0$ , respectivamente, de acuerdo a un exponente no entero. Correspondientemente,

$$N(L) \sim L^D \quad (1.2),$$

despejando a  $D$  y aplicando el límite  $L \rightarrow \infty$

$$D = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln N(L)}{\ln L} \quad (1.3).$$

Esto para el caso de crecimiento, donde  $l = 1$ . Aquí el símbolo  $\sim$  significa proporcionalidad y (1.3) es independiente de  $l$ . Para fractales, cuya composición parte de un tamaño finito y que a través del proceso se forman ramificaciones o fragmentos infinitamente más pequeños, tenemos que

$$N(l) \sim l^{-D} \quad (1.4)$$



despejando a  $D$  y aplicando el límite  $l \rightarrow 0$

$$D = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln N(l)}{\ln (1/l)} \quad (1.5)$$

Obviamente, que para objetos no fractales el valor de  $D$  coincide con la dimensión euclidiana  $d$ , pero para los que si lo son  $D < d$ .

Como ejemplo, calculemos la dimensión de los objetos presentados en la figura 1.1, 1.2 y 1.3, del periodo  $k=1$  (para los demás periodos la  $D$  es la misma). Para el caso de crecimiento, tenemos

$$N(L) = 5^k \quad \text{con} \quad L = 3^k,$$

en donde  $k$  es el número de iteraciones completadas. Utilizando (1.2) tenemos que

$$D = \ln(5) / \ln(3) = 1.465\dots;$$

tal número esta entre  $d=1$  y  $d=2$  tal como se esperaba. Análogamente para el fractal presentado en la figura 1.2

$$N(l) = 5 \quad \text{con} \quad l = 1/3$$

y por lo tanto  $D$  tendrá el mismo valor.

Para la junta de Sierpinski, figura 1.3,  $N(l) = 3$  con  $l = 1/2$ , por lo tanto

$$D = \ln(3) / \ln(2) = 1.5849\dots$$

Los objetos fractales considerados en la naturaleza tienen un tamaño mínimo (se refiere a la unidad más pequeña que conforma al objeto, en este caso una partícula) y uno máximo (referido al tamaño de la longitud más larga ocupada por el mismo; la cual se considera el tamaño de toda la estructura). El tamaño finito ( $L < \infty$ ) de fractales físicos hace posible tratar a todos los casos físicos relevantes utilizando una cantidad adimensional

$$\epsilon = \frac{l}{L} \quad (1.6),$$

la cual es el tamaño de bolas para el recubrimiento total normalizado de la estructura completa. En el caso de crecimiento fractal, cuando la dimensión fractal es investigada,  $l$  se mantiene constante y  $L$  crece, mientras que para fractales generados por divisiones subsecuentes,  $L$  se mantiene constante y  $l$  decrece. Por lo tanto, (1.2) y (1.4) en términos de  $\epsilon$  son conjuntados en

$$N(\epsilon) = \epsilon^{-D} \quad (1.7),$$

en donde  $\epsilon \ll 1$ ,  $N(\epsilon)$  es el número de bolas de radio  $\epsilon L$  en la dimensión  $d$  necesarias para cubrir el objeto fractal y  $D$  es la dimensión fractal.

Por lo tanto, los fractales ordinarios están definidos como objetos para los cuales la dimensión fractal está determinada por la ecuación (1.7), la cual es menor que la dimensión del espacio  $d$ .

Para el caso de fractales autoafines, la figura 1.6 muestra un objeto multifractal <sup>6, 7</sup>. Debido a que la semilla es anisotrópica, la dimensión fractal para los brazos horizontales es diferente a la de los verticales, lo que implicaría tener más de una  $D$ . Este tipo de objetos no será tratado en este trabajo.

Una vez establecido el concepto de dimensión fractal, presentaremos los diferentes métodos para determinarla, no sólo para fractales matemáticos, sino también físicos.

<sup>6</sup> Vicsek, Tamás. Fractal Growth Phenomena, segunda edición, edit. World Scientific, pag. 48.

<sup>7</sup> R. Jullien, R. Botet. Aggregation and Fractal Aggregation, World Scientific, Singapur 1987, pag. 29-31.

## 1.4. MÉTODOS PARA DETERMINAR LA DIMENSIÓN FRACTAL.

Cuando tratamos de determinar la dimensión fractal de las estructuras en estudio, durante la práctica, nos damos cuenta que la aplicación directa para calcular a  $D$  podría resultar inefectiva. En su lugar, se utilizan algunos métodos basados en la teoría anterior para poder calcularla, tales como el método experimental, el método por computadora (este se refiere a la evaluación de los datos numéricos mediante equipo computacional) y el teórico.

El método experimental calcula a  $D$  mediante los resultados obtenidos en forma experimental y representa la manera estandar de examinar el fenómeno en muchos campos de la física. Este método juega un papel importante en el tema concerniente a fractales en proceso de formación. Por otra parte, en el fenómeno físico de fractales en crecimiento, muchas investigaciones están basadas en simulaciones por computadora debido a las ventajas mecánicas que ofrece, como son el rápido procesamiento de grandes cantidades de datos y a la exactitud de los resultados obtenidos. El método teórico es aplicable a un rango amplio de procesos de crecimiento y para ello es utilizado el grupo de renormalización.

Los métodos aquí mencionados no serán explicados con profundidad, ya que no son necesarios para la comprensión de este trabajo ni para el cumplimiento de objetivos (de hecho el método teórico no será estudiado en esta tesis), excepto el método de evaluación numérica, en el cual es basado el cálculo de la dimensión fractal de los agregados obtenidos en las diferentes simulaciones aquí expuestas. Para una mayor información sobre el tema, se recomienda la bibliografía de Mandelbrot citada al final de esta tesis.

### 1.4.1 Cálculo de la dimensión fractal con datos obtenidos mediante experimentos.

Un gran número de técnicas experimentales han sido utilizadas para medir la dimensión fractal de estructuras en crecimiento. Los métodos más aplicados son: el procedimiento de digitalización de imágenes en dos dimensiones, la dispersión experimental para medir fractales de

volumen, el recubrimiento de estructuras con monocapas y medida directa para calcular a  $D$  de fractales de superficie.

La digitalización de imágenes para un objeto fractal bidimensional es la forma modelo para obtener datos cualitativos y cuantitativos. La información es obtenida mediante un scanner o una cámara de video ordinaria y transmitida a la memoria de la computadora (usualmente una PC). Los datos son almacenados en forma de un arreglo bidimensional de pixeles, los cuales son designados por un número diferente de cero si la región está ocupada por alguna partícula. Pero si la región está vacía, entonces se designa con cero. Así, por medio de la computadora, los datos pueden ser evaluados y se podrá calcular a  $D$ .

La dispersión experimental es un método poderoso para medir la dimensión fractal de estructuras microscópicas. Dependiendo de las características de la escala asociada al objeto estudiado, pueden utilizarse la dispersión de rayos  $X$ , de neutrones o de luz para revelar las propiedades de los fractales. Con esto puede obtenerse información de varios agregados en crecimiento en un tiempo  $t$ , o utilizar el rayo de dispersión para una fractal de superficie, etc.

Medir a  $D$  mediante el recubrimiento de la estructura con esferas de radio  $r$ , es una idea directamente relacionada a la definición de  $D$  discutida en la sección 1.3. Al llevar a cabo una investigación de este tipo se requiere de materiales, los cuales son absorbidos por la superficie del objeto fractal en estudio. La dimensión fractal es entonces obtenida por la relación  $n(\epsilon) \sim \epsilon^{-D}$ , que equivale a (1.7), donde  $n(\epsilon)$  moles/g es el número de moléculas absorbidas formando una monocapa en la superficie. Este método está limitado a medir las propiedades superficiales, dado que las regiones vacías dentro de un objeto fractal no son accesibles a las moléculas. Una variación simple de este método es que el tamaño de las moléculas es mantenido constante y  $R$ , el radio de las partículas, aumenta.

La medida directa de las propiedades físicas de los objetos fractales puede ser usada para la determinación experimental de  $D$ . Un gran número de métodos ha sido sugerido, y varios de ellos están basados en las propiedades eléctricas, en las que se considera la cantidad de corriente, y la potencia electromagnética, en cuanto a su disipación y frecuencia en dependencia con la impedancia <sup>8</sup> compleja de la interfase fractal. Este método proporciona una estimación indirecta de  $D$  y es menos utilizado que los métodos anteriores.

<sup>8</sup> Impedancia es la resistencia aparente de un circuito a una corriente alterna.

### 1.4.2 Método de Evaluación de Datos Numéricos.

En la sección 1.4.1 se vieron, en forma resumida, varias técnicas con las que es posible obtener información de una estructura fractal. Análogamente, existe el método de evaluación numérica, que es la forma más simple de obtener a  $D$ , basándose en la definición (1.2) y (1.4).

Este consiste en considerar un número máximo de partículas ( $nmax$ ) que puede contener un objeto. Durante la formación del mismo, cada  $part$  partículas se obtendrá el radio de giro ( $Rgi$ ), donde  $part$  es un valor entero dado por el investigador, de acuerdo a la cantidad de partículas que el descé se obtenga  $Rgi$ ; por lo que cada  $npart=j*npart$  será obtenido (donde  $j= 1,2,3, \dots, n$ , con  $n= nmax/part$ ). Con lo que se tendrán  $n$  parejas de datos o coordenadas, a las cuales se les sacará logaritmo natural. En seguida estas son localizadas en un plano, cuyo eje horizontal lo forma el  $\ln(npart)$  y al eje vertical el  $\ln(Rgi)$ ; entonces,  $D$  puede ser obtenida mediante regresión lineal. Utilicemos mínimos cuadrados para ajustar una línea recta, en la que la distancia de cada punto a la recta sea mínima, de la siguiente manera.

Dadas la coordenadas  $(x_j, y_j) = (\ln npart, \ln Rgi)$  de cada etapa del agregado, se calcula la diferencia entre  $y_j$  (valor observado) y  $y = mx + b$  (valor esperado). Como sólo nos interesa la magnitud de esta discrepancia la elevamos al cuadrado y la sumamos:

$$d_j = y_j - y \text{ pero } y = mx_j + b$$

$$d_j = y_j - (mx_j + b)$$

$$d_j^2 = y_j^2 - 2mx_j y_j - 2by_j + m^2 x_j^2 + 2bmx_j + b^2.$$

La suma  $s$  de los cuadrados de las desviaciones,  $s = \sum d_j^2$ , debe ser un mínimo, y como depende de  $m$  y  $b$ , debe cumplirse que  $ds = (\partial s / \partial m) dm + (\partial s / \partial b) db$ ,  $ds=0$  en el mínimo, pero  $m$  y  $b$  son independientes, entonces:  $(\partial s / \partial m) = 0$  y  $(\partial s / \partial b) = 0$  simultáneamente. Obteniendo las derivadas parciales y resolviendo el sistema de ecuaciones en  $m$  y  $b$  se tiene

$$m = \frac{n \sum x_i y_i - (\sum x_i)(\sum y_i)}{n(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2} \quad (1.8)$$

$$b = \frac{(\sum x_i^2)(\sum y_i) - (\sum x_i)(\sum x_i y_i)}{n(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2} \quad (1.9)$$

en donde  $n$  es el número de puntos a graficar.

Entonces, la dimensión fractal se obtiene por medio de la línea recta, ya que  $D$  se define como la inversa de la pendiente,  $D = 1/m$ .

El radio de giro, de cada cierto número de partículas ( $Rgi(npart)$ ), se obtiene de la siguiente forma.

Considérese el vector  $r_i = (x_i, y_i)$  con  $i = 1, 2, \dots, npart$ , que representa la posición de la  $i$ -ésima partícula. El centro de masa<sup>9</sup> se define como el promedio de los  $r_i$

$$r_{cm} = \frac{\sum r_i}{npart} \quad (1.10)$$

y el radio de giro como

$$Rgi(npart)^2 = \frac{\sum (r_i - r_{cm})^2}{npart} \quad (1.11)$$

Despejando a  $Rgi$  se tiene que

$$Rgi(npart) = \sqrt{(\sum (r_i - r_{cm})^2 / npart)} \quad (1.12)$$

<sup>9</sup> El centro de masa o centro de gravedad es el punto donde se concentra toda la masa de la materia. Este no necesariamente debe estar en el cuerpo.

Luego, haciendo uso de (1.2), se tiene que

$$npart \sim Rg(npart)^D \quad (1.13).$$

Despejando a  $D$ , tenemos que

$$D = \frac{\ln npart}{\ln Rg(npart)} \quad (1.14).$$

Por lo tanto, ya es posible obtener a  $D$  graficando el  $\ln npart$  contra  $\ln Rg$  y obtener a  $m$ . Esta ecuación corresponde a la aceptación de que en el régimen asintótico  $\ln Rg$  es linealmente proporcional al logaritmo del radio total del agregado.

Para obtener el arreglo que contiene las coordenadas correspondientes a las posiciones de las partículas que constituyen al fractal, usualmente se requiere de procedimientos numéricos que dependen del proceso físico particular en investigación; por ejemplo, las observaciones generadas por la simulación en computadora de fractales en crecimiento.

Para las simulaciones estocásticas, la aleatoriedad es introducida con la ayuda de un generador de números pseudoaleatorios distribuidos uniformemente, cuidando que el método no falle a lo largo de la secuencia porque puede producir números aleatorios correlacionados estadísticamente. Este problema puede superarse mezclando dos generadores de números aleatorios.

Un factor importante en la formación de cúmulos fractales, es el fenómeno de movimiento Browniano, ya que una partícula presenta una caminata aleatoria, de  $N$  pasos, antes de quedar pegada al agregado. La distancia entre el punto de partida a un punto de llegada se denota por  $\langle R^2(N) \rangle$ , llamada distancia extremo a extremo cuadrática media. Tal tema será analizado en el capítulo siguiente.

## **CAPÍTULO 2**

# **TEORÍA Y SIMULACIÓN DE CAMINATAS ALEATORIAS.**



## 2. TEORÍA Y SIMULACIÓN DE CAMINATAS ALEATORIAS

### 2.1. TEORÍA DE CAMINATAS ALEATORIAS.

En este capítulo se tratará el movimiento aleatorio de partículas dispersas en un medio líquido, el cual es un ejemplo simple de un proceso estocástico. Tal fenómeno resulta ser un factor necesario en la formación de estructuras fractales en crecimiento, como es el caso de los cúmulos o agregados, por ello se le ha dado un interés especial al estudio y análisis del mismo, el cual es tratado a continuación.

Una consecuencia fundamental de la teoría cinética es que en ausencia de fuerzas externas, todas las partículas en suspensión, independientemente de su tamaño sufren un movimiento, cuya dirección es continuamente cambiada al azar. Esto como resultado de la colisión aleatoria con las moléculas del medio en suspensión, con otras partículas y las paredes del recipiente que las contiene. Cada partícula sigue una trayectoria complicada e irregular; a este movimiento aleatorio se le conoce como movimiento Browniano. Este nombre se le dio en honor al botánico Brown, quien observó por primera vez el fenómeno con granos de polen suspendidos en agua.

Como ejemplo, presentamos en la figura 2.1 la trayectoria de una caminata aleatoria obtenida en un experimento, el cual consistió en observar a una partícula coloidal de radio  $0.53 \mu\text{m}$ , mediante un microscopio, durante 30 segundos. Las sucesivas posiciones que ocupó durante ese lapso de tiempo fueron marcadas desde el punto de partida hasta el punto de llegada a cada paso. Este fenómeno representa un ejemplo simple de un proceso estocástico que puede encontrarse en estructuras fractales en crecimiento.

Por lo tanto, tenemos el caso de una partícula que experimenta una caminata aleatoria, haciendo pasos de longitud  $l$  que se distribuye de acuerdo a una Gaussiana en direcciones aleatorias. Tal proceso puede ser descrito en términos de la distancia extremo a extremo cuadrática media  $R^2 = \langle R^2(t) \rangle$  realizada por las partículas durante un intervalo de tiempo  $t$  dado. En la siguiente sección esto será analizado.

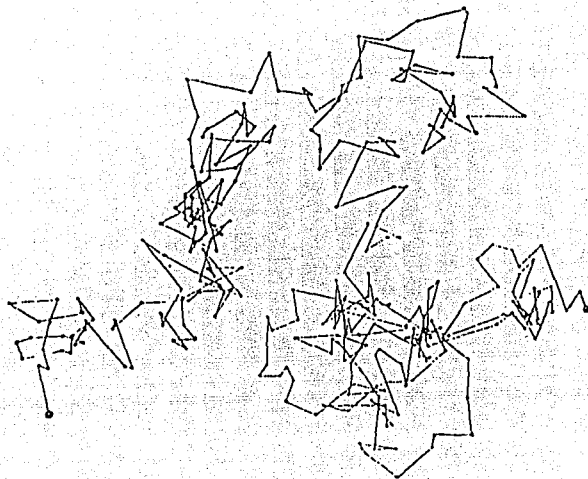


FIGURA 2 . 1.

### 2.1.1. Distancia extremo a extremo cuadrática media.

La cantidad usada para la caracterización de la caminata aleatoria es su distancia extremo a extremo cuadrática media, que es la distancia del punto inicial de partida de un cuerpo en movimiento, al extremo final de llegada. En esta parte, se supone que el cuerpo es una partícula en difusión que realiza un paso de tamaño  $l$  en un intervalo de tiempo unitario. Por lo tanto, el número de  $N$  pasos es igual a la duración  $t$  de la caminata, la cual presenta una configuración propia.

Considérese una caminata aleatoria de  $N$  pasos, cada uno de ellos de longitud  $l$ , los cuales pueden tomar cualquier dirección.

Sea  $R_{conf}$  la distancia extremo a extremo para una caminata dada:

$$R_{conf} = |\vec{R}_N - \vec{R}_0| = |\vec{R}_N| \quad (2.1),$$

donde  $\vec{R}_N$  es la posición final después de  $N$  pasos y  $\vec{R}_0 = 0$ , por ser el punto de partida. La distancia extremo a extremo cuadrática media se define como

$$\overline{R^2} = \langle R^2_{conf} \rangle \quad (2.2),$$

en donde  $\langle R^2_{conf} \rangle$  indica un promedio sobre todas las configuraciones. Pero

$$\vec{R}_{conf} = \sum_i \vec{l}_i \quad (2.3),$$

en donde  $\vec{l}_i$  es un vector de tamaño  $l$  o  $i=1, \dots, N$ , por lo que

$$\overline{R^2} = \langle R^2_{conf} \rangle = \langle \sum_i \vec{l}_i \cdot \sum_j \vec{l}_j \rangle = \langle \sum_i \vec{l}_i \cdot \vec{l}_i \rangle$$

$$\overline{R^2} = \langle l_1 l_1 + l_1 l_2 + \dots + l_1 l_N + l_2 l_1 + \dots + l_2 l_N + \dots + l_N l_N \rangle$$

$$\overline{R^2} = \sum_i l^2 + \sum_{ij} l^2 \langle \cos \theta_{ij} \rangle \quad (2.4).$$

Dado que  $\langle \cos \theta_{ij} \rangle = 0$ , entonces la distancia extremo a extremo cuadrática media se obtiene como

$$\overline{R^2} = N l^2 \quad (2.5).$$

Queda por demostrar que la distancia extremo a extremo de la caminata aleatoria sigue una distribución Gaussiana.

### 2.1.2 Distribución de la Distancia Extremo a Extremo Cuadrática Media, en dos Dimensiones.

Teóricamente la distancia extremo a extremo cuadrática media se distribuye como una Gaussiana, independientemente de la dimensión en que se encuentre. Para demostrarlo en dos dimensiones, supondremos que el número de elementos o pasos es muy grande ( $N \gg 1$ ) y consideraremos la proyección de cada paso a lo largo de un eje arbitrario, en este caso el eje  $y$ .

Sea  $N_+$  el número de pasos con proyección positiva y  $N_-$  el número de pasos con proyección negativa. Entonces, si  $N$  es par,

$$N_+ = N/2 + n \quad (2.6),$$

$$N_- = N/2 - n \quad (2.7),$$

donde  $n$  es la desviación con respecto al promedio, con  $|n| \ll N/2$ , en casi todas las ocasiones.

Si  $P(N_+)$  es la probabilidad de que ocurra un número  $N_+$  de proyecciones positivas, entonces se distribuye como una binomial, con  $p = 1/2$  y por lo tanto

$$P(N_+) = \frac{N!}{(N_+! N_-!)} (1/2)^N \quad (2.8).$$

Utilizando la Aproximación de Stirling:

$$\ln x! = (x + 1/2) \ln x - x + 1/2 \ln 2\pi \quad (2.9)$$

para  $x \gg 1$ , en (2.8). Se tiene que

$$\ln P(N_+) = (N + 1/2) \ln N - (N_+ + 1/2) \ln N_+ - (N_- + 1/2) \ln N_- - N \ln 2 - 1/2 \ln 2\pi \quad (2.10).$$

Sustituyendo ahora la ecuación (2.6) y (2.7) en (2.10) llegamos a que

$$\begin{aligned} \ln P(n) &= (N + \frac{1}{2}) \ln N - (N/2 + \frac{1}{2} + n) * \ln[(N/2) * (1 + (2n/N))] - \\ &\quad - (N/2 + \frac{1}{2} - n) * \ln[(N/2) * (1 - (2n/N))] - N \ln 2 - \frac{1}{2} \ln 2\pi. \\ \ln P(n) &= \frac{1}{2} \ln(2/\pi N) - (N/2 + \frac{1}{2} + n) * \ln(1 + (2n/N)) - \\ &\quad - (N/2 + \frac{1}{2} - n) * \ln(1 - (2n/N)) \end{aligned} \quad (2.11).$$

Pero sabemos que  $\ln(1+y) = y - y^2/2 + \dots$  si  $y \ll 1$ . Entonces

$$\begin{aligned} \ln P(n) &= \frac{1}{2} \ln(2/\pi N) - (N/2 + \frac{1}{2} + n) * (2n/N - 2n^2/N^2) - \\ &\quad - (N/2 + \frac{1}{2} - n) * (-2n/N - 2n^2/N^2) \\ \ln P(n) &= \frac{1}{2} \ln(2/\pi N) - 2n^2/N \end{aligned} \quad (2.12).$$

Habiendo despreciado  $2n^2/N^2$  comparado con  $2n^2/N$ , se tiene que

$$P(n) = (2/\pi N)^{1/2} * \exp(-2n^2/N), \quad (2.13),$$

que es cierta para un número discreto de pasos. Pero para el continuo se establece la ecuación en términos de distribución. Por lo tanto, vamos a suponer ahora que la relación anterior es válida para valores continuos de  $n$ , tal que  $P(n) dn$  nos da la probabilidad de encontrar un valor de  $n$  entre  $n$  y  $n + dn$ . Por lo tanto

$$P(n) dn = (2/\pi N)^{1/2} * \exp(-2n^2/N) dn \quad (2.14).$$

La proyección sobre el eje  $y$  de un paso dado es  $ly = l \cos \theta$ . Por lo tanto

$$\langle ly \rangle = 0,$$

pero

$$\langle (l y)^2 \rangle = l^2 \langle \cos^2 \theta \rangle = l^2 / 2 \quad (2.15),$$

por lo que

$$\sqrt{\langle (l y)^2 \rangle} = l / \sqrt{2} \quad (2.16).$$

Si  $N_+$  y  $N_-$  son muy grandes, la proyección de la distancia extremo a extremo sobre el eje y toma entonces el valor

$$Ry = (N_+ - N_-) * (l / \sqrt{2}) = 2 l n / \sqrt{2} \quad (2.17),$$

por lo que

$$dRy = (2 l / \sqrt{2}) dn \quad (2.18).$$

Sea  $P(Ry) dRy$  la probabilidad de encontrar un valor de la proyección y de la distancia extremo a extremo entre  $Ry$  y  $Ry + dRy$ , por lo que  $P(Ry) dRy = P(n) dn$ , dado que a un valor de  $Ry$  corresponde un valor de  $n$ . Entonces

$$P(Ry) = (\sqrt{2} / 2l) * P(n) = (1 / \pi l^2 N)^{1/2} * \exp(-Ry^2 / l^2 N) \quad (2.19),$$

análogamente

$$P(Rx) = (\sqrt{2} / 2l) * P(n) = (1 / \pi l^2 N)^{1/2} * \exp(-Rx^2 / l^2 N) \quad (2.20).$$

Entonces, si  $R^2 = Rx^2 + Ry^2$ , tenemos

$$P(R) dR = P(Rx) * P(Ry) dRx dRy$$

$$P(R) dR = (1 / \pi l^2 N) * \exp(-R^2 / l^2 N) dRx dRy \quad (2.21)$$

para  $N \gg 1$  y  $R \ll N l$ .

Por esto, una caminata aleatoria tiene una distribución Gaussiana.

Dado que  $dR_x dR_y = 2 \pi R dR$ , entonces la probabilidad  $P(R) dR$  de que la distancia extremo a extremo este entre  $R$  y  $R + dR$  es

$$P(R) dR = 2\pi * (1 / \pi l^2 N) * \exp(- R^2 / l^2 N) R dR \quad (2.22),$$

válida cuando  $N \gg 1$  y  $R \ll Nl$ . ■

### 2.1.3 Distribución de la distancia extremo a extremo cuadrática media, en tres dimensiones.

El procedimiento para demostrar que la distancia extremo a extremo cuadrática media en tres dimensiones se distribuye como una Gaussiana es análogo al anterior. Y por ello partiremos de la ecuación (2.14).

$$P(n) dn = (2 / \pi N)^{1/2} * \exp(- 2n^2 / N) dn.$$

En este caso, serán utilizadas tres variables, así que la proyección sobre el eje  $z$  de un paso dado es  $lz = l \cos \theta$ . Por lo tanto

$$\langle lz \rangle = 0$$

pero

$$\langle (lz)^2 \rangle = l^2 \langle \cos^2 \theta \rangle = l^2 / 3 \quad (2.23),$$

despejando a  $\sqrt{\langle l z \rangle^2}$

$$\sqrt{\langle l z \rangle^2} = l / \sqrt{3} \quad (2.24).$$

Si  $N_+$  y  $N_-$  son muy grandes, la proyección de la distancia extremo a extremo sobre el eje  $z$  toma entonces el valor

$$Rz = (N_+ - N_-) * (l / \sqrt{3}) = 2 l n / \sqrt{3} \quad (2.25),$$

por lo que

$$dRz = (2 l / \sqrt{3}) dn \quad (2.26).$$

Sea  $P(Rz) dRz$  la probabilidad de encontrar un valor de la proyección  $z$  de la distancia extremo a extremo entre  $Rz$  y  $Rz + dRz$ , por lo que  $P(Rz) dRz = P(n) dn$ , dado que a un valor de  $Rz$  corresponde un valor de  $n$ , entonces

$$P(Rz) = (\sqrt{3} / 2l) * P(n) = (3 / 2\pi l^2 N)^{1/2} * \exp(-3Rz^2 / 2 l^2 N) \quad (2.27),$$

análogamente

$$P(Rx) = (\sqrt{3} / 2l) * P(n) = (3 / 2\pi l^2 N)^{1/2} * \exp(-3Rx^2 / 2 l^2 N) \quad (2.28).$$

$$P(Ry) = (\sqrt{3} / 2l) * P(n) = (3 / 2\pi l^2 N)^{1/2} * \exp(-3Ry^2 / 2 l^2 N) \quad (2.29).$$

Entonces, si  $R^2 = Rx^2 + Ry^2 + Rz^2$ , tenemos



$$P(R) dR = P(R_x) * P(R_y) * P(R_z) dR_x dR_y dR_z$$

$$P(R) dR = (3 / 2\pi l^2 N)^{3/2} * \exp(- 3R^2 / 2l^2 N) dR_x dR_y dR_z \quad (2.30),$$

para  $N \gg 1$  y  $R \ll Nl$ .

Por esto, una caminata aleatoria en tres dimensiones tiene una distribución Gaussiana.

Dado que  $dR_x dR_y dR_z = R^2 dR \sin \theta d\phi$ , entonces la probabilidad  $P(R) dR$  de que la distancia extremo a extremo esté entre  $R$  y  $R + dR$ , en el espacio tridimensional, es

$$P(R) dR = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi (3 / 2\pi l^2 N)^{3/2} * \exp(- 3R^2 / 2l^2 N) R^2 dR$$

$$P(R) dR = 4\pi * (3 / 2\pi l^2 N)^{3/2} * \exp(- 3R^2 / 2l^2 N) R^2 dR \quad (2.31),$$

válida cuando  $N \gg 1$  y  $R \ll Nl$ . ■

Ya realizadas las demostraciones procederemos a obtener la dimensión fractal de una caminata aleatoria.

### 2.1.4 Dimensión fractal de una Caminata Aleatoria.

La trayectoria del movimiento Browniano es una curva de dimensión topológica (dimensión en el espacio Euclidiano) igual a 1. Sin embargo, ésta es de dimensión fractal igual a 2 independientemente de la dimensión del espacio, lo cual es demostrado a continuación.

Un caso muy estudiado es en el que una partícula en movimiento Browniano, realiza pasos distribuidos como una Gaussiana en direcciones aleatorias. Tal proceso puede ser descrito en términos de la distancia extremo a extremo cuadrática media  $R^2 = \langle R^2(t) \rangle$  realizada por las partículas durante un intervalo de tiempo  $t$  dado. Para caminatas aleatorias  $R^2 \sim t$ , independientemente del espacio euclidiano  $d$ . Contabilizando la cantidad de lugares visitados por la partícula realizando  $t$  pasos  $\langle N(R) \sim t \rangle$ , entonces la expresión es equivalente a  $N(R) \sim R^2$  y comparando con la definición de dimensión fractal,  $N(L) \sim L^D$ , se tiene que  $D = 2$  para todo  $d$ , y que  $D < d$  si  $d > 2$ .

Otra forma de verlo, es partir de la ecuación (2.5),

$$R^2 = N \cdot \ell^2$$

sea  $R_{rcm} = \sqrt{R^2} = \sqrt{N \ell^2} = N^{1/2} \ell$ , donde  $R_{rcm}$  es la distancia extremo a extremo cuadrática media y  $\ell$  es unitario. Luego se define el exponente  $\nu$  como

$$R_{rcm} \sim N^\nu, \text{ donde } \nu = 1/2 \quad (2.32).$$

Se sigue que el exponente  $\nu$  de una caminata aleatoria es  $1/2$ , y que la dimensión fractal de una caminata aleatoria se define como el inverso de  $\nu$ , es decir  $D = 1/\nu$ .

## 2.2 Simulación de caminatas aleatorias.

Una vez terminada la teoría sobre caminatas aleatorias, contamos ya con las herramientas necesarias para la elaboración de simulaciones que describan el comportamiento de este fenómeno, así como la verificación de la misma en la práctica. Tales algoritmos serán realizados en dos y tres dimensiones, en red y en el espacio continuo, tratando de describir a este hecho lo más apegado a la realidad.

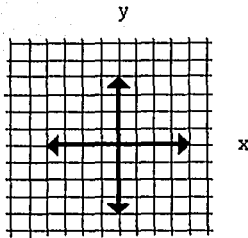
### 2.2.1 Simulación de Caminatas Aleatorias en red bidimensional.

En esta sección es descrito el movimiento Browniano, que presenta una partícula en difusión, mediante la técnica de simulación por computadora. Este es el caso más sencillo, que nos servirá de introducción a los algoritmos poco más complicados.

Inicialmente se considera una partícula situada en el centro de una red bidimensional, la cual se moverá un número determinado de pasos, cada uno en dirección al azar en cuatro posibilidades (Ver figura 2.2).

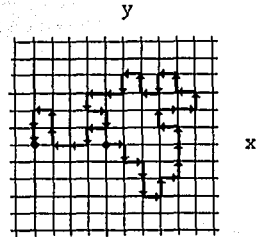
Para simular el sentido aleatorio que toma una partícula con movimiento Browniano, se divide en cuatro subintervalos al intervalo  $[0, 1]$ , se elige un número  $x_k$  al azar y se establecen las siguientes condiciones: si  $0 \leq x_k \leq 0.25$  significa que hay un movimiento sobre el eje de las ordenadas en sentido positivo, pero si  $0.25 < x_k \leq 0.5$  entonces habrá un desplazamiento sobre el eje de las abscisas en el mismo sentido, o si sucede que  $0.5 < x_k \leq 0.75$  entonces ocurrirá un movimiento sobre el eje de las ordenadas pero en sentido negativo y por último si se tiene que  $0.75 < x_k \leq 1.0$  el desplazamiento será en el mismo sentido, pero sobre el eje de las abscisas. Estas condiciones se establecerán para cada paso durante toda la trayectoria

que realice la partícula en movimiento. La figura 2.3 muestra un ejemplo gráfico de una simulación de una caminata aleatoria de 38 pasos.



Las únicas posibles direcciones que se presentan en una red de dos dimensiones son: norte, sur, este y oeste.

FIGURA 2.2



Simulación de una caminata aleatoria de 38 pasos, cuyo tamaño de paso es la unidad.

FIGURA 2.3

Como pudo observarse existen sólo cuatro posibles direcciones y el tamaño de paso es constante, debido a la red en donde se sitúa la partícula. La longitud de paso de la partícula, es de tamaño la unidad, o sea el tamaño de una celda.

En seguida de que cada partícula concluya con su caminata, se calcula la distancia del origen al punto de llegada después de  $n$  pasos, mediante

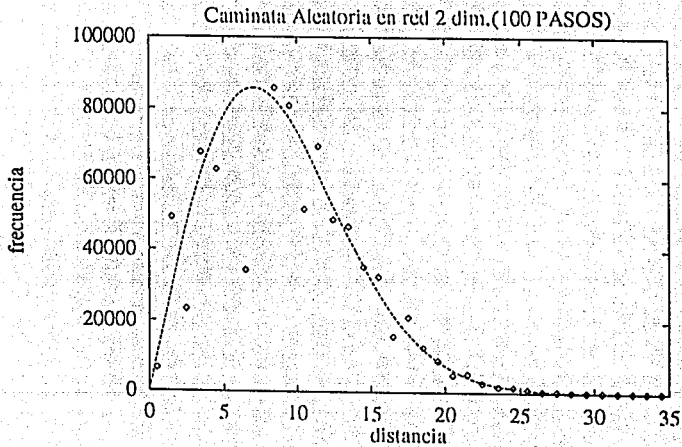
$$distancia = (\sum x_i)^2 + (\sum y_i)^2)^{1/2}$$

con lo que se obtendrá la frecuencia de las distancias  $X$  en un histograma. Se grafican estos puntos junto con la función de distribución Gaussiana en dos dimensiones para hacer mas visible el grado de ajuste que existe entre ambos.

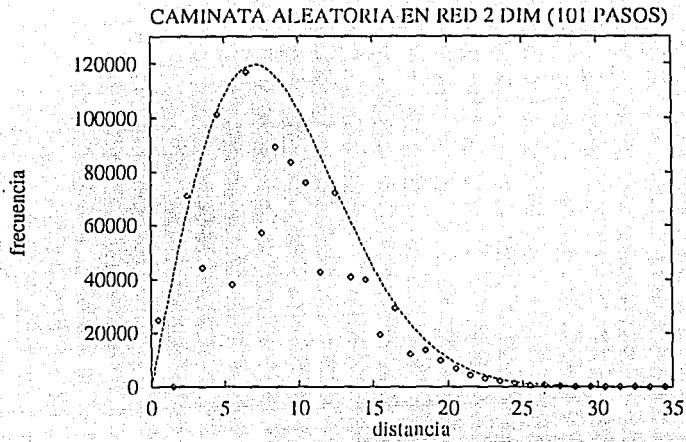
En las simulaciones aquí presentadas, se realizan 1 000 000 de caminatas con  $N=100$  y  $N=101$  pasos. Se consideran estas dos situaciones para saber la distribución que toma la caminata al finalizar con los  $N$  pasos establecidos. Para ello observemos las gráficas 2.1, donde  $N$  es par, y 2.2 con  $N$  impar (los rombos dispersos son los datos arrojados por nuestra simulación, mientras que la curva punteada representa la función de distribución Gaussiana.) En ellas se establece que el ajuste con respecto a la función de distribución Gaussiana es mala; ya que cuando el número de pasos es par, en una red, puede suceder que la última posición

de la partícula en el  $N$ -ésimo paso nunca tome ciertas posiciones, las cuales solo son ocupadas cuando el número de pasos es impar. Este error puede suavizarse, si sumamos los resultados obtenidos en ambos casos y los graficamos, ver gráfica 2.3. Entonces tendremos un ajuste más acercado al deseado, aún que no lo obtendremos perfecto debido a la red que se utiliza.

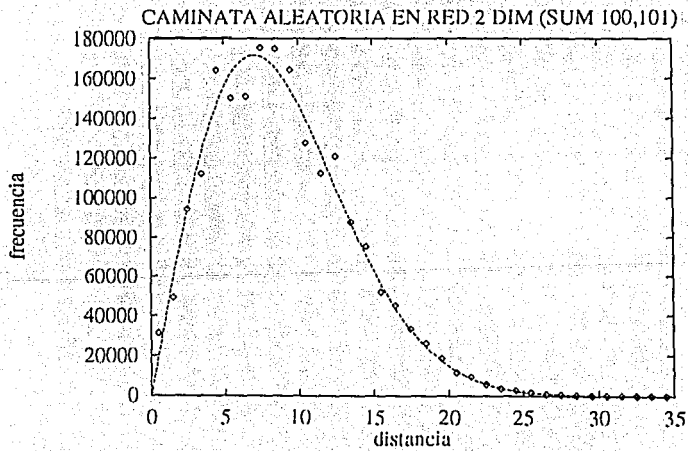
Aquí, sólo se ilustra una simulación de un millón de caminatas, pero en realidad, se hicieron 20, con sus respectivas gráficas, que presentan las tres situaciones establecidas anteriormente, en las cuales se observó el mismo fenómeno. El programa puede ser analizado en el Anexo A-1.



GRÁFICA 2. 1



**GRÁFICA 2.2**



**GRÁFICA 2.3**

## 2.2.2. Simulación de caminata aleatoria en red tridimensional.

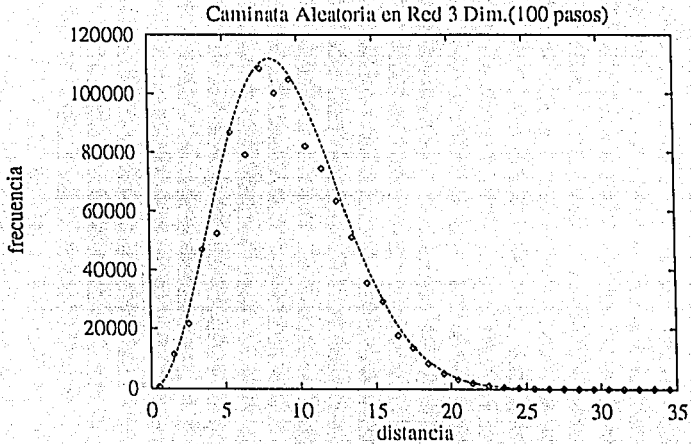
En el caso de una red tridimensional, es el mismo proceso que se realizó anteriormente, con la diferencia de que se utilizaran tres variables.

Esto ocasiona que en lugar de tener cuatro opciones de dirección para el desplazamiento, ahora se cuenta con seis, y por lo tanto el intervalo  $[0, 1]$  debe ser dividido en seis subintervalos, resultando las siguientes condiciones: si  $0 \leq xk \leq 0.16$  entonces el movimiento es una unidad sobre el eje  $x$  en sentido positivo, o si  $0.16 < xk \leq 0.33$  el desplazamiento es sobre el eje  $y$  en el mismo sentido, pero si  $0.33 < xk \leq 0.49$  entonces se mueve sobre el eje  $z$  en sentido positivo, o puede suceder que  $0.49 < xk \leq 0.66$  lo que implicaría que el movimiento es sobre el eje  $x$  en sentido negativo, o si  $0.66 < xk \leq 0.83$  el desplazamiento es sobre el eje  $y$ , pero en sentido negativo, finalmente si  $0.83 < xk \leq 1.00$  entonces el movimiento es sobre el eje  $z$  en el mismo sentido.

Una vez liberada la partícula en el centro de la red, comienza a difundirse en el espacio, dando pasos de longitud unitaria, cuya dirección está dada por las condiciones establecidas anteriormente. Después de  $x$  número de caminatas, se obtiene la frecuencia de las distancias, las cuales son graficadas junto con la función de distribución Gaussiana en tres dimensiones. En las gráficas 2.4 y 2.5, se muestran los puntos que son resultado de una simulación de 1000 000 de caminatas, tanto para  $N=100$  como para  $N=101$  respectivamente (recordar que los rombos dispersos son los datos arrojados por nuestra simulación, mientras que la curva punteada representa la función de distribución Gaussiana). Los resultados de la suma de ambos casos son ilustrados en la gráfica 2.6.

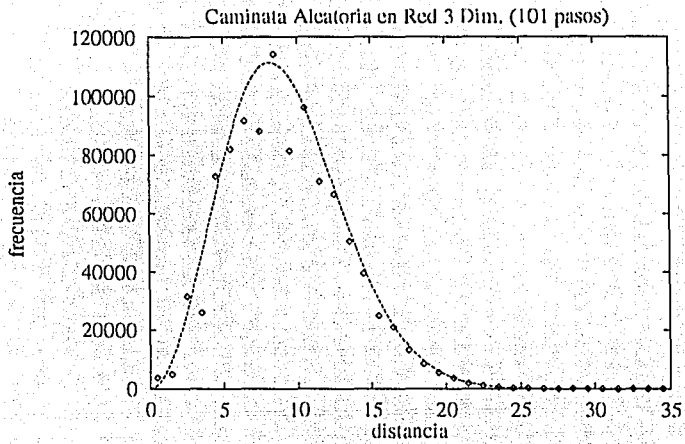
En ellas se observa, nuevamente, como los puntos desconexos presentan el desajuste cuando el número de pasos es par o impar, por motivos ya mencionados. Entonces son sumados ambos resultados, y al graficarlos el ajuste se acerca más a la región de la curva, lo que implica que en red en tres dimensiones las caminatas aleatorias se distribuyen aproximadamente como una Gaussiana.

En este caso se desarrollaron 20 simulaciones de 1000 000 de caminatas, con el número de pasos par, impar y la suma de ambos, con ellas se pudo comprobar, que efectivamente se distribuye como una Gaussiana aproximadamente. El programa se encuentra en el Anexo A-II, para su análisis.

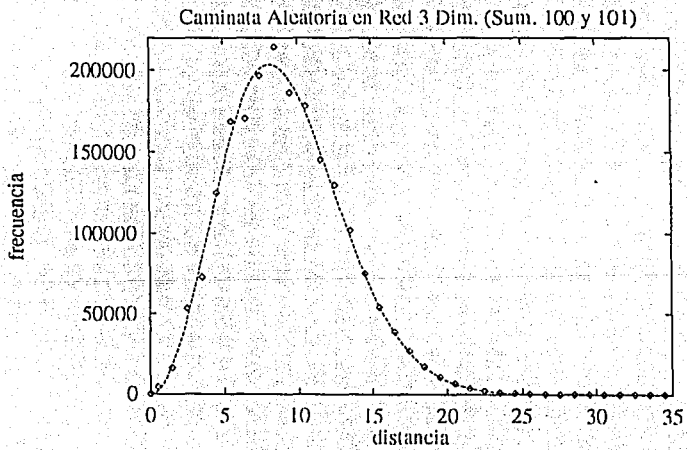


GRÁFICA 2. 4





**GRÁFICA 2. 5**

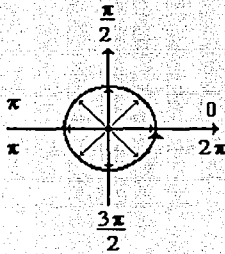


**GRÁFICA 2. 6**

### 2.2.3 Simulación de caminata aleatoria en el continuo bidimensional.

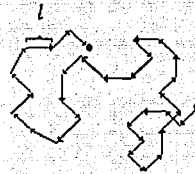
En esta ocasión se realizará la simulación que describa la caminata aleatoria de una partícula, con  $N=100$  pasos, en el espacio continuo en dos dimensiones.

Este caso se representa de manera similar a las simulaciones de caminata aleatoria en red, con la diferencia de que el número de direcciones es infinito por tener un rango de 0 a  $2\pi$  sobre una circunferencia (Ver Figura 2.4 a y 2.4 b, ).



En el espacio continuo, las direcciones que puede tomar una partícula, en cada paso, es infinito (Este caso se apega más a la realidad).

(a)



Este ejemplo muestra la trayectoria, de 31 pasos, que presentó una partícula en difusión. El tamaño de paso  $l$ , se mantiene constante.

(b)

FIGURA 2.4

Para elegir la dirección de cada paso, se proporciona un número aleatorio (distribuido uniformemente) que se multiplica por  $2\pi=6.2832\dots$  y se asigna a la variable  $\theta$ . En seguida se calcula mediante

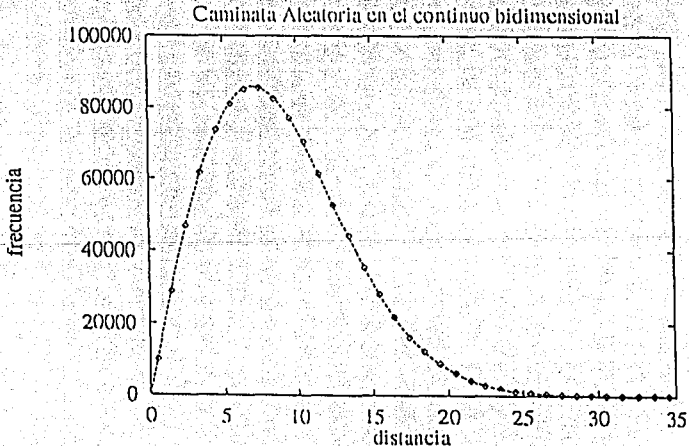
$$\begin{aligned} \Delta x &= \cos(\theta) \\ \Delta y &= \sin(\theta) \end{aligned}$$

Estas funciones nos proporcionarán las coordenadas de la nueva posición, después de un paso, en el plano euclidiano bidimensional de cada paso. En una variable "x" se llevará el

incremento de las abscisas y en una variable "y" la suma de las ordenadas. Al finalizar con el  $N$ -ésimo paso, se calcula la distancia de la posición final al centro donde fue liberada. Ésta debe ser dada en cada paso, de cada una de las 1 000 000 de caminatas que se simularon, considerando un tamaño de paso igual a la unidad.

Se grafican las distancias contra su frecuencia, junto con la función de distribución Gaussiana en dos dimensiones, y se verifica claramente como esos puntos se ajustan con mucho mayor exactitud a la función, que los puntos obtenidos de simulaciones en red. Como puede observarse, en el espacio continuo, la simulación de las caminatas aleatorias ya no presenta el problema de que el número de pasos sea par o impar, debido a que ahora las direcciones son tomadas en forma aleatoria, con lo que tendremos un número infinito de posibilidades para cada paso; a diferencia de la red en la que sólo había cuatro y seis direcciones en dos y tres dimensiones respectivamente.

En la gráfica 2.7 se muestra el resultado de una de las simulaciones (recordar que los rombos dispersos son los datos arrojados por nuestra simulación, mientras que la curva punteada representa la función de distribución Gaussiana). Para esta sección, se realizaron 20 corridas del programa presentado en el Anexo A-III, y pudo observarse el buen ajuste de la distribución de las caminatas aleatorias en el espacio continuo en dos dimensiones, obtenidas de la simulación, con la Gaussiana.



GRÁFICA 2. 7

### 2.2.4 Simulación de caminata aleatoria en el continuo tridimensional.

Por último se presenta la simulación de caminata aleatoria en el espacio continuo tres dimensiones. En este caso intervienen tres variables y por lo tanto la dirección en cada paso se distribuye en una esfera.

Dado un sistema coordenado esférico, ver figura 2.4(a), existe un plano acimutal y un eje perpendicular a dicho plano. Un punto se localiza por medio de tres números, cuya representación en coordenadas esféricas es  $P(\rho, \theta, \phi)$ , donde  $\rho = |OP|$ ,  $\theta$  es la medida en radianes no negativa del ángulo más pequeño medido desde el lado positivo del eje  $z$  a la recta  $OP$  y  $\phi$  es la medida en radianes del ángulo polar de la proyección de  $P$  en el plano polar. Veamos la figura 2.4(b). El origen tiene la representación en coordenadas esféricas  $(\rho, \theta, \phi)$  donde  $\theta$  y  $\phi$  pueden tener cualesquiera valores. Si el punto  $P(\rho, \theta, \phi)$  no es el origen, entonces  $\rho > 0$  y  $0 \leq \theta \leq \pi$ , donde  $\theta = 0$  si  $P$  está en el lado positivo del eje  $z$  y  $\theta = \pi$  si  $P$  está en el lado negativo del eje  $z$ .

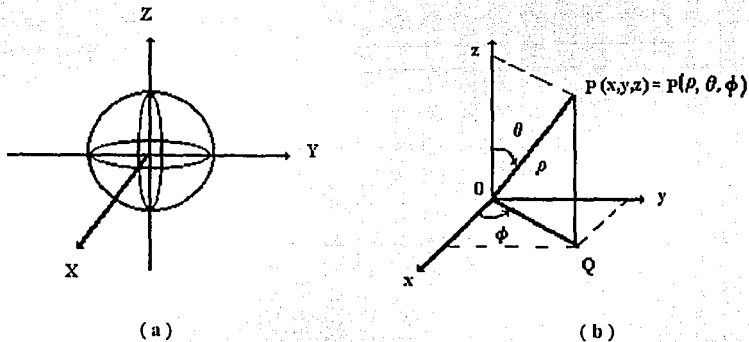


FIGURA 2.4

Colocando juntos un sistema coordenado esférico y un sistema coordenado cartesiano, como se muestra en la figura 2.4(b), obtenemos las relaciones entre las coordenadas esféricas y las coordenadas cartesianas de un punto  $P$  como

$$X = |\overline{OQ}| \cos \phi \quad Y = |\overline{OQ}| \sin \phi \quad Z = |\overline{QP}|$$

Ya que  $|\overline{OQ}| = \rho \sin \theta$  y  $|\overline{QP}| = \rho \cos \theta$ , estas ecuaciones se transforman en

$$x = \rho \sin \theta \cos \phi \quad y = \rho \sin \theta \sin \phi \quad z = \rho \cos \theta,$$

en donde  $\rho$  es el tamaño de paso igual a la unidad. Con ésto tendremos la dirección en cada paso para cada una de las 1000 000 de caminatas, cada una de 100 pasos.

En primera instancia, se pensaría en utilizar directamente a  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , calculadas arriba, para encontrar la posición de la partícula en movimiento; tal como se hizo en la sección anterior. Pero se observa que al generar los vectores dentro de la esfera, poniendo  $\theta = \pi * \text{Núm}_{\text{azar1}}$  y  $\phi = \pi * \text{Núm}_{\text{azar2}}$  (donde  $\text{Núm}_{\text{azar1}}$  y  $\text{Núm}_{\text{azar2}}$  son números aleatorios diferentes), se tiene que su concentración es mucho mayor en los polos que en el ecuador, por lo tanto su distribución no es uniforme. Entonces surge el problema de obtener números aleatorios cuya distribución se ajuste a nuestras necesidades.

Para tal efecto considérese la diferencial de área de una cinta de la superficie de la esfera, comprendida entre  $\theta$  y  $\theta + d\theta$ :

$$dA = 2 \pi R^2 \sin \theta d\theta \quad (2.33).$$

La integral de dicha  $dA$  entre  $\theta = 0$  y  $\theta = \pi$  nos da el área de la esfera,  $4\pi R^2$ . La diferencial del área normalizada a la unidad,  $dA_{11}$ , será entonces

$$dA_{11} = (2\pi R^2 / 4\pi R^2) \sin \theta d\theta = \frac{1}{2} \sin \theta d\theta \quad (2.34).$$

Para obtener vectores distribuidos uniformemente en la superficie de la esfera, debemos tomar un número al azar para  $\theta$  y hacer

$$\int_0^{\theta_{\text{azar}}} dA_{11} = \text{Núm}_{\text{azar1}}, \quad (2.35).$$

Resolviendo a la integral, se tiene

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(\theta_{\text{azar}}) = \text{Núm}_{\text{azar1}} \quad (2.36).$$

Entonces

$$\cos(\theta_{\text{azar}}) = 1 - 2\text{Núm}_{\text{azar1}} \quad (2.37),$$

Y como  $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$ , luego entonces

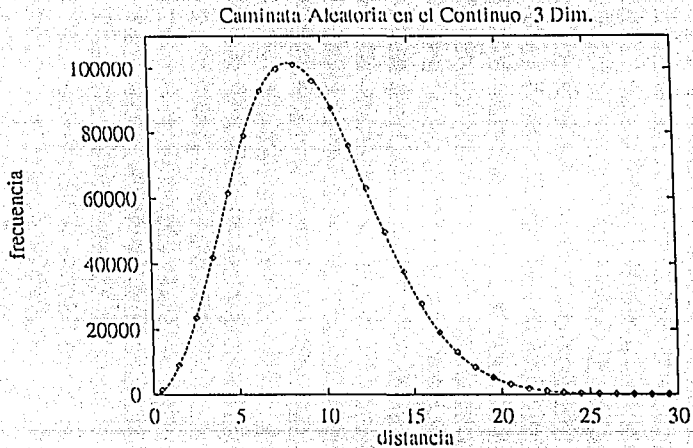
$$\text{sen } \theta_{\text{azur}} = \sqrt{1 - \cos^2(\theta_{\text{azur}})} \quad (2.38),$$

y

$$\phi = 2\pi * \text{Núm}_{\text{azur}2} \quad (2.39).$$

Después de obtener los resultados de la simulación por computadora, se grafican las distancias contra sus frecuencias, junto con la función de distribución Gaussiana en tres dimensiones y se observa como el ajuste es casi perfecto y con esto se visualiza que las caminatas aleatorias se distribuyen como Gaussiana.

A continuación se presenta la gráfica 2.8, como resultado de la simulación realizada (recordar que los rombos dispersos son los datos arrojados por nuestra simulación, mientras que la curva punteada representa la función de distribución Gaussiana). El programa se localiza en el Anexo A-IV.



GRÁFICA 2. 8

Una vez planteada la teoría de caminatas aleatorias, realizado las simulaciones de las mismas y de haber hecho la comparación entre ambas, se afirma que la caminata aleatoria se distribuye como una Gaussiana, ya que su ajuste es aproximado en el caso de redes, y casi perfecto en el caso continuo. En seguida se analizará el modelo de Agregación Limitada por Difusión.

## **CAPÍTULO 3.**

### **AGREGACIÓN LIMITADA POR DIFUSIÓN**

**(D. L. A.)**

### 3. AGREGACIÓN LIMITADA POR DIFUSIÓN.

El fenómeno en el que una partícula individual o un conjunto de partículas se añade a un cúmulo o agregado, haciéndolo crecer conforme transcurre el tiempo, se le conoce como agregación. En este caso se supone que esa unión es irreversible, es decir, una vez pegados no podrán ser separados por ninguna fuerza externa.

La cinética de la agregación de pequeñas partículas formando grandes cúmulos ocurre en diversos fenómenos de la naturaleza tales como formación de humo y hollín, crecimiento de aerosoles, nucleación y crecimiento, así como floculación y agregación coloidal, etc. El modelo de agregación simple que en este capítulo trataremos es el modelo de Agregación Limitado por Difusión o modelo DLA, el cual fue introducido por Witten y Sander en 1981.

El modelo DLA consiste en el crecimiento del agregado en función de una partícula fija, a la cual le son pegadas otras partículas que están en difusión. Es preciso señalar que las partículas en movimiento, que lleguen a alguna posición vecina cercana al cúmulo, tendrán tendencia a pegarse en las puntas. Tiempo después de haber iniciado el proceso, el agregado presentará brazos de diferentes longitudes, dándole una apariencia dendrítica con hoyos de diversos tamaños. Este efecto cualitativo explica porque los agregados Witten y Sander son objetos fractales. El carácter fractal de estos agregados es establecido por la dimensión fractal, mediante el radio de giro en función del número de partículas:

$$N \sim Rg^D \quad (3.1)$$

en donde  $N$  es el número de partículas,  $Rg$  el radio de giro y  $D$  la dimensión fractal. Despejando a  $D$  se tiene

$$D = \ln N / \ln Rg \quad (3.2)$$



En (3.2), el radio de giro es calculado mediante la ecuación 1.12, del Capítulo 1; para cada cierto número  $npart$  de partículas como ya se había establecido. Pero para fines de programación tenemos que desglosarlo de la siguiente manera.

Sea

$$\vec{r}_i = (x_i, y_i) \quad \text{donde } i = 1, 2, \dots, npart \quad y$$

$$\vec{r}_{cm} = \frac{\sum \vec{r}_i}{npart} = \frac{\sum (x_i, y_i)}{npart} = \left( \frac{\sum x_i}{npart}, \frac{\sum y_i}{npart} \right) = (x_{cm}, y_{cm})$$

por tanto, el radio de giro toma la forma

$$(npart) Rgi^2 = \sum [(x_i, y_i) - (x_{cm}, y_{cm})]^2,$$

elevando al cuadrado

$$(npart) Rgi^2 = \sum x_i^2 - 2 x_{cm} \sum x_i + npart x_{cm}^2 + \sum y_i^2 - 2 y_{cm} \sum y_i + npart y_{cm}^2.$$

Como  $x_{cm} = \frac{\sum x_i}{npart} \Rightarrow \sum x_i = x_{cm} (npart)$  y  $\sum y_i = y_{cm} (npart)$ , entonces se tiene

$$(npart) Rgi^2 = \sum (x_i^2 + y_i^2) - 2 npart x_{cm}^2 - 2 npart y_{cm}^2 + npart x_{cm}^2 + npart y_{cm}^2$$

$$(npart) Rgi^2 = \sum (x_i^2 + y_i^2) - npart x_{cm}^2 - npart y_{cm}^2$$

Despejando a  $Rgi$  se tiene que

$$Rgi = \sqrt{[\sum (x_i^2 + y_i^2) - npart x_{cm}^2 - npart y_{cm}^2] / npart} \quad (3.3).$$

Luego entonces se hace uso de la ecuación (1.2) del Capítulo 1,

$$D = \ln n_{part} / \ln R_{gi} \quad (3.4).$$

Se grafica el  $\ln n_{part}$  contra el  $\ln R_{gi}$ . En ésta se observará un conjunto de puntos, por los cuales se ha de pasar una línea recta que minimice las distancias de todos los puntos a la recta (método de mínimos cuadrados); la pendiente  $m$  de ella debe ser igual a la inversa de la dimensión fractal  $D = 1/m$ , como se vió anteriormente.

En base a métodos experimentales y diversas simulaciones hechas en diferentes espacios de dimensión  $d$  menor o igual a 6, fue posible obtener la tabla 3.1, que presenta la dimensión fractal para el modelo DLA. También podemos observar que  $D$  aumenta al mismo tiempo que  $d$  y que  $D < d$ . Estos datos serán utilizados para verificar los resultados que obtengamos de las simulaciones presentadas.

Dimensión fractal  $D$ , en espacio Euclidiano  $d$   
Modelo D.L.A.

d	2	3	4	5	6
D	1.7	2.5	3.3	4.2	5.3

TABLA 3.1.

Una interesante extensión de este modelo consiste en introducir una probabilidad de pegamiento,  $p$ . Esto significa que cuando la partícula en difusión alcanza un sitio vecino cercano al agregado, ésta tiene solamente una probabilidad  $p$  de quedar pegada. Sin embargo, ha sido encontrado que la dimensión fractal no depende de  $p$ , pero cuando ésta es muy pequeña, el agregado es aparentemente más compacto. Cuando el límite de  $p$  tiende a cero se incurre en el modelo Eden<sup>10</sup>, ya que la partícula visita a casi todos los sitios de la frontera del cúmulo antes

<sup>10</sup> En 1961, Eden, propuso un modelo de crecimiento celular para explicar principalmente la evolución de tumores. El cual consiste en rodear a una partícula de posiciones vecinas cercanas, se elige una de ellas aleatoriamente y se designa como ocupada, nuevamente se establecen posiciones vecinas a ambas, se elige otra posición para considerarla ocupada. El proceso es iterativo, hasta alcanzar cúmulos compactos de cierto número de partículas, cuya superficie es un fractal. Para mayor información consultar la bibliografía dada al final de este trabajo.

de quedar pegada, y esa probabilidad es uniforme en todos los hoyos de la superficie. Este es un típico paso de enlace entre dos regímenes gobernados por diferentes condiciones.

Anteriormente fue admitido que los agregados Witten-Sander fueron fractales alcatorios, autosimilares, cuya dimensión fractal era independiente de la red, dependiendo sólo de la dimensión del espacio. Pero las simulaciones en dos dimensiones fueron realizadas en varias redes y solamente la más reciente a gran escala (más de 100 000 partículas), presentó una pequeña pero importante dependencia de la dimensión fractal con el tipo de red usada. Este resultado junto con las propiedades anisotrópicas y las recientes investigaciones analíticas establecen el carácter no universal del modelo Witten-Sander <sup>11</sup>.

### 3.1. Agregación Limitada por Difusión en una Red Bidimensional

A continuación será descrita la versión original del modelo, en una red en dos dimensiones, estableciendo paso a paso el proceso de formación de agregados del modelo DLA, en el que fue basada la simulación de agregación que se proporciona en este trabajo.

En general, el modelo DLA consiste de una partícula inicial denotada como semilla del agregado, situada en el centro del espacio. Una partícula es liberada a una distancia determinada en un punto alcatorio. Luego comienza una caminata alcatoria hasta quedar pegada a la semilla, en posición también al azar. En seguida se libera otra partícula que sigue el mismo proceso que la anterior hasta quedar pegada al agregado. Así sucesivamente hasta alcanzar un cúmulo con un número  $N$  determinado de partículas.

Para fines de programación, considérese una red cuadrada bidimensional en forma de tablero cuadrículado. Inmediatamente se posiciona una partícula en el centro de ésta con

<sup>11</sup> R. Jullien, R. Botet. Agregation and fractal aggregates, ed. World Scientific, Singapore 1987, pag 61.

coordenadas (0,0), la cual representa el origen y es llamada semilla del agregado. A ésta posición se le asigna un valor de 1 para señalar que está ocupada, las celdas que la rodean son denotadas con -1 para indicar que son posiciones vecinas cercanas, y con 0 en cualquier otro caso. Ver figura 3.1.

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	-1	1	-1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Estructura física inicial de la simulación del modelo D.L.A.

1: Indica lugar ocupado por la partícula, en este caso la semilla.

-1: Designa posición vecina cercana al agregado o cúmulo.

0: En cualquier otro caso.

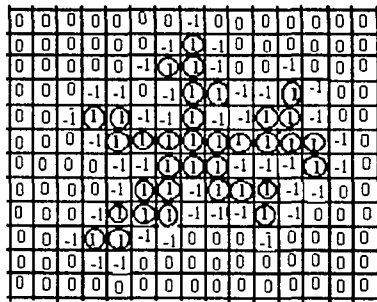
FIGURA 3.1

Se establecen dos límites de espacio, uno para saber en dónde se liberarán las partículas y el otro para saber cuándo una partícula es despreciable, es decir, cuando ésta se aleja demasiado de la semilla o agregado, entonces se prefiere desecharla y liberar otra partícula, ya que la probabilidad de que regrese es mínima o simplemente nunca lo haga y puede provocar largos tiempos de ejecución e inclusive puede provocar que el programa nunca termine. Para el primer caso se establece una circunferencia de radio  $R_p$ , que debe ser mayor que el brazo más largo del agregado. Para la simulación consideremos a  $R_p = r_{max} + 3$ , en donde  $r_{max}$  indica la distancia del centro del agregado a la rama más larga. Cada vez que se cumpla que  $r_{max}$  cambie de valor, entonces se actualiza a  $R_p$  incrementándole tres unidades. Para la segunda opción, se denota con  $R_g$  a la circunferencia de diámetro mayor y su tamaño está dado por  $n$ -veces  $R_p$ , en este caso  $R_g = 4 * R_p$ .

Una vez delimitado el espacio se procede a liberar una partícula en forma aleatoria sobre la circunferencia  $R_p$ ; se saca el centro más cercano, ya que se está manejando un red finita y entera, obteniendo una nueva posición en coordenadas sobre la red. Inmediatamente comienza

una caminata aleatoria en la red, que indica difusión de la partícula (las únicas direcciones que puede tomar en cada paso son: derecha, izquierda, arriba y abajo; debido a la red en la que se desplaza). Si en su camino se encuentra una posición adyacente a la semilla, la partícula se detiene y queda irremediablemente pegada; ahora el agregado cuenta con dos partículas.

Se denotan nuevamente posiciones vecinas cercanas con respecto a las dos partículas que conforman al agregado; se vuelve a liberar otra partícula sobre la circunferencia  $R_p$ , vuelve a obtenerse el entero más cercano y comienza su difusión a través de la red hasta alcanzar un vecino cercano en el que se detenga y quede pegado, ahora el agregado tiene tres partículas. El proceso se repite hasta alcanzar un número  $N$  deseado de partículas que conformen el agregado, o hasta que las ramificaciones del mismo rebasen las fronteras de la red, cuyas dimensiones dependen de la capacidad de memoria del equipo computacional que se utilice. Pero si la partícula en difusión no toca ninguna posición vecina cercana y se aleja del centro de tal forma que rebasa el radio  $R_g$ , entonces se descarta y se libera nuevamente otra partícula sobre la circunferencia  $R_p$  siguiendo el mismo proceso iterativo. En la figura 3.2 se presenta un cúmulo en red en forma de arreglo bidimensional.



Estructura física de la Simulación del modelo D.L.A., después de un tiempo transcurrido, el cúmulo tiene 35 part.

FIGURA 3.2.

En la Tabla 3.2 A y 3.2 B se muestran los resultados de 10 simulaciones con 1000 partículas y 10 simulaciones con 2000 partículas respectivamente, en ellas se observa que la dimensión fractal promedio para la primera es de  $1.739 \pm 0.033$ , y para la segunda, es de  $1.696 \pm 0.037$ . Cantidades que se ajustan de manera muy aproximada a la de la Tabla 3.1, para 2 dimensiones.

**SIMULACIÓN DE AGREGACIÓN LIMITADA POR DIFUSIÓN,  
EN RED DE DOS DIMENSIONES (1000 PARTICULAS C/U).**

Núm. Simula.	Semilla	Dim. Frac.	Desviación Standard
1	976321450	1.65	0.018
2	456321700	1.65	0.007
3	234567890	1.71	0.007
4	567920145	1.71	0.016
5	987645321	1.71	0.013
6	338565898	1.76	0.029
7	456789321	1.77	0.011
8	342156789	1.78	0.01
9	783520981	1.78	0.031
10	543278945	1.87	0.021
Promedio =		1.739	0.0163

TABLA 3. 2 A

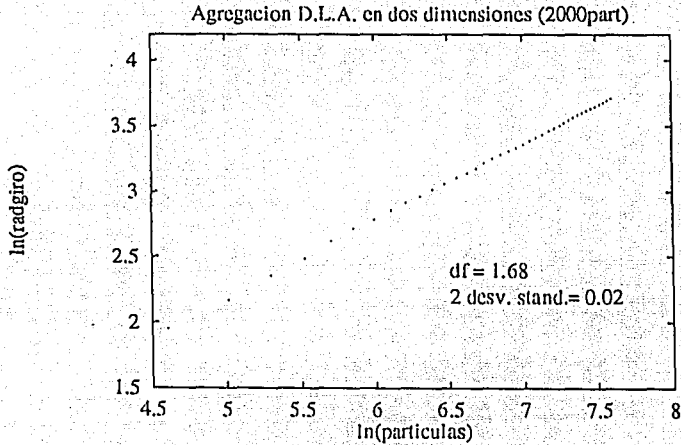
**SIMULACIÓN DE AGREGACIÓN LIMITADA POR DIFUSIÓN,  
EN RED DE DOS DIMENSIONES (2000 PARTICULAS C/U).**

Núm. Simula:	Semilla	Dim. Frac.	Desviación Standard
1	451983654	1.62	0.033
2	123098789	1.63	0.03
3	345190745	1.64	0.028
4	976321450	1.68	0.015
5	345678901	1.68	0.012
6	397802100	1.78	0.019
7	445465898	1.67	0.014
8	544862812	1.71	0.01
9	234127856	1.8	0.007
10	678345120	1.75	0.017
Promedio =		1.696	0.0185

TABLA 3. 2 B

La gráfica 3.1, es producto de la simulación 5 para dos mil partículas. En ella se ve cómo son graficados el vector que contienen el logaritmo natural del radio de giro y del número de partículas. Con ellos y mediante mínimos cuadrados se obtuvo la pendiente de la recta, cuya

distancia a los puntos es mínima, con la que fue posible obtener la dimensión fractal de los cúmulos formados. El programa se encuentra en el Anexo A-V



GRÁFICA 3. 1

Una vez entendido el procedimiento del modelo D.L.A. en red bidimensional, ahora lo pasaremos a una red tridimensional y en seguida al espacio continuo bidimensional.

### 3.2 Simulación de Agregación Limitada por Difusión en Red Tridimensional.

Para la simulación del modelo DLA en red en tres dimensiones, se requiere de una red cúbica simulada con un arreglo tridimensional  $K$  de  $l^3/l^3$ , en donde cada celda cúbica se inicializa con cero. Posteriormente se establece la partícula semilla con coordenadas  $(0,0,0)$  y valor de 1. Como ya se había establecido, cada celda ocupada por una partícula tendrá valor de 1, las posiciones vecinas cercanas con -1 y cero en cualquier otro caso.

Ahora en lugar de calcular el radio pequeño y el radio grande de una circunferencia, se proporciona el radio de la esfera pequeña y el de la esfera grande, por encontrarnos en el espacio tridimensional.

Se libera una partícula sobre la esfera pequeña, tomando en cuenta que la distribución debe ser igual en todos los ángulos de la esfera. Para ello se considera la teoría vista en la simulación de caminata aleatoria en el continuo de tres dimensiones.

Tan pronto como es liberada, la partícula comienza una caminata aleatoria en la red tridimensional; se calcula la distancia del centro al último punto de llegada en cada paso. Finalmente, se chequea que sucedan cualquiera de las tres situaciones siguientes:

1. Que la partícula encuentre una posición vecina cercana y quede pegada al agregado. Si llegase a suceder, el número de partículas del agregado se incrementa en uno, la posición ocupada se designa con 1 y se establecen inmediatamente los vecinos cercanos. En esta parte se calcula el radio de giro cada 50 partículas pegadas al agregado. Estos datos serán necesarios para calcular la dimensión fractal de cúmulo completo, después de finalizar el proceso.

2. O, puede suceder que la distancia sea mayor que el radio de la esfera grande. Entonces se desecha, y se dispone a liberar otra partícula.



3. De otra forma, se continua con la caminata aleatoria y se prosigue a verificar cuál de las situaciones anteriores sucede.

Este proceso iterativo finalizará, ya sea porque el número de partícula del cúmulo es mayor o igual al número máximo de partículas  $n_{max}$  que el investigador desee, o que el brazo más largo del agregado sea mayor o igual que los límites de la caja. Para llevar el control del brazo o rama más largo, se establece la condición de que si la distancia es mayor que  $r_{max}$ , que es la variable que contiene el tamaño de la rama más larga durante todo el proceso, entonces  $r_{max}$  es igual a la distancia y se prosigue a recalcular el radio pequeño y el radio grande de la esfera correspondiente.

A continuación se presentan las tablas 3.3A y 3.3B, que contienen los resultados de 10 simulaciones realizadas para agregados de 1000 y 2000 partículas respectivamente. En la gráfica 3.2, observe como los puntos son ajustados a una línea recta, cuya pendiente es utilizada para calcular a  $D$ . El programa se encuentra en el Anexo A-VI.

#### SIMULACIÓN DE AGREGACIÓN LIMITADA POR DIFUSIÓN, EN RED DE TRES DIMENSIONES (1000 PARTÍCULAS C/U).

Núm. Simula.	Semilla	Dim. Frac.	Desviación Standard
1	207482908	2.55	0.009
2	591434042	2.58	0.008
3	432718263	2.42	0.009
4	131691801	2.43	0.012
5	732723258	2.41	0.012
6	634285258	2.5	0.009
7	356379201	2.60	0.023
8	451989257	2.55	0.012
9	400293644	2.43	0.017
10	325987250	2.5	0.008
Promedio =		2.497	0.011

TABLA 3.3 A

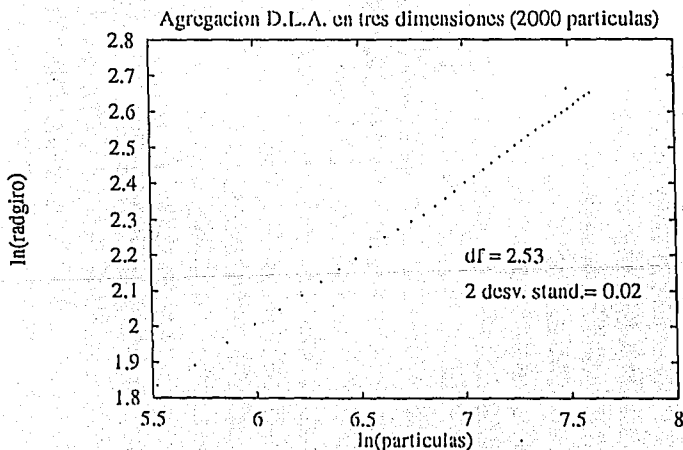
Para las 10 simulaciones de 1000 partículas, la dimensión fractal promedio fue de  $2.497 \pm 0.022$ , y para las 10 simulaciones de 2000 partículas fue de  $2.481 \pm 0.027$ ; las cuales

son muy cercanas a  $D=2.5$ , para tres dimensiones. La gráfica 3.2 muestra la distribución de los puntos obtenidos de la simulación 4 para 2000 partículas ; localizados en la gráfica  $\ln-\ln$ , por los cuales se hizo pasar una recta mediante mínimos cuadrados y cuya pendiente es utilizada para obtener a  $D$ .

**SIMULACIÓN DE AGREGACIÓN LIMITADA POR DIFUSIÓN,  
EN RED DE TRES DIMENSIONES (2000 PARTÍCULAS C/U).**

Núm. Simula.	Semilla	Dimensión Fractal	Desviación Standard.
1	123839273	2.42	0.015
2	739129821	2.5	0.011
3	298346632	2.31	0.008
4	928387155	2.53	0.01
5	678764223	2.41	0.013
6	329874193	2.32	0.012
7	548787266	2.54	0.014
8	438475876	2.5	0.016
9	384781762	2.66	0.021
10	679789242	2.62	0.013
Promedio =		2.481	0.0133

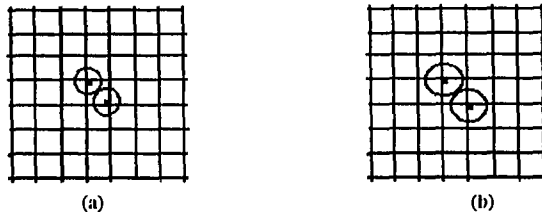
TABLA 3.3 B



GRAFICA 3. 2

### 3.3 Simulación de Agregación Limitada por Difusión en Continuo de dos dimensiones.

Para ésta simulación se hace uso de una red bidimensional, representada mediante un arreglo  $K$  de  $n \times n$ , necesaria para llevar el control sobre las partículas que van constituyendo al agregado conforme transcurre el tiempo; el tamaño de paso será el diámetro de cada partícula que se considera de  $\sqrt{2}$ , siendo éste igual que la diagonal de una celda de tamaño la unidad. Se estima esa cantidad porque con ello se garantiza con plena confianza de que dadas dos partículas, sus centros no ocupen la misma celda. Para ilustrar esto, ver la figura 3.4.



En la figura (a), el diámetro de las partículas es menor que  $\sqrt{2}$ , y por lo tanto puede suceder que el centro de dos de ellas ocupen la misma celda, situación que no es válida por motivos de programación. Esto se soluciona, considerando el diámetro mayor o igual a  $\sqrt{2}$ , como se muestra en la figura (b), con esto se garantiza que cada centro ocupará una celda diferente.

FIGURA 3. 4

Luego, se establecen los límites máximos y mínimos del arreglo bidimensional, que representa a la red.

Posteriormente se coloca la semilla en el centro de la red con coordenadas (0,0), se rodea de posiciones vecinas cercanas (designadas con -1), como se muestra en la figura 3.5, y se le designa con 1 (en este caso las partículas agregadas tendrán un número diferente a las otras, el cuál es designado de acuerdo a como se van pegando, esto para diferenciarlas de las demás). En ella puede observarse que cada partícula se rodea de veinte posiciones vecinas cercanas, ya que ahora, la partícula en difusión, puede llegar en cualquier dirección y traslaparse o rozar contorno con contorno con alguna otra partícula del agregado. En éstas dos situaciones la partícula puede quedar pegada.

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	-1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	-1	-1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	-1	-1	1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	-1	-1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	-1	-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Representación de la red, utilizada en la simulación del modelo D.L.A. en el espacio continuo bidimensional. En este caso se consideran 20 posiciones vecinas cercanas, para garantizar que si existe el menor roce entre partículas, estas quedarán pegadas.

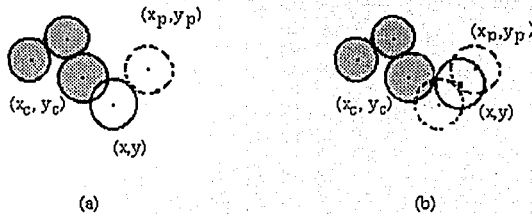
FIGURA 3. 5

En seguida son calculadas las circunferencias concéntricas, tanto la de radio pequeño como la del grande. Se libera una partícula sobre la primera, la cual inmediatamente comienza una caminata aleatoria en el continuo bidimensional. En cada momento en que ésta realiza un paso se mide la distancia del punto donde se sitúa al centro del cúmulo. Si esa longitud llega a ser mayor que la del radio grande, entonces se desecha y se libera otra nueva partícula, prosiguiendo con el proceso; pero si es menor, la partícula sigue difundiéndose en el espacio.

Si en su recorrido se encuentra con una posición vecina cercana, se cuestiona si la partícula está dentro de la zona de posible traslape. Para saberlo, es necesario "peinar" la región en torno a ella misma; si resulta que una o más de esas posiciones son diferentes a 0 y -1, quiere decir que está posiblemente encimada, por lo que es necesario contabilizar el número de partículas con las que hay un posible traslape (*npc*) y guardar el número que corresponde a esas partículas en un vector (*inti*).

El siguiente paso, es separar a la partícula de todas aquellas con las que posiblemente se encuentra traslapada, esto se hace de la siguiente forma: se verifica si la distancia entre la partícula en movimiento y las partículas con las que se creó se traslapó, es menor que  $\sqrt{2}$ . En caso afirmativo, podemos estar seguros de la existencia de un traslape, por lo tanto se procede a

separarlas. Esto se logra, cuando la partícula en movimiento es desplazada en la dirección opuesta a la que llegó, con una razón  $r$  de desplazamiento entre 0 y 1, dada por lo siguiente.



La figura (a) muestra el traslape entre dos partículas, en la figura (b) ya han sido separadas.

FIGURA 3.6

Considere a  $(x, y)$  como las coordenadas de la posición original de la partícula en movimiento, a  $(x_p, y_p)$  como la posición de la misma, pero en un paso anterior, y a  $(x_c, y_c)$  como las coordenadas de la partícula, que conforma a la frontera del cúmulo, con la que hay superposición. Como se observa en la figura 3.6, la relación entre  $(x, y)$  y  $(x_p, y_p)$  está dada por

$$dl = (x - x_p, y - y_p) + r(y_p, y_p)$$

de donde

$$dl = [x + x_p(r-1), y + y_p(r-1)] \quad (3.5);$$

por lo tanto la distancia entre  $(x, y)$  y  $(x_c, y_c)$  es  $\sqrt{2}$  y está dada como sigue

$$\sqrt{2} = \sqrt{[x_c - x - x_p(r-1)]^2 + [y_c - y - y_p(r-1)]^2} \quad (3.6).$$

Se procede a encontrar a  $r$  a partir de (3.6). Después de hacer las operaciones algebraicas necesarias, se llegó a

$$(x_p^2 + y_p^2) r^2 - 2r[x_p(x_c + x_p - x) + y_p(y_c + y_p - y)] + [(x_c + x_p - x)^2 + (y_c + y_p - y)^2 - 2] = 0,$$

la cual es una ecuación de segundo grado, que para fines de programación se desglosa de la siguiente manera.

$$a = (x_p^2 + y_p^2)$$

$$bx = (x_c + x_p - x)$$

$$by = (y_c + y_p - y)$$

$$b = -2(x_p bx + y_p by),$$

$$c = bx^2 + by^2 - 2;$$

por lo tanto, la solución a la ecuación es

$$r1 = (-b + \sqrt{b^2 - 4ac})/2a \quad (3.7),$$

$$r2 = (-b - \sqrt{b^2 - 4ac})/2a \quad (3.8).$$

Para saber cual  $r$  tomar de (3.7) y (3.8), se elige la menor. Luego entonces las coordenadas de la nueva posición de la partícula en movimiento, después de la separación, está dada por

$$x = x + x_p (r-1)$$

$$y = y + y_p (r-1)$$

y el paso anterior estará dado por

$$x_p = x_p * r$$

$$y_p = y_p * r$$

De esta manera se garantiza que la frontera de ambas partículas coincide entre sí. Una vez despegada, se considera este nuevo centro para verificar si se enciende con otras partículas, siguiendo el procedimiento anterior.

Después de separar a la partícula en movimiento de cualquier otra, entonces quedará pegada al agregado, contorno con contorno a alguna de las partículas que lo constituyen. Por lo tanto el tamaño de éste aumentará en una unidad; en seguida se actualiza a  $(x_c, y_c)$  con la de la partícula agregada. A la nueva celda ocupada, de la red, se le designa el número de partículas que se han pegado ( $n_{cont}$ ) y se vuelven a designar con -1 a las posiciones vecinas cercanas con respecto a la nueva partícula. Cada vez que una partícula se suma al cúmulo, se debe verificar si su brazo más largo es mayor que la circunferencia de radio pequeño, en caso afirmativo se deben actualizar a  $r_p = r_{max} + 3$  y  $r_g = 4 r_p$ .

Si el tamaño del cúmulo no excede a la red o el máximo de partículas que debe conformar al cúmulo no es rebasado, se procede a liberar a otra partícula y se le aplica el mismo tratamiento antes descrito. En caso contrario se finalizará con el proceso.

Cada cincuenta partículas pegadas se calcula el radio de giro y al mismo tiempo se actualizan las variables de mínimos cuadrados, necesarias para que posteriormente se calcule la dimensión fractal del agregado.

La tabla 3.4 proporciona los resultados de veinte simulaciones cada una con 10 000 partículas. Las columnas que la componen son: el número de simulación, la semilla para generar los números pseudoaleatorios, la dimensión fractal, la desviación estándar y el tiempo máquina de ejecución en minutos. El programa es mostrado en el Anexo A-VII.

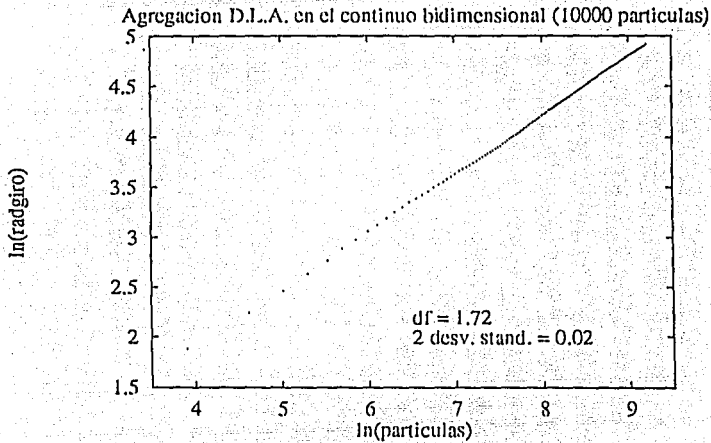
Como se observa la dimensión fractal promedio, de todas las simulaciones, es de  $1.7155 \pm 0.026$  desviación estándar, que en comparación con la de la tabla 3.1, para dos dimensiones, es muy cercana y por lo tanto puede decirse que el programa arroja datos certeros. El tiempo promedio de proceso en corrida es de 43 minutos. La gráfica 3.3 corresponde a la simulación número 1, en ella se observa como los puntos dispersos se ajustan a una línea recta cuya pendiente es utilizada para calcular a  $D$ .

**SIMULACIÓN DE AGREGACIÓN LIMITADA POR DIFUSIÓN,  
EN EL ESPACIO CONTINUO DE DOS DIMENSIONES.  
(10 000 PARTICULAS C/U)**

Núm. Simula.	Semilla	Dim. Frac.	Desviación Standard	Tiempo (min.)
1	172618346	1.72	0.008	47
2	472864522	1.74	0.021	45
3	763715532	1.7	0.017	38
4	625315432	1.71	0.004	23
5	381354362	1.75	0.021	31
6	483737333	1.71	0.018	26
7	665748242	1.71	0.013	32
8	201910102	1.64	0.005	58
9	938463553	1.72	0.006	62
10	848484732	1.69	0.013	61
11	486740232	1.8	0.009	45
12	575757423	1.68	0.028	49
13	436183564	1.71	0.012	37
14	609053843	1.76	0.009	49
15	648573642	1.72	0.025	63
16	443563863	1.75	0.01	81
17	483737333	1.71	0.018	26
18	372832377	1.71	0.012	30
19	400289374	1.68	0.006	37
20	899867364	1.7	0.007	31
Promedio =		1.7155	0.0131	43.55

**TABLA 3. 4**





GRÁFICA 3. 3

La figura 3.6 es la visualización de un cúmulo obtenido de la simulación realizada en este trabajo. En ella se presenta la forma dendrítica que presenta el cúmulo en crecimiento. Cada cierto número de partículas adheridas al agregado presentan color diferente, esto es para verificar que las partículas tiene la tendencia de pegarse en las puntas de las ramificaciones, esto provoca que queden hoyos de diversos tamaños, que es lo que caracteriza a los agregados del modelo D.L.A. como objetos fractales.

AGREGACION LIMITADA POR DIFUSION (D.L.A.).

— Espacio Continuo dos Dim., 1 000 partículas;  $df = 1.67$ .

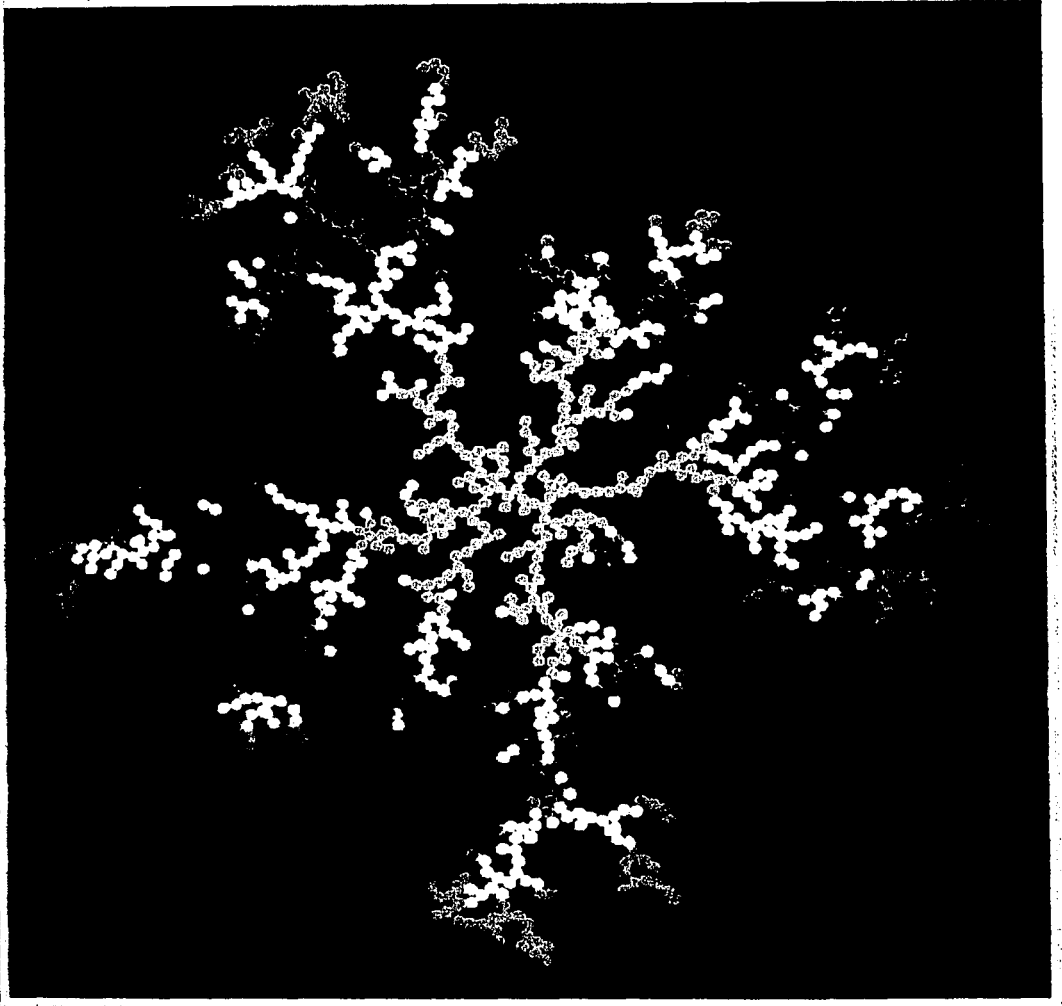


FIGURA 3.6

## **CAPÍTULO 4.**

### **AGREGACIÓN COLOIDAL CÚMULO-CÚMULO**

**(D. L. C. A.)**

#### 4. AGREGACIÓN COLOIDAL LIMITADA POR DIFUSIÓN (D.L.C.A.).

El modelo Witten-Sander fue el primer modelo simple capaz de describir el proceso de crecimiento irreversible aleatorio y generar estructuras fractales. A través de los tiempos se le ha encontrado un gran número de aplicaciones experimentales, como es la electrodeposición, fluidos en movimiento, etc., más no fue posible que describiera el proceso regular de agregación encontrado, tanto, en coloides como en aerosoles.

El inconveniente esencial en este modelo es que existe una situación asimétrica en la que una partícula individual llega a pegarse a un sólo agregado o cúmulo, situación que no siempre sucede en la realidad, como es el caso de los coloides y aerosoles, en que los cúmulos se mueven en el espacio y son capaces de pegarse unos con otros. Pero este fenómeno es contemplado por el modelo de Agregación Coloidal Limitada por Difusión (D.L.C.A.) o también conocido como Agregación Cúmulo-Cúmulo. En 1983, dos años después de la introducción del modelo DLA, el estudio del DLCA se extendió simultáneamente en Francia y Estados Unidos.

El proceso iterativo que propone el modelo de agregación Cúmulo-Cúmulo, consiste en elegir aleatoriamente un agregado de un conjunto de ellos, en el que cada uno presenta un movimiento Browniano limitado por el espacio. Cuando en su recorrido dos cúmulos llegan a una posición vecina cercana, es decir, cuando una o más partículas de un agregado ocupan alguna posición vecina inmediata de otro, sucede la unión irreversible de ambos, formando un cúmulo más grande con movimiento aleatorio más lento y con la probabilidad de quedar pegado a otro agregado. Por lo tanto, cuando la colisión ocurre el número de agregados decrece en uno, en tal medida que al finalizar el proceso se contará con uno sólo el cual contendrá a todos los demás.

En el modelo de agregación D.L.C.A., donde varios agregados se difunden en el espacio, las características del movimiento Browniano están dadas por dos situaciones posibles: ya sea que el tamaño de paso " $\sigma$ ", sea constante en un tiempo  $t$ , dado, y el número de pasos  $N$  sea proporcional a un coeficiente de difusión  $\mathcal{D}$ , es decir, el tamaño de paso es fijo y el número de ellos aumenta. En la simulación presentada en este trabajo, se considera este caso, porque el tamaño de paso que realizan los cúmulos son de la longitud de una de las celdas de la red, y por lo tanto queda fijo. La otra situación es, que para un  $N$  fijo, el tamaño de paso  $\sigma$  varía en el tiempo  $t$ , inversamente con el tamaño del agregado.

En este proceso el tiempo  $t$  y el número de pasos  $N$  son proporcionales,  $t \sim N$ , y el coeficiente de difusión  $D$  es tal que, utilizando

$$D = (Na^2) / t \quad (4.1),$$

llamada constante de proporcionalidad y por lo tanto

$$t = (Na^2) / D \quad (4.2).$$

Cabe señalar que si  $D$  es mayor el cúmulo es más difusible, caso de los agregados más pequeños. Pero si es menor, su difusión será más lenta.

El coeficiente de difusión viene de la relación de Stokes - Einstein

$$D = (K_b T) / (6\pi\eta Rg_i) \quad (4.3),$$

en donde  $K_b$  (es la constante de Boltzman),  $T$  (es la temperatura),  $\pi \cdot \eta$  (es el coeficiente de viscosidad) son constantes y  $Rg_i$  varía para cada agregado. Se hace uso de la siguiente razón

$$\frac{D}{D_{max}} = \frac{Rg_{max}}{Rg_i} \quad (4.4),$$

en donde  $D_{max}$  es el coeficiente de difusión máximo, que corresponde al cúmulo más pequeño y  $Rg_{max}$  es el radio de giro del cúmulo más grande. Al hacer uso de esa relación se tiene que

$$D \sim (1 / Rg_i) \quad (4.5),$$

pero

$$Rg_i \sim S_i^{-1/D} \quad (4.6),$$

donde  $S_i$  es el número de partículas del cúmulo  $i$ ,  $D$  es la dimensión fractal. Sustituyendo 4.6 en 4.5, se tiene que el coeficiente de difusión está dado por

$$D \sim S_i^{-1/D} \quad (4.7).$$

Esta forma será de gran utilidad para la programación de nuestra simulación.

Otro factor importante que no debe olvidarse, es el conteo del tiempo físico  $t$ , que es el tiempo en que tarda en formarse los agregados en la realidad. Considerando un intervalo de tiempo  $\Delta t$  para un cúmulo de 1, se tiene que

$$\Delta t = 1/N \quad (4.8).$$

Pero para cúmulos mayores se tiene que

$$\Delta t = 1/(N * D_{max}) \quad (4.9),$$

en donde  $N$  es el número efectivo de cúmulos y  $D_{max}$  es el coeficiente de difusión máximo. No se olvide que el tiempo se incrementa independientemente de si el cúmulo se mueve o no.

Así, la versión básica del modelo Cúmulo-Cúmulo, que exhibe agregados con propiedades fractales, fue numéricamente estudiada y se obtuvo la dimensión fractal en 2, 3, 4, 5 y 6 dimensiones del espacio Euclidiano. Los valores son presentados en la tabla 4.1.

**Dimensión fractal en diferentes dimensiones del espacio Euclidiano d.**

d	2	3	4	5	6
D	1.44	1.78	2.05	2.27	2.26

**TABLA 4.1**

Los agregados obtenidos por el modelo DLCA exhiben formas completamente diferentes a las del modelo DLA. Los cúmulos Witten-Sander están organizados aleatoriamente alrededor de un origen, mientras que en el caso de los agregados Cúmulo - Cúmulo están formados por la unión entre ellos mismos. A continuación se establece la metodología a seguir para la realización de la Simulación del modelo Cúmulo- Cúmulo en red bidimensional.

#### 4.1. Simulación de Agregación Coloidal Cúmulo-Cúmulo en red bidimensional.

Para el estudio de las estructuras de los agregados y la dinámica de su formación obtenidas mediante el modelo D.L.C.A., se utilizará una red bidimensional cuadrada de  $L$  renglones por  $L$  columnas y se dispondrá de  $N$  partículas liberadas aleatoriamente sobre la retícula. Además se dirá que se tiene una reacción de agregados cuando suceda una colisión entre ellos y queden pegados irreversiblemente, considerando que cada agregado contiene por lo menos una partícula.

El algoritmo debe iniciarse con la declaración de las variables necesarias, tales como el arreglo  $latt$  de  $L \times L$ , que representa la red en dos dimensiones. Debe especificarse el número de partículas  $N$ ; hay que establecer la probabilidad  $stkprb$ <sup>12</sup> para que ocurra una unión, indicar el tamaño del cúmulo más grande ( $max$ ) y el del más pequeño ( $min$ ) durante todo el proceso, inicializar el vector  $k$  que contenga a todos los cúmulos fantasma (el término fantasma se refiere, a que los agregados ya no existen en el sistema, pero que algunos vectores contienen información sobre ellos, y durante el proceso ya no deben ser considerados), establecer dos vectores que contengan las coordenadas  $(x,y)$  de los centros geométricos de cada cúmulo  $Xc$ ,  $Yc$ , respectivamente. Para llevar el control de donde inicia cada cúmulo en los vectores donde se requiera, se utiliza el vector  $ic$ ; el arreglo  $clus$  contiene los centros de cada partícula que conforma a cada agregado. No debe olvidarse considerar dos variables que contabilicen el número de cúmulos,  $nc$ , que contenga a cúmulos fantasmas y vivos, y a  $nffc$  que lleva el conteo de cúmulos solamente vivos o efectivos; considerar el número de partículas de cada cúmulo en el vector  $n$ , y otras variables que se requieran en el programa.

En seguida, se liberan las partículas aleatoriamente sobre la red, cuidando que alguna partícula no se encuentre en posición adyacente a otra, al inicio del proceso. Cada celda ocupada por el cúmulo es designada por un número natural consecutivo, para que cada cúmulo cuente con un número diferente y así sea posible identificarlo de los demás. Se obtiene el coeficiente de difusión para  $is$  partículas, en donde  $is=1, 2, 3, \dots, npart$ , el cual se obtiene del número de partículas,  $is$ , elevado a la  $-(1/df)$ , donde  $df$  es la dimensión fractal.

<sup>12</sup> Cuando el  $stkprb=1$ , implica que todo choque entre partículas y agregados conlleva a la formación de una unión entre ellos, a este proceso se le llama D.L.C.A. Pero si  $stkprb < 1$ , quiere decir que sólo existe una probabilidad menor que uno que se establezca dicha unión, entonces se le nombra R.L.C.A.

Otro factor importante, es considerar las condiciones de frontera periódica con las que se libran los efectos de borde y nos permite trabajar en el bulto sin fronteras. Esto se refiere a que cuando una partícula o cúmulo, durante su movimiento difusivo, sobrepasa la frontera de la red, ésta se traslade hacia el lado opuesto al del que se salió; así por ejemplo si la partícula o cúmulo sale por arriba, las posiciones de las mismas se trasladan abajo y viceversa si sale por abajo. Si sale por la derecha, las partículas que queden fuera se posicionarán en el lado izquierdo de la red; de igual forma si sale por la izquierda entrará por la derecha. Si saliese por alguna esquina el cúmulo o partícula entraría por la esquina opuesta de ella misma. Estas condiciones no deben olvidarse cada vez que el cúmulo se mueva o se pegue.

Se prosigue a elegir un agregado al azar, y se chequea el número de partículas que contiene, las coordenadas de cada partícula que lo conforma, así como las de su centro geométrico y su coeficiente de difusión.

En seguida se libera un número aleatorio  $X$  y si  $X > (\mathcal{D} / \mathcal{D}_{\max})$ , entonces el cúmulo no se mueve, se elige a otro y se incrementa el tiempo físico. Esta condición se cumplirá con más frecuencia para cúmulos grandes por ser menos difusivos.

Para el caso en que se cumpla que  $X < (\mathcal{D} / \mathcal{D}_{\max})$ , el cúmulo se difunde, y se obtiene la nueva posición después de un paso. Se verifican dos situaciones, primero que se cumplan las condiciones de frontera periódicas, para que en determinado momento de que la partícula designada como centro geométrico salga de los límites de la red el programa no fracase, y que en cuanto alguna o varias partículas del cúmulo elegido sobrepasen los límites, ésta o éstas sean trasladadas al lado opuesto, como ya se había establecido. La otra situación es ver si existe traslape con algún otro cúmulo.

Si sucede lo segundo, el cúmulo elegido regresa a su posición original y se verifica si hay contacto, es decir, cuántas y cuáles partículas del cúmulo se encuentran en posición adyacente a otro cúmulo, y si hay reacción (indica "pegamiento"). Para ello se lanza un número al azar  $stkrb$ , que debe ser menor o igual a 1, según se designe al inicio; por lo tanto hay que distinguir qué partículas son vecinas cercanas y cuales están pegadas. Si sucede que se pegaron entonces los dos agregados pasan a formar un sólo cúmulo conocido como cúmulo vivo, designándole un número natural diferente al de los demás, y los otros dos cúmulos pasan a ser fantasmas; así el número de los cúmulos vivos disminuirá en uno. No olvidar actualizar todos los vectores que involucren a estos tres cúmulos. En seguida se procede a elegir otro cúmulo del sistema, se incrementa el tiempo y se prosigue con el proceso anterior.



En caso de no haber reacción, la posición inicial de la que partió el agregado al ser elegido, se designa con  $l_{att}$  y se actualiza a  $l_{att}$  con la nueva posición que ocupan todas las partículas del mismo. Se procede a elegir otro agregado.

En caso de no haber traslape sólo se actualiza la nueva posición del cúmulo y se designa con  $l_{att}$  la posición anterior. Se incrementa el tiempo físico y se procede a elegir otro agregado, siguiendo el procedimiento establecido. Así sucesivamente hasta alcanzar un número determinado de cúmulos o hasta tener un sólo agregado.

Al transcurrir el tiempo, el sistema estará formado de cúmulos cada vez más grandes; el número de ellos disminuirá, y su tamaño fácilmente excederá la frontera de la red. Entonces, para evitar situaciones en la que la suma de sus diámetros sea mayor que las dimensiones de la caja, durante la unión entre cúmulos gigantes se debe contemplar la condición de que la suma de sus diámetros sea menor que  $l_{att}$ ; en caso contrario se finalizará con el proceso. Esto debe ser contemplado ya que la simulación funciona para cúmulos cuyo diámetro sea menor que las dimensiones de la red.

Debido a la memoria finita con que se cuenta, existe el hecho de tener vectores cuyo tamaño de memoria exceda al establecido por la computadora. Así que debe encontrarse la forma de actualizar esos vectores cada vez que sea necesario. En esta parte los cúmulos fantasmas desaparecerán de todos los vectores que pudieran contener información sobre ellos. A esta acción le llamaremos compactación de arreglos.

En este algoritmo se hace necesario obtener el número promedio de partículas por cada cúmulo, para ello se hace uso del promedio pesado que es el que se utiliza en polímeros y en estos casos. Considérese el promedio inicial  $S_{inc}$  (que se refiere al promedio pesado antes de que suceda un pegamiento) de la siguiente forma

$$S_{inc} = \frac{ns(1) 1^2 + ns(2) 2^2 + \dots + ns(i) i^2 + \dots + ns(n) n^2}{ns(1) 1 + ns(2) 2 + \dots + ns(i) i + \dots + ns(n) n} = \frac{nums}{dens} \quad (4.10)$$

Se crea un cúmulo de  $i$  partículas después de un pegamiento, y se tiene

$$S_{fin} = \frac{ns(1)1^2 + \dots + (ns(j)-1)j^2 + \dots + (ns(k)-1)k^2 + \dots + (ns(i)+1)i^2 + \dots + ns(n)n^2}{ns(1)1 + ns(2)2 + \dots + (ns(i)+1)i + \dots + ns(n)n} \quad (4.11),$$

Para fines de programación, se tiene que

$$\begin{aligned} n_1^2 &= k^2 \quad \text{el cúmulo } n_1 \\ n_2^2 &= j^2 \quad \text{el cúmulo } n_2 \\ n_3^2 &= i^2 \quad \text{el nuevo cúmulo resultante de la unión } n_1 \text{ y } n_2 \end{aligned}$$

y sea  $j + k = i$  que indica que la unión de los cúmulos  $n_1$  y  $n_2$  da como resultado el cúmulo  $n_3$ . Entonces  $S_{fin}$  se define como

$$S_{fin} = \frac{n_{ums} + i^2 - j^2 - k^2}{dens + i - j - k} \quad (4.12),$$

clevando  $n_3^2 = (n_1 + n_2)^2$  y sustituyendo en (4.12) se tiene que el promedio pesado

$$S = \frac{n_{ums} + 2n_1 * n_2}{dens} \quad (4.13),$$

donde  $n_{ums}$  y  $dens$  inicialmente son igual al número de partículas liberadas en el sistema; el primero varía conforme se pegan dos cúmulos y el segundo se mantiene constante durante todo el proceso.

Cuando los cúmulos satisfagan una cierta cantidad mínima de partículas, prefijada al inicio de la simulación, se obtiene el logaritmo del radio de giro y del número de partículas de los mismos, los cuales son guardados en un archivo. Después de completar el proceso, y mediante mínimos cuadrados, esos datos son utilizados para obtener a la dimensión fractal del cúmulo formado al final de un cierto tiempo.

Muchos de los procesos reales de agregación Cúmulo-Cúmulo son más complejos que la simulación mostrada en este trabajo. Aquí sólo se presenta la manera de iteración potencial de la

formación de agregados, en un rango de tiempo corto, entre dos cúmulos los cuales determinan la naturaleza estática y dinámica del D.L.C.A.

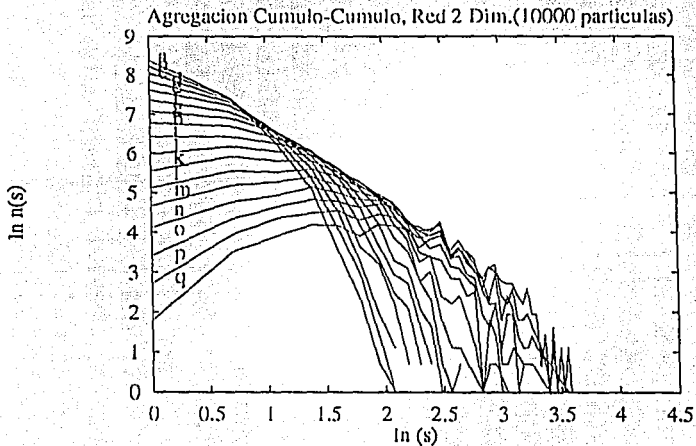
A continuación se presentan algunos resultados numéricos obtenidos de la simulación, y cuyo programa es presentado en el Anexo A- VIII.

**Simulación de Agregación Coloidal Limitada por Difusión.  
(Resultados de 20 simulación, cada una con 10 000 partículas).**

Núm. Simula.	Semilla	Stkprb	Dim. Frac.	Desviación Standard.	Tiempo (minutos)
1	627283383	1	1.49	0.015	25
2	473682223	1	1.43	0.0133	32
3	112363440	1	1.41	0.0131	19
4	211112363	1	1.46	0.0143	20
5	300218232	1	1.42	0.0134	35
6	787446352	1	1.43	0.014	22
7	584753342	1	1.45	0.0149	33
8	195864586	1	1.41	0.0141	26
9	588889832	1	1.5	0.014	60
10	877832641	1	1.44	0.014	26
11	341892663	1	1.43	0.0145	41
12	498162531	1	1.48	0.0141	51
13	328276425	1	1.4	0.0144	47
14	983745253	1	1.43	0.0154	29
15	783752734	1	1.43	0.0149	34
16	283741827	1	1.43	0.0141	23
17	128374934	1	1.44	0.0138	42
18	873478888	1	1.48	0.0138	49
19	984668455	1	1.45	0.0141	66
20	999857352	1	1.51	0.0143	25
Promedio			1.446	0.014175	35.25

TABLA 4. 2

La dimensión fractal promedio, de las simulaciones realizadas, es de  $1.446 \pm 0.028$ , que en comparación con los resultados de la tabla 4.1 es muy aproximada. El tiempo máquina de proceso promedio es de 35 minutos. La siguiente gráfica es resultado de una de las simulaciones y nos da el número de cúmulos de tamaño  $s$  que hay en el sistema, a cada tiempo. En ella se observa como la cantidad de cúmulos pequeños va disminuyendo, mientras que los agregados más grandes aumenta a través del tiempo de proceso. Los tiempos para los que se graficó, en logaritmo natural, fueron  $a=4.0$ ,  $b=4.25$ ,  $c=4.5$ ,  $d=4.75$ ,  $e=5.0$ ,  $f=5.25$ ,  $g=5.5$ ,  $h=5.75$ ,  $i=6.0$ ,  $j=6.25$ ,  $k=6.5$ ,  $l=6.75$ ,  $m=7.00$ ,  $n=7.25$ ,  $o=7.5$ ,  $p=7.75$ ,  $q=8.00$ .



GRÁFICA 4.1

En la figura 4.1 se muestra 4 etapas del proceso. En la primera, se observa una dispersión de puntos o cúmulos formados por una, dos o más partículas; después de transcurrir el tiempo, en las siguientes dos, el número de cúmulos ha disminuido y el tamaño de los mismos ha aumentado. Finalmente, en la última figura, sólo se exhiben 12 cúmulos que contienen a todas las partículas que inicialmente se liberaron. Estas imágenes fueron obtenidas de la visualización contemplada en la simulación del Anexo A-VIII, que en este trabajo se realizó.

AGGREGATION OF CHEMICAL SPECIES IN POLYMER

— TOXKO particles: *alk-1*, *in(fine)-128*

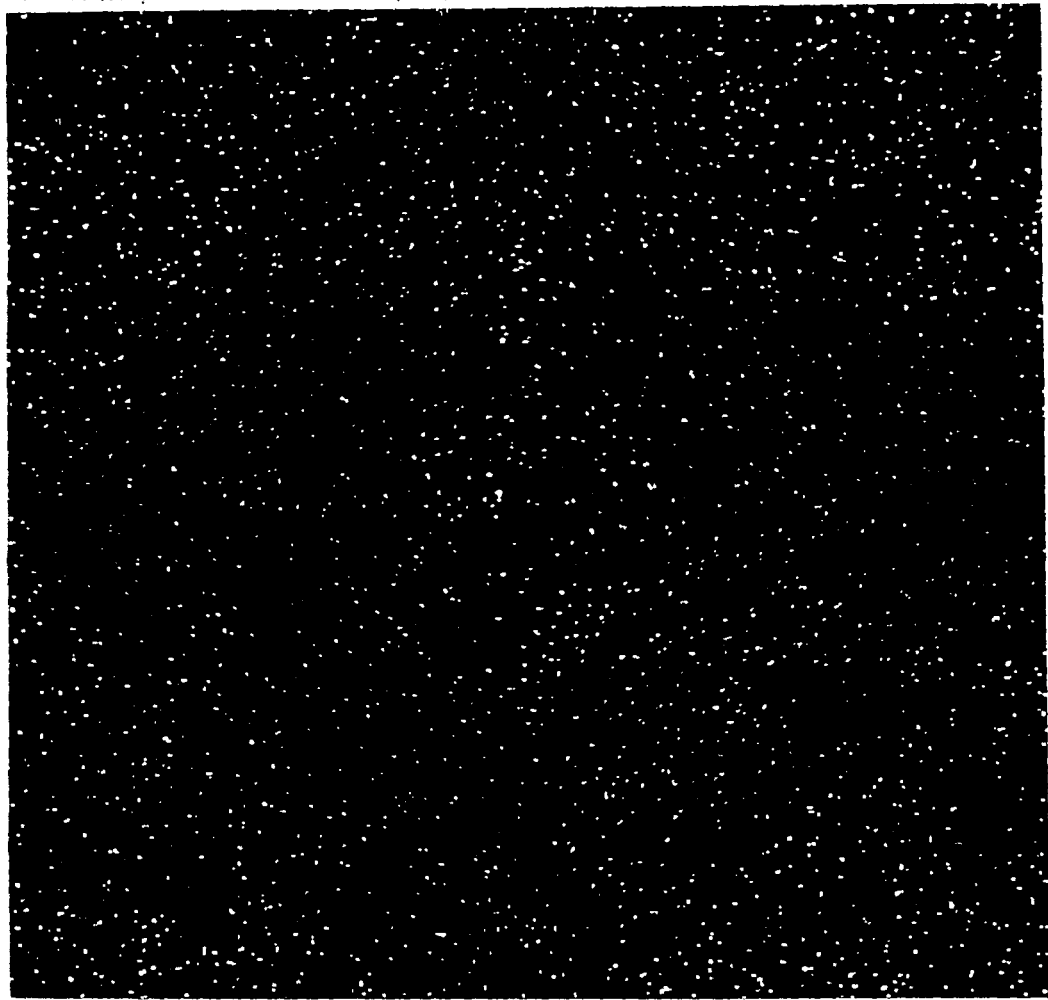


FIGURA 4.1

AGREGACION COLOIDAL CUMULO - CUMULO.

— 10 000 partículas;  $stk = 1$ ,  $ln(time) = 9.25$

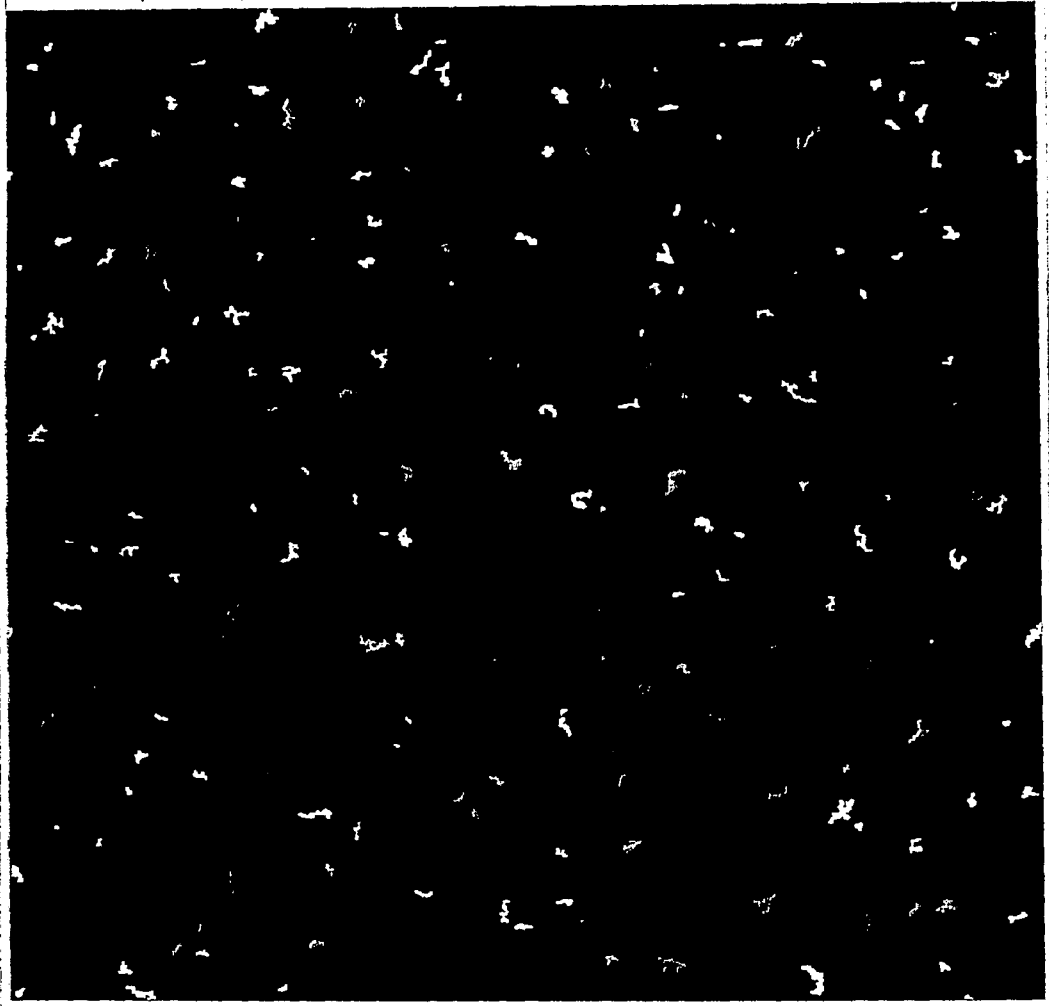


FIGURA 4.2

AGREGACION COLOIDAL CUMULO CUBICO

— 10 000 partículas:  $sk=1$ .  $\ln(\text{time})=10.50$



FIGURA 13

AGREGACION COLOIDAL CUBIHO CUBIHO

10000 partículas. at 1.40. stk. 1. in (time) 11.3

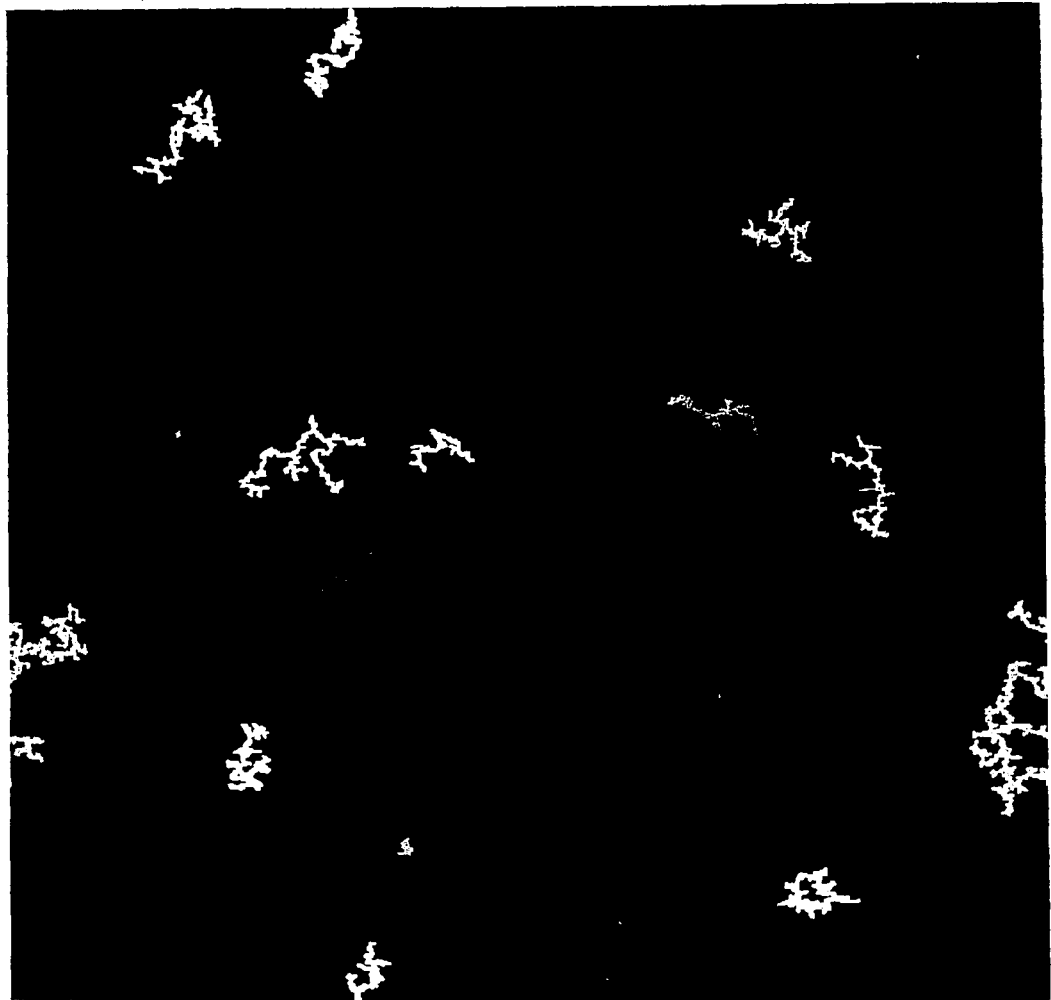


FIGURA 11



En seguida se realizará una comparación de los resultados obtenidos de nuestra simulación con algunos experimentos, para saber en qué medida se ajustan a la realidad.

Uno de los pasos más comunes para el estudio de agregación Cúmulo-Cúmulo limitado por difusión, en dos dimensiones, es el uso de la interface fluido-aire, en donde las partículas coloidales son atrapadas en la superficie por la tensión. En base a esto, HorKin y Bán presentaron un experimento de agregación de partículas de carbón suspendidas en agua, en 1988<sup>13</sup>. El cual, consistió en liberar partículas de carbón, de aproximadamente 0.5  $\mu\text{m}$  de diámetro, sobre una superficie acuosa, inmediatamente los efectos de la tensión superficial dominaron el proceso provocando que los cúmulos comenzaran a moverse, describiendo trayectorias Brownianas, con la posibilidad de pegarse a otros cúmulos. El proceso de agregación fue seguido mediante observación óptica a través del microscopio, y fue posible obtener fotos con las cuales y mediante el proceso de digitalización de imágenes fue posible obtener las imágenes presentadas en la figura 4.5; las cuales ilustran cuatro etapas del proceso.

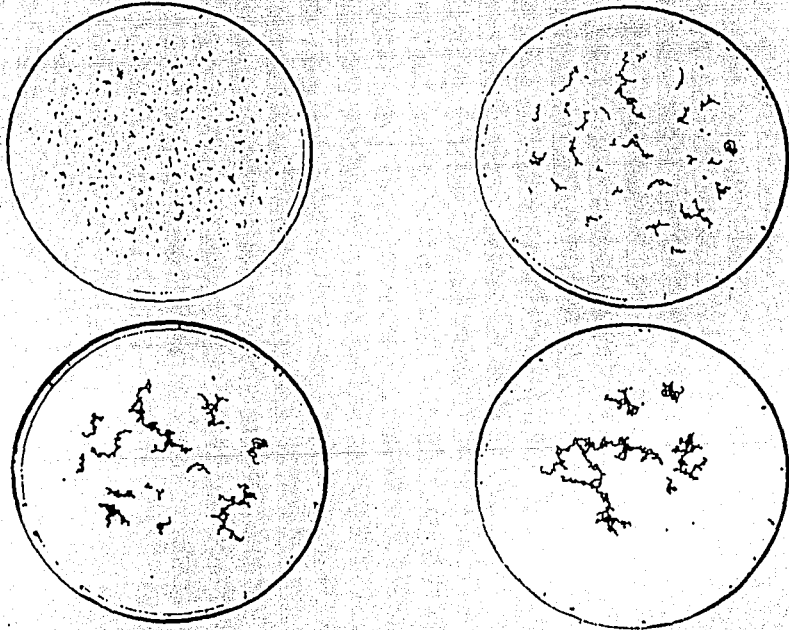


FIGURA 4.5

<sup>13</sup> Vicsek, Tamás. Fractal Growth Phenomena, segunda edición, edit. World Scientific, pag. 255.

Si comparamos estas imágenes con las visualizaciones obtenidas de nuestra simulación, presentadas las figuras 4.1, 4.2, 4.3, 4.5. Observaremos que son semejantes, ya que en las primeras etapas se observa la dispersión de partículas y conforme avanza el proceso se muestran estructuras más grandes que incluyen a las mismas. Esto indica que la simulación por computadora es un reflejo de la realidad.

Otro experimento realizado por Skjeltorp en 1987<sup>14</sup>, el cual consistió en confinar y comprimir entre dos platos de cristal, a esferas de poliestireno de diámetro 4.7  $\mu\text{m}$ , y observar mediante un microscopio el fenómeno de agregación. De esto se obtuvo una estructura fractal de dimensión fractal  $D \cong 1.49$ , cuyo valor se acerca al obtenido, en promedio, por nuestra simulación.

Así como en este ejemplo, nuestra simulación presenta resultados y visualizaciones muy acordes a los fenómenos de agregación suscitados en la naturaleza. Por ello, debe tenerse la seguridad de que el algoritmo funciona de manera acuada a la realidad, sin olvidar que está fundamentado en la hipótesis planteada en el inicio de esta tesis.

---

<sup>14</sup> Vicsek, Tamás. Fractal Growth Phenomena, segunda edición, edit. World Scientific, pag. 257.

## CONCLUSIONES.

## CONCLUSIONES.

*Al inicio de esta investigación se estableció el supuesto de que las partículas coloidales se encuentran en constante movimiento, debido al choque aleatorio que éstas tienen con las moléculas del medio en suspensión, con las paredes del recipiente que las contiene o con otras partículas; a este movimiento aleatorio se le llamó movimiento Browniano. Además, durante ese movimiento difusivo existe la probabilidad de que al roce o choque con otras partículas o cúmulos queden pegados, formando así agregados más grandes, los cuales a su vez efectúan caminatas aleatorias y se pegan con otros cúmulos.*

*En base a esto, fueron analizados dos modelos, que describen el fenómeno de agregación. Uno es el modelo Agregación Limitada por Difusión (D.L.A.), que es tratado como un primer paso para entender la agregación coloidal; el cual presenta un inconveniente esencial, ya que existe una situación asimétrica, que consiste en que dada una partícula individual en difusión llega a pegarse a un agregado fijo, situación que no siempre sucede. El segundo es el modelo Agregación Coloidal Limitada por Difusión (D.L.C.A.) o Agregación Cúmulo-Cúmulo, que es el que más se apega a la realidad y satisface las características planeadas en nuestra suposición. Este se basa en la teoría de que cúmulos y partículas del sistema se difunden simultáneamente, con la probabilidad de quedar pegados al contacto de unos con otros; por lo tanto el número de cúmulos del sistema decrece en uno por cada "pegamiento" que ocurra. Igualmente pudo observarse que ambos modelos generan estructuras fractales, ya que las formas que presenta son irregulares con hoyos de varios tamaños. Asimismo se hizo uso de la dimensión fractal, para obtener una cantidad numérica que nos diera información sobre la distribución de la masa del objeto, en el espacio Euclidiano de dimensión  $d$ .*

*Para ambos modelos se realizaron simulaciones por computadora, de las cuales no sólo se presentaron resultados numéricos sino también visualizaciones. Al comparar los resultados de la simulación basada en el modelo D.L.C.A. con los experimentales, se observó gran semejanza, que por las fluctuaciones aleatorias (que es normal en la naturaleza) no es idéntica, pero sí muy semejante. Lo que implica que la simulación describe la dinámica de formación de los agregados de una manera muy apegada a la realidad y sus resultados numéricos son confiables para obtener la dimensión fractal de los cúmulos formados.*

*Una vez analizada la teoría expuesta en ésta tesis, comparando los resultados de nuestra simulación con los experimentales, y como la misma está basada en el supuesto teórico expuesto al inicio, podemos decir que la hipótesis de la que se partió es verdadera.*

*Los algoritmos realizados en este trabajo describen de forma artificial, mediante equipo computacional, el comportamiento real de los sistemas coloidales en crecimiento. Estos algoritmos serán de gran utilidad para aquellos investigadores interesados en el tema, ya que además de describir el fenómeno de la agregación se podrá experimentar sobre ellos, adicionando las variables necesarias que cumplan con sus requerimientos, además de hacer los cambios pertinentes sobre el programa.*

*Las ventajas que ofrecen estos algoritmos son: se podrán controlar fácilmente las condiciones experimentales así como comprimir largos periodos de tiempo, además no se expone a errores en el mundo real, ni a gastos excesivos o innecesarios.*

*El principio teórico utilizado en esta investigación, para describir el fenómeno de agregación es la manera más sencilla de concebirla y puede ser aplicada a sistemas más complejos, en donde la forma de las partículas no necesariamente sea esférica, sino irregular (caso de los asfaltenos, los cuales son partículas microscópicas de forma irregular, que se encuentran en el petróleo), pero cuyo comportamiento sea similar.*

*Con esto y con la comprobación de la hipótesis hemos cumplido con los objetivos establecidos en un principio, y por lo tanto se da por concluida esta investigación.*

## ANEXO A.

## A N E X O A.

En este apartado se muestra la codificación de los siguientes algoritmos :

- A I. Simulación de caminata aleatoria en red de dos dimensiones.
- A II. Simulación de caminata aleatoria en red de tres dimensiones.
- A III. Simulación de caminata aleatoria en el continuo bidimensional.
- A IV. Simulación de caminata aleatoria en el continuo tridimensional.
- A V. Simulación del modelo D.L.A en red de dos dimensiones.
- A VII. Simulación del modelo D.L.A en el continuo bidimensional.
- A VIII. Simulación del modelo D.L.C.A en red dos dimensiones.

Cada uno de ellos, describen su respectivo procedimiento con sus propias condiciones, tratando de optimizar lo más posible el tiempo de proceso y la cantidad de memoria disponible. Esto no quiere decir, que se les haya hecho una prueba de optimalidad, o que estos algoritmos sean insuperables, pero si se apegan lo más posible a la realidad, tratando de minimizar la duración del proceso y la memoria.

Los programas están en lenguaje FORTRAN, compilados y corridos en estaciones de trabajo DEC (Digital Equipment Corporation) y Silicon Graphics del Instituto de Física de la U.N.A.M.. Las características de estos dos equipos son: La Silicon Graphics cuenta con un procesador R4000, de 100 Mhz., 64 Mb. de memoria RAM y 1 JGB en disco, su sistema operativo es IRIX. El DEC 3100 cuenta con 8 Mb. de memoria RAM, dos discos de 370 Mb y utiliza el O.S. ULTRIX DEC.

## AI. ALGORITMO DE LA SIMULACIÓN DE CAMINATA ALEATORIA EN RED DOS DIMENSIONES.

```

c CAMINATA ALEATORIA EN UNA RED
c DOS DIMENSIONES

c n: representa el número de pasos de cada caminata
c nfunc: vector que contiene las frecuencias de las distancias.
c distancia: distancia del origen al último paso, después de n.
c seed: semilla para el generador de núm. pseudoaleatorios.
c delx: indica movimiento sobre el eje X.
c dely: indica movimiento sobre el eje Y.
c ix: contabiliza las direcciones sobre el eje X.
c iy: contabiliza las direcciones sobre el eje Y

c **** Declaración de parámetros y variables ****
parameter (n=100)
integer nfunc(n)
integer seed
integer delx, dely

open (unit=1, file='resu100', status='new')

seed=194845899
eps=1.e-6

c **** Inicializando arreglo nfunc ****
do 2 i=1,n
  nfunc(i)=0
2 continue

c
c do 10 i=1,1000000
  ix=0
  iy=0
  c **** Caminata aleatoria de n pasos ****
  do 5 j=1,n
    xk=ran(seed)
    if (xk .lt. .25) then
      delx=0
      dely=1
    elseif (xk .lt. .50) then
      delx=1
      dely=0
    elseif (xk .lt. .75) then
      delx=0
      dely=-1
    else
      delx=-1
      dely=0
    endif
    ix=ix+delx
    iy=iy+dely
  5 continue

c
c **** Calculando la distancia del punto de partida ****
c **** al punto de llegada al final de los n pasos. ****
distancia=sqrt(real((ix**2)+(iy**2)))
idistancia=int(distancia-eps)+1
nfunc(idistancia)=nfunc(idistancia)+1
10 continue

write(1,*) 'Simulación de Caminata Aleatoria'
write(1,*) ' en Red Bidimensional'
write(1,*) ' X Frecuencia'

do 15 i=1,n
  x=real(i)-.5
  write(1,*) x,nfunc(i)
15 continue
stop
end

```



## AII. ALGORITMO DE LA SIMULACIÓN DE CAMINATA ALEATORIA EN RED TRES DIMENSIONES.

### c CAMINATA ALEATORIA EN UNA RED TRES DIMENSIONES

c n: representa el número de pasos de cada caminata  
 c nfunc: vector que contiene las frecuencias de las distancias.  
 c distancia: distancia del origen al último paso, después de n.  
 c seed: semilla para el generador de núm. pseudoaleatorios.  
 c delx: indica movimiento sobre el eje X.  
 c dely: indica movimiento sobre el eje Y.  
 c delz: indica movimiento sobre el eje Z.  
 c ix: contabiliza las direcciones sobre el eje X.  
 c iy: contabiliza las direcciones sobre el eje Y.  
 c iz: contabiliza las direcciones sobre el eje Z.

#### c \*\*\*\* Declarando parámetros y variables \*\*\*\*

```
parameter (n=101)
integer nfunc(n)
integer seed
integer delx, dely, delz
```

```
open (unit=1, file='re101', status='new')
```

```
seed=574627272
cpr=1.e-6
```

#### c \*\*\*\* Inicializando arreglo nfunc \*\*\*\*

```
do 2 i=1,n
  nfunc(i)=0
2 continue
```

#### c \*\*\*\* Simulación para 1000000 de caminatas \*\*\*\*

```
do 10 i=1,1000000
  ix=0
  iy=0
  iz=0
```

#### c \*\*\*\* Caminata aleatoria de n pasos \*\*\*\*

```
do 5 j=1,n
  xk=ran(seed)
  if (xk .le. .166666) then
    delx=1
    dely=0
    delz=0
  elseif (xk .le. .333332) then
    delx=0
    dely=1
    delz=0
  elseif (xk .le. .499998) then
    delx=0
    dely=0
    delz=1
  elseif (xk .le. .666664) then
    delx=-1
    dely=0
    delz=0
  elseif (xk .le. .833330) then
    delx=0
    dely=-1
    delz=0
  else
    delx=0
    dely=0
    delz=-1
  endif
  ix=ix+delx
  iy=iy+dely
  iz=iz+delz
5 continue
```

```

c      **** Calculando la distancia de la partícula desde el ****
c      **** punto de partida al punto de llegada después de n pasos ****
distancia=sqrt(real((ix**2)+(iy**2)+(iz**2)))
idistancia=int(distancia-eps)+1
10      nfunc(idistancia)=nfunc(idistancia)+1
      continue

write (1,*)"Caminata Aleatoria en Red 3 Dim."
write (1,*)" Distancia   Frecuencia"
do 15 i=1,n
  x=real(i)-.5
  write (1,*) x,nfunc(i)
15      continue
      stop
      end

```

### AIII. ALGORITMO DE LA SIMULACIÓN DE CAMINATA ALEATORIA EN EL CONTINUO DOS DIMENSIONES

```

c CAMINATA ALEATORIA EN EL CONTINUO
c DOS DIMENSIONES

c n: representa el número de pasos de cada caminata
c nfunc: vector que contiene las frecuencias de las distancias.
c distancia: distancia del origen al último paso, después de n.
c seed: semilla para el generador de núm. pseudoaleatorios.
c theta:  $2\pi \cdot \text{Núm. aleatorio}$ .
c delx, dely: coordenadas de la nueva posición.
c x,y: contabilizan a delx y dely respectivamente

parameter (n=100)

integer nfunc(n)
integer seed

open (unit=1, file='co22', status='new')

seed=347573263

do 2 i=1,n
nfunc(i)=0
continue

do 10 i=1,1000000
x=0.
y=0.

do 5 j=1,n
theta=6.2832*(ran(seed))
delx=cos(theta)
dely=sin(theta)
x=x+delx
y=y+dely
continue

distancia=sqrt(x**2+y**2)
idistancia=int(distancia)+1
nfunc(idistancia)=nfunc(idistancia)+1
continue

write (1,*)CAMINATA ALEATORIA EN EL CONTINUO'
write (1,*)DOS DIMENSIONES'
write (1,*)DISTANCIA FRECUENCIA'

do 15 i=1,n
x=real(i)-.5
write (1,*) x,nfunc(i)
continue

stop
end

```

## AIV. ALGORITMO DE LA SIMULACIÓN DE CAMINATA ALEATORIA EN EL CONTINUO TRES DIMENSIONES

```

c CAMINATA ALEATORIA EN EL
c CONTINUO TRIDIMENSIONAL

c n: representa el número de pasos de cada caminata
c nfunc: vector que contiene las frecuencias de las distancias.
c distancia: distancia del origen al último paso, después de n.
c seed: semilla para el generador de núm. pseudoaleatorios.
c theta:  $2\pi * \text{Núm. aleatorio}$ .
c delx, dely, delz: coordenadas de la nueva posición.
c x, y, z: contabilizan a delx, dely, y delz respectivamente

parameter (n=100)

integer nfunc(n)
integer seed

open (unit=1, file='con31', status='new')

seed=184627562

do 2 i=1,n
  nfunc(i)=0
2 continue
c ***Comienza el conteo de 1000 000 de caminatas de n pasos.***
do 10 i=1,1000000
  x=0.
  y=0.
  z=0.

  do 5 j=1,n
c ***generación de vectores con distribución uniforme***
    phi=6.2832.*ran(seed)
    costheta=1.-2.*ran(seed)
    sintheta=sqrt(1.-costheta**2)
    delx=sintheta*cos(phi)
    dely=sintheta*sin(phi)
    delz=costheta
    x=x+delx
    y=y+dely
    z=z+dclz
5 continue

    distancia=sqrt(x**2+y**2+z**2)
    idistancia=int(distancia)+1
10 nfunc(idistancia)=nfunc(idistancia)+1
  continue

write (1,*)CAMINATA ALEATORIA EN EL CONTINUO
write (1,*)TRES DIMENSIONES
write (1,*)DISTANCIA FRECUENCIA

do 15 i=1,n
  x=real(i)-.5
  write (1,*) x,nfunc(i)
15 continue

stop
end

```

## AV. ALGORITMO DE LA SIMULACIÓN DEL MODELO D.L.A. EN RED BIDIMENSIONAL.

### c SIMULACION DE AGREGACION c EN RED DOS DIMENSIONES

c  $k(n*n)$ : tamaño de la red ( $n \times n$ ).  
 c  $n$ : cada  $m$ -veces partículas se obtiene  $rgi$ .  
 c  $rgi$ : radio de giro.  
 c  $secd$ : semilla para el generador de núm. pseudoaleatorios.  
 c  $nmax$ : número máximo de partículas para el cúmulo  
 c distancia: distancia del origen al último paso, después de  $n$ .  
 c  $rmax$ : rama más larga del cúmulo.  
 c  $ncont$ : cuenta las part. conforme se van pegando.  
 c  $vecl$ : vector que contiene el  $ln(ipart)$   
 c  $npart$ : número de partículas pegadas al cúmulo

```
parameter(n=250)
parameter(m=50)
integer secd
integer k(-n:n,-n:n)
real rgi(300)
real vecl(300)
```

c \*\*\*\*\* Inicializando variables que contabilizan el tiempo \*\*\*\*\*

c \*\*\*\*\* máquina de proceso \*\*\*\*\*  
 real ctime, t1, t2, tclapsed, tarray(2)  
 external ctime  
 t1=ctime(tarray)

```
open (unit=1, file='rgi', status='new')
```

c \*\*\*\*\* Inicializando variables para mínimos cuadrados\*\*\*\*\*

```
nrad=0
sumxi=0
sumyi=0
sumxi2=0
sumxiyi=0
```

```
icm=0
jcm=0
icm2=0
jcm2=0
```

c  
 nmax=10000  
 secd=544862812

```
write(1,*, 'SIMULACION DE AGREGACION EN RED BIDIMENSIONAL'
write(1,*)          'RADIO DE GIRO'
write(1,*) secd: ', secd
```

c \*\*\*\*\* Límites máximos y mínimos del arreglo\*\*\*\*\*

```
ixmax=0
ixmin=0
iymax=0
iymin=0
```

```
rmax=0.
```

```

c ****Inicializa el arreglo k, simula la red bidimensional****
do 1 i=-n,n
  do 1 j=-n,n
    k(i,j)=0
1 continue

c ****Posicion de la partícula semilla****
k(0,0)=1
k(0,1)=-1
k(1,0)=-1
k(0,-1)=-1
k(-1,0)=-1
ncont=1

c ****Calculando el radio pequeño (rp) y radio grande (rg)****
2 rp=rmax+3.
  rg=4.*rp

c ****Libera partícula sobre radio pequeño****
3 aleat=ran(seed)
  theta=360.*aleat
  x=rp*cos(theta)
  y=rp*sin(theta)
  nx=nint(x)
  ny=nint(y)

c ****Simula caminata aleatoria****
4 xk=ran(seed)
  if (xk .le. 0.25) then
    nx=nx+1
  elseif (xk .le. 0.5) then
    ny=ny+1
  elseif (xk .le. 0.75) then
    nx=nx-1
  else
    ny=ny-1
  endif
  distancia=sqrt(real((nx**2)+(ny**2)))

  if (distancia .ge. rg) goto 3

  if (nx .gt. n) goto 4
  if (ny .gt. n) goto 4
  if (nx .lt. -n) goto 4
  if (ny .lt. -n) goto 4

c ****Condicion que verifica si la partícula se pega al agregado*
if (k(nx,ny) .eq. -1) then
  k(nx,ny)=1
  if (k(nx,ny+1) .ne. 1) k(nx,ny+1)=-1
  if (k(nx,ny-1) .ne. 1) k(nx,ny-1)=-1
  if (k(nx+1,ny) .ne. 1) k(nx+1,ny)=-1
  if (k(nx-1,ny) .ne. 1) k(nx-1,ny)=-1
  ncont=ncont+1

c **** Actualizando variables para mínimos cuadrados **
icm= icm + nx
jcm= jcm + ny
icm2= icm2 + nx**2
jcm2= jcm2 + ny**2

```

```

c ****Calculando el radio de giro cada 50 particulas****
c ****pegadas al agregado, utilizando minimos cuadrados****
if (mod(ncont,m) .eq. 0) then
  xcm= real(jcm)/real(ncont)
  ycm= real(jcm)/real(ncont)
  rad=(real (jcm2+jcm2)- real(ncont)*(xcm**2 + ycm**2))/ncont
  radgi=sqrt(rad)
  sub=ncont/m
  rgi(sub)=log(radgi)
  vccl(sub)=log(real(ncont))
  nrad=nrad+1

  sumxi=sumxi+vccl(sub)
  sumyi=sumyi+rgi(sub)
  sumxi2=sumxi2+(vccl(sub)**2)
  sumxiyi=sumxiyi+(vccl(sub)*rgi(sub))

endif

if (ncont .ge. nmax) goto 10
if (nx .gt. ixmax) ixmax=nx
if (ny .gt. iymax) iymax=ny
if (nx .lt. ixmin) ixmin=nx
if (ny .lt. iymn) iymn=ny
if (ixmax .ge. n) goto 10
if (iymax .ge. n) goto 10
if (ixmin .le. -n) goto 10
if (iymn .le. -n) goto 10
if (distancia .gt. rmax) then
  rmax=distancia
  goto 2
else
  goto 3
endif
else
  goto 4
endif

10 write (6,*) 'ipart= ',ncont

a=(nrad*sumxiyi-sumxi*sumyi)/(nrad*sumxi2-sumxi**2)
b=(sumxi2*sumyi-sumxiyi*sumxi)/(nrad*sumxi2-sumxi**2)

c ****La dimension fractal es igual uno entre la pendiente****
df=1/a

sumdi2=0

do 11 i=1,nrad
  di2=((rgi(i)**2)-2*(a*vccl(i)+b)*rgi(i)+(a**2)*(vccl(i)**2)
  +2*b*a*vccl(i)+(b**2))
  sumdi2=sumdi2+di2
11 continue

c *** Calculando la desviación standard **
sy= sqrt(sumdi2/(nrad-2))
sm=sy*(nrad/(nrad*sumxi2-sumxi**2))
sb=sy*(sumxi2/(nrad*sumxi2-sumxi**2))

c ****Lo siguiente se utiliza para calcular el tiempo****
c ****maquina de proceso del programa****
t2=etime(tarray)

```

```

telapsed=t2-t1

write(6,*) 'a= ',a, ' b= ',b
write(6,*) 'df= ',df
write(6,*) 'sy= ',sy, ' sm= ',sm, ' sb= ',sb
write(6,*) 'time= ', telapsed, ' n= ', n

write(1,*) 'LOG (NCONT) LOG(RADGI)'

do 12 i=1,nrad
  write(1,*) vect(i),rgi(i)
12  continue

write (1,*) 'npart= ', ncont, ' m= ', a, ' b= ', b, ' df= ', df
write (1,*) ' sm= ', sm, ' sb= ',sb, ' sy= ',sy
write (1,*) ' time= ', telapsed, ' n= ', n

stop
end

```



## AVI. ALGORITMO DE LA SIMULACIÓN DEL MODELO D.L.A. EN RED TRIDIMENSIONAL.

c SIMULACION DE AGREGACION  
c EN RED TRES DIMENSIONES  
c (RADIO DE GIRO)

c  $k(n*n*n)$ : tamaño de la red  $k(n*n*n)$ .  
c m: cada m-veces partículas se obtiene rgi.  
c rgi: radio de giro.  
c seed: semilla para el generador de núm. pseudosaleatorios.  
c nmax: número máximo de partículas para el cúmulo  
c distancia: distancia del origen al último paso, después de n.  
c rmax: rama más larga del cúmulo.  
c ncont: cuenta las part. conforme se van pegando.  
c vecti: vector que contiene el  $\ln(npart)$   
c npart: número de partículas pegadas al cúmulo

```
parameter (n=100)
parameter (m=50)
parameter (lm=10000)
```

```
integer k(-n:n,-n:n,-n:n)
integer seed
real rgi(lm)
real vect(lm)
```

c \*\*\*\*\* Inicializando variables que contabilizan el tiempo \*\*\*\*\*  
c \*\*\*\*\* máquina de proceso \*\*\*\*\*  
real etime, t1, t2, telpased, tarray(2)  
external etime  
t1=etime(tarray)

```
open (unit=1, file='rgi', status='new')
```

```
nrad=0
```

c \*\*\*\*\*Inicializando variables para minimos cuadrados\*\*\*\*\*

```
sumxi=0.
sumyi=0.
sumxi2=0.
sumxyi=0.
```

```
icm=0
jcm=0
kcm=0
icm2=0
jcm2=0
kcm2=0
```

```
nmax=10000
seed=533345130
```

```
write(1,*)SIMULACION DE AGREGACION EN RED'
write(1,*) TRIDIMENSIONAL (RADIO DE GIRO)
write(1,*)
write(1,*)seed= ',seed
```

```

write(1,*,y')
c ****Límites máximos y mínimos del arreglo tridimensional****
ixmax=0
ixmin=0
iymax=0
iymin=0
izmax=0
izmin=0

rmax=0.
c ****Inicializando el arreglo k, simula la red tridimensional**
do 1 i=-n,n
  do 1 j=-n,n
    do 1 l=-n,n
      k(i,j,l)=0
1 continue
c ****Posición de la partícula semilla****
k(0,0,0)=1
k(0,0,1)=-1
k(0,1,0)=-1
k(1,0,0)=-1
k(0,0,-1)=-1
k(0,-1,0)=-1
k(-1,0,0)=-1
ncont= 1

c ****Calculando el radio pequeño(rp) y el radio grande(rg)***
2 rp=rmax+3.
  rg=4.*rp
c ****Libera partícula sobre radio pequeño****
3 alcat1=ran(seed)
  alcat2=ran(seed)
  phi=360.*alcat1
  costheta=1.-2.*alcat2
  sintheta=sqrt(1.-costheta**2)

  x=rp*sintheta*cos(phi)
  y=rp*sintheta*sin(phi)
  z=rp*costheta
  nx=nint(x)
  ny=nint(y)
  nz=nint(z)

c ****Simula caminata aleatoria****
4 xk=ran(seed)
  if (xk .le. 0.1666667) then
    nx=nx+1
  elseif (xk .le. 0.3333333) then
    ny=ny+1
  elseif (xk .le. 0.5) then
    nz=nz+1
  elseif (xk .le. 0.6666667) then
    nx=nx-1
  elseif (xk .le. 0.8333333) then
    ny=ny-1
  else
    nz=nz-1
  endif

```

```

distancia=sqrt(real((nx**2)+(ny**2)+(nz**2)))
if (distancia .ge. rg) goto 3

if (nx .gt. n) goto 4
if (ny .gt. n) goto 4
if (nz .gt. n) goto 4
if (nx .lt. -n) goto 4
if (ny .lt. -n) goto 4
if (nz .lt. -n) goto 4

c ****Condicion que verifica si la particula se pega al agregado*
if (k(nx,ny,nz) .eq. -1) then
  k(nx,ny,nz)=1
  if (k(nx,ny,nz+1) .ne. 1) k(nx,ny,nz+1)=-1
  if (k(nx,ny+1,nz) .ne. 1) k(nx,ny+1,nz)=-1
  if (k(nx+1,ny,nz) .ne. 1) k(nx+1,ny,nz)=-1
  if (k(nx,ny,nz-1) .ne. 1) k(nx,ny,nz-1)=-1
  if (k(nx,ny-1,nz) .ne. 1) k(nx,ny-1,nz)=-1
  if (k(nx-1,ny,nz) .ne. 1) k(nx-1,ny,nz)=-1
  ncont=ncont+1

  icm=icm + nx
  jcm=jcm + ny
  kcm=kcm + nz
  icm2=icm2 + nx**2
  jcm2=jcm2 + ny**2
  kcm2=kcm2 + nz**2

c ****Calculado el radio de giro cada 50 particulas****
c ****pegadas, utilizando minimos cuadrados****
if (mod(ncont,m) .eq. 0) then
  xcm= real(icm)/real(ncont)
  ycm= real(jcm)/real(ncont)
  zcm= real(kcm)/real(ncont)
  rad=(real(icm2+jcm2+kcm2)-real(ncont)*(xcm**2+
  ycm**2+zcm**2))/real(ncont)
  radgi= sqrt(rad)
  sub=ncont/m
  rgi(sub)=log(radgi)
  vect(sub)= log(real(ncont))
  nrad=nrad+1

  sumxi=sumxi+vect(sub)
  sumyi=sumyi+rgi(sub)
  sumxi2=sumxi2+(vect(sub)**2)
  sumxiyi= sumxiyi+(vect(sub)*rgi(sub))

endif

if (ncont .ge. nmax) goto 10
if (nx .gt. ixmax) ixmax=nx
if (ny .gt. iymax) iymax=ny
if (nz .gt. izmax) izmax=nz
if (nx .lt. ixmin) ixmin=nx
if (ny .lt. iymn) iymn=ny
if (nz .lt. izmin) izmin=nz

if (ixmax .ge. n) goto 10
if (iymax .ge. n) goto 10
if (izmax .ge. n) goto 10
if (ixmin .lt. -n) goto 10
if (iymn .lt. -n) goto 10

```

```

if (izmin .le. -n) goto 10

if (distancia .gt. rmax) then
  rmax=distancia
  goto 2
else
  goto 3
endif
else
  goto 4
endif

c   *** Calculando la Dim. Fractal. ***
10  a=(nrad*sumxiyi-sumxi*sumyi)/(nrad*sumxi2-sumxi**2)
    b=(sumxi2*sumyi-sumxiyi*sumxi)/(nrad*sumxi2-sumxi**2)
    df=1/a

c   *** Calculando la desviación estandar. ***
    sumdi2=0
    do 11 i=1,nrad
      di2=(rgi(i)**2)-(2*(a*vecl(i)+b)*rgi(i))+(a**2)*(vecl(i)**2)
        +2*b*a*vecl(i)+(b**2)
    c   sumdi2=sumdi2+di2
11  continue

c   *** Calculando la desviación standard **
    sy=sqrt(sumdi2/(nrad-2))
    sm=sy*sqrt(nrad/(nrad*sumxi2-sumxi**2))
    sb=sy*sqrt(sumxi2/(nrad*sumxi2-sumxi**2))

c   ****Lo siguiente se utiliza para calcular el tiempo****
c   ****de proceso del programa****
    t2=ctime(tarray)
    tlapscd=t2-t1

    write(6,*) 'npart=',ncont
    write(6,*) 'a= ',a,' b= ',b
    write(6,*) ' df= ',df

    write(6,8) sy,sm,sb

    write(1,*) LOG(NCONT) LOG(RAIDGI)
    do 12 i=1,nrad
      write(1,*) vecl(i),rgi(i)
12  continue

    write(1,*) 'semilla = ',sccd
    write(1,*) 'npart=',ncont,' m= ',a,' b= ',b,' df= ',df
    write(1,*) 'sy= ',sy,' sm= ',sm,' sb= ',sb

8   format('sy= ',f9.6,' sm= ',f9.6,' sb= ',f9.6)

    stop
    cnd

```

## AVII. ALGORITMO DE LA SIMULACIÓN DEL MODELO D.L.A. EN EL CONTINUO BIDIMENSIONAL.

### c SIMULACION DE AGREGACION EN c EL CONTINUO DOS DIMENSIONES

c k(n\*n): tamaño de la red k(nxn).  
 c m: cada m-veces partículas se obtiene rgi.  
 c rgi: radio de giro.  
 c seed: semilla para el generador de núm. pseudoaleatorios.  
 c nmax: número máximo de partículas para el cúmulo  
 c nf: número de posiciones vecinas.  
 c distancia: distancia del origen al último paso, después de n.  
 c (xc,yc): centro de las partículas pegadas al cúmulo.  
 c (x,y): posición de la partícula después de un paso.  
 c (xp,yp): posición de la partícula en movimiento en un  
 c paso anterior.  
 c rmax: rama más larga del cúmulo.  
 c npe: número de traslapes.  
 c ini: vector que contiene el número de las partículas  
 c con las que hay traslape.  
 c ncont: cuenta las part. conforme se van pegando.  
 c vect: vector que contiene el ln(npart)  
 c npart: número de partículas pegadas al cúmulo

```
parameter(nmax=1000)
parameter(n=200)
parameter(m=50)
parameter(nf=20)
integer jx(nf),jy(nf)
integer inti(nf)
integer iprovik(nf)
integer seed, si, sub
integer k(-n:n,-n:n)
real xc(nmax)
real yc(nmax)
real rgi(nmax/m)
real vect(nmax/m)
```

```
c *** Inicializando variables que contabilizan el ***
c *** tiempo máquina de proceso ***
real etime, t1, t2, telapsed, tarray(2)
external etime
t1=etime(tarray)
```

```
open (unit=1, file='rgi', status='new')
```

c \*\*\*\*\*Inicializando variables para minimos cuadrados.\*\*\*\*\*

```
eps=1. c-6
nrad=0
sumxi=0.
sumyi=0.
sumxi2=0.
sumxiyi=0.
```

```
xicm=0.
yicm=0.
xicm2=0.
yicm2=0.
```

```
seed=927645237
```

```
write(1,*) SIMULACION DE AGREGACION EN EL CONTINUO
write(1,*) DOS DIMENSIONES (RADIO DE GIRO)
```

```

write(1,*) '
write(1,*) ' seed: ', seed
write(1,*) '

c *****Inicializando vector que contiene las 20 posiciones*****
c *****vecinas cercanas (zona de posible traslape)*****

do 5 i=1,3
  jx(i)=i-2
  jy(i)=2
5  continue
do 20 i=1,5
  jx(i+3)=i-3
  jy(i+3)=1
20 continue
do 30 i=1,2
  jx(i+8)=i-3
  jy(i+8)=0
30 continue
do 40 i=1,2
  jx(i+10)=i
  jy(i+10)=0
40 continue
do 50 i=1,5
  jx(i+12)=i-3
  jy(i+12)=-1
50 continue
do 60 i=1,3
  jx(i+17)=i-2
  jy(i+17)=-2
60 continue

c *****Límites máximos y mínimos del arreglo k*****
xmin=0.
xmax=0.
ymin=0.
ymax=0.

rmax=0.

c *****Inicializando el arreglo k, simula la red****
do 1 i= -n,n
  do 1 j= -n,n
    k(i,j)=0
1  continue

C *****Representa partícula semilla en el centro de la red*****
k(0,0)=1
xc(1)=0.
yc(1)=0.
do 70 in=1,20
  k(jx(in),jy(in))=-1
70 continue

ncont=1

c *** Calculando el radio pequeño y el radio grande. ***
2  rp=rmax+3.
   rg2=16.*(rp**2)

C *****Genera partícula sobre radio pequeño*****
3  theta=6.2832*(rand(seed))

```

```

x=rp*cos(theta)
y=rp*sin(theta)

do 8 i=1,nf
  iprovik(i)=0
8  continue

C ***** Caminata aleatoria*****
4  theta2= 6.2832* (ran (seed))
   xp=1.41421* cos (theta2)
   yp=1.41421* sin (theta2)
   x= x + xp
   y= y + yp
   distancia2=(x**2)+(y**2)

   mb=0
   if (distancia2 .ge. rg2) goto 3
   np=0
75  continue
   nx=nint(x)
   ny=nint(y)

   if (nx .gt. n) goto 4
   if (ny .gt. n) goto 4
   if (nx .lt. -n) goto 4
   if (ny .lt. -n) goto 4

   do 78 j=1,nf
     inti(j)=0
78  continue

C *****Condicion que verifica si una partícula esta*****
C ***** dentro de la zona de posible traslape*****
   if (k(nx,ny) .ne. 0) then
     npc=0
     do 80 l=1,nf
       if ((k(nx+jx(i),ny+jy(i)).ne.0).and.(k(nx+jx(i),ny+jy(i))
c     .ne. -1)) then
c     ***** se encuentra en posición vecina cercana *****
       si=0
       if (mb.eq.0) goto 7
       do 6 l=1,mb
         if (k(nx+jx(i),ny+jy(i)).eq.iprovik(l)) si=1
6       continue
7       if (si.eq.0) then
c         *** si hay traslape*****
         npc=npc+1
         inti(npc)=k(nx+jx(i),ny+jy(i))
         endif
       endif
80      continue

   if (npc.eq.0) goto 95
   do 90 j=1,npc
     id=inti(j)
     d2=(xc(id)-x)**2 + (yc(id)-y)**2

c     ***si la distancia es menor que sqrt(2), implica que hay *****
c     *** traslape con alguna partícula *****
     if (d2.lt.2.-eps) then

c     *****Separando las partículas traslapadas*****

```

```

a=(xp**2) + (yp**2)
bx=xc(id) + xp - x
by=yc(id) + yp - y
b=-2*(xp*bx+yp*by)
c= bx**2 +by**2-2
r1=(-b+sqrt(b**2-4*a*c))/(2*a)
r2=(-b-sqrt(b**2-4*a*c))/(2*a)

if (r1 .lt. 1.) then
  r=r1
else
  r=r2
endif

x=x+xp*(r-1.)
y=y+yp*(r-1.)
xp=xp*r
yp=yp*r
np=1
mb=mb+1
iprovik(mb)=id
goto 75
endif
90  continue
95  if (np.eq.0) goto 4
    ncont=ncont+1
    xc(ncont) = x
    yc(ncont) = y
    nx=nint(x)
    ny=nint(y)
    k(nx,ny)=ncont
C   *****En seguida se vuelven a designar las posiciones****
C   *****vecinas cercanas con -1****
    do 120 i=1,20
      mx=nx + jx(i)
      my=ny + jy(i)
      if (k(mx,my).eq.0) k(mx,my)=-1
120  continue

c   *****Calculando el radio de giro para cada 50 partículas****
c   *****pegadas, utilizando minimos cuadrados****
    xicm= xicm + x
    yjcm= yjcm + y
    xicm2= xicm2 + x**2
    yjcm2= yjcm2 + y**2

    if (mod(ncont,m) .eq. 0) then
      xcm= xicm/real(ncont)
      ycm= yjcm/real(ncont)
      rad= ((xicm2+yjcm2)- real(ncont)*(xcm**2 + ycm**2))/ncont
      radgi=sqrt(rad)
      sub=ncont/m
      rgi(sub)=log(radgi)
      vect(sub)=log(real(ncont))
      nrad=nrad+1

      sumxi=sumxi+vect(sub)
      sumyi=sumyi+rgi(sub)
      sumxi2=sumxi2+(vect(sub)**2)
      sumxyi=sumxyi+(vect(sub)*rgi(sub))
    endif

```



```

distancia=sqrt(distancia2)
if (ncont .ge. nmax) goto 10
if (nx .gt. ixmax) ixmax=nx
if (ny .gt. iymax) iymax=ny
if (nx .lt. ixmin) ixmin=nx
if (ny .lt. iymn) iymn=ny
if (ixmax .ge. n) goto 10
if (iymax .ge. n) goto 10
if (ixmin .le. -n) goto 10
if (iymn .le. -n) goto 10
if (distancia.gt. rmax) then
  rmax=distancia
  goto 2
else
  goto 3
endif
else
  goto 4
endif

10 write (6,*) 'npart= ',ncont

c *** Calculando la dimensión fractal ***
a=(nrاد*sumxiy-sumxi*sumyi)/(nrاد*sumxi2-sumxi**2)
b=(sumxi2*sumyi-sumxiy*sumxi)/(nrاد*sumxi2-sumxi**2)
df=1/a

sumdi2=0
do 11 i=1,nrad
  di2=((rgi(i)**2)-2*(a*vcct(i)+b)*rgi(i)+(a**2)*(vcct(i)**2)
  +2*b*a*vcct(i)+(b**2))
c sumdi2=sumdi2+di2
11 continuc

c *** calculando la desviación Standard ***
sy= sqrt(sumdi2/(nrاد-2))
sm=sy*(nrاد/(nrاد*sumxi2-sumxi**2))
sb=sy*(sumxi2/(nrاد*sumxi2-sumxi**2))

t2=etime(tarray)
telapsed=(t2-t1)/60

write(6,*) 'a= ',a, ' b= ',b
write(6,*) 'df= ',df
write(6,*) 'sy= ',sy, ' sm= ',sm, ' sb= ',sb
write(6,*) 'time= ', telapsed, ' n= ', n

write(1,*) LOG(NCONT) LOG(RADGI)
do 12 i=1,nrad
  write(1,*) vcct(i),rgi(i)
12 continuc

write (1,*) '
write (1,*) 'npart= ', ncont, ' m= ', a, ' b= ', b, ' df= ', df
write (1,*) ' sm= ', sm, ' sb= ', sb, ' sy= ', sy
write (1,*) ' time= ', telapsed, ' n= ', n

stop
end

```

### AVIII. ALGORITMO DE LA SIMULACIÓN DEL MODELO D.L.C.A. EN RED BIDIMENSIONAL.

```

c      SIMULACION DE AGREGACION
c      CUMULO - CUMULO
c      EN RED BIDIMENSIONAL

parameter(l=1000)
parameter(npart=10000)
parameter(nclus=6*npart)
parameter(nic=2*npart)
parameter(stkprb=1.0)
parameter(minrg=32)
parameter(nmax=1000)
parameter(lmaxlog=1000)
parameter(nrea=10000)
parameter(dlgtime=0.25)
parameter(xlgtime0=2.0)

integer latt(1,1)
integer clus(nclus)
integer n(nic)
integer k(nic)
integer ic(nic)
integer xc(nic)
integer yc(nic)
integer xmax(nic)
integer xmin(nic)
integer ymax(nic)
integer ymin(nic)
integer index(npart)
integer indexr(nic)
integer ns(npart)
integer nefe, nc, nums, max, min, sub

real rgi(npart),nparti(npart)
real dens, s, dfmxin

integer isecd
integer nrcac(2,nrea)
integer x1, y1, xc1, yc1, xc3, yc3, xci, yci
integer clusx, clusy, clusx1, clusy1
real dif(npart)
real lgtime, lgs, lgnefc
real lgnsi, lgi

double precision rand

common /lgtime/ lgtime

c      ***** tiempo maquina de proceso *****
real t1, t2, telapsed, tarray(2)
real etime
t1=etime(tarray)

c      *****nefe: indica el numero efectivo de cumulos *****
nefe=npart
c      ***** nc: numero de cumulos *****
nc=npart

```

```

xlgtime=xlgtime0
time=1./(real(nefe))

sub=0

c   ** vector dif: contiene los coeficientes de difusión de**
c   ** cumulos con is numero de particulas *****
    df= 1.4400
    expon= -(1./df)
    do 5 is= 1, npart
      dif(is)= (real(is))**expon
5   continue

    max= 1
    min= 1

c   ***ns: numero de cumulos de tamaño s ***
    ns(1)=npart
    do 8 i= 2, npart
      ns(i)=0
8   continue

    nums=ns(1)
    dens=real(ns(1))
    s=1.

    isced=348270489

c   call srand(isced)
    ** Inicializando el arreglo latt, simula la red. ****
    do 10 i= 1, l
      do 10 j= 1, l
        latt(j,i)=0
10  continue

c   ** Liberando particulas aleatoriamente en la red,***
c   ** evitando que dos cumulos queden en posiciones vecinas**
15  do 20 i= 1, npart
    x= rand()
    y= rand()
    ix= 2*int(x*(l/2)+1.)
    iy= 2*int(y*(l/2)+1.)
    if (latt(ix,iy).ne.0) goto 15
    latt(ix,iy)=i
    xc(i)= ix
    yc(i)= iy
20  continue

c   ** inicializando n: numero de particulas de c/cumulo****
    do 30 i=1,npart
      n(i)=1
30  continue

c   *inicializando clus: contiene centros de c/particula****
c   *que conforman a cada cumulo *****
    do 40 i=1,2*npart-1,2
      clus(i)= 0
      clus(i+1)= 0
40  continue

c   *inicializando ic: que indica donde inicia c/cumulo*****
    do 50 i=1,npart

```

```

50     ic(i)=2*i-1
        continue

c     ****inicializando index e indexr ****
        do 55 i=1,npart
            index(i)= i
            indexr(i)= i
55     continue

c     ** inicializando k:contiene cumulos vivos y fantasmas**
        do 70 i=1,npart
            k(i)= 1
70     continue

        do 80 i=1,npart
            xmax(i)= 0
            ymax(i)= 0
            xmin(i)= 0
            ymin(i)= 0
80     continue

        dfmxin=1.
90     deltime=dfmxin/nfc

92     lgtime=log(time)
        if (lgtime .ge. xlgtime) then
            lgnefc= log(real(nfc))
            lgs= log(s)
            open (unit=1, file='data1', status='unknown',
c             access='append')
            open (unit=2, file='data2', status='unknown',
c             access='append')
            open (unit=3, file='data3', status='unknown',
c             access='append')

            write(1,98) lgtime,lgnefc
            write(2,98) lgtime,lgs
            write(3,99) lgtime
            do 95 i= min,max
                if (ns(i) .eq. 0) goto 95
                lgi= log(real(i))
                lgnsi= log(real(ns(i)))
                write(3,98) lgi,lgnsi
95             continue
98             format (3x,19.6,6x,19.6)
99             format (10x,19.6)
                close(1)
                close(2)
                close(3)
                xlgtime= xlgtime+dlgtime
        endif

c     *** se elige un agregado aleatoriamente y se difunde***
        x=rand()
        ind1=int(1.+x*nfc)
        icl1= index(ind1)
        time= time + deltime
        n1= n(icl1)
        difn1= dif(n1)
        pc= difn1 * dfmxin
        x= rand()
    
```

```

if (x .gt. pc) goto 92
C **** Caminata aleatoria*****
x= rand()
if (x .lt. 0.25) then
  ndx= 1
  ndy= 0
elseif (x .lt. 0.5) then
  ndx= -1
  ndy= 0
elseif (x .lt. 0.75) then
  ndx= 0
  ndy= 1
else
  ndx= 0
  ndy= -1
endif
c **** Nueva posicion del cumulo despues de un paso ****
x1= xc(ic1) + ndx
y1= yc(ic1) + ndy

c **** Condiciones de frontera periodica para librar ****
c **** efectos de borde ****
if (x1 .gt. 1) then
  x1= x1-1
elseif (x1 .lt. 1) then
  x1= x1+1
endif
if (y1 .gt. 1) then
  y1= y1-1
elseif (y1 .lt. 1) then
  y1= y1+1
endif

c **** verificando si hay traspase ****
ic1= ic(ic1)
m1= 0
do 110 i=1,n1
  i2= ic1 + 2*i
  clusx= x1 + clus(i2-2)
  clusy= y1 + clus(i2-1)
  if (clusx .gt. 1) then
    clusx= clusx - 1
  elseif (clusx .lt. 1) then
    clusx= clusx + 1
  endif
  if (clusy .gt. 1) then
    clusy= clusy - 1
  elseif (clusy .lt. 1) then
    clusy= clusy + 1
  endif
  icl2= latl(clusx,clusy)
  if ((icl2 .ne. 0) .and. (icl2 .ne. ic1)) then
    ***hubo traspase ***
    m1=1
cruy **la instruccion de abajo se comenta en la cruy**
    goto 120
  endif
110 continue
120 if (m1 .eq. 1) then
  x1= xc(ic1)
  y1= yc(ic1)

```

```

endif

c      **** verifica si hay contacto y reaccion ****
nconta=0
nreact=0
do 130 i=1,n1
  i2=ic1+2*i
  clusx= x1 + clus(i2-2)
  clusy= y1 + clus(i2-1)
  if (clusx .gt. 1) then
    clusx= clusx - 1
  elseif (clusx .lt. 1) then
    clusx= clusx + 1
  endif
  if (clusy .gt. 1) then
    clusy= clusy - 1
  elseif (clusy .lt. 1) then
    clusy= clusy + 1
  endif

  clusx1= clusx - 1
  if (clusx1 .gt. 1) then
    clusx1= clusx1 - 1
  elseif (clusx1 .lt. 1) then
    clusx1= clusx1 + 1
  endif
  icl2= latt(clusx1,clusy)

  if ((icl2 .ne. 0) .and. (icl2 .ne. ic1)) then
c      **** hubo un contacto ****
    nconta= nconta + 1
    x= rand()
    if (x .lt. stkprrb) then
c      **** hubo una reaccion ****
      nreact= nreact+1
      nreact(1,nreact)= clusx1
      nreact(2,nreact)= clusy
    endif
  endif

  clusx1= clusx + 1
  if (clusx1 .gt. 1) then
    clusx1= clusx1 - 1
  elseif (clusx1 .lt. 1) then
    clusx1= clusx1 + 1
  endif
  icl2= latt(clusx1,clusy)
  if ((icl2 .ne. 0) .and. (icl2 .ne. ic1)) then
c      **** hubo un contacto ****
    nconta= nconta + 1
    x= rand()
    if (x .lt. stkprrb) then
c      **** hubo una reaccion ****
      nreact= nreact+1
      nreact(1,nreact)= clusx1
      nreact(2,nreact)= clusy
    endif
  endif

  clusy1= clusy - 1
  if (clusy1 .gt. 1) then
    clusy1= clusy1 - 1

```

```

elseif (clusy1 .lt. 1) then
  clusy1= clusy1 + 1
endif
icl2= latt(clusx,clusy1)
if ((icl2 .ne. 0) .and. (icl2 .ne. icl1)) then
  **** hubo un contacto ****
  nconta= nconta + 1
  x= rand()
  if (x .lt. stkprb) then
    ***** hubo una reaccion *****
    nreact= nreact+1
    nreact(1,nreact)= clusx
    nreact(2,nreact)= clusy1
  endif
endif

clusy1= clusy + 1
if (clusy1 .gt. 1) then
  clusy1= clusy1 - 1
elseif (clusy1 .lt. 1) then
  clusy1= clusy1 + 1
endif
icl2= latt(clusx,clusy1)
if ((icl2 .ne. 0) .and. (icl2 .ne. icl1)) then
  **** hubo un contacto ****
  nconta= nconta + 1
  x= rand()
  if (x .lt. stkprb) then
    ***** hubo una reaccion *****
    nreact= nreact+1
    nreact(1,nreact)= clusx
    nreact(2,nreact)= clusy1
  endif
endif
130  continue

c  * si no hubo reaccion ni traslape, la posicion anterior****
c  ** se designa con cero y se actualiza latt con la nueva****
c  ** posicion. *****
if (nreact .eq. 0) then
  if (m1 .eq. 1) then
    goto 92
  else
    xc1= xc(icl1)
    yc1= yc(icl1)
    do 140 i=1,n1
      i2= icl1+2*i
      clusx= xc1 + clus(i2-2)
      clusy= yc1 + clus(i2-1)
      if (clusx .gt. 1) then
        clusx= clusx - 1
      elseif (clusx .lt. 1) then
        clusx= clusx + 1
      endif
      if (clusy .gt. 1) then
        clusy= clusy - 1
      elseif (clusy .lt. 1) then
        clusy= clusy + 1
      endif
      latt(clusx,clusy)= 0
140  continue

```

```

do 150 i= 1,n1
  i2= ic1+2*i
  clusx= x1 + clus(i2-2)
  clusy= y1 + clus(i2-1)
  if (clusx .gt. 1) then
    clusx= clusx - 1
  elseif (clusx .lt. 1) then
    clusx= clusx + 1
  endif
  if (clusy .gt. 1) then
    clusy= clusy - 1
  elseif (clusy .lt. 1) then
    clusy= clusy + 1
  endif
  latt(clusx,clusy)= ic1
150  continue
  xc(ic1)=x1
  yc(ic1)=y1
  goto 92
endif
c
** En el caso de que si hubo reaccion (se pega) *****
else
  if(m1 .eq. 0) then
    xc1= xc(ic1)
    yc1= yc(ic1)
    do 160 i=1,n1
      i2=ic1+2*i
      clusx= xc1 + clus(i2-2)
      clusy= yc1 + clus(i2-1)
      if (clusx .gt. 1) then
        clusx= clusx - 1
      elseif (clusx .lt. 1) then
        clusx= clusx + 1
      endif
      if (clusy .gt. 1) then
        clusy= clusy - 1
      elseif (clusy .lt. 1) then
        clusy= clusy + 1
      endif
      latt(clusx,clusy)= 0
160  continue
      xc(ic1)=x1
      yc(ic1)=y1
    endif
    do 170 i= 1,nreact
      clusx= nreact(1,i)
      clusy= nreact(2,i)
      icl2= latt(clusx,clusy)
      if(k(icl2) .eq. 0) then
        goto 170
      endif
      ind2= indextr(icl2)
      icl3= nc + 1
      ndx1=xmax(icl1)-xmin(icl1)+1
      ndx2=xmax(icl2)-xmin(icl2)+1
      ndy1=ymax(icl1)-ymin(icl1)+1
      ndy2=ymax(icl2)-ymin(icl2)+1
      if((ndx1+ndx2 .ge. 1-2).or.(ndy1+ndy2 .ge. 1-2)) then
        write(6,*) Suma de diametros mayor que 1-2'
        goto 500
      endif

```



```

c      call merge(1,npart,nclus,nic,icl1,icl2,icl3,ind1,
c      ind2,nc,nefe,clus,n,k,ic,xc,yc,xmax,ymax,xmin,ymin,
c      index,indexr,ns,rgi,nparti,sub,min,max,s,dfmin,
c      nums,dens,expon,x1,y1,minrg)

      icl1= icl3
      ind1= indexr(icl3)
170    continue
      endif

      n3= n(icl3)
      ic3= ic(icl3)
      xc3=xc(icl3)
      yc3=yc(icl3)
      do 200 i=1,n3
         i2= ic3 + 2*i
         clusx= xc3 + clus(i2-2)
         clusy= yc3 + clus(i2-1)
         if (clusx .gt. 1) then
            clusx= clusx - 1
            elscif (clusx .lt. 1) then
               clusx= clusx + 1
            endif
         if (clusy .gt. 1) then
            clusy= clusy - 1
            elscif (clusy .lt. 1) then
               clusy= clusy + 1
            endif
         latl(clusx,clusy)= icl3
200    continue

c      ****Compactacion de arreglos, para evitar desborde de los****
c      ****mismos****
      imaxi=ic3+2*n3
      if (imaxi .ge. 4*npart) then
         nfan=0
         nefcls=0
         nfacfs=0
         do 220 i=1,nc
            ni=n(i)
            if (k(i) .eq. 1) then
               k(i-nfan)=k(i)
               n(i-nfan)=n(i)
               xc(i-nfan)=xc(i)
               yc(i-nfan)=yc(i)
               xmax(i-nfan)=xmax(i)
               xmin(i-nfan)=xmin(i)
               ymax(i-nfan)=ymax(i)
               ymin(i-nfan)=ymin(i)
               ic(i-nfan)=nefcls+1
               do 210 j=1,2*ni
                  clus(nefcls+j)=clus(nefcls+nfacfs+j)
210          continue
                  nefcls=nefcls+2*ni
                  ind=indexr(i)
                  index(ind)=i-nfan
                  indexr(i-nfan)=ind
                  else
                     nfan=nfan+1
                     nfacfs=nfacfs+2*ni
                  endif
220          continue

```

```

nc=nfc

do 240 i=1,nc
  ni=n(i)
  xci=xc(i)
  yci=yc(i)
  ici=ic(i)
  do 230 j=1,ni
    j2=ici+2*j
    clusx=xci+clus(j2-2)
    clusy=yci+clus(j2-1)
    if (clusx .gt. 1) then
      clusx=clusx-1
    elseif (clusx .lt. 1) then
      clusx=clusx+1
    endif
    if (clusy .gt. 1) then
      clusy=clusy-1
    elseif (clusy .lt. 1) then
      clusy=clusy+1
    endif
    latt(clusx,clusy)=i
230   continue
240   continue

endif

if (max .gt. nmax) then
  write(6,*) 'max mayor que nmax'
  goto 500
endif
goto 90

500  t2=etime(tarray)
      tclapsed=(t2-t1)/60.
      open (unit=4, file='data4', status='new')

      sumxi=0.
      sumyi=0.
      sumxi2=0.
      sumxiyi=0.

do 520 i=1,sub
  write(4,*) npart(i), rgi(i)
  sumxi=sumxi+npart(i)
  sumyi=sumyi+rgi(i)
  sumxi2=sumxi2+(npart(i)**2)
  sumxiyi=sumxiyi+(npart(i)*rgi(i))
520  continue

c   *** Calculando la dimensión fractal ***
      a=(sub*sumxiyi-sumxi*sumyi)/(sub*sumxi2-sumxi**2)
      b=(sumxi2*sumyi-sumxiyi*sumxi)/(sub*sumxi2-sumxi**2)
      df=1/a

      sumdi2=0
      do 530 i=1,sub
        di2=((rgi(i)**2)-2*(a*npart(i)+b)*rgi(i)+(a**2)*(npart(i)**2)
          +2*b*n*npart(i)+(b**2)
          sumdi2=sumdi2+di2
c
530  continue

```

```

c      *** calculando la desviación Standard ***
      sy= sqrt(sumdi2/real(sub-2))
      sm=sy*(sub / (sub*sumxi2-sumxi**2))
      sb=sy*(sumxi2 / (sub*sumxi2-sumxi**2))

      write(4,*)sced= ',isced
      write(4,*) stkprb= ',stkprb
      write(4,*)time= ',tclapsed
      write(4,*) df= ',df
      write(4,*)m= ',a ', b= ',b,
      write(4,600) sy, sm, sb
600    format('sy= ',f9.7, ' sm= ',f9.7, ' sb= ',f9.7)

      close (4)

      stop
      end
    
```

c SUBROUTINA MERGE

```

      subroutine merge(1,npart,nclus,nic,icl1,icl2,icl3,ind1,
c ind2,nc,nfc,clus,n,k,ic,xc,yc,xmax,ymax,xmin,ymin,
c index,indxr,ns,rgi,nparti,sub,min,max,s,dflxin,
c nums,dens,expon,x1,y1,minrg)
    
```

```

      integer clus(nclus),n(nic),k(nic),ic(nic)
      integer xc(nic),yc(nic),xmax(nic),ymax(nic)
      integer xmin(nic),ymin(nic),index(npart),indxr(nic)
      integer ns(npart)
      integer xep3, yep3, clusx, clusy, clusx2, clusy2
      integer sub, x1, y1
    
```

```

      real rgi(npart),nparti(npart)
    
```

```

      real lgtime
      common /lgtime/ lgtime
      ic3= ic(nc) + 2*n(nc)
    
```

c \*\*\*\*\*obteniendo las radios de cada cumulo\*\*\*\*\*

```

      nrx1= (xmax(icl1) - xmin(icl1)+1)/2
      nrx2= (xmax(icl2) - xmin(icl2)+1)/2
      nry1= (ymax(icl1) - ymin(icl1)+1)/2
      nry2= (ymax(icl2) - ymin(icl2)+1)/2
    
```

c \*Analizando que las distancias de los centros geometricos\*

c \*\*scan menores que la suma de los radios de c/cumulo\*\*\*\*\*

```

      if (abs(xc(icl1)-xc(icl2)) .lt. nrx1+nrx2+2) then
        ix=xc(icl2)-xc(icl1)
      else
        if (xc(icl1) .lt. xc(icl2)) then
          ix= xc(icl2)-xc(icl1)-1
        else
          ix= xc(icl2)-xc(icl1)+1
        endif
      endif
      endif
    
```

```

if (abs(yc(ic1))-yc(ic2)) .lt. nry1+nry2+2) then
  iy=yc(ic2)-yc(ic1)
else
  if (yc(ic1) .lt. yc(ic2)) then
    iy= yc(ic2)-yc(ic1)-1
  else
    iy= yc(ic2)-yc(ic1)+1
  endif
endif

c      **** actualizando el maximo y minimo del nuevo ****
c      **** cumulo que resultado de la union de dos cumulos,***
c      ** todo con respecto al centro del cumulo ic1 elegido**
if (xmax(ic1) .gt. xmax(ic2)+ix) then
  xmax(ic3)= xmax(ic1)
else
  xmax(ic3)= xmax(ic2) + ix
endif
if (ymax(ic1) .gt. ymax(ic2) + iy) then
  ymax(ic3)= ymax(ic1)
else
  ymax(ic3)= ymax(ic2)+iy
endif
if (xmin(ic1) .lt. xmin(ic2)+ix) then
  xmin(ic3)= xmin(ic1)
else
  xmin(ic3)= xmin(ic2)+ix
endif
if (ymin(ic1) .lt. ymin(ic2)+iy) then
  ymin(ic3)= ymin(ic1)
else
  ymin(ic3)= ymin(ic2)+iy
endif

c      * para establecer el centro geometrico del cumulo ic3***
c      * definido con respecto a la posicion del cumulo ic1 ****
xcp3= (xmax(ic3)+xmin(ic3))/2
yep3= (ymax(ic3)+ymin(ic3))/2
xmax(ic3)= xmax(ic3)-xcp3
ymax(ic3)= ymax(ic3)-yep3
xmin(ic3)= xmin(ic3)-xcp3
ymin(ic3)= ymin(ic3)-yep3
xc(ic3)= xc(ic1)+xcp3
yc(ic3)= yc(ic1)+yep3
if (xc(ic3).gt.1) then
  xc(ic3)=xc(ic3)-1
elseif (xc(ic3).lt.1) then
  xc(ic3)= xc(ic3)+1
endif
if (yc(ic3).gt.1) then
  yc(ic3)= yc(ic3)-1
elseif (yc(ic3).lt.1) then
  yc(ic3)= yc(ic3)+1
endif

c      * actualizando el vector n; numero de particulas que *****
c      * conforman al nuevo agregado *****
n1= n(ic1)
n2= n(ic2)
n(ic3)= n1+n2
n3= n(ic3)

```

```

c      * actualizando el vector k, en donde los dos cumulos *****
c      * que se pegaron pasan a ser fantasma(0) y el cumulo *****
c      * resultante de esa union para a ser vivo (1) *****
      k(ic1)= 0
      k(ic2)= 0
      k(ic3)= 1

      ic1= ic(ic1)
      ic2= ic(ic2)
      ic(ic3)= ic(nc) + 2*n(nc)
      ic3= ic(ic3)

c      nefe= nefe-1
c      nc= nc+1

      do 300 j= 1,n1
        j3= ic3 + 2*j
        j1= ic1 + 2*j
        clus(j3-2)= clus(j1-2)-xcp3
        clus(j3-1)= clus(j1-1)-yep3
300    continue

      do 310 j=1,n2
        j3= ic3+2*(n1+j)
        j2= ic2+2*j
        clus(j3-2)= clus(j2-2)+ix-xcp3
        clus(j3-1)= clus(j2-1)+iy-yep3
310    continue

c      ***** actualizando el vector index e indexr*****
      if (ind1 .lt. ind2) then
        index(ind1)= icl3
        indexr(icl3)= ind1
        indefc= index(nefe)
        index(ind2)= indefc
        indexr(indefc)= ind2
      else
        index(ind2)= icl3
        indexr(icl3)= ind2
        indefc= index(nefe)
        index(ind1)= indefc
        indexr(indefc)= ind1
      endif

c      **** calculando radio de giro ***
      if (n3 .ge. minrg) then
        clusx=0
        clusy=0
        clusx2=0
        clusy2=0
        do 315 i=1,n3
          i2= ic3+2*i
          ix= clus(i2-2)
          iy= clus(i2-1)
          clusx= clusx + ix
          clusy= clusy + iy
          clusx2= clusx2 + ix**2
          clusy2= clusy2 + iy**2
315    continue

        xcm= (real(clusx))/(real(n3))
        ycm= (real(clusy))/(real(n3))

```

```

c      rg=sqrt((real(clusx2+clusy2)-real(n3))*(xcm**2+
      ycm**2))/real(n3))
      sub= sub+1
      rgi(sub)=log(rg)
      nparti(sub)= log(real(n3))
    endif

c      if (n3 .gt. max) max= n3
      *** actualizando ns **
      ns(n1)= ns(n1)-1
      ns(n2)= ns(n2)-1
      ns(n3)= ns(n3)+1
      if (ns(min),eq.0) then
        do 320 i= min+1, max
          if (ns(i) .ne. 0) then
            min= i
            dfmxi= min**(expon)
            goto 390
          endif
320      continue
      endif

c      *** calculando el promedio pesado de los cumulos***
390      nums= nums+2*n1*n2
      s=(real(nums))/dens

      nefe=nefc-1
      nc=nc+1

      return
      end

```

## BIBLIOGRAFIA

- R. Jullien, R. Botet. *Agregation and Fractal Agregation*, World Scientific, Singapur 1987.
- *Kinetics of Agregation and Gelation*, edited by F. Family and D. P. Landau, North Holland, Amsterdam, 1984.
- P. Meakin, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edite by C. Domb and J.L. Lebowitz, Academic, New York 1988, Vol. 12, pg. 335.
- Mandelbrot, Benoit B., *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, San Francisco 1982.
- C. Tanford. *Fisical Chemistry of Macromolecules*, Wiley, New York 1961.
- *Fractals in Physics, Proceeding of the sixth Trieste International Symposium of the Fractals in Physics*, Trieste, Italy 1985, edited by L. Pietronero and E. Tosatti, North Holland, Amsterdam 1986.
- Vicsek, Tamás. *Fractal Growth Phenomena*, World Scientific, Singapur 1989.
- Mandelbrot, Benoit B. *Fractals, Form, Chance and Dimension*, Freeman, San Francisco 1977.
- D.S. Caroll. *On Growth and Form*, edited by H.E. Stanley and N. Ostrowky, Nijhoff, Dordrecht 1983, p. 1183.