

Universidad de Los Andes
Facultad de Ciencias
Post-grado en Física Fundamental

Crecimiento y formación de fases en medios heterogéneos.

Presentado por:
M.Sc. Carlos A. Echeverria A.

Tutor: **Dr. Kay Tucci**

Noviembre 2007

*Esta tesis, culminación de mis estudios formales,
se la dedico a la memoria de mi padre.
Sargento primero Eloy Echeverria.*

*y al sol radiante que pronto estará entre nosotros
Horacio.*

Agradecimientos

A la hora de agradecer, siempre aparecen en la memoria un enorme número de personas, familiares, amigos y enemigos, todos ellos contribuyeron de una forma u otra, para bien o para mal, del resultado de lo que soy hoy en día. Es por ello que sólo citaré a los familiares y amigos más cercanos, y a los enemigos, aunque no aparezcan en el texto, también les agradezco.

Comenzaré agradeciendo al tutor y amigo, Dr. Kay Tucci, quien en otra época fuera compañero de estudio y que en la actualidad es mi profesor de doctorado. A dos maravillosas mujeres, mi esposa Mariebe y mi madre Mélida, ambas me brindaron su apoyo incondicional, y en ocasiones condicionado, para que ésta tarea se concretara. A mi gran amigo Orlando Álvarez, quien en todo momento me brindó todo su apoyo y amistad, como lo hace su maestro a las tortugas ninjas.

También agradezco al conjunto de mujeres "mágicas" de mi familia natural y política, Neyda, Yuleima y Eglis, hermanas sobre todas las cosas. A la Manola, admiradora del Kaneko del Táchira, Marvin, Marian, Margelis y Maria Eugenia y otros familiares como mi sobrino Leonardo, mi cuñado Arlis y a los suegros María y Evencio, todos ellos contribuyeron en este logro.

A mis amigos caóticos, en especial al Dr. Mario Cosenza gran amigo y consejero, quien con su basto conocimiento contribuyó a la culminación de la tesis. Al Dr. Antonio Parravano,

José Luis, Hender, Juan Carlos, Alejandrita, Miguel Angel, Miguel Pineda, José Manuel, Luz Marina y a un miembro externo muy apreciado Mayerlin.

Al grupo de Química Teórica en especial a los Doctores Wilmer Olivares, Belky Sulbaran, Pedro Colmenares, Rafael Almeida, Luis Rincón, Juan Carlos Villegas, Zaida Parra y Daniel Morales. Todos ellos contribuyeron con sus conocimientos y amistad a que lograra esta meta.

A mis compañeros del Laboratorio de Física Aplicada y Computacional (LFAC), Lord Javier Gonzalez Esteves, Gilberto Paredes, Ramón Molina, Luis Villaruel y en especial al Prof Efren Ontiveros, por su ayuda en mis inicios como profesor. Con los cuales comparto mi motivación al trabajo y las ganas de transformar el futuro.

A mis compañeros de Universidad, Atilio, Alicia, hermanito Giovanni, Berlitz y Blanquita, que en los momentos difíciles siempre me tendieron la mano y me motivaron a seguir adelante.

Por último y más importante a la Universidad Nacional Experimental del Táchira, quien me brindó todo su apoyo para que realizara mis estudios de doctorado. Ayuda que jamás en la vida podré agradecer completamente.

Índice general

Resumen	7
Introducción	9
1. Crecimiento y formación de fases en redes de mapas acoplados en medios heterogéneos	15
1.1. Los sustratos de la simulación.	16
1.1.1. Medios heterogéneos en las redes de mapas acoplados.	17
1.1.2. Modelo para la vecindad variable en diferentes geometrías.	18
1.2. La dinámica en las celdas de las redes de mapas acoplados.	20
1.3. Crecimiento y formación de fases en las redes de mapas acoplados sobre medios Heterogéneos.	21
1.3.1. Parámetros de orden.	22
1.3.2. Resultados para un sustrato homogéneo.	24
1.3.3. Resultados para un sustrato con impurezas.	26
1.4. Efecto del incremento de la vecindad en el crecimiento y formación de fases.	36
1.4.1. Resultados con vecindad variable.	38
1.4.2. Análisis de la dinámica con vecindad variable.	43
1.5. Conclusiones.	47
2. Sistema social multicultural sobre medios heterogéneos.	50

2.1. Modelo de multicultural de Axelrod.	51
2.2. El modelo de Axelrod sobre medios heterogéneos.	55
2.3. Resultados de la simulación con líderes e impurezas.	56
2.4. Simulación de un modelo de Axelrod con vecindad variable.	58
2.5. Conclusión	61
3. Dinámica de formación y estabilización de dominios de fluidos binarios	63
3.1. Dinámica de colisión de multipartículas.	64
3.2. Difusión de un fluido.	68
3.2.1. Difusión de un fluido en un medio libre.	69
3.2.2. Difusión en un medio con obstáculos.	71
3.3. Estabilización de interfase en fluidos binarios.	75
3.3.1. Implementación de la dinámica de colisión multipartículas para fluidos inmisibles.	77
3.3.2. Simulación de una interfase.	80
3.3.3. Simulación de una interfase con obstáculos.	91
3.4. Separación de fluidos binarios.	94
3.4.1. Separación de fases en un medio libre.	95
3.4.2. Separación de fases en un medio con obstáculos.	100
3.5. Conclusiones.	102
Conclusiones Generales.	106
Bibliografía.	108
Anexo	114

Resumen

En esta tesis se estudia el efecto que tienen los sustratos heterogéneos en el crecimiento y formación de dominios en sistemas espaciotemporales multiestables. En particular se utilizan tres modelos espacio-temporales diferentes: redes de mapas biestables acoplados, fluidos binarios modelados con dinámica de colisión multipartículas y autómatas celulares con dinámica de interacción cultural multiestable. Las propiedades estadísticas de los dos primeros se caracterizan mediante el tamaño medio de los dominios de las fases y mientras que para el tercer modelo, estas propiedades se caracterizan a través de la fracción promedio de dominios culturales. Se encuentra que al aumentar la densidad de impurezas u obstáculos en las redes de mapas acoplados y en los fluidos binarios la velocidad del crecimiento de los dominios disminuye. Además, para los tres sistemas se observa que en el estado inhomogéneo el tamaño promedio de los dominios resultantes decrece al aumentar la densidad de impurezas.

Se obtienen los diagramas de fases para las redes de mapas acoplados y para la dinámica de interacción cultural, los cuales muestran las regiones de patrones homogéneos y heterogéneos en el espacio de parámetros de cada sistema. Se determina que las impurezas tienen un efecto sobre las propiedades críticas de ambos sistemas. También se muestra que al incrementar el rango de la interacción en estos dos sistemas, las transiciones de fase se vuelven más abruptas, pasando de ser transiciones de segundo orden a ser de primer orden, alcanzando, para rangos de interacción relativamente bajos, las mismas propiedades que se han observado cuando en estos sistemas se utiliza acoplamiento global.

A una escala mesoscópica se estudia la difusión de un fluido en un medio con obstáculos esféricos, mostrando la dependencia del coeficiente de difusión con respecto a la densidad de obstáculos y a la temperatura. Para los fluidos binarios se modifica la técnica mesoscópica de colisión multipartículas con la finalidad de introducir el efecto de repulsión entre las especies. Longrando, con esta modificación, estabilizar la interfase entre los dominios y recuperar la estructura de equilibrio de la interfase predicha por la representación de una mezcla binaria mediante un modelo de Ising.

El tiempo saca a la luz todo lo que está oculto
y encubre y esconde lo que ahora brilla
en el más grande esplendor.
Quinto Horacio Flaco

Introducción

El crecimiento y formación de fases sucede en muy diversos sistemas, por ejemplo en los sólidos magnéticos, fluidos de varios componentes inmiscibles [1] e incluso en sistemas sociales con diferentes idiosincrasias culturales [16]. El comportamiento global en estos sistemas se caracteriza por el tamaño de cada una de las fases que los componen [1, 16]. Para su control es necesario entender cómo las variables externas e internas afectan la formación y el tamaño de las fases. Un ejemplo de estas variables internas es la presencia de objetos sólidos, impurezas o discontinuidades en el espacio donde se lleva a cabo la separación de las fases, en otras palabras, que el medio sea heterogéneo. En fluidos binarios se ha observado con técnicas experimentales [24] y con resultados teóricos [3, 23], que al introducir objetos inmóviles que no interactúan con los componentes del sistema, se inhibe el crecimiento y la formación de las fases. Este mismo fenómeno también se ha estudiado en sistemas magnéticos [4], donde se observó que las líneas de las interfaces son desviadas por la presencia de las impurezas, lo que permite controlar la forma y el tamaño final de las fases.

En este trabajo se estudia, utilizando tres técnicas diferentes para el modelado de sistemas espacialmente distribuidos, el efecto que tiene el carácter heterogéneo del medio sobre el crecimiento y formación de las fases en sistemas con parámetros de orden conservados y no conservados. Los parámetros de orden conservados son aquellos cuyo valor integral del sistema, no desaparece en el tiempo, como por ejemplo las densidades de un fluido binario

que no reaccionan al transcurrir el tiempo. En cambio, los parámetros de orden no conservados son aquellos cuyo valor integral del sistema, pueden variar en el tiempo, como por ejemplo la magnetización de un sólido magnético. Los tres tipos de modelos de sistemas espacialmente distribuidos que se utiliza en esta tesis son: las redes de mapas acoplados [5] con dinámica local biestable [7]; autómatas celulares [39] con el modelo de dinámica cultural multiestable propuesto por Robert Axelrod [16]; y por último la dinámica de colisión de multipartículas [44, 45, 46]. En los dos primeros sistemas, sus respectivos parámetros de orden son no conservados, mientras que en el tercer sistema el parámetro de orden es conservado. La heterogeneidad del medio se consigue mediante la inclusión de impurezas, sea que estas interactúen con su alrededores o no. También se estudia con los dos primeros modelos cómo la discretización del espacio afecta el crecimiento y formación de fases.

Las redes de mapas acoplados [5] son modelos de sistemas espacialmente distribuidos compuestos por celdas que se conectan unas a otras según alguna regla que caracteriza a la red. Los estados de las celdas evolucionan temporalmente con una dinámica regida por una aplicación o mapa de retorno [6]. Las propiedades de estos sistemas son caracterizadas por medio de un parámetro de orden o de una propiedad estadística del sistema. La escala de simulación de las redes de mapas acoplados es macroscópica, por eso, estos modelos son computacionalmente más eficientes, sobre todo si los comparamos con los métodos de simulación tradicionales, los cuales requieren un enorme número de partículas, lo que hace que sea imposible realizar las simulaciones en un tiempo razonable. Para los sistemas que se encuentran en un régimen espacio-temporal caótico o en un estado muy alejado del equilibrio los resultados obtenidos por técnicas computacionales tradicionales, no reproducen los comportamientos observados en la naturaleza, y si a estos modelos tradicionales se les someten a campos externos, los resultados que generan las simulaciones están aún más alejados de la realidad [9]. En cambio, al estudiar estos sistemas con redes de mapas acoplados, se logra reproducir comportamientos dinámicos colectivos no triviales, tales como transientes de grano grueso, dominios de fases caóticas, sincronización, etc. [8, 10, 14, 15]. Otra características a

resaltar de las redes de mapas acoplados, es que son modelos en los cuales se pueden evaluar los comportamientos cercanos a transiciones de fases en sistemas de tamaños finitos, para luego extrapolarlos de manera muy fiable al límite termodinámico. Además, con los mapas se evita un desarrollo detallado del sistema a nivel microscópico, es decir, la construcción a nivel molecular de un Hamiltoniano o Lagrangiano y su eventual resolución. En ellos la dinámica local se describe de manera muy sencilla [6]. El ordenamiento de fases en redes de mapas acoplados en el equilibrio se ha estudiado por muchos autores, relacionando sus resultados con los del modelo de Ising en el equilibrio [17, 18, 19, 20, 21, 22]. En este trabajo se estudia la influencia que tienen las impurezas o sitios inactivos en el crecimiento y formación de fases, sobre una estructura regular de redes de mapas acoplados, para luego observar el efecto de la discretización y del tamaño de la vecindad en las dinámicas de crecimiento.

En esta tesis también se estudia el crecimiento y separación de dominios con autómatas celulares, los cuales son modelos matemáticos de sistemas que evolucionan en pasos discretos de tiempo, sobre un espacio y estados discretos. Los autómatas celulares son adecuados para modelar sistemas naturales que puedan ser descritos como una colección de objetos simples que interactúan localmente unos con otros [11, 13]. Debido a la similitud que tienen algunos procesos sociales a con procesos físicos comunes, algunos investigadores se han dedicado a caracterizar, por medio del analogo de propiedades físicas ya conocidas, modelos que logran reproducir ciertos comportamientos sociales colectivos. Uno de éstos investigadores es Robert Axelrod, quien propone un modelo de autómatas celulares de interacción cultural para estudiar cómo los individuos son capaces de influenciarse entre sí [16], y por qué esta influencia no siempre conduce a la homogeneidad. Su modelo puede usarse para explicar cómo una cultura puede establecerse, extenderse y sostenerse. La dinámica estudia un comportamiento de transición de fase fuera del equilibrio entre dos estados finales: el ordenado, un estado cultural globalmente homogéneo; y el desordenado, un estado culturalmente fragmentado; como se muestra en [27, 30, 31, 32]. Algunas modificaciones o extensiones de este modelo se han estudiado recientemente. Por ejemplo, el arrastre cultural es modelado como un ruido que

actúa sobre configuraciones desordenadas congeladas[33]; el efecto de los medios de comunicación de masas es considerado como un campo externo [34] o una influencia autónoma que actúa sobre el sistema [35, 36]. Los efectos de la topología de la redes sociales de interacción también son investigadas en [31, 37, 38]. En particular, en este trabajo se emplea el modelo de interacción cultural de Axelrod para estudiar la influencia que tiene la heterogeneidad del sustrato en la formación de dominios culturales. Para tal fin se estudia el sistema con dos tipos de impurezas: la primera corresponde a celdas sin actividad que asemejan accidentes geográficos; la segunda corresponde a celdas que influyen en sus vecinos pero estos no influyen en ellas con lo cual se pretende representar a líderes.

Por último se estudia el efecto que tienen las impurezas del sustrato en el crecimiento y ordenamiento de fases en fluidos binarios. En general, los sistemas moleculares son complejos y consisten de un gran número de partículas, por lo cual sería imposible encontrar sus propiedades de forma analítica. Para evitar este problema, la dinámica molecular utiliza métodos numéricos para su estudio, esta técnica de modelado representa un punto intermedio entre los estudios experimentales y los desarrollos teóricos. Puede ser entendida como un experimento en la computadora. Específicamente, en la simulación de fluidos se utiliza potenciales energéticos o fuerzas entre pares de partículas, que logran representar de manera muy precisa ciertas propiedades macroscópicas que no requieren un gran número de partículas durante la simulación [59, 60]. Sin embargo, cuando se quieren representar propiedades que involucran grandes cantidades de moléculas o partículas, como movilidad de coloides, reacciones químicas de macromoléculas, difusión de fluidos en sistemas congestionados o estudios dinámicos de separaciones de fases, la simulación por dinámica molecular pierde su practicidad, ya que se necesitan tiempos de cálculo excesivamente grandes y estos tiempos pueden llegar a ser comparables con el promedio de vida del ser humano, aún si se utilizan las mejores plataformas de cómputo del mundo. Para solventar esto, se ha desarrollado una gran variedad de técnicas de simulación [61], que a pesar de perder el detalle molecular, pueden describir las propiedades macroscópicas de manera precisa. Un ejemplo de estas

técnicas es la dinámica de colisión de multipartículas para la descripción de la dinámica de fluidos desarrollada por Malevenets y Kapral [44, 45, 46]. Esta técnica es un híbrido entre autómatas celulares y dinámica molecular convencional, donde se define una celda en la que las partículas colisionan simultáneamente a través de un operador de rotación. Este operador conserva la masa, el momento y la energía, con lo cual se logra un equilibrio de Maxwell-Boltzmann. La dinámica de colisión de multipartículas se ha empleado en una gran diversidad de sistemas [57], incluso en sistemas de fluidos binarios [62]. Para el estudio del efecto que tiene la heterogeneidad en la formación de fases, se comienza implementando la técnica simulación mesoscópica para describir la difusión de un fluido en un medio con nanopartículas inmóviles u obstáculos, haciendo un estudio del rango de temperatura para los cuales la técnica es válida. Seguidamente, se incluyen fuerzas repulsivas en la dinámica para la evolución de una interfase de dos fluidos inmiscibles en una película, en primer lugar sin obstáculos para luego agregarlos. Por último se describe la separación de fases de fluidos binarios.

Esta tesis está estructurada de la siguiente manera. El crecimiento y formación de fases sobre sustratos heterogéneos con parámetros no conservados se estudia en los capítulos 1 y 2; y con parámetros conservados en el capítulo 3. En particular en el primer capítulo el estudio se realiza con redes de mapas acoplados, incluyendo impurezas en redes regulares. Las impurezas son celdas que no interactúan con sus alrededores y sólo ocupan un espacio en la red. Seguidamente, en el mismo capítulo se estudia el efecto que tiene en la dinámica y en la segregación de las fases, la forma en que se realiza la discretización del espacio, así como el rango de la vecindad de interacción. Luego, en el segundo capítulo, se estudia el efecto de los tipos de impurezas en el modelo de dinámica cultural propuesto por Robert Axelrod usando autómatas celulares. En el último capítulo se estudia la difusión de un fluido en medios con obstáculos inmóviles utilizando la técnica de colisión multipartículas. Se establece el rango de temperatura donde la dinámica de colisión de multipartículas es válida y se determina la influencia que tienen los obstáculos en el coeficiente de difusión. Luego en este mismo

capítulo, se incluye un factor de repulsión a la técnica de simulación para representar fluidos de especies diferentes y estudiar la estabilidad de una interfase en fluidos binarios variando la densidad de impurezas u obstáculos en el medio y observando el efecto de los mismos en la interfase. Al final del capítulo, se estudia la descomposición espinodal en fluidos binarios con dinámica de colisión multipartículas con repulsión observando el efecto de las impurezas en las propiedades de crecimiento y formación de dominios. En el último capítulo se presenta las conclusiones generales sobre la influencia que tienen las impurezas en el proceso de separación de fases y crecimiento de dominios.

El que ha comenzado bien,
está a la mitad de la obra.
Quinto Horacio Flaco

Capítulo 1

Crecimiento y formación de fases en redes de mapas acoplados en medios heterogéneos

Las redes de mapas acoplados [5] son modelos de sistemas espacialmente distribuidos compuestos por celdas que se conectan unas a otras según alguna regla que caracteriza a la red. Los estados de las celdas evolucionan temporalmente con una dinámica regida por una aplicación o mapa de retorno [6]. Las propiedades de estos sistemas son caracterizadas por medio de un parámetro de orden o de una propiedad estadística del sistema. La escala de simulación de las redes de mapas acoplados es macroscópica, por eso, estos modelos son computacionalmente más eficientes, sobre todo si los comparamos con los métodos de simulación tradicionales, los cuales requieren un enorme número de partículas, lo que hace que sea imposible realizar las simulaciones en un tiempo razonable. Para los sistemas que se encuentran en un régimen espacio-temporal caótico o en un estado muy alejado del equilibrio los resultados obtenidos por técnicas computacionales tradicionales, no reproducen los comportamientos observados en la naturaleza, y si a estos modelos tradicionales se les someten a

campos externos, los resultados que generan las simulaciones están aún más alejados de la realidad [9]. En cambio, al estudiar estos sistemas con redes de mapas acoplados, se logra reproducir comportamientos dinámicos colectivos no triviales, tales como transientes de grano grueso, dominios de fases caóticas, sincronización, etc. [8, 10, 14, 15]. Otra característica a resaltar de las redes de mapas acoplados, es que son modelos en los cuales se pueden evaluar los comportamientos cercanos a transiciones de fases en sistemas de tamaños finitos, para luego extrapolarlos de manera muy fiable al límite termodinámico. Además, con los mapas se evita un desarrollo detallado del sistema a nivel microscópico, es decir, la construcción a nivel molecular de un Hamiltoniano o Lagrangiano y su eventual resolución. En ellos la dinámica local se describe de manera muy sencilla [6]. El ordenamiento de fases en redes de mapas acoplados en el equilibrio se ha estudiado por muchos autores, relacionando sus resultados con los del modelo de Ising en el equilibrio [17, 18, 19, 20, 21, 22]. En este trabajo se estudia la influencia que tienen las impurezas o sitios inactivos en el crecimiento y formación de fases, sobre una estructura regular de redes de mapas acoplados, para luego observar el efecto de la discretización y del tamaño de la vecindad en las dinámicas de crecimiento.

1.1. Los sustratos de la simulación.

El fenómeno de separación de fases ha sido estudiado sobre una red bidimensional cuadrada homogénea y con condiciones de contorno periódicas. Chaté y colaboradores [17, 18, 19, 20] con una vecindad de von Neumann (4 vecinos), y posteriormente Angelini [21] realiza este estudio pero con una vecindad de Moork (8 vecinos). En ambos casos se usa una dinámica local biestable con un acoplamiento difusivo y se obtuvieron resultados similares. A diferencia de los trabajos antes mencionados, en este capítulo se emplea sustratos heterogéneos para controlar el crecimiento y formación de fases en las redes de mapas acoplados. El sustrato se construye insertando impurezas a una red homogénea. Además, se extienden los estudios de estos autores, ampliando el rango de interacción o incrementando el número de celdas vecinas, y cambiando las estructuras morfológicas de las celdas en la discretización, para observar su efecto en la transición de fase.

1.1.1. Medios heterogéneos en las redes de mapas acoplados.

Una de las maneras de conseguir heterogeneidad, es emplear un sustrato homogéneo e incluirle impurezas o celdas inactivas. Para incluir dichas impurezas en el sistema se usa el siguiente procedimiento: primero se selecciona una celda al azar en la red y ésta se desactiva, de tal manera que sólo ocupe un espacio en la red pero no interactúe con ninguna otra celda del sustrato. Alrededor de la celda inactiva se crea una zona circular de exclusión de radio d en la que no puede haber otra celda inactiva como lo ilustra la figura 1.1. Este proceso se repite seleccionando al azar nuevas celdas fuera del área de exclusión de la celdas ya seleccionadas hasta que no sea posible introducir otra impureza más en la red.

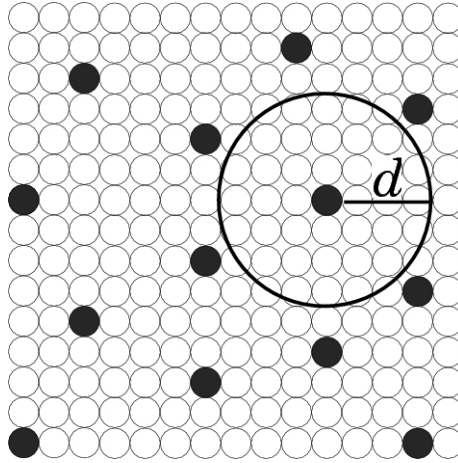


Figura 1.1: *Soporte espacial de la simulación, mostrando las celdas activas (\circ) y las impurezas (\bullet). Las impurezas son colocadas aleatoriamente a una distancia radial mínima de d entre ellas.*

La figura 1.2 muestra la relación que existe entre la densidad de impurezas ρ y el área de exclusión d . De ella se tiene que $\rho = 0,624 d^{-2}$. Para garantizar una proporción idéntica de estados del sistema, se escoge que un número de impurezas tal que el número de celdas activas sea par.

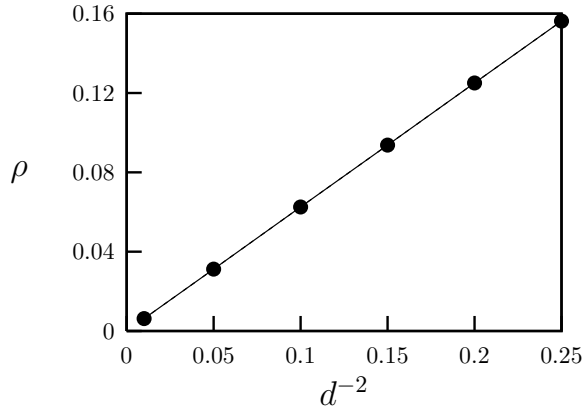


Figura 1.2: La relación entre ρ y d^{-2} en escala logarítmica. $\rho = 0,624 d^{-2}$.

1.1.2. Modelo para la vecindad variable en diferentes geometrías.

En trabajos previos de Chaté y colaboradores [17, 18, 19, 20], se determina que existen valores críticos para la transición de fase, de desorden a orden, y que estos valores varían con el número de celdas vecinas, como lo muestran los resultados de Angelini [21]. Por consiguiente, surge la pregunta de ¿cómo sería el comportamiento de éstos valores críticos si se cambia el tamaño de la región de interacción alrededor de cada celda, en otras palabras, el nivel de vecindad r_ν ? También, se puede estudiar el efecto que tiene en la transición de fase, el cambiar los números de vecinos adjuntos que posee cada celda mediante el cambio de la geometría de la misma, por ejemplo las celdas cuadradas poseen cuatro vecinos adjuntos, mientras que la triangular y la hexagonal poseen tres y seis vecinos respectivamente. Para ilustrar los diferentes tipos de sustratos veamos la figura 1.3

En esta figura se presentan tres discretizaciones diferentes, la triangular a la izquierda, la cuadrada en el centro y la hexagonal a la derecha. En cada uno de los cuadros se presenta en gris el conjunto de la celda negra. Para el primer nivel de vecindad, $r_\nu = 1$, podemos observar que el número de vecinos inmediatos cambia con la geometría, para la triangular cada celda posee tres vecinos, para la red cuadrada cuatro vecinos y para la hexagonal

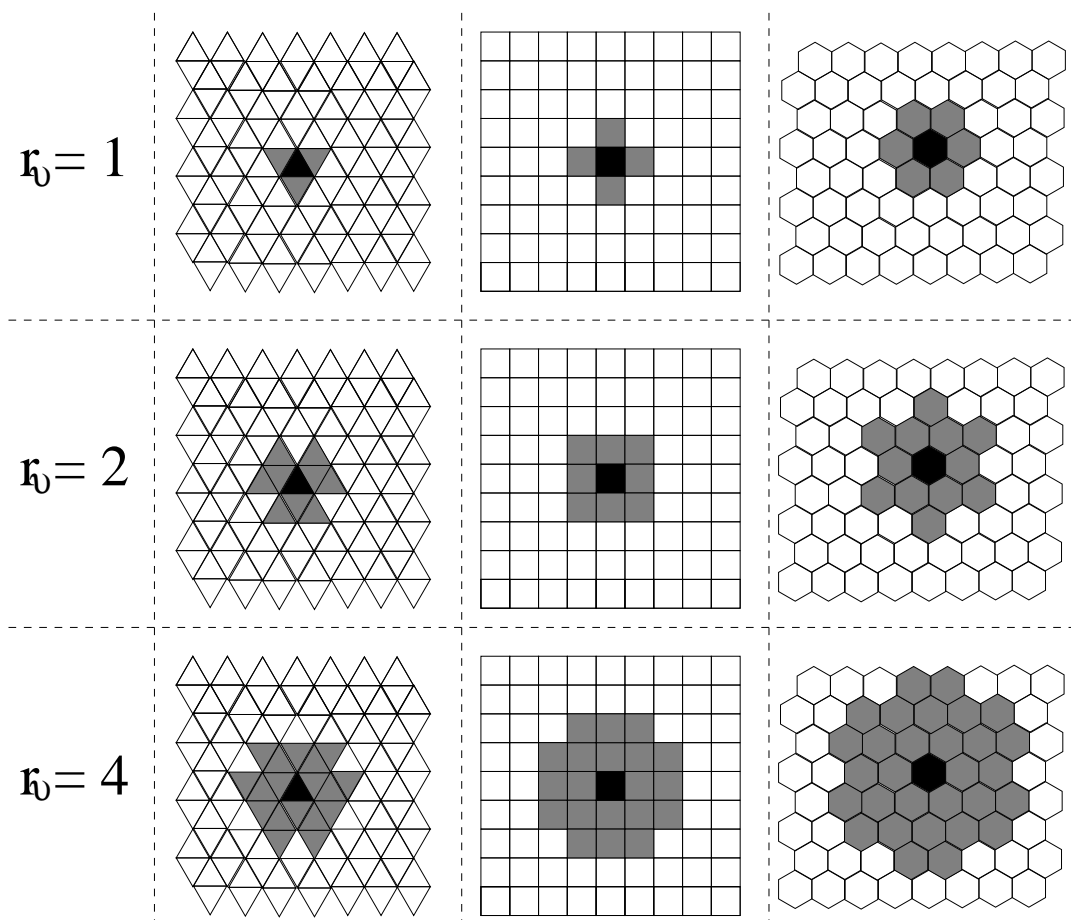


Figura 1.3: *Diferentes tipos de discretización. (derecha) Triangular, (mitad) cuadrada y (izquierda) hexagonal. Con sus respectivos nivel de interacción r_ν .*

seis vecinos. En la siguiente fila muestra el conjunto de las celdas vecinas para $r_\nu = 2$ o segunda vecindad, donde para las celdas triangular sus vecinas son de seis celdas, para las cuadradas son ocho celdas y para las hexagonales son doce celdas. En la tercera columna aparece el área de vecindad para $r_\nu = 4$. Se nota que a medida que se incrementa el valor de r_ν , para la estructura hexagonal se obtiene una vecindad de forma circular más definida antes que para la estructura cuadrada. En cuanto a la triangular si se continúa incrementando el valor de r_ν , la forma de la vecindad se ajustaría eventualmente a una circunferencia.

El nivel de vecindad r_ν define el conjunto de vecinos N_i de cada celda. Para determinar

los miembros del conjunto de vecinos N_i de la celda i , representados en negro y gris respectivamente en la figura 1.3, se coloca el centro de una circunferencia en el centro de cada celda i y se incrementa su radio desde cero hasta llegar al centro de las celdas adyacentes a la celda. Estas celdas definen el primer nivel de vecindad $r_\nu = 1$. Si este radio se sigue incrementando, se llega al centro de las celdas inmediatamente más externas, las cuales definen el segundo nivel de vecindad $r_\nu = 2$ y todas las celdas que estén dentro de la circunferencia son tomadas como vecinas de la central, es decir pertenecen a N_i para $r_\nu = 2$ (ver figura 1.3). Si se sigue aumentando el radio de la circunferencia de vecinos, podemos definir todas los niveles de vecindades hasta cubrir todas las celdas del sistema, este último es lo que se define como acoplamiento global $\nu_i = N$, donde ν_i es la cardinalidad del conjunto N_i de celdas vecinas para la vecindad r_ν . Éste caso fué estudiado por Álvarez y colaboradores [29] en redes de mapas acoplados globalmente con dinámica biestable.

1.2. La dinámica en las celdas de las redes de mapas acoplados.

La dinámica de las redes de mapas acoplados viene dada por:

$$x_{t+i}^i = (1 - \epsilon)f(x_t^i) + \frac{\epsilon}{\nu_i} \sum_{j \in N_i} f(x_t^j), \quad (1.1)$$

donde, x_t^i es una variable real, ϵ es un parámetro que mide la fuerza del acoplamiento entre la celda central i y su conjunto de vecinos N_i y ν_i es la cardinalidad de ese conjunto de vecinos. La dinámica local $f(x_t^i)$ es una función no lineal. Para estudiar el fenómeno de formación de dominios y separación de fases, se utiliza mapas multiestables. En particular en este caso se utilizará un mapa biestable propuesto por Miller y Huse [7, 20].

$$f(x) = \begin{cases} -2\mu/3 - \mu x & \text{si } x \in [-1, -1/3] \\ \mu x & \text{si } x \in [-1/3, 1/3] \\ 2\mu/3 - \mu x & \text{si } x \in [1/3, 1]. \end{cases} \quad (1.2)$$

donde, μ es el parámetro de la dinámica local. Cuando $\mu \in [1, 2]$, el mapa posee dos atractores caóticos simétricos en intervalos $I^\pm = [\pm\mu(2 - \mu)/3, \pm\mu/3]$, separados por un brecha $I^o = [-\mu(2 - \mu)/3, \mu(2 - \mu)/3]$. El ancho de este espesor está relacionado con la facilidad de transición entre los dos regiones, entre más grande sea la brecha entre los atractores caóticos, será más difícil que el estado de una celda cambie de atractor debido al acoplamiento. Los estados locales tienen dos fases muy bien definidas, que pueden ser caracterizados por una variable de spin que se consigue con el signo del estado a un tiempo t , $\sigma_t = \text{sign}(x_t)$.

Inicialmente se distribuye aleatoriamente sobre la red los estados de cada celda, estableciendo que la mitad de las celdas estén en fase positiva y la otra mitad estén en fase negativa, esto para que el sistema posea igual probabilidad de ir a cualquiera de las dos fases, y en consecuencia, el sistema no llegue al estado de la fase mayoritaria. También se escoge un parámetro de acoplamiento de $\mu = 1,9$, con lo cual se obtiene todas las características anteriormente expuestas por los Chatè y Angelini.

1.3. Crecimiento y formación de fases en las redes de mapas acoplados sobre medios Heterogéneos.

Un parámetro de orden utilizado para caracterizar el comportamiento de redes de mapas acoplados con dinámica local biestables es la longitud característica de una fase $L(t)$ [17, 18, 19, 20], dicha longitud es calculada con la función correlación espacial igualada a $1/2$, encontrando una ley de escala, $L(t) \sim t^{\alpha_p}$, donde el exponente varía con el acoplamiento y sólo corresponde con el valor teórico, $\alpha_p = 1/2$, para un acoplamiento dado. En éste caso

la simulación es para sistemas muy grande, con una red de tamaño 8192^2 y descartando transientes de 10^4 iteraciones, éstos autores logran recuperar dicho valor teórico α_p [19], con un acoplamiento de mediana intensidad de $\epsilon = 0,512$. En esta tesis estudiaremos un sistema con un tamaño mas medido, para poder hacer un barrido mucho mas amplio de los parámetros. Además, estos estudios se han hecho en sistemas regulares y fractales [17, 18, 19, 20, 21, 22], por consiguiente, en este trabajo se pretende realizar un estudio en un sustrato intermedio, incluyéndole impurezas o sitios inactivos en una estructura regular y estudiando el crecimiento y formación de las fases en el mencionado medio.

1.3.1. Parámetros de orden.

El parámetro de orden que se emplea en este capítulo para caracterizar la formación de dominios y crecimiento de las fases, es el tamaño medio de la fase instantáneo R_t , que se define como:

$$R_t = \frac{1}{N^2} \sum_{r=1}^{L/2} \frac{1}{N_r} \sum_{i,j} \delta_{r_{ij},r} \delta_{\sigma_t^i, \sigma_t^j}, \quad (1.3)$$

donde, $\delta_{r_{ij},r}$ es el delta Kronecker respecto a la distancia radial euclidiana r , N_r es la cantidad de celdas que existe a una distancia radial r de una celda central i y r_{ij} es la distancia euclidiana entre las celdas i y j ; $\delta_{\sigma_t^i, \sigma_t^j}$ es el delta de Kronecker respecto a las fases, entre dos celdas i y j . El parámetro R_t toma en cuenta la estructura dimensional de la red y las imperfecciones de la misma.

También se mide la fracción de las celdas que en el instante de tiempo t , tienen k vecinos en su misma fase $G_t(k)$, la cual viene dada por

$$G_t(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N F_t^i(k) \quad (1.4)$$

con

$$F_t^i(k) = \begin{cases} 1, & \text{si } \sum_{j \in N_i^v} \delta_{\sigma_i^i, \sigma_t^j} = k, \\ 0, & \text{si } \sum_{j \in N_i^v} \delta_{\sigma_i^i, \sigma_t^j} \neq k \end{cases}; \quad (1.5)$$

Este parámetro da información sobre la estructura fina de los estados como lo muestra la figura 1.4, en la que se tiene todas las posibles configuraciones para el caso de una red cuadrada con vecindad de Von Neumann. La fracción de celdas con $k = 0, 1, 2, 3$ y 4 vecinos en la misma fase en el instante t viene representado por $G_t(0), G_t(1), G_t(2), G_t(3)$ y $G_t(4)$ respectivamente.

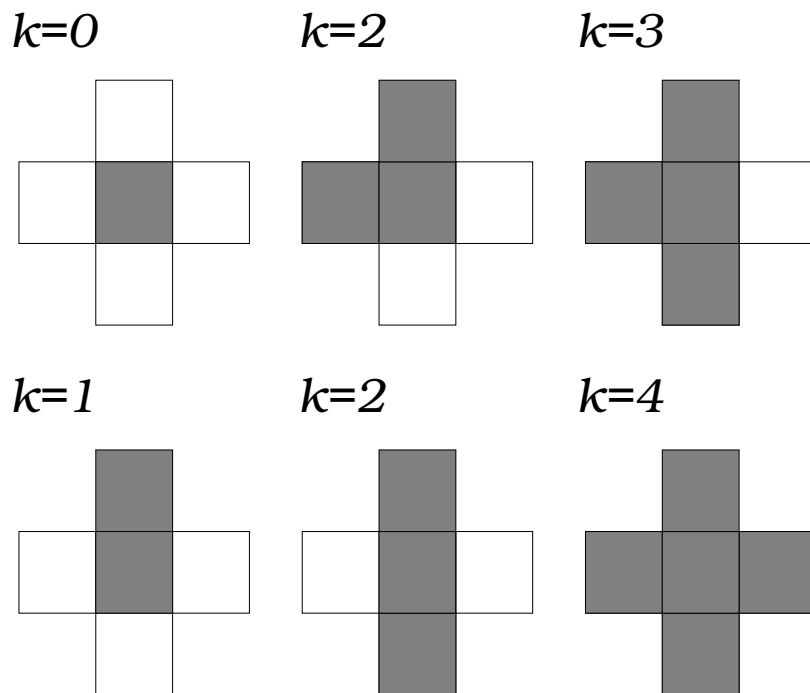


Figura 1.4: Las configuraciones locales tomadas en cuenta por las fracciones $G_t(k)$, para $k = 1, 2, 3$ y 4 . En una red de celdas cuadradas.

Es importante resaltar, que la presencia de las configuraciones $k = 2$ y $k = 3$, indica que en el sistema existe por lo menos una interface que separa a las dos fases, y los valores de

$G_t(2)$ y $G_t(3)$ son proporcionales a las longitudes de las interfaces.

1.3.2. Resultados para un sustrato homogéneo.

Antes de la inclusión de las impurezas en el sustrato, es necesario estudiar en un sistema homogéneo el comportamiento asintótico del parámetro de orden propuesto R_∞ , comparándolos con los resultados obtenidos con otros parámetros de orden como la persistencia o la longitud característica, utilizados por Chatè y colaboradores [20]. La figura 1.5 muestra el valor asintótico del tamaño medio de los dominios promediado sobre 40 realizaciones $\langle R_\infty \rangle$ para una red cuadrada de lado $L = 50$. En éste caso se encuentra, que el valor crítico de acoplamiento $\epsilon_0 = 0,676$, coincide con los resultados obtenidos por Chatè [20]. Pero para este estudio, el parámetro de orden R_t , además de captar la transición de fase del estado inhomogéneo al homogéneo, también da información sobre el tamaño de los dominios.

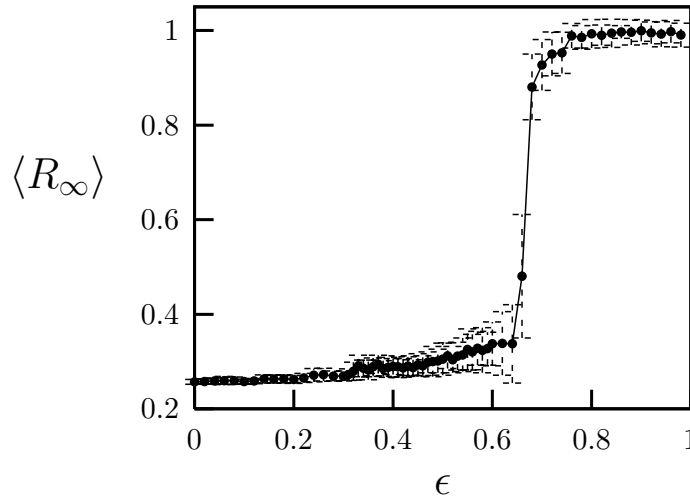


Figura 1.5: Valor asintótico de los tamaño promedio de los dominios $\langle R_\infty \rangle$ en función del acoplamiento ϵ , para $d = \infty$ y $\rho = 0$. El promedio es tomó sobre 40 realizaciones con condiciones iniciales diferentes. Las barras de error corresponden a la desviación estándar calculada sobre las 40 realizaciones.

La figura 1.6 muestra los valores en el equilibrio de $G_\infty(k)$ en función del acoplamiento ϵ . Se observa que los valores de $G_\infty(2)$ y $G_\infty(3)$, decaen significativamente en el valor crítico ϵ_0 , mientras que los el valores de $G_\infty(0)$ y $G_\infty(1)$ presentan un crecimiento para $\epsilon \geq 0,9$. En particular los valores de $G_t(0)$ presentan un incremento significativo para valores elevados del acoplamiento ϵ , lo cual indica que existen zonas en el sistema donde la estructura de equilibrio resultante, es semejante a la de un tablero de ajedrez. Angelini, con una dinámica local diferente y para valores de acoplamientos más bajos [21], consigue que esta estructura cubra todo el sistema y la llamó antiferromagnética. En este caso el hecho de que la fracción de elementos con todos sus vecinos en fase contraria, se presenta con $0 < G_\infty(0) < 1$, lo cual indica que es posible hallar este tipo de estructuras de tablero de ajedrez en pequeñas regiones del sistema y no necesariamente cubriendo la totalidad del sistema como lo reportó Angelini [21].

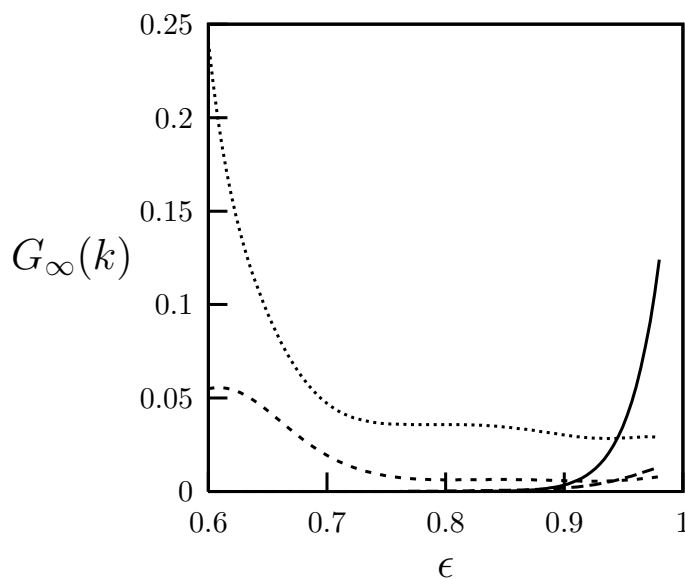


Figura 1.6: El valor de la fracción $G_\infty(k)$ versus ϵ para $(\rho = 0)$. $G_t(0)$ es la línea continua, $G_t(1)$ es la línea larga interrumpida, $G_t(2)$ la línea corta interrumpida y $G_t(3)$ la línea punteada. Los valores mostrados corresponden a un promedio sobre 40 realizaciones de condiciones iniciales.

La estructura de ajedrez aparece tanto por razones dinámicas como estructurales. La razón dinámica proviene del hecho que la forma de los extremos del mapa de retorno de Miller–Huse con $\mu = 1,9$, permite que en una iteración el estado del mapa cambie de signo. Si a esta característica le agregamos un acoplamiento fuerte, es decir, que los estados de la celdas dependan del estado de sus vecinos más que de su propio estado, cuando una celda esté rodeada por celdas en fase contraria, la celda central se mantiene en la fase contraria a la de sus celdas vecinas y esta configuración permanece estable. Por otro lado, estructuralmente la red cuadrada de primeros vecinos tiene un clustering nulo, es decir, que los vecinos de un nodo no son vecinos entre sí, por lo que no hay influencia entre ellos. Lo anterior no sucede para redes con otras geometrías, como la hexagonal o si se usa una vecindad más amplia.

1.3.3. Resultados para un sustrato con impurezas.

Para obtener los resultados de esta sección se mantiene fijo el parámetro de la dinámica local en $\mu = 1,9$, usando las condiciones iniciales como se indicó en la sección 1.1.2, para un tamaño de sustrato $L = 50$, con condiciones periódicas y con una densidad de celdas inactivas ρ , las cuales son distribuidas según se indica en 1.1.1. La figura 1.7 muestra los patrones estacionarios emergentes en el sistema a diferentes valores de parámetros ρ y ϵ . Las imágenes superiores muestra que el tamaño promedio de los dominios decrece cuando la densidad de impurezas en el sistema se incrementa, mientras que las inferiores, revelan la que para valores grandes de acoplamiento ϵ emergen dominios complejos semejante al de un tablero de ajedrez, donde ambas fases coexisten, también llamados antiferromagnéticos por Angelini [21].

Para comprender estos patrones se hace un análisis con del comportamiento del sistema en el tiempo t , encontrando que el tamaño promedio de la fase se incrementa al transcurrir el tiempo, como $\langle R_t \rangle \sim t^\alpha$, donde el exponente α caracteriza la velocidad de crecimiento. En la figura 1.8 se muestra la evolución de $\langle R_t \rangle$ para dos distancia diferentes entre las impurezas d con $\epsilon = 0,73$ y sobre un promedio de 40 realizaciones. Se observa que el crecimiento de la

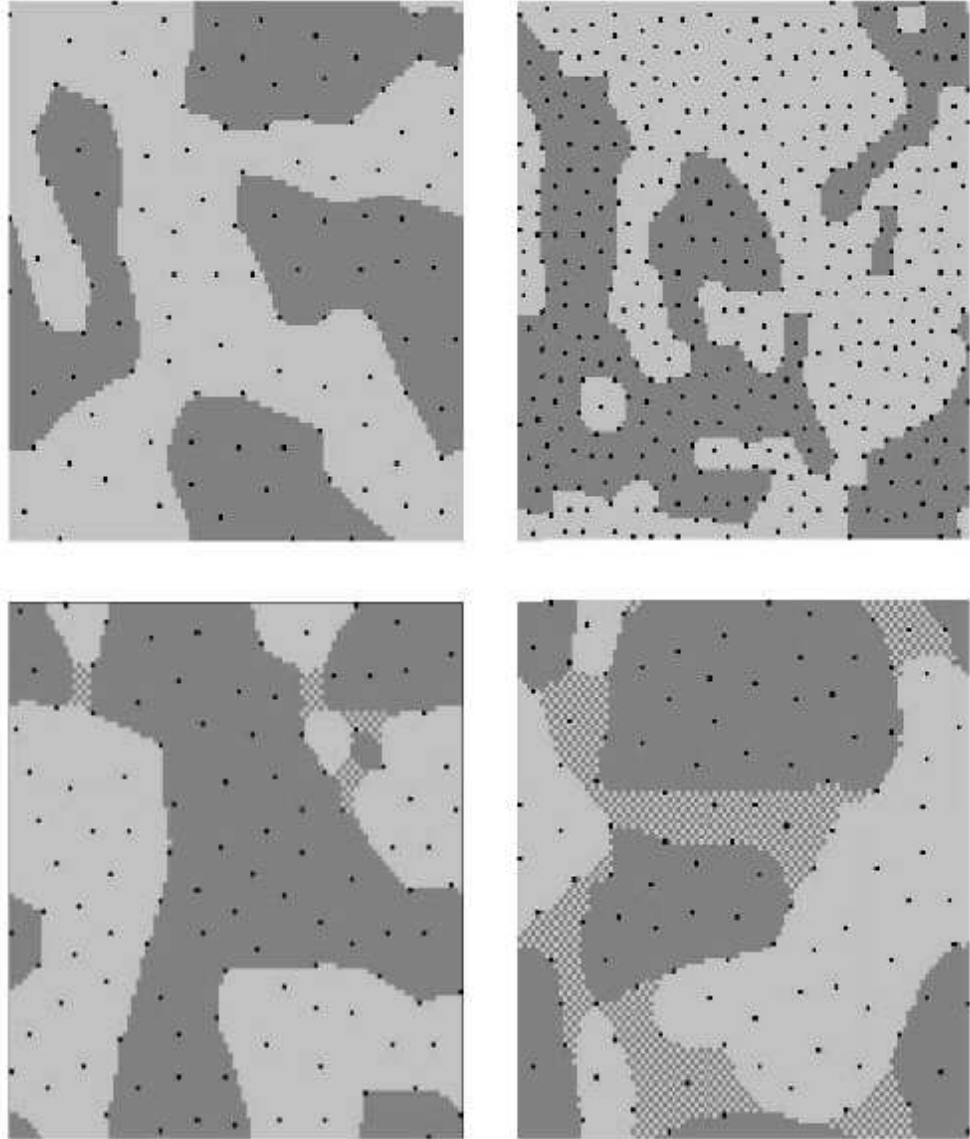


Figura 1.7: Fotografía de la formación de patrones de una red de tamaño 100×100 con impurezas, para diferentes valores de parámetros. Arriba a la izquierda: $\rho = 0,0097$ ($d = 8$), $\epsilon = 0,73$. Arriba a la derecha: $\rho = 0,039$ ($d = 4$), $\epsilon = 0,73$. Abajo a la izquierda: $\rho = 0,0097$ ($d = 8$), $\epsilon = 0,73$. Abajo a la derecha: $\rho = 0,0097$ ($d = 8$), $\epsilon = 0,98$.

fase presenta dos regímenes bien diferenciados durante su evolución en el tiempo. A tiempos cortos, $t \lesssim 100$ iteraciones, se tiene que $\langle R_t \rangle \sim t^{\alpha_1}$, con el exponente $\alpha_1 \approx 0,071$ que no es apreciablemente afectado por la presencia de las impurezas. Para tiempos mayores, el comportamiento de escala cambia a $\langle R_t \rangle \sim t^{\alpha_2}$, con $\alpha_2 > \alpha_1$, indicando que el crecimiento de los dominios es más rápido en este régimen, y donde claramente se aprecia que α_2 depende de la densidad de las celda inactivas.

La figura 1.8 evidencia que el tamaño promedio de los dominios resultantes es significativamente reducido por la presencia de impurezas, en concordancia con otros comportamientos de sistemas biestables sobre medio heterogéneos [4]. También, este resultado es comparable con modelos teóricos y datos experimentales de fluidos binarios, los cuales muestran restric-

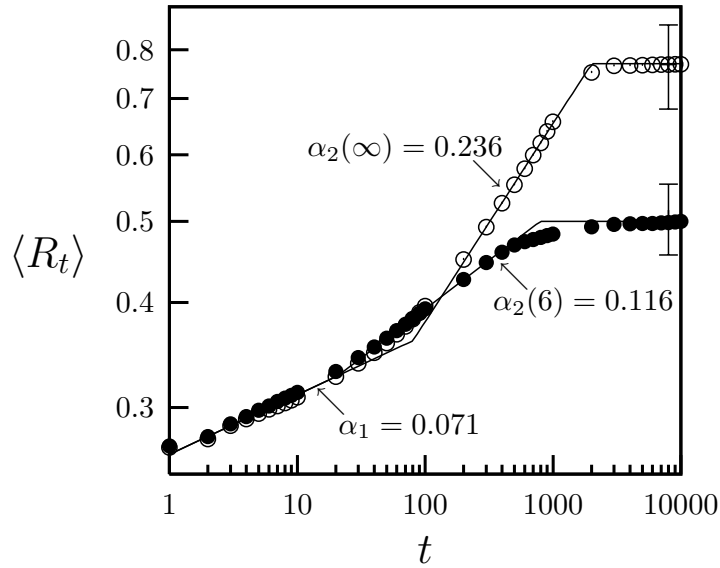


Figura 1.8: *En una escala log-log. El tamaño promedio de los dominios $\langle R_t \rangle$ como función del tiempo t para $d = \infty$ ($\rho = 0$) (círculos vacíos), y $d = 6$ ($\rho = 0,017$) (círculos sólidos), con $\epsilon = 0,73$ fijo, para un promedio de 40 realizaciones de condiciones iniciales. El valor de los exponentes de escalamiento α_1 y α_2 . La barra de error típica es indicada en cada curva.*

ciones en el crecimiento de la fase cuando existe la presencia de impurezas [3, 24].

Para comprender el origen de los dos regímenes de crecimiento se estudia la estabilidad de las configuraciones locales de las dos fases. Esto se consigue mediante el cálculo de la fracción de celdas con k vecinos en fase contraria en el instante t , $G_t(k)$, dada por la ecuación 1.4. Para las mismas condiciones de la figura 1.8, la figura 1.9 muestra $G_t(k)$ para $k = 0, 1, 2$ y 3 , en un sistema sin impurezas y en un sistema con impurezas. Se observa que, en ambos casos, $G_t(0)$ y $G_t(1)$ decae hasta cero luego de $t \approx 100$ iteraciones. Así, el decaimiento en el número de configuraciones locales asociadas con $k = 0$ y $k = 1$, determina el régimen lento del crecimiento de las fases caracterizado por el exponente α_1 en la figura 1.8. El crecimiento de los dominios en este régimen temprano ocurre por la unión de unidades de celdas a los dominios cuyo tamaño es del orden de una celda. La escala espacial que está involucrada en este proceso, es más pequeña que la distancia mínima entre las celdas inactivas d y por consiguiente, la presencia de las impurezas no afecta el mecanismo de crecimiento de fase y el exponente α_1 no depende de d .

Para $t > 100$ iteraciones, las fracciones $G_t(2)$ y $G_t(3)$ subsisten y decaen a valores asintóticos para ambos casos. El crecimiento de fase en este segundo régimen ocurre cuando los dominios de una misma fase cuyos tamaños promedios son más grandes que una celda, entran en contacto. Este proceso es ilustrado en la figura 1.10. Cuando dos dominios de igual fase consiguen estar separados por una delgada capa, formada por una hilera de celdas en fase contraria, las celdas que se encuentran en esta capa poseen una configuración local descrita por $k = 2$, el acoplamiento de los mapas dinámicos, ecuación 1.1, actúa en la celda con esa configuración local y procede al cambio de su fase, de ésta configuración cambia a otra configuración de tipo $k = 2$ y seguidamente ésta se transforma a una configuración de tipo $k = 3$, para llegar finalmente a la configuración homogénea $k = 4$. Como resultado, los dominios se unen formando un dominio cuyo tamaño promedio es mucho mayor que el tamaño de cada uno de los dominios iniciales. A través de este mecanismo de crecimiento, el tamaño de las fases en el sistema se incrementa más rápidamente que para los procesos suce-

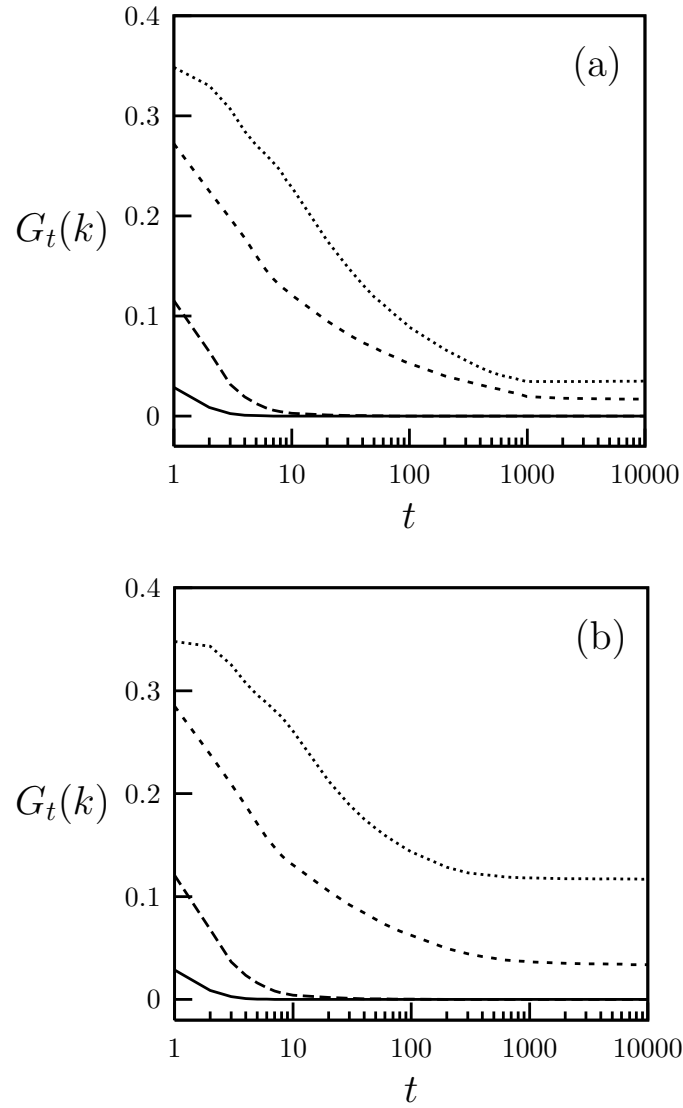


Figura 1.9: El valor de $G_t(k)$ en función del tiempo t . $G_t(0)$ línea continua, $G_t(1)$ línea interrumpida de segmentos largos, $G_t(2)$ línea interrumpida de segmentos cortos y $G_t(3)$ línea punteada. (a) para $d = \infty$. (b) para $d = 6$ y $\epsilon = 0,73$ para ambos casos.

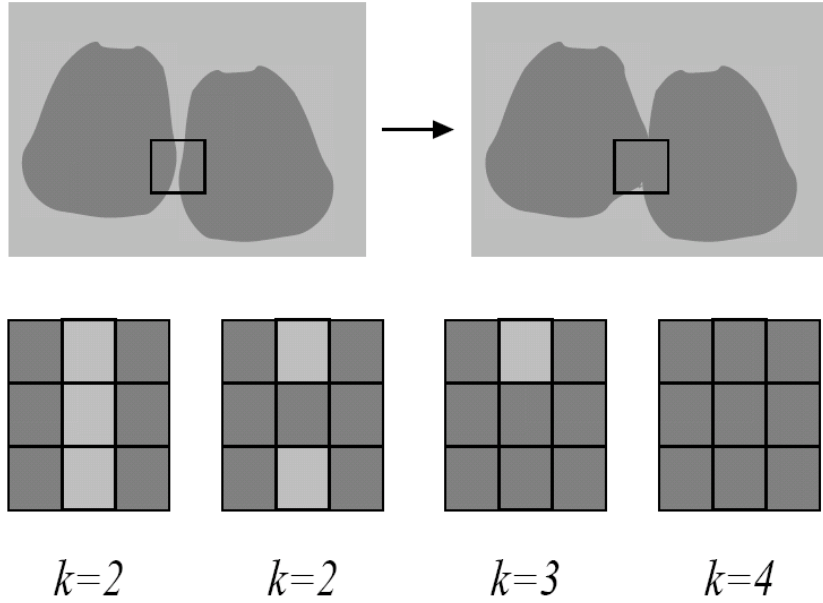


Figura 1.10: Arriba: Mecanismo de crecimiento rápido cuando dos dominios de la misma fase entran en contacto para formar un dominio más grande. La flecha indica la dirección del tiempo. Abajo: Los cambios de las configuraciones locales que ocurren en el recuadro marcado y son ilustrados en detalle en el panel inferior.

sivos de unión de las celdas solitarias, involucradas en el crecimiento a tiempos tempranos. La diferencia en la velocidad de crecimiento del dominio de las fases en estos dos regímenes se manifiesta por el hecho de que $\alpha_2 > \alpha_1$.

Cuando las celdas inactivas están presentes y el tamaño promedio de los dominios es comparable a la distancia mínima entre impurezas d , existe una alta probabilidad que algunas impurezas se encuentren en la interface. Estas impurezas dificultan la transformación de las configuraciones locales $k = 2$ a las configuraciones $k = 3$ y $k = 4$ descritas anteriormente. Consecuentemente, el crecimiento de las fases es más lento, y las fracciones $G_t(2)$ y $G_t(3)$ alcanzan valores asintóticos más grandes en presencia de las impurezas como se manifiesta en la figura 1.9 (b). Por consiguiente, el tamaño asintótico promedio de los dominios para

$\rho \neq 0$ es más reducido que para $\rho = 0$, como también se muestra en la figura 1.7.

La figura 1.11 muestra como los exponentes de crecimiento α_1 y α_2 son afectados por el parámetro de acoplamiento ϵ , para dos diferentes valores de densidad de impurezas ρ . Se observa que α_1 incrementa suavemente con ϵ y, como se observa en la figura 1.8, este comportamiento no es afectado por la presencia de las celdas inactivas. Por otra parte, el exponente α_2 aparece para valores de ϵ_c mayores que un ϵ_0 , y su comportamiento depende de ambos parámetros ϵ y ρ .

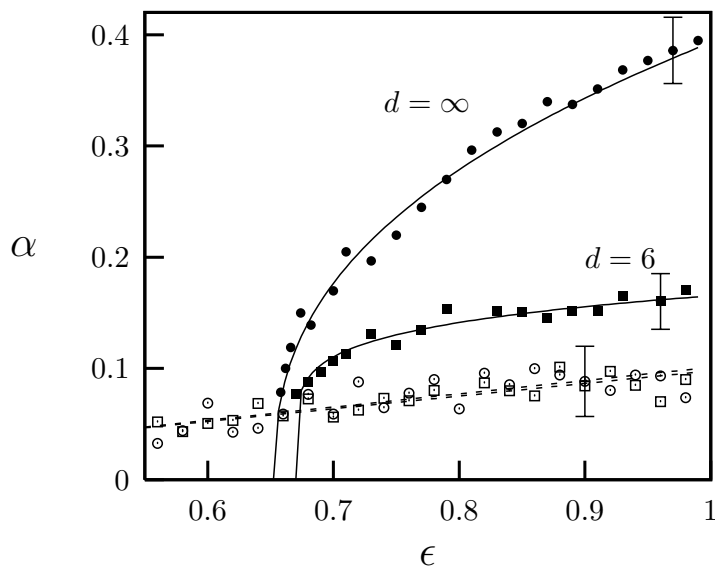


Figura 1.11: El exponente de crecimiento de fase α_1 (línea segmentada) y α_2 (línea continua) como función de ϵ para diferentes valores de d . Los valores muestran los promedios obtenidos sobre 40 realizaciones de condiciones iniciales para cada valor de ϵ . Los círculos vacíos (\circ): α_1 para $d = \infty$ ($\rho = 0$). Cuadros vacíos (\square): α_1 para $d = 6$ ($\rho = 0,017$); círculos sólidos (\bullet): α_2 para $d = \infty$ ($\rho = 0$); círculos sólidos (\blacksquare): α_2 para $d = 6$. La típica barra de error se muestra sobre cada curva.

La figura 1.12 muestra el exponente α_2 calculado para el espacio de parámetros (ϵ, d) .

Dicha figura resalta un contorno crítico $\epsilon_c(d)$, que separa el régimen donde el crecimiento rápido ocurre, caracterizado por $\alpha_2 > 0$, del régimen donde sólo el crecimiento lento se hace presente, correspondiente a $\alpha_2 = 0$, en el plano (ϵ, d) . Cerca del contorno crítico $\epsilon_c(d)$, el exponente α_2 puede ser descrito por una relación de escala $\alpha_2 \sim (\epsilon - \epsilon_c)^\gamma$, donde γ también depende del parámetro d , o lo que es equivalente, de la densidad de impurezas ρ .

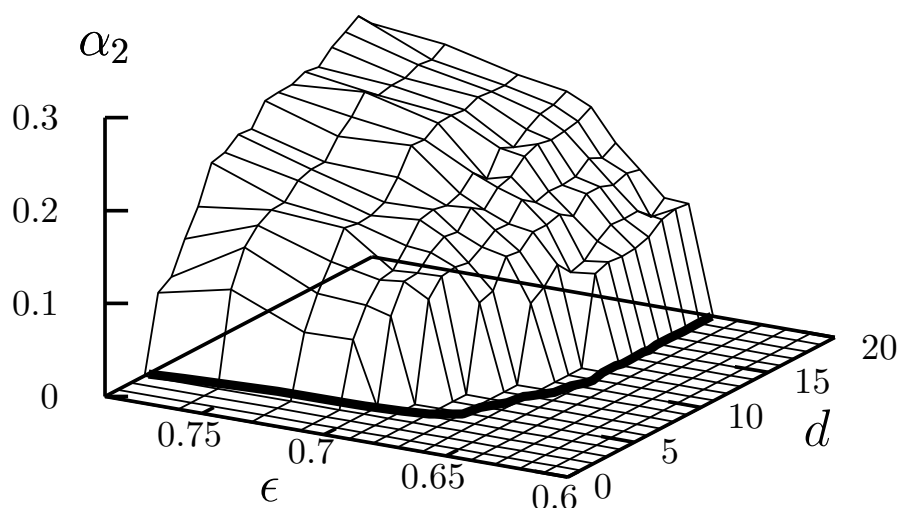


Figura 1.12: El exponente de crecimiento rápido α_2 como función de ϵ y d . El comportamiento crítico de $\epsilon_c(d)$ que separa el régimen del crecimiento rápido del régimen del crecimiento lento es indicado por línea continua gruesa en el plano (ϵ, d) . Los valores son obtenidos como en la figura 1.11.

La figura 1.13 muestra el comportamiento del exponente crítico de γ en función de la distancia d . El exponente γ puede ser bien ajustado por una relación de escala $\gamma(d) \sim (d - d_c)^\theta$, donde $d_c \approx 4,0$ y $\theta \approx 0,45$. Para valores por debajo de $d_c \approx 4$. ($\rho = 0,039$) no existe el régimen de crecimiento rápido.

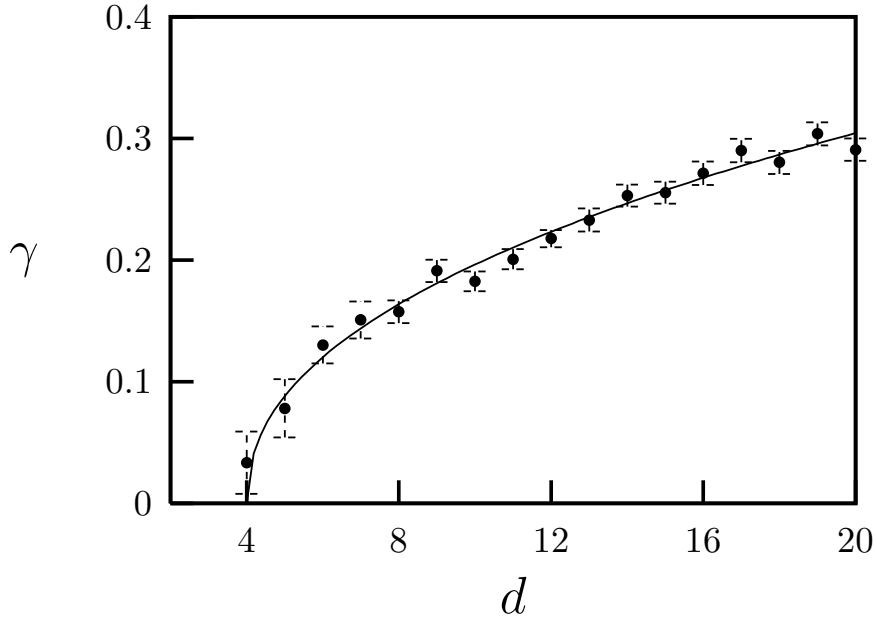


Figura 1.13: *El exponente crítico γ como una función de la distancia entre las impurezas d . obtenido sobre un promedio de 40 realizaciones de condiciones iniciales para cada valor del parámetro. Las barras de errores son mostradas.*

La figura 1.14 resume el comportamiento colectivo de la red de mapa acoplado con dinámica biestable en presencia de celdas inactivas. Esta figura muestra el diagrama de fase del sistema en el espacio de parámetros (ϵ, d) , indicando las regiones donde el sistema es homogéneo (una fase), heterogéneo (las dos fases coexisten). Así como la región donde emergen dominios tipo tablero de ajedrez o estructuras antiferromagnéticas. El contorno crítico $d_c(\epsilon)$ para la división del régimen del crecimiento rápido de dominios ($\alpha_2 > 0$) también está indicado en este plano mediante la línea segmentada.

La transición entre la fase heterogénea a la homogénea para valores de $\epsilon > \epsilon_0$, puede ser descrita mediante dado por la relación de escala $\langle R_\infty \rangle \sim (d - d_c)^{\beta(\epsilon)}$, donde d_c es el valor

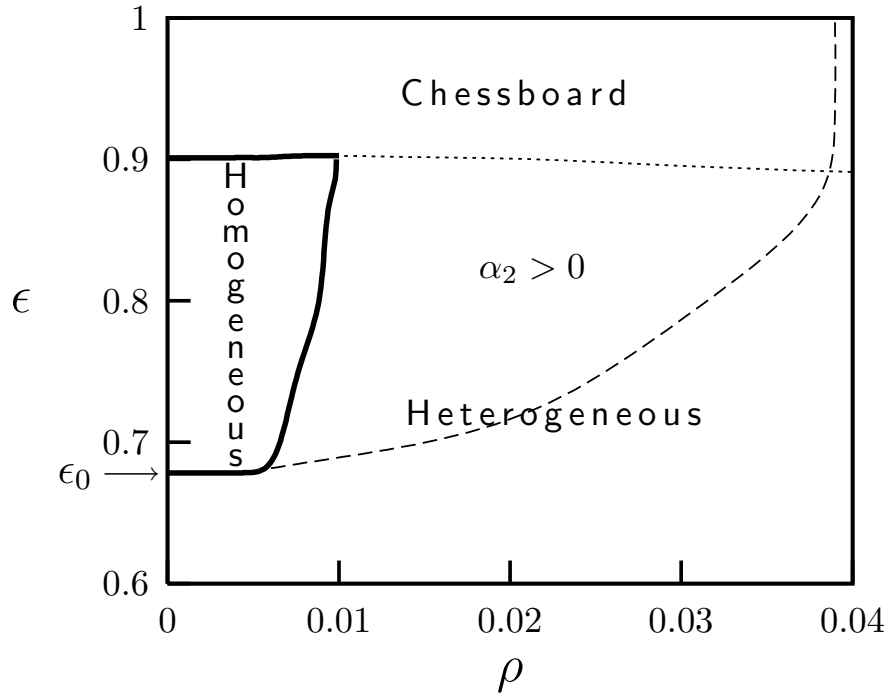


Figura 1.14: Diagrama de fase de el sistema de la ecuación 1.1 en el espacio de parámetros de (ϵ, ρ) . Las regiones donde es homogéneo, heterogéneo y pasee estructura tipo tablero de ajedrez existe, están indicadas por las etiquetas. La línea interrumpida indica el contorno crítico que divide el régimen de crecimiento rápido de los dominios caracterizado por $\alpha_2 > 0$. El valor crítico ϵ_0 a partir del cual se suceden los crecimientos de dominios en ausencia de impurezas es marcada sobre el eje vertical.

crítico de la distancia mínima a la cual la transición ocurre, y β es un exponente crítico que caracteriza esta transición.

La figura 1.15 muestra el comportamiento del exponente crítico β en función de ϵ . Existe un valor crítico del acoplamiento $\epsilon_c \approx 0,855$ a partir del cual β cambia de ser un valor constante de $\beta \approx 0,24$ a tener una relación de escala $\beta \sim (\epsilon - \epsilon_c)^{\gamma_R}$, donde $\gamma_R \approx 0,25$ es un exponente crítico que caracteriza la transición. Dicha transición está relacionada con la emergencia de la configuración de dominios inducidos por fuerte acoplamiento en presencia

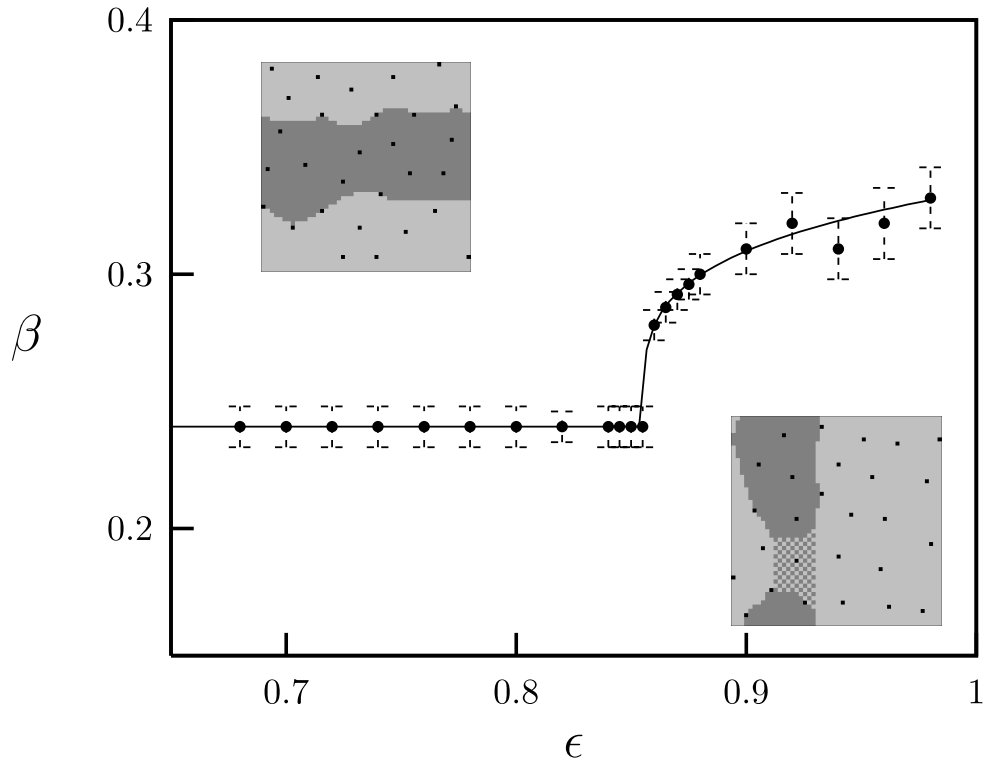


Figura 1.15: El valor del exponente crítico β como función del acoplamiento ϵ . Las dos configuraciones congeladas del sistema para $\epsilon < \epsilon_c$ (izquierda) y para $\epsilon > \epsilon_c$ (derecha). Los colores claro y el oscuro representa cada fase y los puntos negros corresponden a la impurezas.

de sitios inactivos, donde la coexistencia de sitios alternativos de las dos fases forman regiones con patrones tipo tablero de ajedrez.

1.4. Efecto del incremento de la vecindad en el crecimiento y formación de fases.

Después de estudiar el efecto que tienen las impurezas en el crecimiento y formación de fases sobre una red cuadrada, en esta sección se estudia el efecto que tiene sobre la formación de dominios el cambiar la forma de las celdas en la red de discretización del sustrato. También se estudia como al varía el rango de interacción que posee cada una de las celdas, afecta

la formación y crecimiento de dominios en este tipo de sistema. Este modelo está inspirado por la interacción de un átomo en una red cristalina. Cada átomo interactúa con los átomos que se encuentran en un entorno infinito, con forma circular en el caso de dos dimensiones y esférica en el caso de tres dimensiones.

En las redes de mapas acoplados, el estudio del crecimiento y formación de fases biestables sobre redes regulares se ha hecho con primeros vecinos [17, 18, 20] hasta segundos vecinos [21] y con acoplamiento global [29], observándose entre estos modelos un cambio en los valores críticos de la persistencia en función del acoplamiento. En esta sección se estudia cómo es el comportamiento de los valores críticos de estos sistemas biestables cuando se varía la vecindad de las celdas desde primeros vecinos hasta acoplamiento global. Lind y colaboradores usando redes de mapas acoplados realizaron estudios del efecto que tiene sobre la sincronización la variación de vecindades [25]. Ellos varían el radio de interacción de 1 a $[(L - 1)/2]$ e introdujeron una función controladora de la intensidad de interacción de acuerdo a la distancia. Con lo anterior, estos autores lograron inducir coherencia en las redes de mapas acoplados con dinámicas biestables, y adicionalmente encontraron que el tipo de sincronización que se observa con acoplamiento global, también se puede observar con valores de vecindades considerablemente más bajos. Por otra parte, Ribeiro y Lind estudiaron el efecto que tiene la forma estructural de cada celda de la red sobre la distribución local de estados y en la formación de agregados [26], consiguieron que los efectos geométricos de la red sean significativos, y observaron que algunas estructuras son más cohesivas que otras.

En ésta sección de la tesis, se amplía el rango de interacción y se cambia la forma geométrica de la discretización del espacio, para estudiar los efectos de estas modificaciones, sobre los valores críticos de acoplamiento y los exponentes de la transición entre el estado homogéneo y el heterogéneo. Adicionalmente, se estudia la variación de los exponente de crecimiento α para éstas mismas variables.

1.4.1. Resultados con vecindad variable.

Para estudiar el efecto que tiene el tamaño de la vecindad sobre la formación de dominios, en la figura 1.16 muestra los valores del tamaño medio de los dominios en el estado asintótico $\langle R_\infty \rangle$, calculados con la ecuación 1.3, donde el promedio es hecho sobre 40 realizaciones de condiciones iniciales diferentes, para las diferentes estructuras de discretización y variando el grado de vecindad r_ν y el parámetro de acoplamiento ϵ . Para cada una de las estructuras el lado de la red es $L = 50$, las condiciones de contorno son periódicas. En los tres casos las superficies muestran una transición entre un estado heterogéneo, correspondientes a valores de $\langle R_\infty \rangle$ menores de 0,5; a un estado homogéneo, valores de $\langle R_\infty \rangle$ cercanos a 1,0. La figura 1.17 muestra la frontera entre el estado homogéneo y el heterogéneo del sistema en el espacio de parámetros (ϵ, r_ν) . Esta frontera define el valor crítico del acoplamiento ϵ_c en función del nivel de vecindad r_ν .

Se puede apreciar que cuando los elementos se acoplan solamente con sus primeros vecinos, $r_\nu = 1$, existe una gran diferencia en el valor crítico del acoplamiento ϵ_c de las diferentes estructuras. Para una estructura triangular $\epsilon_c \approx 0,91$, para la cuadrada $\epsilon_c \approx 0,67$ y para la hexagonal $\epsilon_c \approx 0,55$. Pero a medida que se incrementa el nivel de vecindad r_ν , los valores del acoplamiento crítico ϵ_c para las diferentes estructuras se aproximan unos a otros, convergiendo cuando $r_\nu \rightarrow \infty$ a $\epsilon_c \approx 0,35$ en todos los casos. Este último es el valor crítico de acoplamiento para una red de mapas con acoplamiento global obtenido por Álvarez y colaboradores [29]. También, se observa que la diferencia entre los valores críticos de las estructuras triangular y hexagonal es menor que la existente entre estos y los de la estructura cuadrada. Lo anterior es consecuencia de la similitud morfológica existente entre las dos primeras. Para $r_\nu > 12$ el acoplamiento crítico en las tres estructuras es alrededor de $\epsilon_c \approx 0,39$, lo cual indica que para $r_\nu > 12$ los valores de ϵ_c son cercanos al de una red de mapas con acoplamiento global, sin importar la estructura de la discretización. Este fenómeno también se observa en los estudios de sincronización hechos por Lind y colaboradores [25]. La similitud entre los valores críticos del acoplamiento ϵ_c para los tres tipos de estructuras, a partir de un nivel de vecindad $r_\nu \geq 3$,

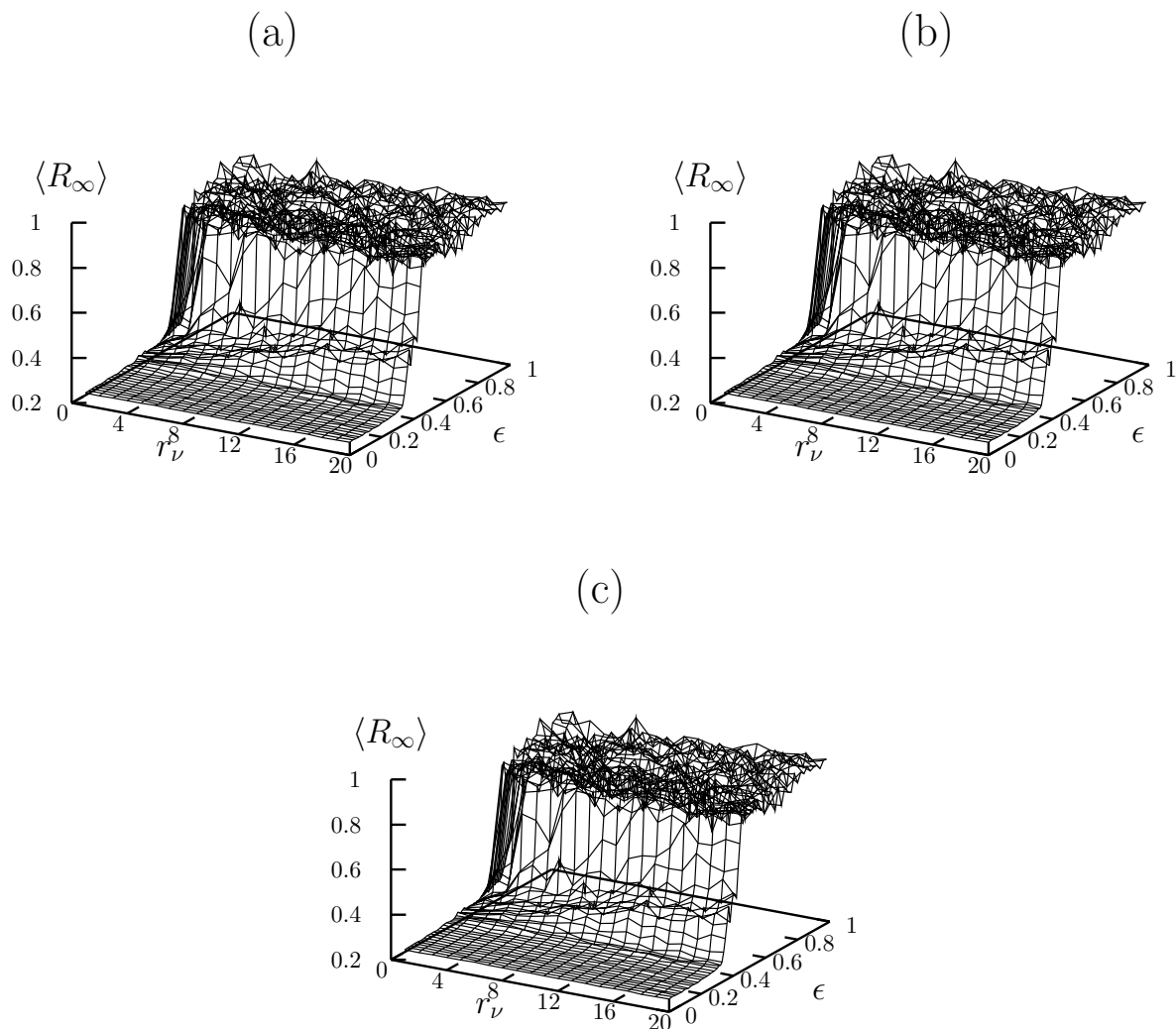


Figura 1.16: *Tamaño medio de las fases $\langle R_\infty \rangle$ en función del parámetro de acoplamiento ϵ y el nivel de vecindad r_ν , para los tres tipos de discretización. (a) triangular, (b) cuadrada y (c) hexagonal. Los valores de $\langle R_\infty \rangle$ son obtenidos usando una red de $L = 50$, con condiciones de borde periódicas y sobre 40 realizaciones con condiciones iniciales diferentes.*

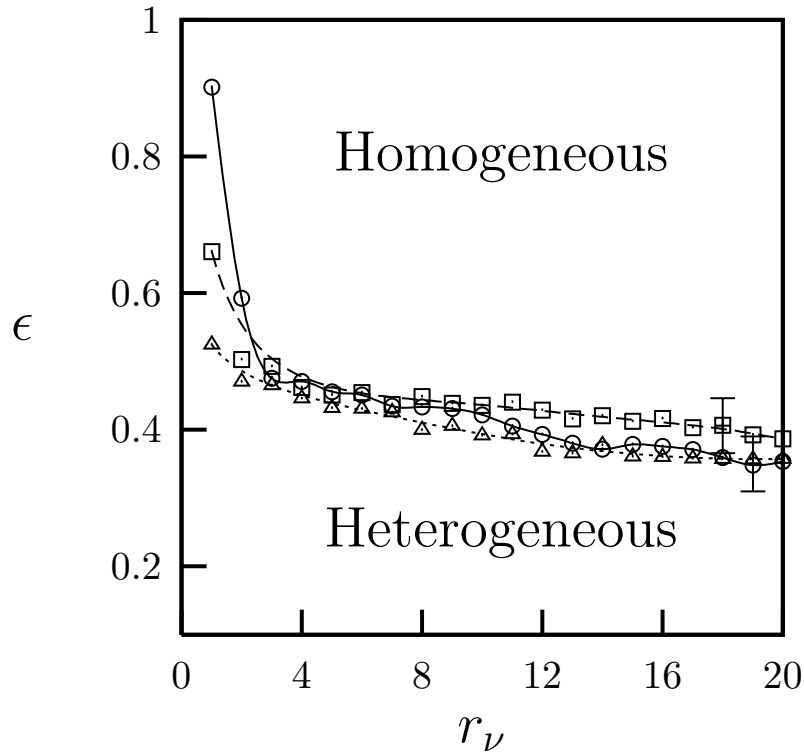


Figura 1.17: Diagrama de fase en el espacio de parámetros (ϵ, r_ν) . Se muestra el valor del acoplamiento crítico ϵ_c como función del nivel vecindad r_ν , para los tres diferentes tipos de discretización, triangular (Δ), cuadrada (\square) y hexagonal (\circ). Las líneas corresponden al mejor ajuste entre los puntos y la barra de error típica se muestra en cada curva y es obtenida sobre 40 realizaciones de condiciones iniciales.

es consecuencia de que a medida que r_ν aumenta las vecindades poseen un mejor ajuste a una circunferencia, y la diferencia en la cantidad de vecinos de una estructura a otra se hace menos significativa.

La figura 1.18 muestra la transición del estado heterogéneo al estado homogéneo, caracterizada por el tamaño medio de las fases $R_\infty(r_\nu)$. En ella se aprecia que la transición sigue la ley de escala

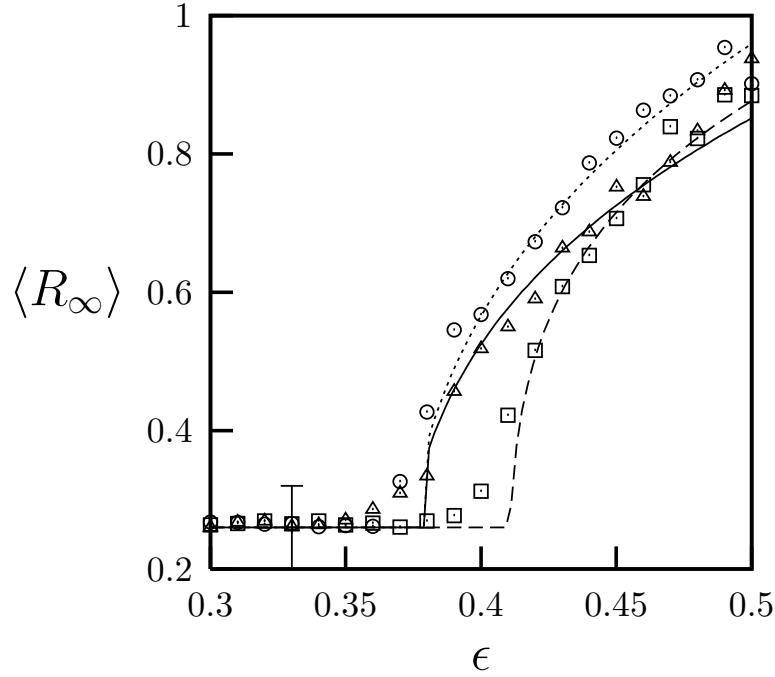


Figura 1.18: *Tamaño medio de las fases $\langle R_\infty \rangle$ como función del parámetro de acoplamiento ϵ , para un nivel de vecindad $r_\nu = 16$ y con los tres tipos de discretización, triangular (Δ), cuadrada (\square) y hexagonal (\circ). Las líneas corresponden al mejor ajuste de la ecuación 1.6. Los valores son obtenidos con 40 realizaciones de condiciones iniciales.*

$$R_\infty(r_\nu) \sim (\epsilon - \epsilon_c(r_\nu))^{\beta_\nu}, \quad (1.6)$$

donde, $\epsilon_c(r_\nu)$ es el valor crítico del acoplamiento que a su vez depende del nivel de vecindad como se mostró en la figura 1.17.

En la figura 1.19 se muestra la variación del exponente crítico β_ν de la transición (ecuación 1.19 en función del nivel de vecindad r_ν . Se aprecia que mientras los valores de r_ν son bajos, la magnitud del exponente de transición se mantiene constante, pero a partir de un cierto valor de r_ν surge una dependencia del exponente crítico β_ν con la forma de la discretización y el nivel vecindad. A partir de dicho valor, β_ν se incrementa de tal manera que el mejor

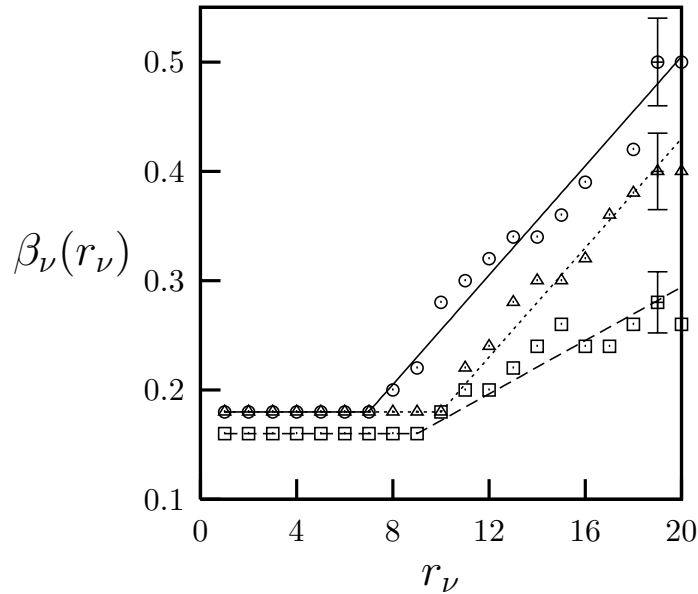


Figura 1.19: El valor de β_ν como función del nivel de vecindad r_ν . Para los tres diferentes tipos de discretización, triangular (Δ), cuadrada (\square) y hexagonal (\circ). Las líneas corresponden al mejor línea que pasa por los puntos, punteada para la triangular, cortada para la regular y continua para la hexagonal. Los valores son obtenidos sobre 40 realizaciones de condiciones iniciales.

ajuste en cada caso es una recta con pendiente positiva m_Δ , m_\square y m_\circ para la discretización triangular, cuadrada y triangular respectivamente. Cabe destacar que la pendiente m_Δ y m_\circ , que corresponden a las estructuras triangular y hexagonal, son $m_\Delta \approx m_\circ \approx 0,025$. En cambio, para la discretización cuadrada la pendiente es $m_\square \approx 0,012$. Este comportamiento del exponente crítico es consecuencia de la semejanza morfológica entre la discretización triangular y la hexagonal que permite contruir con la estructura triangular una estructura hexagonal, mientras que la estructura cuadrada no posee esta característica y esto se refleja en una pendiente m_\square diferente de m_Δ y m_\circ .

1.4.2. Análisis de la dinámica con vecindad variable.

Al igual que en la sección 1.3, en esta sección se estudia la dinámica de la formación de dominios, pero ahora se varía la estructura de discretización y el nivel de vecindades r_ν de la red y se calculan los exponentes de crecimiento α_1 y α_2 . En la figura 1.20 se muestran los exponentes de crecimiento α_1 y α_2 en función del parámetro de acoplamiento ϵ y el nivel de vecindad r_ν para los tres tipos de discretización. Estos exponentes de crecimiento reflejan los dos mecanismos de crecimiento que se explicaron en detalle en la sección 1.3.3. Aquí se observa que existe un cambio en la ley de crecimiento de las fases para la estructura cuadrada (figura 1.20 b) y hexagonal (figura 1.20 c) pero no para la estructura triangular (figura 1.20 a). Esto indica que sólo en las dos primeras estructuras aparecen los dos mecanismos de crecimiento, mientras que en la estructura triangular no. Además, se observa una clara diferencia entre los valores de α_1 y α_2 para las tres formas de celdas. Para los sistemas con estructura triangular, ambos exponentes de crecimiento son nulo en todo rango de niveles de vecindad r_ν , en cambio, para los sistemas con celdas cuadradas o hexagonales, ambos exponentes están presentes y en estos dos tipos de discretización α_1 incrementa su valor al aumentar r_ν , mientras que α_2 lo disminuye. Es de notar que para la red cuadrada con $r_\nu = 1$ el comportamiento de los exponentes α_1 y α_2 es el mismo que se observa en la figura 1.11 para un medio homogéneo, es decir, una red con $d = \infty$. En los sistemas con estructura cuadrada y hexagonal el incremento que se observa en α_1 con el incremento del nivel de vecindad r_ν se debe a que el crecimiento de los dominios asociado a este exponente, está relacionado al cambio de fase de regiones al tamaño de las regiones vecindad, y como la vecindad se incrementa con r_ν , el exponente de crecimiento también lo hace. En particular, en estructuras con celdas hexagonales el incremento del exponente α_1 es mayor, ya que el número de vecinos crece más rápidamente al variar el nivel de vecindad en una unidad. En cambio, en estos dos casos el exponente α_2 , asociado al crecimiento por fusión de dominios, disminuye con el incremento de r_ν . Esto se debe a que al incrementarse la vecindad la formación de la interface se hace más difícil, ya que la misma se desestabiliza por las interacciones de largo alcance y cualquier perturbación en el sistema puede romper la interface y en consecuencia destruir los dominios.

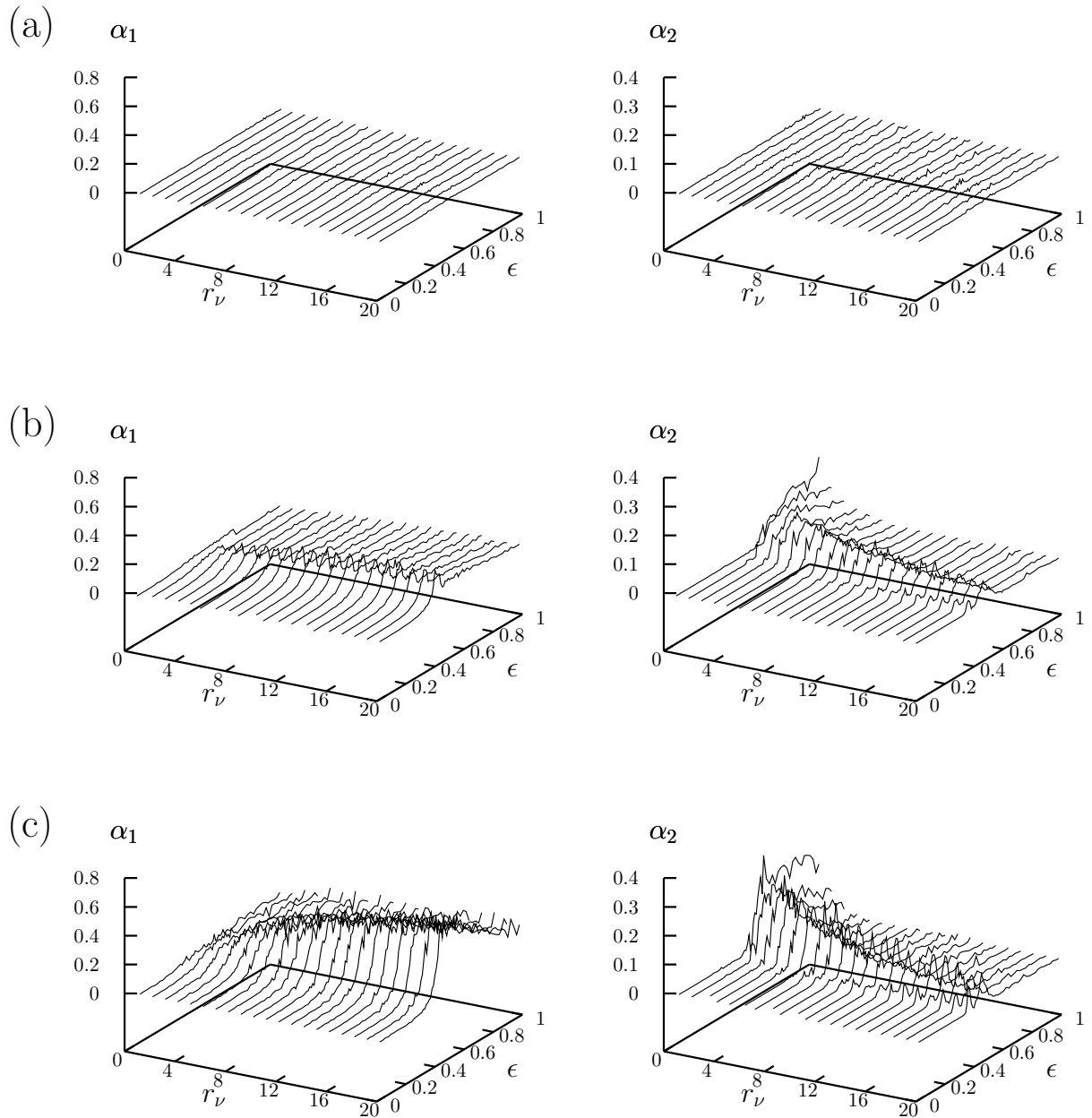


Figura 1.20: Exponentes α_1 (izquierda) y α_2 (derecha) en función del acoplamiento ϵ y el nivel de vecindad r_ν para diferentes tipos de estructuras de discretización. Fila (a) triangular. Fila (b) cuadrada. Fila (c) hexagonal. Los valores son obtenidos con un sistema de tamaño 50 con condiciones de borde periódicas y sobre 40 realizaciones con condiciones iniciales diferentes.

Para explicar la razón por la cual en las estructuras triangulares no posee exponentes de crecimiento de dominios, la figura 1.21 muestra el valor de $\langle R_t \rangle$ para la primera iteración, $t = 1$, para las tres estructuras de discretización. En la figura se observa que para la estructura triangular cuando el acoplamiento esté por encima de su valor crítico, el tamaño promedio de los dominios luego de una iteración es aproximadamente del tamaño del sistema. Este comportamiento aparece para todos los niveles de vecindad r_ν , y sin importar si el número de celdas en la vecindad es par o impar. En cambio, para los sistemas con estructura cuadrada luego de una iteración la dinámica sólo ha hecho crecer el tamaño de sus dominios hasta la mitad del tamaño del sistema, y para la estructura hexagonal vemos que la dinámica de crecimiento de dominio aún no ha evolucionado lo suficiente como para observar un exponente de crecimiento. Por el rápido crecimiento que se observa en la estructura triangular no es posible establecer una ley de crecimiento y por consiguiente, no se puede calcular los exponentes de crecimiento.

La velocidad de crecimiento de los dominios en las estructuras triangulares depende exclusivamente del tipo de discretización y es independiente del acoplamiento. La rápida estabilización de los dominios podría ser consecuencia de las características difusivas en medios tortuosos con longitudes de pasos regulares. En este sentido, Grassberger en 1982 estudia la difusión de partículas con movimientos aleatorios en diferentes geometrías de redes [28], específicamente se mide el número evalúa de iteraciones necesarias para que una partícula pueda cruzar su propia trayectoria. En este trabajo se encontró que para una estructura triangular el número de iteraciones está comprendidos entre 14 y 16, para una red cuadrada está entre 20 y 22 y para la estructura hexagonal es superiores a 34. Todos estos resultados fueron obtenidos manteniendo las reglas de movimiento al azar y variando solamente la geometría del sustrato.

Teniendo en cuenta que el acoplamiento en las redes de mapas acoplados es difusivo y

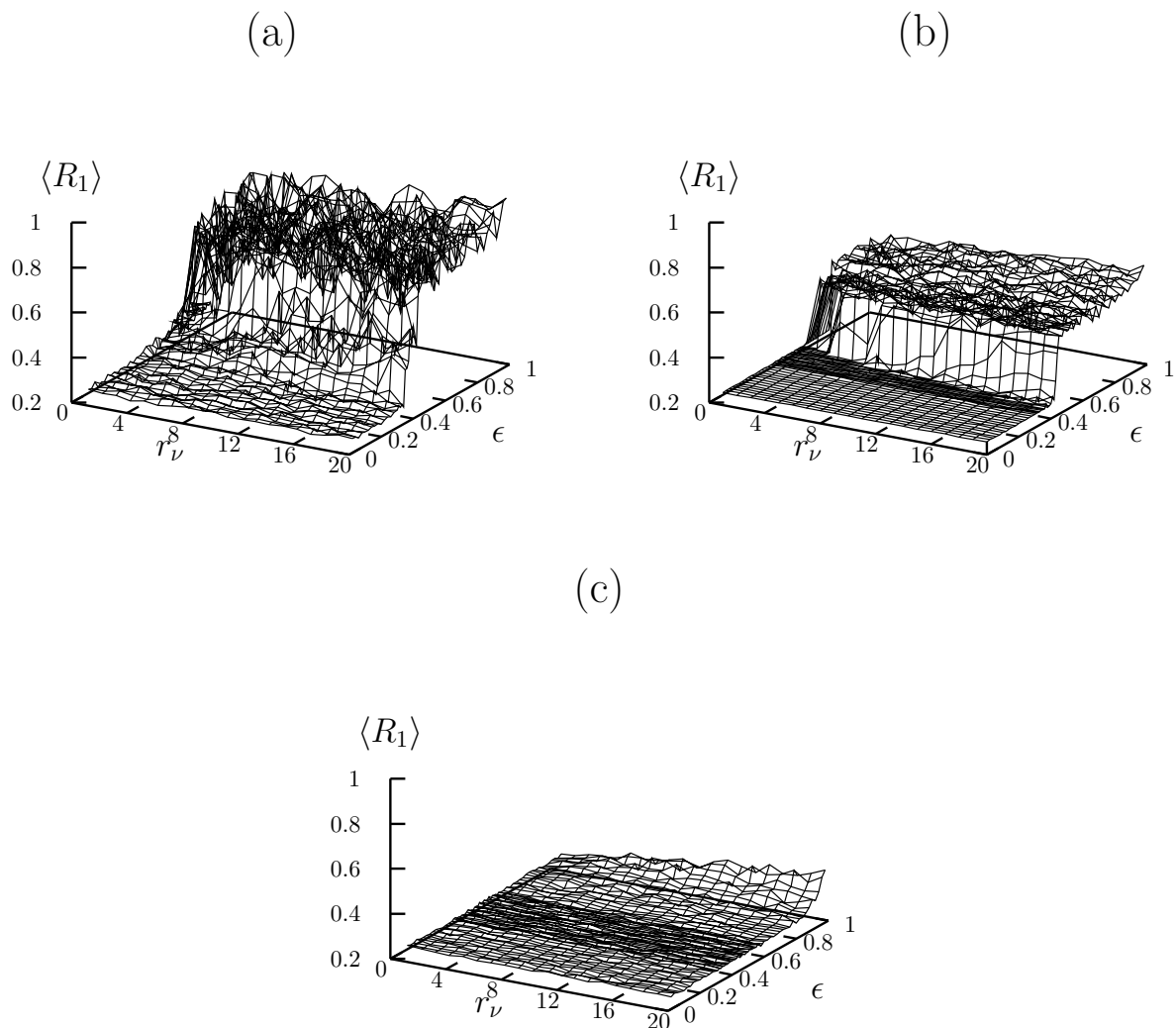


Figura 1.21: *Tamaño medio de las fases $\langle R_1 \rangle$ en función del parámetro de acoplamiento ϵ y el nivel de vecindad r_ν para los tres tipos de discretización. (a) triangular. (b) cuadrada. (c) hexagonal. Los valores son obtenidos sobre 40 realizaciones con condiciones iniciales diferentes.*

que en un sustrato con una estructura triangular una partícula con movimiento aleatorio tienda a estar en una zona del espacio más reducida en comparación con lo que ocurre sobre una estructura cuadrada, y ésta a su vez es más reducida que para una hexagonal; podemos suponer que si la estructura del sustrato presenta una difusión baja como en el caso de las red triangular, el sistema con esta estructura llega a su estado de equilibrio mucho más rápido que para estructuras que presenta de difusión más alta, como es el caso de las redes cuadradas y hexagonales. Esto es equivalente a que la información se transmita a zonas reducidas del sistema y, en consecuencia, al no llegarle información de las regiones más alejadas estas zonas se estabilizan rápidamente.

1.5. Conclusiones.

Se consideró un sistema de mapas caótico biestables acoplados sobre una red regular con sitios inactivos distribuidos aleatoriamente como un modelo para estudiar el proceso de ordenamiento de fases en medios con impurezas. La densidad de impurezas, ρ , se relacionó con la distancia mínima entre las impurezas d . Se mostró con éste modelo que la velocidad con la cual los dominios de fase crecen, disminuye cuando las impurezas están presentes en el sistema. Esto refleja que el tamaño promedio de los dominios resultantes en el estado heterogéneo de el sistema decrece cuando la densidad de impurezas aumenta.

Al estudiar la evolución temporal del crecimiento de los dominios se obtienen dos exponentes de crecimiento. El primero, α_1 , presente en la primeras iteraciones de la evolución, esta asociado al mecanismo de crecimiento por agregación de celdas solitarias a los dominios y no es afectado por la presencia de impurezas. El segundo exponente, α_2 , presente a partir de un tiempo de $t \approx 100$, muestra un crecimiento de dominios más rápido, el cual está asociado a la fusión de dominios y si es afectado por la presencia de impurezas.

También se calculó la frontera crítica que separa el régimen del crecimiento lento de los dominios del régimen del crecimiento rápido en el espacio de parámetros de el sistema (ϵ, d) .

A lo largo de la frontera crítica el exponente de crecimiento rápido α_2 exhibe propiedades de escala para ambos parámetros, manifestado por la existencia de los exponentes críticos γ y θ que se muestra en las figuras 1.12 y 1.13. También se explica la transición entre estos dos regímenes de crecimiento en términos de las propiedades de estabilidad de las configuraciones locales medidas por la fracciones $G_t(k)$.

Por otra parte, para valores altos del acoplamiento ϵ , el sistema muestra un estado heterogéneo complejo, el cual contiene en regiones en que las de dos fases coexisten, formando un dominio espacial semejante a la configuración de un tablero de ajedrez, también llamado estado estado antiferromagnético. Además, se encuentra que la presencia de los patrones tipo tablero de ajedrez no es afectada de manera significativa por la presencia de impurezas. La existencia de estos patrones viene acompañado por una propiedad de escala, reflejada en el exponente crítico β . El diagrama de fases obtenido en la figura 1.14 muestra las regiones en el espacio de parámetros (ϵ, d) donde los diferentes comportamiento del sistema ocurren.

Estos resultados indican que la inclusión de las impurezas puede ser usada como un mecanismo de control para el tamaño y velocidad de crecimiento de los dominios en medios biestables. Al igual que en otros estudios recientes con mapas caóticos en redes complejas [22, 14] los resultados obtenidos indican que la topología de la red puede jugar un rol decisivo en el determinación del comportamiento colectivo emergente como la formación de patrones. Los resultados de este capítulo sugieren que las heterogeneidad espacial también pueden ser empleadas como un mecanismo de selección para generar patrones en sistemas espaciotemporales.

Los valores críticos de acoplamiento para la transición del estado heterogéneo al estado homogéneo convergen a $\epsilon_c \approx 0,35$ al aumentar el nivel de vecindad de interacción r_ν . Esto ocurre sin importar la estructura de discretización que se esté empleando. Sin embargo, para $r_\nu = 1$ y $r_\nu = 2$ los valores críticos de acoplamiento de la transición ϵ_c para cada una de las es-

estructuras empleadas difieren significativamente, mostrando que dichos valores críticos no son universales como lo indicó Chatè y colaboradores [20]. Los valores críticos del acoplamiento para la red de mapas acoplados con nivel de vecindad $r_\nu > 12$ se acerca a su valor asintótico, lo cual concuerda con el acoplamiento crítico que aparece para redes de mapas globalmente acoplados. Además, los valores de acoplamiento crítico son aproximadamente los mismos a partir de una vecindad de $r_\nu > 3$. En cuanto a los exponentes críticos de la transición, existe para cada tipo de discretización un valor de nivel de vecindad r_ν a partir del cual éstos se incrementan al aumentar el nivel de la vecindad de interacción.

Como el acoplamiento en el modelo de redes de mapas acoplados usado es difusivo y la difusión se ve afectada por la tortuosidad del medio [28], los transientes en estos sistemas podrían verse muy afectados por el cambio de las estructuras en la discretización del medio. Los exponentes de crecimiento para la red triangular, la estructura más tortuosa de las tres, no pudieron ser observados debido a que la dinámica del sistema alcanza el 95 % de su estado asintótico luego de una iteración. En cambio, para las estructuras cuadradas y hexagonales, cuyas tortuosidades son menores, se obtuvieron los dos valores de los exponentes de crecimiento α_1 y α_2 y se calcularon los cambios de escala en las leyes de crecimiento. El hecho de obtener los dos exponentes de crecimiento evidencia la existencia de los en el mecanismo de crecimiento, agregación de celdas solitarias y fusión de dominios, en cada una de éstas redes. El valor del exponente de crecimiento α_1 se incrementa con el aumento del nivel de vecindad r_ν , gracias a que la agregación de una celda al dominio de la fase se realiza a una distancia mayor, mientras que, el exponente α_2 se hace más pequeño con r_ν porque las interfaces son más difíciles de estabilizar debido a las interacciones de largo alcance.

Las muchas promesas disminuyen
la confianza.
Quinto Horacio Flaco

Capítulo 2

Sistema social multicultural sobre medios heterogéneos.

Algunos procesos sociales son similares a procesos físicos comunes, por ejemplo: las agregaciones de coloides en solución se asemejan a las agregaciones de bancos de peces en el mar; las migraciones de iones cargados cuando se activa un campo eléctrico externo se parece a la huida de las aves cuando perciben un peligro; la sincronización de los átomos en el proceso de emisión láser posee el mismo comportamiento de la sincronización del encendido de las luces de las luciérnagas. Estas similitudes ha provocado que algunos investigadores se estén dedicando a la tarea de caracterizarlos a través de propiedades físicas ya conocidas. Para tal fin se han desarrollado modelos que logran reproducir ciertos comportamientos sociales colectivos. Uno de éstos investigadores es Robert Axelrod [16] quien propone un modelo de autómatas celulares [11, 13] para la interacción cultural. Su modelo permite estudiar cómo los individuos son capaces de influenciarse entre sí para asemejarse cada vez más y por qué esta influencia no siempre conduce a la homogeneidad.

Entender cómo un cultura puede establecerse, extenderse y sostenerse, tiene mucha im-

portancia en el mundo de hoy. Con los resultados de los modelos se puede intentar responder preguntas como por ejemplo si el inglés se volverá un idioma universal, si las nuevas tecnologías pueden imponerse, si alguna canción o vestido se pondrá de moda o si un grupo minoritario podrá sobrevivir.

El modelo de interacción cultural de Axelrod exhibe un comportamiento de transición de fase fuera del equilibrio entre dos estados finales: el ordenado, un estado cultural homogéneo global; y el desordenado, un estado culturalmente fragmentado [27, 30, 31, 32]. Algunas modificaciones o extensiones del modelo se han realizado recientemente. Por ejemplo, el arrastre cultural modelado con ruido que actúa sobre configuraciones desordenadas congeladas [33], el efecto de medios de comunicación de masa es considerado como un campo externo [34] o como una influencia autónoma que actúa sobre el sistema [35, 36]. Los efectos de la topología de las redes sociales de interacción también han sido investigadas en [31, 37, 38].

En particular, en este capítulo se emplea el modelo de interacción cultural de Axelrod para estudiar la influencia que tiene la heterogeneidad del sustrato en la formación de dominios culturales. Para tal fin se estudia el sistema con dos tipos de impurezas, el primer tipo corresponde a celdas sin actividad que asemajan accidentes geográficos, mientras que el segundo tipo viene dado por celdas que influyen en sus vecinos pero estos no influyen en ellas y representan a líderes.

2.1. Modelo de multicultural de Axelrod.

Un de los tantos problemas interesantes que se plantean los sociólogos es el origen y persistencia de la diversidad cultural en una sociedad. En torno a este tópico se han desarrollado diversos modelos cualitativos y cuantitativos. Robert Axelrod [16], para estudiar este fenómeno, introduce un modelo dinámico conceptualmente simple, tipo autómatas celulares, basado en agentes que interactúan entre sí, el cual permite estudiar el mecanismo de

competencia entre la monoculturalidad y la multiculturalidad de un sistema social. Con este modelo Axelrod responde, en forma general, cuáles son los factores esenciales que determinan que un sistema social sea monocultural o multicultural. Robert Axelrod comienza su artículo con la pregunta [16]:

”if people tend to become more alike in their beliefs, attitudes and behavior when they interact, why do not all differences eventually disappear?”

Para responder a esta pregunta, Axelrod desarrollo un modelo de dinámica cultural basado en dos premisas simples:

1. La probabilidad de interacción entre individuos es proporcional al número de atributos culturales que ellos comparten.
2. La interacción entre individuos incrementa su similitud cultural.

Estos nos dice que dos personas tienden a interactuar mientras tengan, al menos, algo en común. Además, esta interacción lleva a un aumento en la similitud entre las personas que interactúan, y una mayor similitud, a su vez, aumenta la probabilidad de interacción. Axelrod define cultura como un conjunto de atributos individuales que están sujetos a influencia social, es decir, que pueden ser modificados por efecto de la interacción entre individuos.

El modelo no se enfoca en ninguna cultura específica, sino en la forma en la que cualquier cultura puede emerger y difundirse. Además, hay que mencionar que los elementos que conforman este modelos no hacen juicio de valor, ni persigue ninguna intención. Los individuos son modelados mediante agentes dinámicos adaptativos en vez de racionales.

Un característica importante del modelo de interacción cultural es que puede ser expresado mediante un formalismo matemático. El conjunto de atributos de un agente i se puede representar mediante un vector cultural de la siguiente forma,

$$C_i = (c_{i1}, c_{i2}, \dots, c_{if}, \dots, c_{iF}) , \quad (2.1)$$

donde, c_{if} es el f -ésimo atributo cultural del agente i , y F es el número total de atributos culturales de cada individuo, es decir, la dimensión del vector cultural. Además, el vector de cada atributo cultural puede ser tomado de un conjunto infinito de valores,

$$c_{if} \in \{0, \dots, q - 1\} , \quad (2.2)$$

donde, q es el número de posibles rasgos por atributo. Así, existen q^F estados culturales posibles para cada agente.

Para ilustrar el modelo, consideremos el siguiente ejemplo con $F = 3$ atributos culturales y $q = 2$ rasgos por atributo. Estos parámetros permiten $2^3 = 8$ estados culturales diferentes y equivalentes. Si escojemos a q los valores de C_{ij} del conjunto $\{0, 1\}$, los posibles estados culturales son:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ y } \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Ahora, supongamos que nos referimos a la comunidad de nuestro grupo de investigadores en la Universidad. Entonces, el vector cultural de cada investigador estaría dado por

$$C_i = (c_{i1}, c_{i2}, c_{i3}) , \quad (2.3)$$

donde, los atributos c_{i1}, c_{i2}, c_{i3} representan respectivamente al área de trabajo, la preferencia en la bebida y las distribuciones de sistema Linux utilizado por el investigar i . Si las diferencias opciones que se tiene son:

área: (0)Sociofísica (1)Sist. Dinámicos
 bebida: (0) Cerveza (1)Vino ,
 Dist. Linux: (0) Suse (1)Gentoo

se puede etiquetar a un investigador que sea sociofísico, beba cerveza y que prefiera la distribución de sistema linux Suse en su computador con el vector cultural

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

De la misma manera en que se caracterizó a un investigador en el ejemplo anterior, también se puede caracterizar a cada agente que forma parte de un sistema específico mediante su vector cultural. Además, con esta forma de representar el conjunto de atributos culturales se un agente se puede definir claramente la similitud entre dos individuos cualesquiera comparando sus vectores culturales.

El modelo original asume que los agentes no se desplazan y su distribución espacial es sobre una retícula cuadrículada bidimensional de $N = L \times L$, donde N es el número de agentes del sistema y L es el lado de la red cuadrada del sustrato de simulación. Cada agente se encuentra conectado con sus cuatro vecinos más cercanos, es decir, utiliza vecindad de von Neumann. En cada iteración la dinámica de interacción entre los agentes es la siguiente:

1. Se selecciona en forma aleatoria un agente i de la red y a uno de sus vecinos $j \in N_i$, donde, N_i se define como el conjunto de vecinos de la celda i .
2. Se calcula la similitud cultural entre los dos agentes seleccionados en el paso anterior mediante:

$$\omega_{i,j} = \sum_{f=1}^F \delta_{c_{if}, c_{jf}} , \quad (2.4)$$

donde, $\delta_{c_{if}, c_{jf}}$ es el delta de Kronecker entre el rasgo cultural f del agente i y el del agente j .

3. Si $0 < \omega_{ij} < F$, se dice que el enlace entre los nodos seleccionados se encuentran activos, y por lo tanto, los nodos i, j interactuarían con una probabilidad

$$P = \frac{\omega_{ij}}{F}. \quad (2.5)$$

4. Se genera un número aleatorio entre 0 y 1, y si éste es superior que P habrá iteración. En el caso de que haya interacción, se escoge un atributo cultural h de forma aleatoria y que cumpla con $c_{ih} \neq c_{jh}$, luego se le asigna a c_{ih} el valor c_{jh} , es decir, se cambia el valor del atributo c_{ih} de su valor inicial al del atributo c_{jh} .

Al estudiar la evolución del modelo se observa que el sistema asintóticamente se congela, y en su configuración final el sistema puede alcanzar un estado homogéneo o monocultural, en el cual todos los agentes tienen el mismo vector cultural; o un estado heterogéneo o multicultural, en el que coexisten regiones que poseen vectores culturales diferentes.

2.2. El modelo de Axelrod sobre medios heterogéneos.

Para modelar la heterogeneidad en el modelo de dinámica cultural de Axelrod, se procede introduciendo impurezas en la red de igual manera que en el capítulo anterior, manteniendo la restricción de distancia d entre los defectos (ver sección 1.1.1). Como parámetro de control del sistema se utiliza la densidad de defectos $\rho = 0,625 d^2$.

Se estudia la transición de orden a desorden en el sistema con dos tipos de diferentes de impurezas. En primer lugar se simula el modelo introduciendo impurezas que representa obstáculos o defectos en el sustrato. Este tipo de impurezas se modela mediante nodos vacíos en la red, los cuales no son en ningún momento seleccionados ni como agente activo ni como vecino de éste.

Luego se repite el estudio, pero esta vez las impurezas representa a líderes cuyos vectores culturales son constantes e iguales. Esto se traduce en el algoritmo, en que ellos nunca son seleccionados como agentes activos pero si pueden ser seleccionados como vecinos del agente activo.

Como parámetro de orden para medir la transiciones de fase, se utiliza la fracción promedio de regiones culturales g , propuesto por Cosenza y colaboradores [34], y definido como

$$g = \frac{N_g}{N}, \quad (2.6)$$

donde, N_g es el número de celdas contiguas que poseen todos rasgos culturales idénticos y N es el número total de celdas en el sistema. Cuando el valor de g es cercano a $\frac{N_g}{N} \simeq 1$ indica que en el sistema existe una gran variedad de celdas con diferente vector cultural C , es decir, estamos en presencia de un estado heterogéneo. Mientras que si el valor de N_g es cercano a la unidad $g \simeq \frac{1}{N}$, tenemos que en el sistema hay un gran número de celdas con vectores culturales idénticos C , lo cual indica que el estado del sistema es prácticamente homogéneo.

2.3. Resultados de la simulación con líderes e impurezas.

Los resultados que se muestra a continuación se calcularon en una red cuadrada de lado $L = 100$, con una distribución inicial aleatoria de los estados de cada celda y promediado sobre 40 realizaciones. Para facilitar la comprensión del efecto de la heterogeneidad del sustrato sobre la dinámica multicultural de Axelrod, los resultados del modelo con obstáculos y con líderes se muestra simultáneamente en la figura 2.1. En ella se presentan el valor de la fracción promedio de regiones culturales $\langle g \rangle$ en función de los posibles rasgos culturales q y la densidad ρ . En ambos casos se observa que existe una transición de fase entre el estado heterogéneo al estado homogéneo cuando se disminuye el valor de q . La transición define un conjunto de pares de valores críticos q_c y ρ_c en los cuales el sistema cambia de estado.

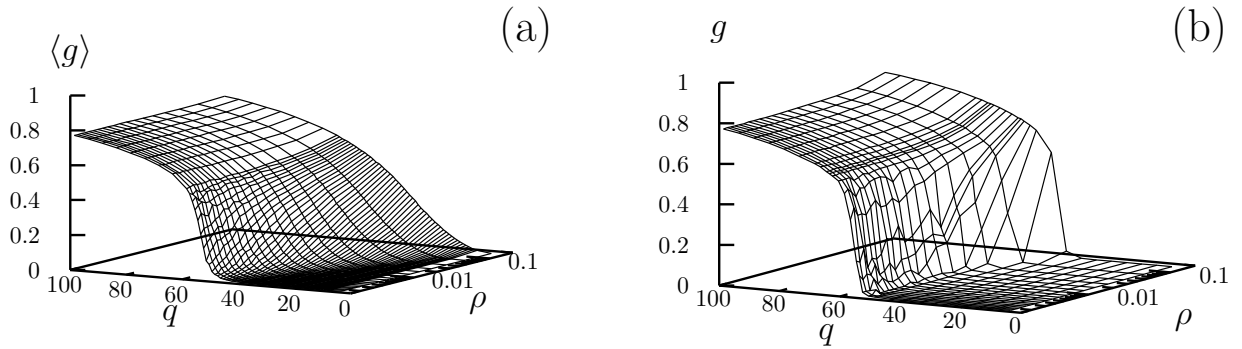


Figura 2.1: *Fracción promedio de grupos o regiones culturales $\langle g \rangle$ como función de los rasgos culturales q y la densidad de líderes (derecha) y de defectos (izquierda) en el sistema ρ .*

La figura 2.2 muestra las fronteras entre las fases homogéneas y heterogéneas en el espacio de parámetros (q, ρ) . La línea continua divide el estado heterogéneo del homogéneo en el sistema con líderes, mientras la línea segmentada representa la frontera en el sistema con defectos. Se observa que la línea continua está por debajo de la línea segmentada, lo cual indica que la presencia de líderes favorece la heterogeneidad más que la presencia de defectos, esto a pesar de que todos los líderes tienen el mismo vector cultural. La línea que representa los valores de la transición con defectos practicamente desciende de una forma lineal al incrementar la densidad de defectos, mientras que en el caso de los líderes, se observa que al principio la frontera desciende más rápidamente y luego sigue paralela a la línea anterior. La diferencia funcional entre los sistemas con defectos y con líderes se debe del efecto que tiene los líderes en sus alrededores. La influencia de los líderes en el sistema es semejante a la influencia que tiene una propaganda en un sistema de Axelrod, estudiado por Gonzale-Avella y colaboradores [34], donde un campo externo actúa sobre el sistema a través del parámetro B que controla la frecuencia con la que el campo influye en el sistema.

En ambos modelos se tiene que el parámetro de orden tiene una ley de escala $g \sim (q - q_c)^{\gamma_g}$. Los exponentes críticos de la transición en ambos modelos se muestran en la figura 2.3, donde la línea continua es para los líderes y la línea cortada es para los defectos. En esta

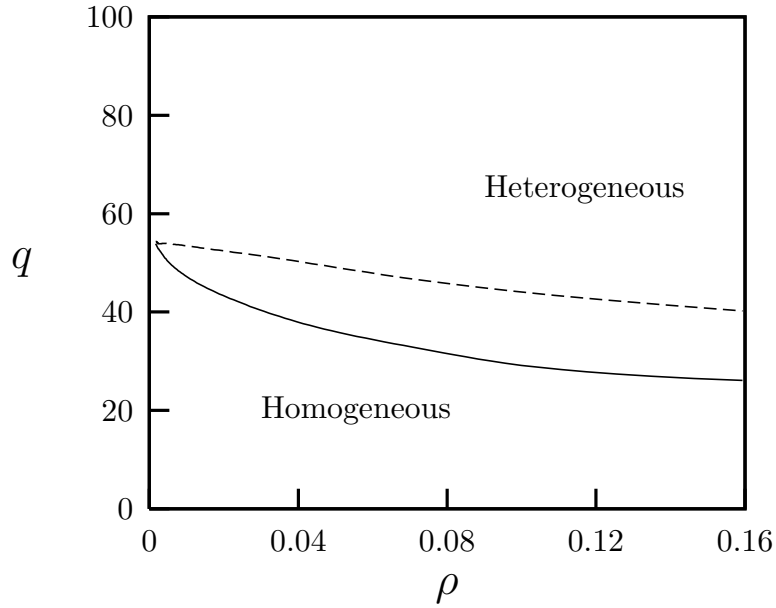


Figura 2.2: Diagrama de fase en el espacio de parametro (q, ρ) . Para la presencia de lideres (línea continua) y defectos (línea segmentada). Bajo las líneas críticas está la región de parámetros donde el sistema llega a un estado homogéneo y sobre éstas el estado del sistema es heterogéneo.

figura se observa que la presencia de defectos no produce ninguna variación en el exponente crítico $\gamma_g^d \approx 0,20$, en cambio a la presencia de líderes si afecta su exponente crítico γ_g^l , y su comportamiento va como $\gamma_g^l \sim \rho^{\beta_g}$, donde, $\beta_g \approx 0,08$.

2.4. Simulación de un modelo de Axelrod con vecindad variable.

Al igual que se hizo en la sección 1.4 del capítulo anterior, en esta sección se estudia el modelo de la dinámica cultural de Axelrod sin la presencia de líderes o de defectos, variando el nivel de vecindad sobre una red cuadrada, donde el conjunto de vecinos del elemento i está definido con: $\{N_i\} = \{c_i \forall d(c_i, c_j) \leq r_\nu\}$, donde $d(c_i, c_j)$ es la función de distancia de

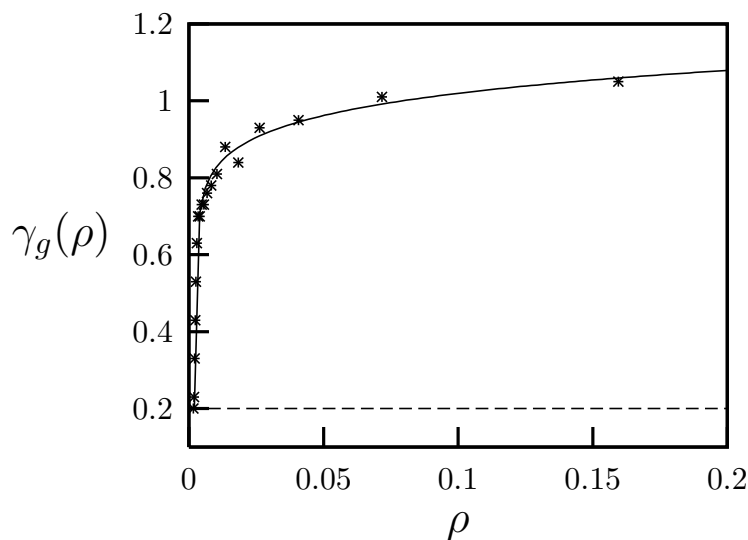


Figura 2.3: *Exponente critico γ_g como función de ρ . La línea continua para el modelo con presencia de líderes y la línea segmentada para la presencia de defectos .*

vecindad entre las celdas i y j , y r_ν es el nivel de vecindad. Al igual que en las redes de mapas acoplados biestables, en este sistema también ocurre una transición de segundo orden entre el estado heterogéneo y el estado homogéneo, que define la frontera en el espacio de parámetros (q, r_ν) . La figura 2.4 muestra el diagrama de fase. Los puntos son valores promediados sobre 40 simulaciones, para un red cuadrada de tamaño $L = 50$ con condiciones iniciales aleatorias. La línea que pasa por los puntos corresponde al mejor ajuste. Vemos que para valores bajos de r_ν el comportamiento de la frontera es lineal y a medida que r_ν aumenta la línea se va curvando hasta llegar a una vecindad de $r_\nu = 350$, que corresponde, aproximadamente, al valor de nivel de vecindad de un sistema globalmente acoplado.

La transición es de segundo orden viene dada por

$$g = (q - q_c^\nu)^{\gamma_g^\nu}, \quad (2.7)$$

donde, q_c^ν es el valor crítico de la transición presentado en la figura 2.4, y γ_g^ν es el exponente

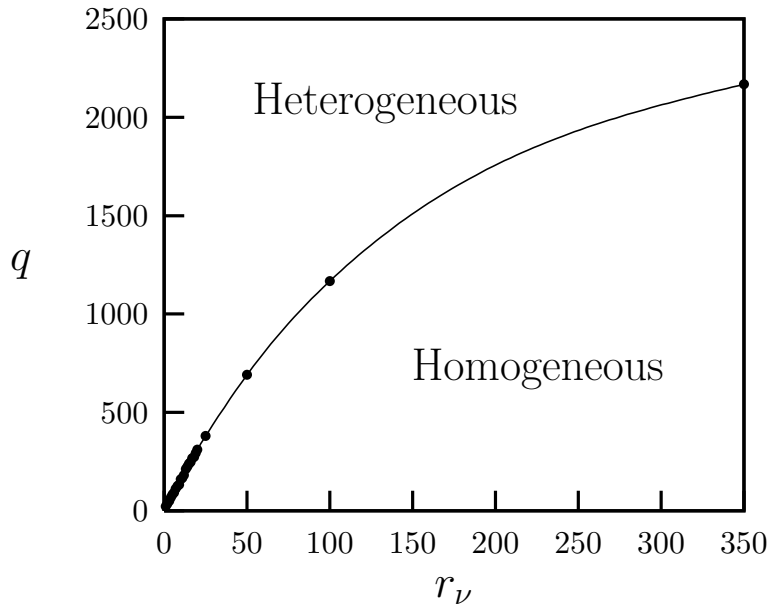


Figura 2.4: Los puntos representan la frontera entre el estado homogéneo y el heterogéneo del sistema. La línea sólida es el mejor ajuste a éstos puntos. El acoplamiento global en éste tamaño de sistema y con condiciones periódicas se alcanza cuando $r_\nu = 350$.

crítico de dicha transición.

La figura 2.5 se muestra el valor del exponente crítico de una transición del estado heterogéneo a uno homogéneo. Se puede observar que el exponente tiene un comportamiento tipo función escalón o de transición de primer orden

$$\gamma_g^\nu \approx \begin{cases} 0,18 & \text{para } r_\nu < 4 \\ 0,40 & \text{para } r_\nu \geq 4 \end{cases} . \quad (2.8)$$

En este sistema, el valor del exponente crítico para sistemas globalmente acoplados se alcanza con un nivel de vecindad $r_\nu = 4$ y este valor se mantienen constantes para $r_\nu \geq 4$. Este comportamiento del exponente crítico contrasta con lo conseguido en el capítulo anterior (ver figura 1.19 para la red cuadrada), Siendo la única diferencia la dinámica local que se ejecuta en cada nodo, y ésto es suficiente para cambiar el comportamiento de los exponentes

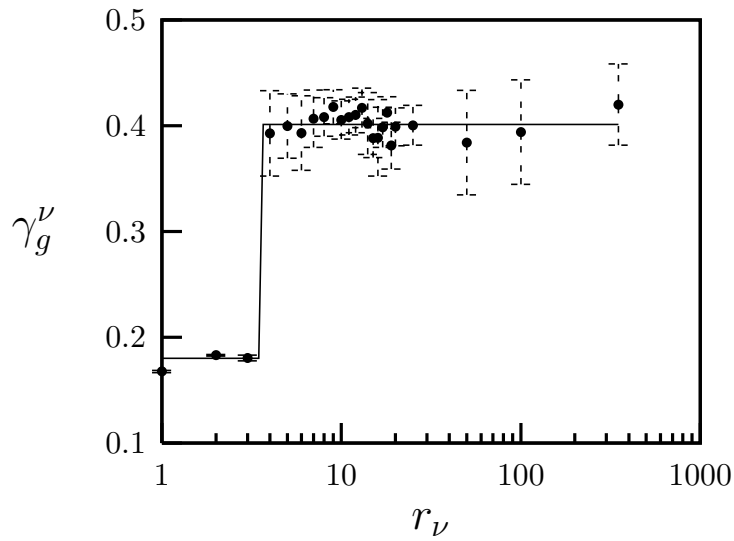


Figura 2.5: Los puntos representan los valores de los exponentes críticos γ_g^ν en función del nivel de vecindad r_ν . La línea sólida representa al promedio de éstos puntos en sus dos regímenes. El acoplamiento global en éste sistema, con condiciones periódicas, se alcanza cuando $r_\nu = 350$.

críticos respecto a sus variables naturales.

2.5. Conclusión

En este capítulo se encontró que la heterogeneidad del medio afecta las transiciones de un estado con diversidad cultural a un estado culturalmente homogéneo en el modelo de dinámica cultural de Axelrod. El efecto de la heterogeneidad se estudió usando dos tipos diferentes de impurezas, las primeras, celdas que no interactúan con sus vecinos, mientras que el segundo tipo de impurezas son en celdas idénticas que pueden influir en su entorno, pero el entorno no puede influir en ellas (líderes). En el diagrama de fases de la figura 2.2, se evidencia que el efecto que tiene sobre las propiedades críticas del sistema cada tipo de impurezas es diferente. Requiriendo un cantidad menor de rasgos culturales para obtener fase

heterogénea cuando las impurezas son celdas homogéneas constantes (líderes) que cuando son celdas inactivas (obstáculos). La magnitud de cambio de la transición de fase se caracteriza con el exponente crítico, se ve afectada sólo por la presencia de líderes, mientras que las celdas inactivas no afectan el valor del exponente crítico. El comportamiento del sistema con la presencia de líderes es semejante al encontrado por González-Avella y colaboradores [34], quienes estudiaron la influencia de un campo externo o propaganda en el modelo de dinámica cultural de Axelrod. Esto sugiere que el modelo no distingue entre una influencia interna y una externa.

Variando el rango de la interacción en una red cuadrada, el exponente crítico de la transición del modelo de dinámica cultural de Axelrod, posee un comportamiento semejante a una función escalón, es decir, una transición de primer orden. El valor crítico de esta transición se obtiene para $r_\nu = 5$. A partir de este valor el exponente crítico mantiene su valor constante e igual al observado para este sistema para este sistema con acoplamiento global, coincidiendo con los resultados de Lind y colaboradores [25].

La virtud es el punto medio
entre dos vicios opuestos.
Quinto Horacio Flaco

Capítulo 3

Dinámica de formación y estabilización de dominios de fluidos binarios

Frecuentemente en la simulación de fluidos se utiliza potenciales energéticos o fuerzas de pares de partículas que logran representar de manera muy exacta ciertas propiedades macroscópicas que no requieren de un gran número de partículas en su simulación [59, 60]. Sin embargo, cuando se quiere representar propiedades que involucran grandes cantidades de moléculas o partículas, como movilidad de coloides, reacciones químicas de macromoléculas, difusión de fluidos en sistemas congestionados o estudios dinámicos de separaciones de fases, las técnicas de simulación convencionales pierden su practicidad, ya que necesitan tiempos de cálculos excesivamente grandes para obtener resultados comparables con los de los experimentos; incluso, en las mejores plataformas de cómputo del mundo, estos tiempos puede llegar a ser comparados con el promedio de vida del ser humano. Para solventar este problema, se han desarrollado una gran variedad de técnicas de simulación [61], que a pesar de perder el detalle molecular, pueden describir las propiedades macroscópicas de manera

muy precisa. Un ejemplo de estas técnicas es la *dinámica de colisión multipartículas* desarrollada por Malevanets y Kapral [44, 45, 46] para la descripción de dinámica de fluidos. La misma consiste en un híbrido entre autómatas celulares y dinámica molecular convencional. En esta técnica se divide el volumen en celdas dentro de las cuales las partículas colisionan simultáneamente a través de un operador de rotación. Este operador conserva la masa, el momento y la energía, con lo cual se logra un equilibrio de Maxwell-Boltzmann. Luego durante un intervalo de tiempo t , todas las partículas se desplazan de acuerdo a sus velocidades sin que estas colisionen entre si. La técnica de dinámica de colisión multipartícula se ha empleado en una gran diversidad de sistemas [57], incluso en sistemas de fluidos binarios [62]. Sin embargo, a pesar de lograr obtener la separación de fases, no se ha reportado el exponente de la ley de crecimiento que la caracteriza la dinámica de la separación de fases.

En éste capítulo en primer lugar se describe la técnica de colisión multipartículas . luego se estudia la difusión de un fluidos en medios con obstáculos inmóviles utilizando esta técnica. Esto se hace para determinar la influencia que tienen los obstáculos en el coeficiente de difusión y establecer el rango de temperatura en el que la dinámica de colisión multipartículas es válida. Después, se estudia la estabilidad de la interfase en fluidos binarios en los que se varían la densidad de impurezas u obstáculos en el medio. También, se estudia la descomposición espinodal en fluidos binarios con la dinámica de colisión multipartículas modificada para incluirle un parámetro de repulsión y se observa el efecto que tienen las impurezas en las propiedades de crecimiento y formación de dominios. Por último, se presenta una conclusión partículas sobre lo encontrado en este capítulo.

3.1. Dinámica de colisión de multipartículas.

Como ya se mencionó, se han desarrollado diversas técnicas de simulación para la descripción de un fluido a diversas escalas. En la escala mesoscópica se tiene, las redes de gases de Boltzmann o "*Lattice Boltzmann gas*", los autómatas celulares [39, 40], dinámica de partículas disipativas [83] y el modelo de fluidos de partículas [42]. Todas éstas técnicas de

simulación de fluidos posee la característica de obviar una descripción detallada de estructura molecular de las partículas, y tomar sólo lo fundamental de éstas para la descripción del fluido. Además, toman como referencia las ecuaciones macroscópicas de fluidos, como la ecuación de Cahn-Hilliard [43] para fluidos de varios componentes, acoplada con la ecuación de Navier–Stokes [91] para estudiar su dinámica.

En ésta parte de la tesis, se describe una nueva técnica de simulación mesoscópica de un fluido propuesta por Malevenets y Kapral denominada dinámica de colisiones multipartículas [44, 45, 46, 57], que se utilizará en este capítulo para el estudio de formación de dominios en fluidos binarios.

La dinámica de colisión multipartículas, es una versión simplificada de la dinámica molecular de colisiones en un fluido que se rige por las ecuaciones hidrodinámicas a grandes escalas de distancia y tiempo, la misma se construye de la siguiente manera: Se adopta desde un punto de vista mesoscópico el fluido, en el cual se actualizan la posición y velocidad en tiempos discretos, de acuerdo con la acción de las fuerzas y las colisiones que el fluido siente. La dinámica se construye bajo las leyes de conservación de la masas, el momento y la energía.

Para la describir la técnica, se considera un sistema de N partículas, cada una con masa m . Las posiciones y velocidades de las partículas son denotadas por $\mathbf{X}^{(N)} = \{\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^N\}$ y $V^{(N)} = \{\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \dots, \mathbf{v}^N\}$, respectivamente. La dinámica consiste en un desplazamiento libre de la partícula s durante el paso discreto temporal τ que viene dada por

$$\mathbf{x}_{t+\tau}^s = \mathbf{x}_t^s + \mathbf{v}_t^s \tau . \quad (3.1)$$

La velocidad \mathbf{v}_t^s se modifica por una colisión multipartículas a cada unidades de tiempo τ . Para determinar las velocidades luego de la colisión, el volumen del sistema se divide en celdas cúbicas, dentro de las cuales, en cada intervalo de tiempo se aplica un operador de rotación $\widehat{\omega}_\xi$, que se escoge cada vez al azar de un conjunto de operadores de rotación, donde

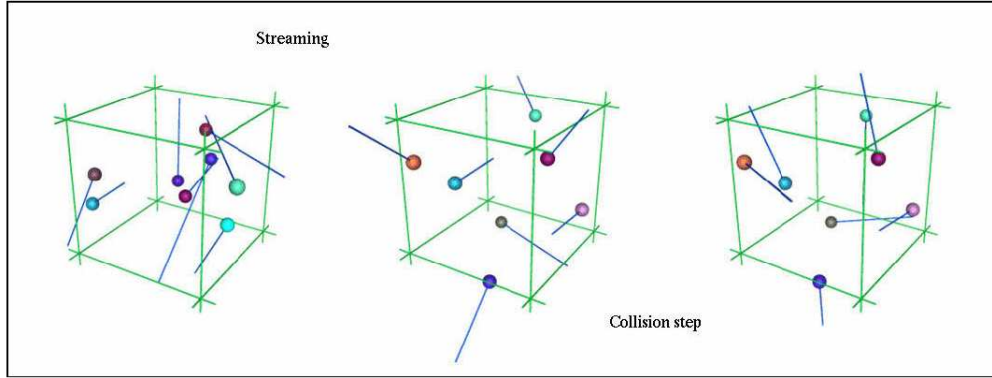


Figura 3.1: Esquema de la división de celdas dentro del sistema para la aplicación de la dinámica de colisiones multipartículas. Las posiciones de las partículas son continuas y no son confinadas al centro de la celda. Las velocidades también son continuas y son denotadas por líneas en las figuras (figura tomada de [57]).

ξ es el índice de la celda, como se muestra en la figura 3.1. Se denota como V_ξ a la velocidad del centro de masas de las partículas que se encuentra dentro de la celda ξ que viene dado por

$$V_\xi = \frac{1}{n_\xi} \sum_{s|\mathbf{x} \in \Omega} \mathbf{v}^{s'}, \quad (3.2)$$

donde, n_ξ es el número de partículas en la celda con volumen Ω y $\mathbf{v}^{s'}$ es el valor de la velocidad de la partícula antes de la colisión. La velocidad después de la colisión \mathbf{v}^s , de cada partícula s en la celda ξ viene dada por

$$\mathbf{v}^s = V_\xi + \widehat{\omega}_\xi(\mathbf{v}^{s'} - V_\xi). \quad (3.3)$$

En cada evento de colisión se aplica el mismo operador $\widehat{\omega}$ para cada una de las partículas presente en la celda ξ , pero varía de celda en celda y de un evento de colisión a otro. Esta regla de colisión cambia las direcciones y magnitudes de las velocidades de las partículas en las celdas, como se puede observar en ejemplo de dos dimensiones para dos partículas mostrado en la figura 3.2.

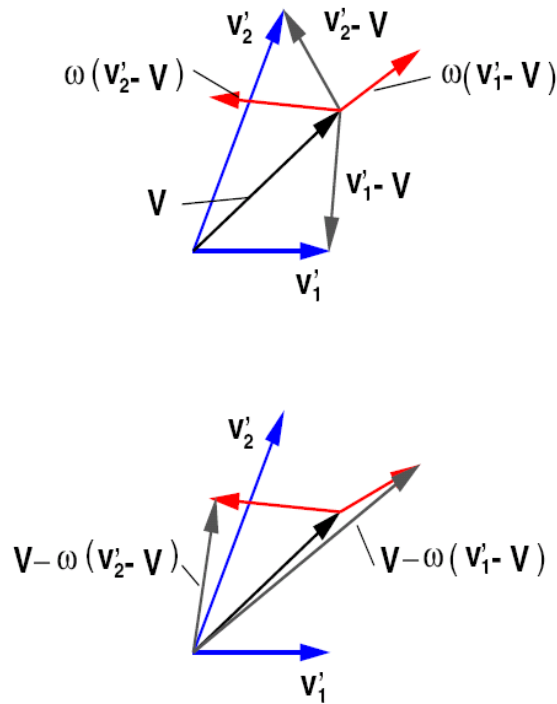


Figura 3.2: *Dinámica de colisiones multipartículas aplicada a dos partículas en dos dimensiones para una rotación de $\pi/2$. Los vectores v'_1 y v'_2 denotan las velocidades antes de la colisión. Arriba se representa la velocidad del centro de masa V y las velocidades relativas de la colisión para el centro de masa antes y después de la rotación de $\pi/2$. Abajo muestra el resultado de sumar a la velocidad del centro de masa las velocidades relativas luego de la colisión (figura tomada de [57]).*

Al aplicar el operador rotacional a las partículas que se encuentra en una celda, la masa, el momento y la energía se conservan. La masa se conserva porque no hay desplazamiento, mientras que para el momento y la energía se tiene respectivamente que:

$$\sum_{s|\mathbf{x}\in\Omega} m \mathbf{v}^s = \sum_{s|\mathbf{x}\in\Omega} m [V_\xi + \widehat{\omega}_\xi(\mathbf{v}^{s'} - V_\xi)] = \sum_{s|\mathbf{x}\in\Omega} m \mathbf{v}^{s'}, \quad (3.4)$$

$$\sum_{s|\mathbf{x}\in\Omega} \frac{m}{2} \|\mathbf{v}^s\|^2 = \sum_{s|\mathbf{x}\in\Omega} \frac{m}{2} \|V_\xi + \widehat{\omega}_\xi(\mathbf{v}^{s'} - V_\xi)\|^2 = \sum_{s|\mathbf{x}\in\Omega} \frac{m}{2} \|\mathbf{v}^{s'}\|^2. \quad (3.5)$$

El tamaño de la celda se establece por la densidad de partículas y la velocidad media de las partículas en el sistema. La densidad determina el número promedio de partículas por celdas y esto afecta el número de partícula envueltas en los eventos de colisión de multipartículas. Por su parte, la velocidad media determina, en promedio, la distancia que las partículas recorren entre los eventos de la colisión.

La rotación aplicada a cada una de las partículas que se encuentra en las celdas ξ viene dada explícitamente por

$$\widehat{\omega}_\xi(\mathbf{v}^{s'} - V_\xi) = \hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{v}^{s'} - V_\xi) + (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}}) \cdot (\mathbf{v}^{s'} - V_\xi) \cos \Pi - \hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{v}^{s'} - V_\xi) \sin \Pi, \quad (3.6)$$

donde, $\hat{\mathbf{n}}$ es la dirección de la partícula s antes de la colisión, Π es la magnitud del ángulo del cambio de dirección y se selecciona aleatoriamente del conjunto de ángulos $\{\pi/2, -\pi/2\}$ o de un conjunto de valores comprendidos entre $0 \leq \Pi \leq \pi$, ya que $\hat{\mathbf{n}}$ puede ser representado en una superficie esférica; finalmente \mathbf{I} es la matriz unitaria.

3.2. Difusión de un fluido.

Tener información sobre el coeficiente de difusión es esencial para comprender la influencia de ésta propiedad en las cinética de las reacciones químicas, el estudio de la dinámica de

la separación de los fluidos inmiscible, el transporte de macropartículas en fluidos, etc. En esta sección, y previo a la inclusión de obstáculos, se determina el coeficiente de difusión como una función de la densidad de partículas y temperatura utilizada en la dinámica de colisión de multipartículas y se comparan los resultados obtenidos con una expresión analítica aproximada para dicho coeficiente. Se emplea dicha técnica mesoscópica para describir la difusión de un fluido en medio con nanopartículas inmóviles o obstáculos y se hace un estudio del rango de validez de la técnica con la temperatura, comparando los resultados obtenidos con las teorías preexistentes de difusión en medios congestionados.

3.2.1. Difusión de un fluido en un medio libre.

El coeficiente de difusión está dado por la integral temporal de la función de correlación de velocidades [59, 60]

$$D_0 = \frac{1}{3} \int_0^\infty \langle \mathbf{v}(t - t_0)^s \mathbf{v}(0)^s \rangle , d(t - t_0), \quad (3.7)$$

donde la variable de integración $t - t_0$ es un diferencial de tiempo, entre un tiempo inicial t_0 y un tiempo final t , y el operador $\langle \dots \rangle$ representa el promedio sobre todo el conjunto de partículas.

Para adaptar la ecuación 3.7 a la dinámica de tiempos discretos del modelo, la integral temporal se reemplaza por una expresión aproximada, usando el método de los trapecios, como lo muestra el análisis de tiempo discreto de Green-Kubo [44, 57]. De esto se obtiene que el coeficiente de difusión D_0 para una dirección x viene dado por [46, 57]

$$D_0 = \frac{1}{2} \langle v_x v_x \rangle + \sum_{l=1}^{\infty} \langle v_x v_x(\ell_\tau) \rangle , \quad (3.8)$$

donde, v_x es la componente x de la velocidad de una partícula en el sistema y ℓ_τ es el conjunto de distancias que una partícula puede recorrer en un tiempo de relajación τ , el cual en el modelo también es el tiempo en que el sistema evoluciona una iteración.

El coeficiente D_0 también puede calcularse usando el desplazamiento cuadrático medio [59, 60]

$$6D_0t = \frac{1}{3} \langle |\mathbf{x}(t - t_0)^s \mathbf{x}(0)^s| \rangle, \quad (3.9)$$

donde, $t - t_0$ es la misma variable temporal de la ecuación 3.7.

El coeficiente D_0 es función de la densidad promedio de partículas por celda, ρ , y de la temperatura T . Esta última es calcula a través del promedio de energía cinética por grado de libertad

$$T = \frac{m \langle \mathbf{v}^s \rangle^2}{d_f k_b}, \quad (3.10)$$

donde, k_b es la constante de Boltzmann, m la masa de la partícula y d_f son los grados de libertad del sistema, que en el caso de partículas puntuales en dos dimensiones es $d_f = 2$ y en tres dimensiones es $d_f = 3$.

Una expresión aproximada para el coeficiente de difusión D_0 puede ser deriva asumiendo un tiempo de relajación único τ , con lo cual se produce un desplazamiento único ℓ . Suponiendo ésto, tenemos que

$$\frac{\langle v_x v_x(\ell_\tau) \rangle}{\langle v_x v_x \rangle} = \left(\frac{\langle v_x v_x(\tau) \rangle}{\langle v_x v_x \rangle} \right)^\ell \equiv (r_D)^\ell, \quad (3.11)$$

por consiguiente, el coeficiente de difusión usando lo anterior esta aproximadamente dado por

$$D_0 \simeq -\frac{1}{2} \langle v_x v_x \rangle + \langle v_x v_x \rangle \sum_{l=1}^{\infty} (r_D)^l = \frac{\langle v_x v_x \rangle (1 + r_D)}{2(1 + r_D)}. \quad (3.12)$$

El valor de r_D se calcula a través de la aproximación de Boltzmann para una sola partícula y para valores de ρ suficientemente grandes [63], y viene dado por

$$r_D = \frac{2(1 - e^{-\rho}) + \rho}{3\rho}, \quad (3.13)$$

con lo cual se llega a una expresión para determinar el coeficiente de difusión D_0 en un medio libre para diferentes temperaturas y densidades promedio de partículas por celda

$$D_0 = \frac{k_b T}{2m} \left(\frac{2\rho + 1 - e^{-\rho}}{\rho - 1 + e^{-\rho}} \right). \quad (3.14)$$

Esta relación fue encontrada por Tucci y colaboradores en [63] y al compararla con los resultados de las simulaciones hechas con la técnica de dinámica de colisión multipartículas, obtuvieron muy buenos ajustes para una temperatura fija de $T = 1/3$, variando la densidad promedio de partículas.

Para determinar la validez de la técnica de dinámica de colisión multipartículas a bajas temperaturas, se calcula el coeficiente de difusión mediante el desplazamiento cuadrático medio, usando la ecuación 3.9, de un conjunto de partículas en un volumen $\mathcal{V} = L^3$, con $L = 50$ y con condiciones de contorno periódicas. Los resultados se presenta en la figura 3.3, donde se gráfica el coeficiente de difusión D_0 en función de la densidad de partículas ρ para tres temperaturas diferentes $T = 0,30$; $0,18$ y $0,06$; encontrándose una muy buena correspondencia con la ecuación 3.14. Lo más resaltante del resultado anterior es ver que aún para temperaturas bajas la difusión obtenida con la técnica de simulación mesoscópica de la colisión mesoscópica es válida, esto a pesar de los efectos de correlación que se generan por tener a una partícula dentro de la misma celda ξ por mucho tiempo.

3.2.2. Difusión en un medio con obstáculos.

Se sabe que al introducir obstáculos en el medio el coeficiente de difusión se ve afectado. Para estudiar cómo los obstáculos afectan a la difusión, se introducen esferas impenetrables e inmóviles colocadas al azar en el volumen \mathcal{V} . Las esferas poseen un radio σ constante y ocupan una fracción de volumen de $\phi \equiv 4\pi N_{obs}\sigma^3/3\mathcal{V}$, donde N_{obs} es el número de obstáculos

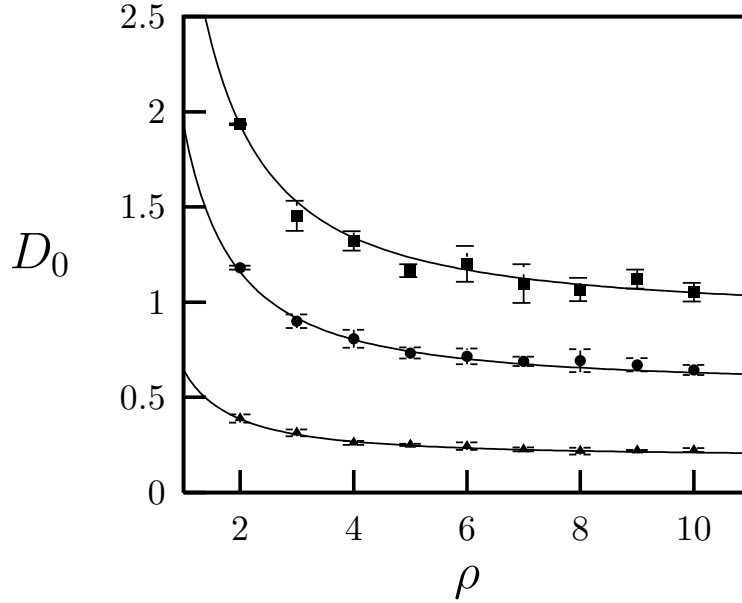


Figura 3.3: Coeficiente de difusión D_0 como función de la densidad de partículas ρ a diferentes temperaturas T . Donde los cuadrados son valores obtenidos de la simulación para $T = 0,30$; los círculos para $T = 0,18$ y los triángulos para $T = 0,06$. Las líneas representa a la ecuación 3.14 para las tres temperaturas. La barras de error se calcularon mediante la desviación estándar del promedio de los valores en los tres ejes espaciales.

presentes en la caja de simulación.

Si definimos a $\rho(\mathbf{r}, t)$ como la densidad total de partículas fuera de los obstáculos, con una posición espacial \mathbf{r} en el instante de tiempo t , esta densidad obedece a la ecuación de difusión, donde los obstáculos son tomados en cuenta por un campo de flujo de difusión inducida $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$. Por consiguiente, la ecuación de difusión para el campo de densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$ es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = D_0 \nabla^2 \rho(\mathbf{r}, t) - \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t), \quad (3.15)$$

donde, si se elimina el último término, la misma se reduce a la ecuación de difusión, lo que indica, que el último término representa un flujo contrario al flujo normal del fluido, produciendo un flujo nulo en el espacio que ocupan los obstáculos.

Partiendo de esta ecuación es posible derivar una ecuación para el promedio de densidad de campo sobre todas las configuraciones de los obstáculos $\langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle$, el cual está sujeto a una expresión que depende de la fracción de volumen efectivo para el coeficiente de difusión. En el límite del campo medio, se asume una distribución aleatoria de obstáculos, y el resultado es una corrección del coeficiente de difusión de un medio libre [47], dado por

$$D(\phi) = D_0 + \Delta D_0 = 2 D_0 \frac{1 - \phi}{2 + \phi}, \quad (3.16)$$

donde, el término de corrección ΔD_0 , corresponde a la teoría de respuesta lineal [59, 60], la cual es válida cuando el campo aplicado es débil.

En las figuras 3.4 se muestra los coeficientes de difusión como función de densidad de obstáculos ϕ , calculados con la técnica de dinámica de colisión multipartículas, para las temperaturas $T = 0,30; 0,18$ y $0,06$ y para los obstáculos con radios $\sigma = 1,0; \sigma = 1,5$ y $\sigma = 2,0$. Estos cálculos se realizaron en una caja de simulación de lado $L = 50$, con condiciones de contorno periódicas. Las líneas continuas se obtuvieron con la ecuación 3.16 para cada una de las tres temperaturas.

Aquí se puede observar una reducción del coeficiente de difusión $D(\phi)$ a medida que se incrementa de ϕ , porque el espacio libre para la difusión es menor. Comparando los resultados de la simulación con el valor teórico de la ecuación 3.16, se observa una discrepancia para altas temperaturas, la cual se va reduciendo a medida que se disminuye la temperatura, hasta tener una buena correspondencia entre la simulación y la teoría a una temperatura de $T = 0,06$.

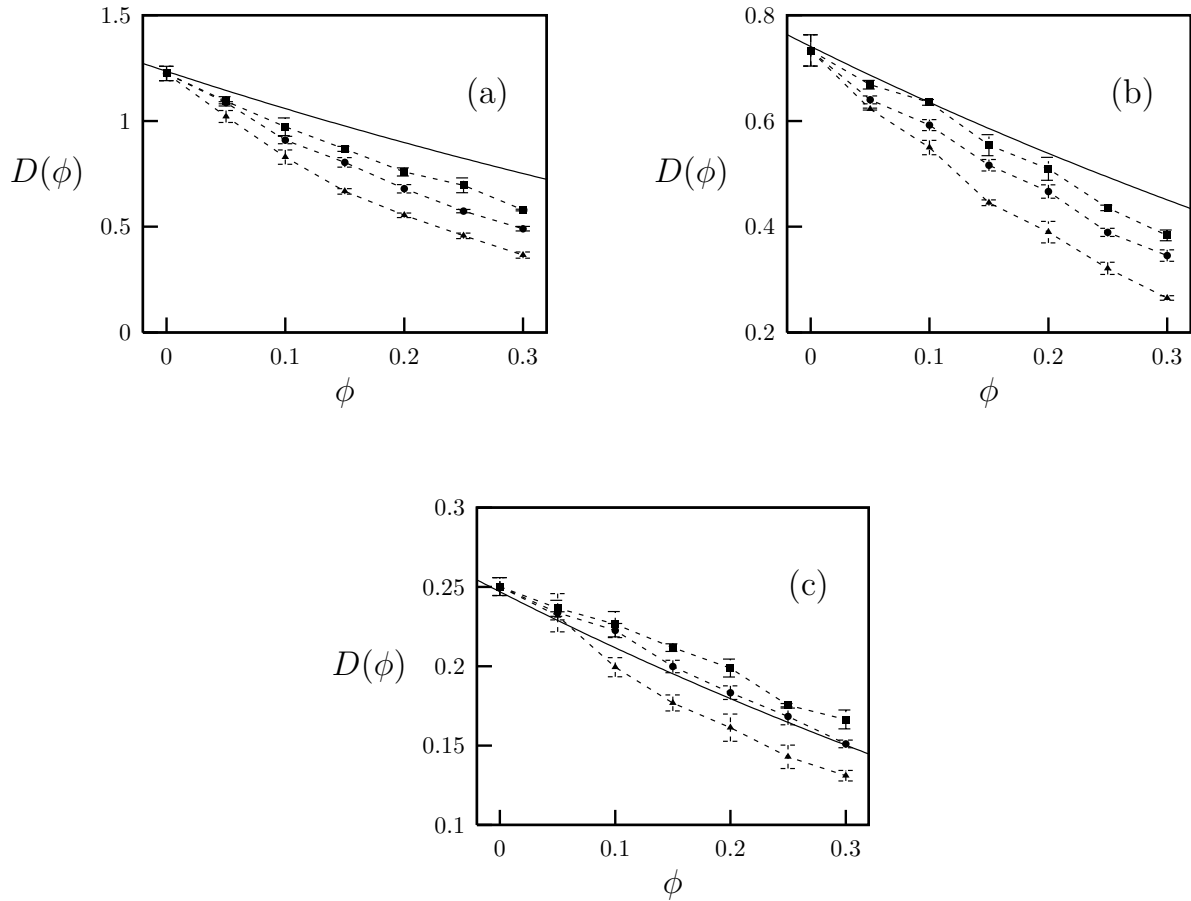


Figura 3.4: Coeficiente de difusión $D(\phi)$ como función de la densidad de obstáculos ϕ para las temperaturas $T = 0,30$ (a); $T = 0,18$ (b) y $T = 0,06$ (c). Los cuadrados son para $\sigma = 0,20$; los círculos para $\sigma = 1,5$ y los triangulares a $T = 1,0$. Las líneas sólidas representan por la ecuación 3.16 para cada temperatura. Las barras de error se calculan usando la desviación estandar del promedio de los valores en los tres ejes espaciales.

Además, se aprecia una diferencia entre de los coeficiente de difusión para cada uno de los diferentes valores radios de los obstáculos σ . Esta última diferencia es una consecuencia del hecho de que el espacio libre que existe entre los obstáculos aumenta, cuando el radio de los obstáculos σ crece. Esto ocurre aún manteniendo constante la densidad global de obstáculos ϕ . Por consiguiente, el desplazamiento cuadrático medio será mayor para valores de σ más grandes. Este efecto no lo puede reproducir la teoría, ya que la misma representa los obstáculos como un flujo de difusión inducida $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, en el cual sólo se toma en cuenta el espacio promedio ocupado por los obstáculos y no es relevante la distribución espacial específica de las regiones que no pueden ocupar las partículas.

La discrepancia de los valores obtenidos en las simulaciones son respecto a los valores teóricos de la ecuación 3.16 para temperaturas altas proviene del hecho de que a medida que la difusión de partículas o la temperatura son más elevadas, la corrección de la difusión ΔD_0 es menos representativa debido a que los campos aplicados son más fuertes y la teoría de respuesta lineal ya no es aplicable para estos valores de temperatura.

3.3. Estabilización de interfase en fluidos binarios.

Muchos procesos físicos, como el intercambio de componentes de una fase a otra, la estabilización o dispersión de emulsiones en fase líquida, entre otros, se llevan a cabo en una interfase líquido-líquido de dos fluidos inmiscibles. Por consiguiente, para este tipo de fenómenos comprender el comportamiento de las interfases es de suma importancia. Existe un interés particular en la inclusión de impurezas en estos sistemas, ya que con ellas se puede controlar la longitud de las interfases y así obtener longitudes más largas que a su vez incrementen el intercambio de masa o aumenten el producto de una reacción química que pueda ocurrir en ellas. Un ejemplo cotidiano de dos líquidos inmiscibles, es el aceite y el agua, que al compartir un volumen forman dos regiones bien definidas que están separadas por una delgada capa compuesta por ambos líquidos. Este tipo de sistema, es conservativo, porque

su parámetro de orden es densidad de los componentes, ha sido descrito principalmente a dos niveles: microscópico con simulaciones de dinámica molecular clásica [48, 49, 50, 51, 54] o con simulaciones de Monte Carlo [52, 53], usando potenciales de interacción como el de Lennard–Jones, y a nivel macroscópico, donde se han empleado la ecuación de Cahn–Hilliard [43, 55, 56] o la de Navier–Stokes [91].

Una manera alternativa de estudiar la dinámica de estos y otros sistemas complejos es a un nivel mesoscópico. Los modelos mesoscópicos ofrecen una descripción de grano grueso de la dinámica, obviando ciertas características microscópicas no esenciales que son computacionalmente costosas y manteniendo aquellas que son esenciales para la dinámica a escala termodinámica. Como los modelos mesoscópicos son estructuralmente válidos a escala macroscópica, son útiles para simular dinámicas de sistemas macroscópicos sobre sustratos complejos [64, 65].

En esta sección se considera una generalización del modelo mesoscópico de dinámica de colisión multipartículas [44, 45, 46] para estudiar la dinámica de formación de la interfaz de dos fluidos inmiscibles. Se muestra como la dinámica de colisión multipartículas puede generalizarse para un sistema de dos componentes inmiscibles. En este modelo la repulsión entre componentes de diferentes especies se introduce a nivel mesoscópico, cuidando que en cada evento de colisión la masa, la energía y el momento se conserven.

Para ilustrar la generalización de la técnica de colisión multipartículas con repulsión se estudia la evolución de la estructura de la interfase entre dos fluidos inmiscibles en una película tridimensional delgada con una de las especies en el lado izquierdo del volumen y la otra del lado derecho, en primer lugar sin obstáculos en el medio para luego agregarle obstáculos y observar el efecto que tienen estos sobre la interfase.

3.3.1. Implementación de la dinámica de colisión multipartículas para fluidos inmisibles.

El modelo que se desarrolló para la dinámica de colisión multipartículas para fluidos inmisibles está basado en esta misma técnica mesoscópica para sistemas multicomponentes desarrollado por Tucci y Kapral [63, 64, 65] para reacciones químicas. En esta última se supone que se tiene un sistema N partículas de diferentes especies $\varsigma = A, B, \dots$, y con masas m_ς respectivamente. En este sistema se introduce un operador Θ_s^ς que caracteriza las especies ς de la partícula s . Este operador posee las siguientes propiedades:

$$\Theta_s^\varsigma \Theta_s^{\varsigma'} = \delta_{\varsigma\varsigma'} \quad y \quad \sum_\varsigma \Theta_s^\varsigma = 1, \quad (3.17)$$

donde, $\delta_{\varsigma\varsigma'}$ es el delta Kronecker respecto a las diferentes especies ς y ς' . Estas ecuaciones indican que una partícula no pertenece a dos especies al mismo tiempo, pero debe pertenecer a alguna especie. El número de partículas de la especie ς viene dado por:

$$N_\varsigma = \sum_{s=1}^N \Theta_s^\varsigma. \quad (3.18)$$

En este modelo tenemos que la velocidad del centro de masa de las partículas de la especie ς que están en la celda ξ a el instante t está dado por:

$$V_{\xi,t}^\varsigma = \frac{1}{n_{\xi,t}^{(\varsigma)}} \sum_{s|\mathbf{x} \in \Omega} \Theta_s^\varsigma \mathbf{v}_t^s, \quad (3.19)$$

donde, n_ξ^ς es el número de partículas de la especie ς en la celda ξ en el instante t y \mathbf{v}_t^s es la velocidad de cada partícula s dentro de la celda ξ en t . La velocidad del centro de masa de todas las $n_{\xi,t} = \sum_\varsigma n_{\xi,t}^\varsigma$ partículas en la celda ξ en el instante t viene dada por:

$$V_{\xi,t} = \frac{\sum_\varsigma n_\xi^\varsigma m_\varsigma V_{\xi,t}^\varsigma}{\sum_\varsigma n_\xi^\varsigma m_\varsigma}, \quad (3.20)$$

donde, m_ς es la masa de las partículas de la especie ς y $V_{\xi,t}^\varsigma$ es la velocidad del centro de masa de las partículas de la especie ς calculada con la ecuación 3.19.

En el modelo se adoptan dos tipos de colisión multipartículas consecutivos. La primera es una colisión que involucra todas las partículas en la celda, sin importar su especie, y se implementada mediante el operador rotacional $\widehat{\omega}$, de la ecuación 3.3. La segunda colisión ocurre solamente entre partículas de una misma especie, y se define aplicando un operador de rotación $\widehat{\omega}^\varsigma$ para cada especie ς . Este segundo operador actúa solamente sobre las partículas de la especie ς . Para cada evento de colisión se eligen nuevos operadores de rotación para cada celda y de para cada especie. El proceso de colisión multipartículas puede ser dividido en dos pasos independientes. En cada celda ξ , primero ocurre la colisión para todas la especies:

$$\mathbf{v}^{s'} = V_\xi + \widehat{\omega}_\xi(\mathbf{v}^s - V_\xi) , \quad (3.21)$$

donde, \mathbf{v}^s es la velocidad antes de la colisión de la partícula s con todas las partículas de la celda ξ y $\mathbf{v}^{s'}$ es la velocidad de la partícula después de esta primera colisión. Luego en el segundo paso se aplica el operador rotacional a cada una de las especies

$$\mathbf{v}^{s*} = \sum_{\varsigma} \Theta_s^\varsigma (V_\xi'^\varsigma + \widehat{\omega}_\xi^\varsigma (\mathbf{v}^{s'} - V_\xi'^\varsigma)) , \quad (3.22)$$

donde, $V_\xi'^\varsigma$ es la velocidad del centro de masa de las partículas de la especie ς que están en las celdas ξ , después del primer paso (ecuación 3.21). Cabe destacar que $\widehat{\omega}_\xi$ se aplica a todas las partículas en el celda, mientras que $\widehat{\omega}_\xi^\varsigma$ solamente se aplica a las partículas de las especies ς que están en la celda.

De las ecuaciones 3.21 y 3.22 se obtiene que la velocidad de una partícula luego de las dos colisiones puede ser expresada como:

$$\mathbf{v}^{s*} = V_\xi + \widehat{\omega}_\xi(\Theta_\xi^\varsigma V_\xi'^\varsigma - V_\xi) + \sum_{\varsigma} \Theta_s^\varsigma (\widehat{\omega}_\xi^\varsigma \widehat{\omega}_\xi (\mathbf{v}^s - V_\xi'^\varsigma)) . \quad (3.23)$$

Sobre la base de este esquema de dos pasos en la dinámica de colisión multipartículas, en la que se representa un fluido de varios componentes, se propone una regla de colisión que logre la separación de las especies inmiscibles, manteniendo la conservación de la masa, energía y momento en cada celda durante la aplicación del operador de colisión.

Para el diseño de esta nueva regla se estudia los mecanismos usados en la simulación por dinámica molecular de la descomposición espinodal de fluidos Lennard-Jones 12 – 6 binarios [66]. En estos modelos las interacciones entre los pares de partículas dependen si ambas son de la misma especie o no:

- Si las especies son iguales, la interacción llega hasta una distancia r_c , llamada radio de corte entre dos partículas. La región definida por el radio de corte r_c se divide a su vez en una parte cercana donde la interacción es repulsiva y otra más alejada donde la interacción es atractiva. Estas dos regiones están divididas por un punto de equilibrio, r_{eq} , en el cual la fuerza de interacción es nula.
- En cambio, si las partículas son de especies diferentes, la distancia lineal de interacción entre ellas es más corta $r_c^{(1/6)} = r_{eq}$, y en ésta región sólo existe interacción repulsiva.

Como una primera aproximación se plantea cambiar el primer paso de la dinámica de colisión multipartículas de la ecuación 3.21 de forma tal para que logre representar la fuerza de repulsión de especies diferentes.

Para introducir la repulsión entre partículas de diferentes especies, además de las velocidades de los centros de masa de las especies V_ξ^ς , donde $\varsigma = A$ o B , se define $\mathbf{r}_{AB} \equiv \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B$ como el vector que separa los centros de masa de las especies A y B que están a su vez en las posiciones \mathbf{r}_A y \mathbf{r}_B respectivamente y a $\hat{\mathbf{r}}_{AB}$ como el vector unitario en la dirección de \mathbf{r}_{AB} . En este primer paso se propone una colisión o rotación sólo para las velocidades del centro de masa, dada por:

$$V_\Lambda^\varsigma = \kappa n_\xi^\varsigma m_\varsigma \hat{\mathbf{r}}_{AB} + V_\xi^\varsigma , \quad (3.24)$$

donde, se introducen el parámetro κ , que ésta relacionado con la fuerza de repulsión y el símbolo ζ' , que se refiere a las partículas de fase contraria a ζ . Notese que la ecuación anterior produce una componente de velocidad en la dirección de \mathbf{r}_{AB} , la cual se suma a la velocidad previa de los centros de masa. La intensidad de la velocidad resultante depende de parámetro κ y de la cantidad de partículas de fase contraria que están presentes en la celda, de forma tal que a mayor número de partículas de especie ζ' , mayor será la repulsión que sienta el centro de masa de las especie ζ . Seguidamente el módulo de la velocidad se ajusta al valor que tenía antes de la colisión, a través de la expresión:

$$\tilde{V}_\xi^\zeta = \frac{V_\Lambda^\zeta}{|V_\Lambda^\zeta|} |V_\xi^\zeta|, \quad (3.25)$$

logrando así conservar el momento en cada celda de la simulación. El segundo paso de la dinámica viene dado por:

$$\mathbf{v}^{s*} = \sum_\zeta \Theta_s^\zeta \left(\tilde{V}_\xi^\zeta + \hat{\omega}_\xi^\zeta (\mathbf{v}^s - V_\xi^\zeta) \right), \quad (3.26)$$

donde se aplica el operador rotacional para simular la colisión entre elementos de una misma especie con las nuevas velocidades de los centros de masa.

3.3.2. Simulación de una interfase.

Para la simulación de formación de la estructura de la interfase se escogió una caja de volumen $\mathcal{V} = L \times L \times 1$ con $L = 100$, divididas en celdas cúbicas de lado $l = 1$ y con condiciones de contorno reflejantes. En la mitad derecha de la caja, $x = 0, 1, \dots, 49$, se colocan aleatoriamente las partículas de la especie A de masa $m_A = 1$ y en el otro lado, $x = 50, 51, \dots, 99$, las partículas de la especie B de masa $m_B = 1$. Las velocidades de las todas las partículas se distribuyen de forma aleatoria, con una distribución de velocidades de Boltzmann, alrededor de un valor promedio definido por $\langle v \rangle = \sqrt{2k_B T/m}$, donde, los grados de libertad de $d_f = 2$, por representar un fluido binario en dos dimensiones, y el intervalo de tiempo entre colisiones es $\tau = 1$. Los valores del número de partículas de cada especie n_ξ^ζ ,

la temperatura reducida T , la intensidad de repulsión κ , son los parámetros de la simulación.

En la figura 3.5 se muestra el estado inicial del sistema, en el cual se observa las fases bien definidas, y tres estados del sistema luego de $t = 10000$ iteraciones para una temperatura $T = 0,12$, un parámetro de repulsión $\kappa = 2,0$, una densidad de partículas $n_\xi^\xi = 2, 5$ y 8 .

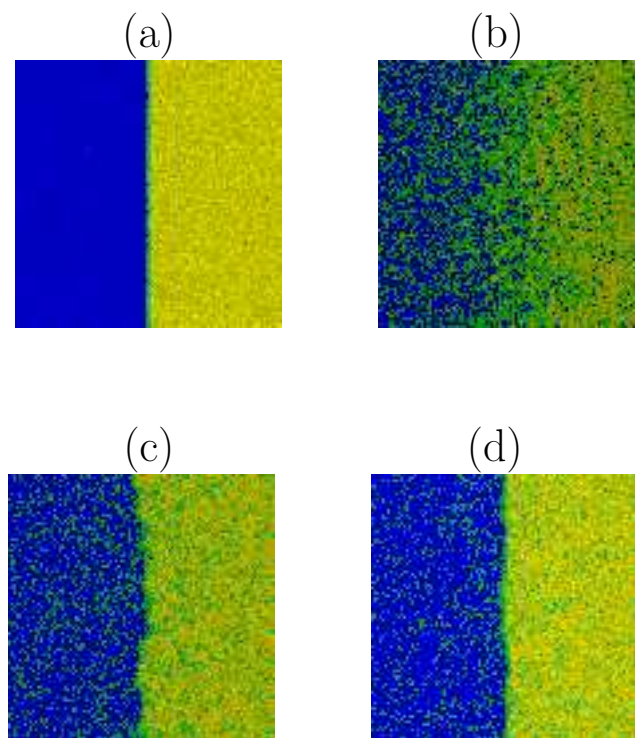


Figura 3.5: Fotos de la estructura de la interfase para $T = 0,12$ y $\kappa = 2,0$. (a) Estado inicial. (b), (c) y (d) Estado del sistema luego de $t = 10000$ iteraciones para $n_\xi^\xi = 2$, $n_\xi^\xi = 5$ y $n_\xi^\xi = 8$ respectivamente.

En dichas figuras, se puede notar que para densidades bajas, $n_\xi^\xi = 2$, la interfase es muy difusa debido a que la baja densidad hace que la fuerza de repulsión entre los fluidos sea débil y no es capaz de mantenerlos separados. Pero si la densidad de partículas se incrementa, figuras 3.5 (c) y (d), se observa que la interfase se va definiendo cada vez más.

Para la descripción de estas interfases, se medirá la función distribución longitudinal de partículas, a lo largo del eje x , definida como

$$\Phi(x) = \left\langle n^\varsigma(x) - n^{\varsigma'}(x) \right\rangle_{\xi_x}, \quad (3.27)$$

donde, $n^\varsigma(x)$ es el número de partículas en la posición x , $\langle \cdot \cdot \rangle_{\xi_x}$ es un promedio sobre todas las celdas ξ_x , que es el conjunto de celdas que están a una distancia x del conjunto de celdas que se encuentran en el origen de coordenadas.

La figura 3.6 muestra la distribución longitudinal de la diferencia de partículas de ambas especies $\Phi(x)$, en función de la posición x . Para un tiempo de simulación de $t = 10000$ iteraciones con $n_\xi^\varsigma = 5$, $T = 0,1$, $\kappa = 0,1$ (a) y $\kappa = 0,2$ (b).

Analíticamente, para describir una interfase en el equilibrio, se puede comenzar con el funcional de Ginzburg–Landau para la energía libre de un fluido con dos especies A y B :

$$F_{GL}[\Phi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left[-\frac{a_2}{2}\Phi(\mathbf{r})^2 + \frac{a_4}{4}\Phi(\mathbf{r})^4 + \frac{K}{2}|\nabla\Phi(\mathbf{r})|^2 \right], \quad (3.28)$$

donde, $\Phi(\mathbf{r})$ es el parámetro de orden definido como la diferencia entre la densidad local de cada una de las fases $\Phi(\mathbf{r}) = n_\xi^\varsigma(\mathbf{r}) - n_\xi^{\varsigma'}(\mathbf{r})$; los coeficientes a_2 y a_4 son valores mayores que cero para garantizar la condición de estabilidad y lograr un rompimiento de la simetría durante la transición a una temperatura T menor que la temperatura crítica T_c ; el término $K/2|\nabla\Phi(\mathbf{r})|^2$ representa el costo energético en la formación de la interfase fluido–fluido donde K también es un parámetro mayor que cero, para garantizar la formación de la interfase. Despreciando las fluctuaciones, uno encuentra que el parámetro de orden $\Phi(\mathbf{r})$ en el equilibrio o en un punto muy alejado de la interfase, $\Phi_{eq} = \pm(a_2/a_4)^{1/2} = \pm 1$, el signo positivo corresponde a una fase ς y el negativo corresponde a la otra ς' . Aunque la ecuación 3.28 es para sistemas no conservativo, la solución para el equilibrio es general para ambos tipos de sistemas conservativo y no conservativo.

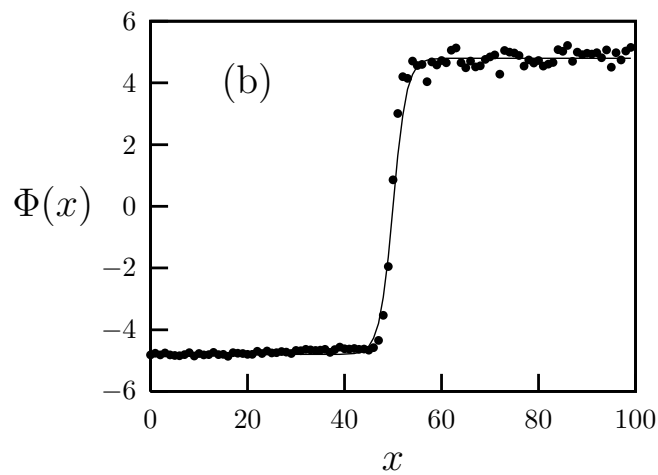
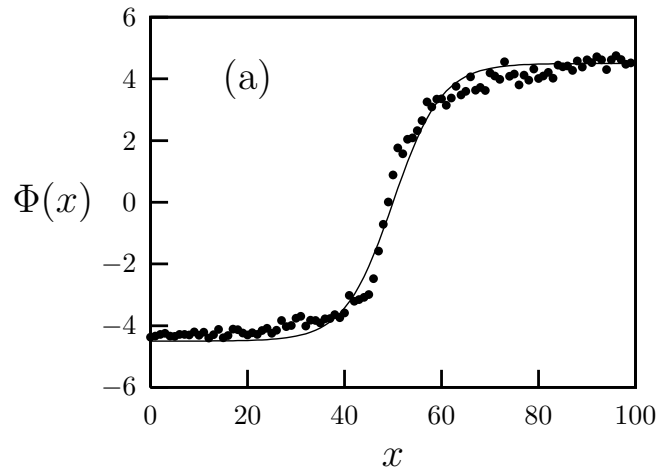


Figura 3.6: Distribución longitudinal del parámetro de orden $\Phi(x)$ en función de la posición x . Para un tiempo de simulación de $t = 10000$ con $n_{\xi} = 5$, $T = 0,05$. (a) $\kappa = 0,1$. (b) $\kappa = 0,2$. Las líneas continuas representan el mejor ajuste de la ecuación 3.29, obteniéndose un espesor de la interfase de $\zeta \approx 10,0$ (a) y $\zeta \approx 2,8$ (b).

Para un sistema de dos dimensiones, la variación de la concentración es unidimensional. Imponiendo condiciones de contorno homogéneas $d\Phi^\varsigma/dx = 0$ y para $\Phi^\varsigma = \Phi_{eq}$ en $x = \pm\infty$, la solución del funcional Ginzburg–Landau para la energía libre (ecuación 3.28) es:

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{a_2}{a_4}} \tanh \frac{x}{\zeta}, \quad (3.29)$$

donde, ζ es el ancho de la interfase y está dado por $\zeta = \sqrt{2K/a_2}$, el cual diverge cuando $a_2 \rightarrow 0$ o cuando $T \rightarrow T_c$. La línea continua en la figura 3.6 corresponde a este resultado. luego de ajustar la ecuación 3.29 a los valores obtenidos en las simulaciones de donde se obtiene el ancho de la interfase para cada caso.

Para explicar el descenso en el valor del prefactor de la ecuación 3.29 $\sqrt{a_2/a_4}$, ver figura 3.6. En la figura 3.5 podemos notar que a medida que la interfase se hace más ancha, más partículas pasan de una fase a otra, hasta que se establece un equilibrio de intercambio de partículas, es decir, el número de partículas de fase contraria ς' que se encuentra en una fase ς permanece constante en el tiempo. Por consiguiente, la densidad de partículas en un punto alejado de la interfase disminuye respecto su valor inicial y por consiguiente, este prefactor depende de la temperatura.

La figura 3.7 muestra tres graficos que muestra el ancho de la interfase ζ para dos instantes de tiempos diferentes. El primero, figura 3.7 (a) es para una densidad de $n_\xi^\varsigma = 2$, el segundo $n_\xi^\varsigma = 5$ y el tercero es para $n_\xi^\varsigma = 8$, todos para un valor del parámetro de repulsión de $\kappa = 2,0$. En éstas tres gráficas se puede ver en primer lugar que la densidad de partículas afecta significativamente el ancho de la interfase y por consiguiente a sus propiedades termodinámicas. A medida que la densidad se incrementa, las interacciones entre las partículas también se incrementan, produciendo una mayor repulsión entre partículas de especies diferentes y en consecuencia la interfase se hace más delgada. También se puede ver que la densidad de partículas juega un papel predominante en la estabilización de la interfase.

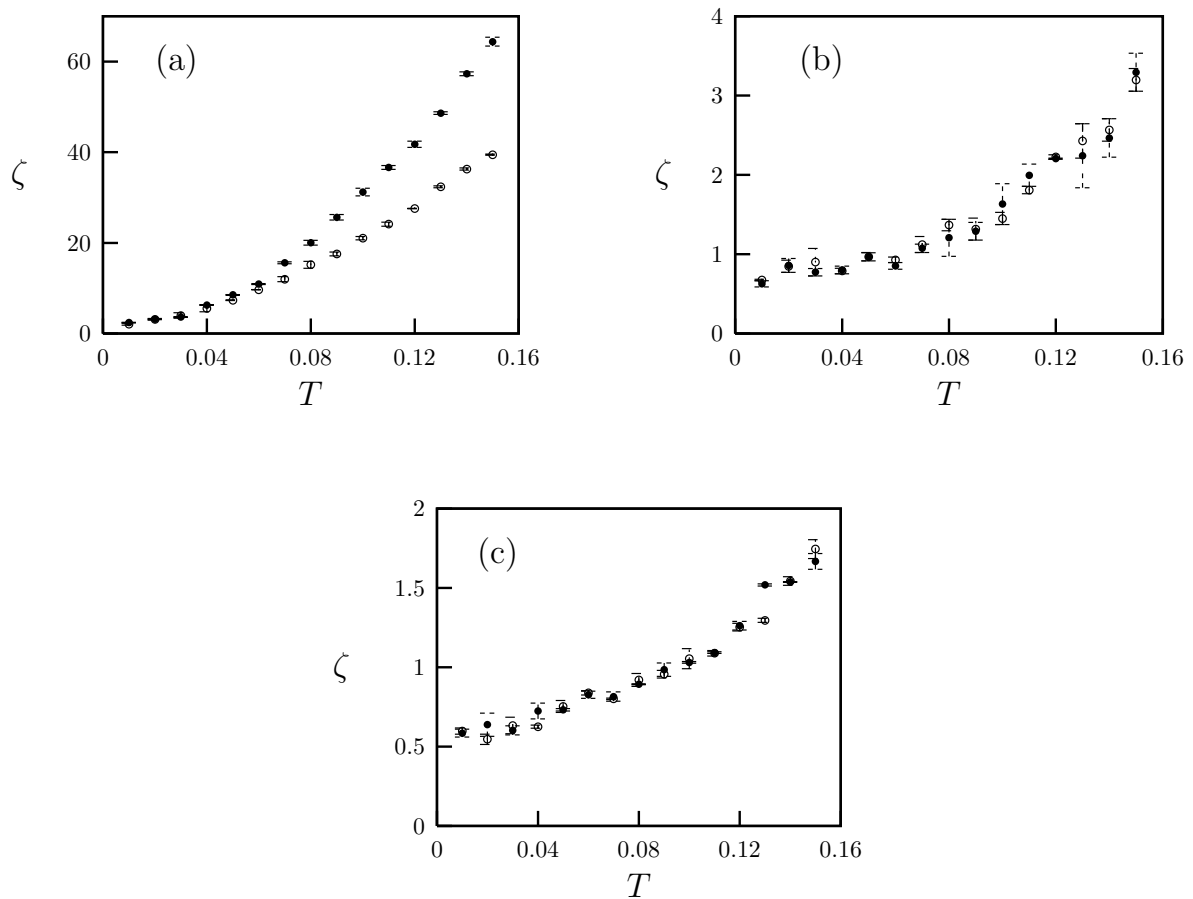


Figura 3.7: El ancho de la interfase ζ como función de la temperatura T para un parámetro de repulsión de $\kappa = 2,0$ y tiempos $t = 10000$ iteraciones (\circ) y $t = 20000$ iteraciones (\bullet). (a) $n_\xi = 2$, (b) $n_\xi = 5$, (c) $n_\xi = 8$. Las barras de error representan la desviación estándar de la dispersión de los puntos en el ajuste de la ecuación (3.29).

En la figura 3.7 (a) se aprecia que para densidades bajas y una temperatura $T > 0,05$ el ancho de la interfase ξ crece la pasar de $t = 10000$ a $t = 20000$ iteraciones, lo que indica que las especies se siguen mezclando, es decir, la interfase es inestable. Pero si se incrementa la densidad de partículas a $n_\xi^5 = 5$ a $n_\xi^8 = 8$, los resultados de ancho de la interfase ζ luego de $t = 10000$ y $t = 20000$ iteraciones se solapan como se muestra en las figuras 3.7 (b) y 3.7(c). Esto indica que la interfase se ha estabilizado y el sistema se encuentra en equilibrio.

En cuanto al rol que juega la temperatura en el ancho de una interfase, sabemos tanto por resultados teóricos como experimentales que si ésta se incrementa, el ancho de la interfase aumenta hasta que ambas especies se mezclan por completo para formar un sola fase homogénea. Esta característica también se obtiene en las simulaciones con la dinámica de colisión multipartículas con repulsión. En las tres gráficas de la figura 3.7 se observa que hay un incremento del ancho de interfase ζ con el aumento de la temperatura T .

Para un sistema tipo modelo de Ising con una aproximación de campo medio [56], se tiene que los coeficiente de la ecuación 3.28 son:

$$a_2 = \frac{S - 4T}{2a^3}, \quad a_4 = \frac{4T}{3a^3}, \quad K = \frac{S}{4a}, \quad (3.30)$$

donde, a es la distancia entre los sitios vecinos, S es el valor promedio de la energía de interacción entre los sitios vecinos, y T es la temperatura del sistema, con estas relaciones y con la ecuación 3.29 podemos llegar a una relación para el ancho de una interfase:

$$\zeta = \sqrt{\frac{2K}{a_2}} \sim \frac{1}{(T_c - T)^{1/2}} \quad (3.31)$$

donde, T_c es la temperatura crítica, es decir la temperatura para la cual el ancho de la interfase diverge $a_2 \rightarrow 0$, lo que equivale a $T_c = S/4$ en este modelo.

En la figura 3.8 se muestra el mejor ajuste de la ecuación 3.31 con los datos de la simulación de las figuras 3.7 (b) y (c), obteniendose una temperatura crítica de $T_c \approx 0,162$

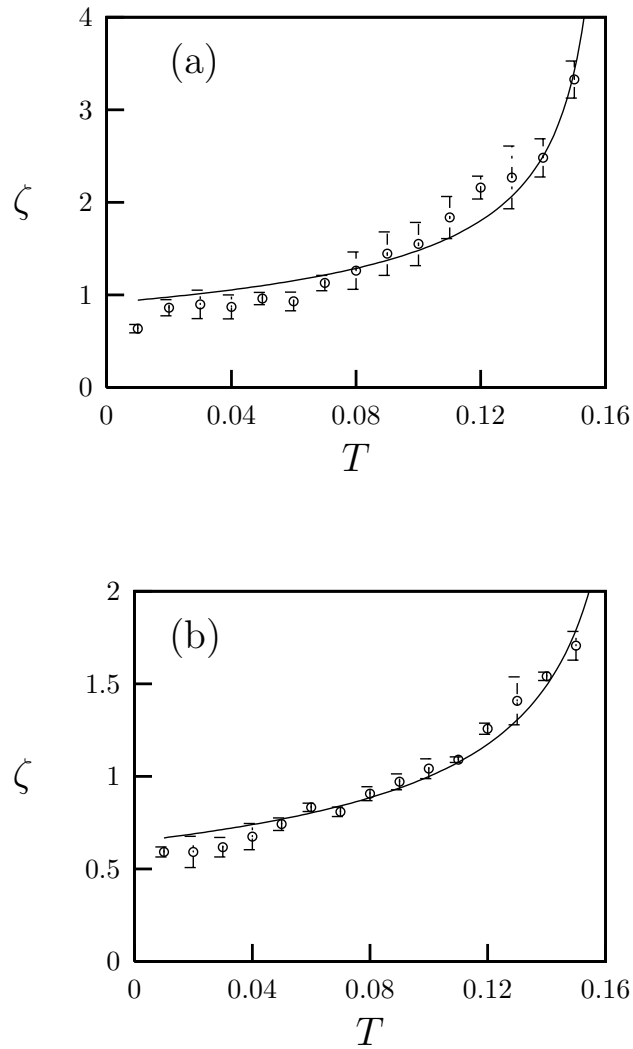


Figura 3.8: El ancho de la interfase ζ como función de la temperatura T . (a) $n_\xi = 5$, (b) $n_\xi = 8$, con $\kappa = 0,2$. Las líneas continuas representan el mejor ajuste de la ecuación 3.31, con una temperatura crítica de $T_c \approx 0,162$ en (a) y $T_c \approx 0,173$ en (b). Las barras de error representan la desviación estándar de la dispersión de los puntos en el ajuste de la ecuación 3.29.

para una densidad de partículas $n_{\xi}^{\zeta} = 5$ y $T_c \approx 0,173$ para $n_{\xi}^{\zeta} = 8$. En esta figura se nota que para ambos casos los datos de la simulación poseen un muy buen ajuste a la curva teórica de la ecuación 3.31.

La figura 3.9 muestra el comportamiento del ancho de la interfase en función de parámetro de repulsión κ , manteniendo la temperatura constante en $T = 0,1$ y para una densidad de partículas también constante de $n_{\xi}^{(\zeta')} = 5$. Como era de esperarse, para bajos valores la repulsión de κ el ancho de la interfase ζ es mayor que para aquellos valores de κ más elevados. Con este modelo el valor de ζ decae al aumentar κ , hasta llegar a una asíntota en $\zeta \approx 1,2$.

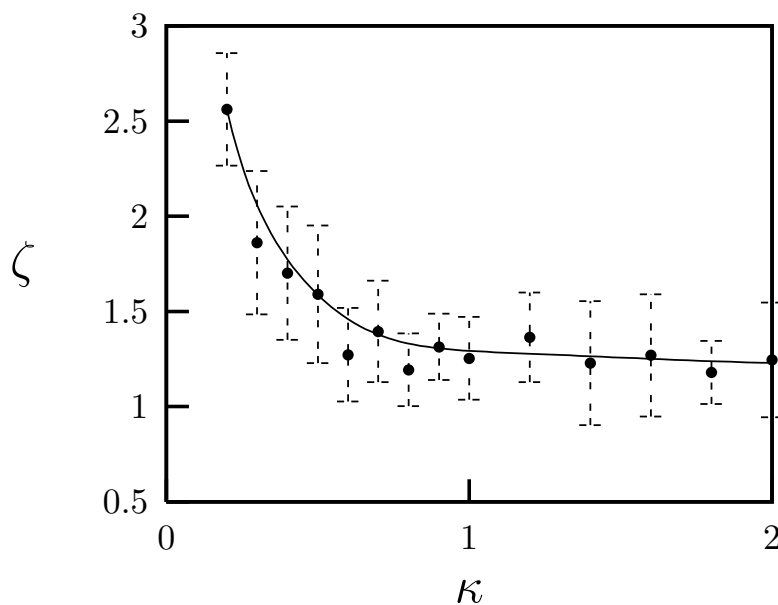


Figura 3.9: El ancho de la interfase ζ como función del parámetro de repulsión κ , para $n_{\xi}^{\zeta} = 5$, $T = 0,1$ y tiempos de simulación $t = 10000$ iteraciones. La línea continua es la mejor curva entre los puntos. Las barras de error representa la desviación estándar de la dispersión de los puntos en el ajuste de la ecuación 3.29.

En un sistema de dos dimensiones, para calcular la tensión superficial entre dos fases se utiliza una ecuación de balance de energía:

$$\Gamma = \int dx \left(f_o(\Phi(x)) - f_o(\Phi_{eq}) + \frac{K}{2} \left(\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right)^2 \right), \quad (3.32)$$

donde, Γ es la tensión superficial, f_o es la energía libre local por unidad de volumen de la interfase que es evaluada en las proximidades de la interfase $\Phi(x)$ y en una región alejada de la misma Φ_{eq} . El tercer término de la integral es la parte energética de la iteración local [56]. Por la condición de minimización de la energía es necesario que se cumpla

$$f_o(\Phi(x)) - f_o(\Phi_{eq}) = \frac{K}{2} \left(\frac{\partial g(x)}{\partial x} \right)^2, \quad (3.33)$$

por consiguiente,

$$\Gamma = K \int dz \left(\frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right)^2. \quad (3.34)$$

Para resolver la integral de la ecuación 3.34, se emplea la solución de la ecuación de Ginzburg–Landau (ecuación 3.28), y teniendo en cuenta que el espesor de interfase ζ es positivo, el resultado de esta integral viene dado por:

$$\Gamma = \frac{4 K \Phi_{eq}^2}{3 \zeta}, \quad (3.35)$$

donde, los valores de Φ_{eq} y ζ se pueden calcular a través de un ajuste de curva de la función de la ecuación 3.29 con los perfiles $\Phi(x)$ obtenidos por la técnica de simulación mesoscópica. Como la energía entre sitios vecinos en un modelo de Ising K es independiente de la temperatura T , es posible calcular la tensión superficial Γ de la simulación y obtener el comportamiento de dicha propiedad termodinámica que genera el modelo, al mantener κ y n_ξ^ζ constantes.

En la figura 3.10 se presentan los valores de la tensión superficial Γ en función de la temperatura T , para un parámetro de repulsión $\kappa = 5$, y un densidad de partículas $n_\xi^\zeta = 5$.

En esta figura se observa que, a bajas temperaturas la tensión superficial Γ permanece constante y a partir de $T = 0,06$ el valor de esta propiedad desciende de igual manera como lo hace una interfase gas-liquido en equilibrio cuando se incrementa la temperatura [56]. En las simulaciones de tensión superficial de interfases liquido-liquido tipo Lennard-Jones [54] se ha encontrado que existe un máximo en la tensión superficial a bajas temperaturas y luego un descenso de dicha propiedad a partir del punto donde la temperatura comienza a jugar un papel primordial. Este comportamiento a abajas temperaturas, que no está presente en la figura 3.10, es producto de las interacciones intermoleculares que se hacen más importante, creando un ordenamiento del fluido. Este efecto no puede aparecer en el este modelo ya que sólo contempla interacciones por colisiones. Sin embargo, esta técnica describe el compor-

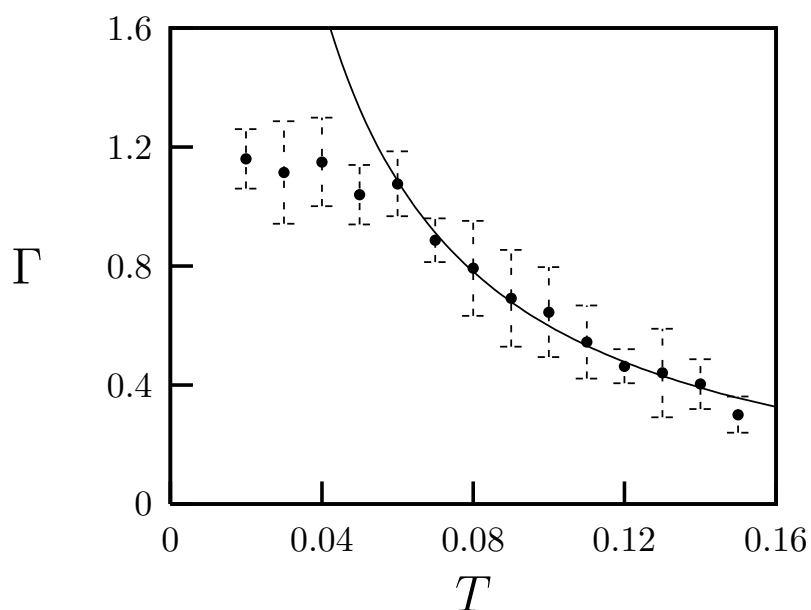


Figura 3.10: La tensión superficial Γ como función de la temperatura T , para $\kappa = 5,0$, $n_{\xi}^{\xi} = 5$ y tiempos de simulación de 10000. La línea sólida representa el mejor ajuste la ecuación 3.36 para los puntos de la simulación, donde $T_c \approx 0,788$. Las barras de error representa la desviación estándar sobre varias realizaciones con condiciones iniciales diferentes.

tamiento de la tensión superficial cuando el efecto de la temperatura es más preponderante.

Al sustituir las relaciones moleculares para un modelos de Ising de la ecuación 3.30 y la ecuación 3.35, en el ecuación de Ginzburg–Landau 3.28 se llega la descripción molecular para la tensión superficial

$$\Gamma = \frac{K (T_c - T)}{2 T a \zeta} \sim \frac{(T_c - T)^{3/2}}{T}. \quad (3.36)$$

En la figura 3.10 se puede comparar la curva proveniente de ajustar la temperatura crítica de la ecuación 3.36 con los valores obtenidos de la simulación a partir de una temperatura de $T = 0,06$. Notese que se obtiene obteniendo un muy buen ajuste con los datos simulados para una temperatura crítica de $T_c \approx 0,788$. Lo anterior corrobora que la modificación hecha en la dinámica de colisión multipartículas para incluir el componente repulsivo es suficiente para simular la formación de interfases en fluidos inmisibles a un nivel mesoscópico cuando la temperatura domina la dinámica.

3.3.3. Simulación de una interfase con obstáculos.

Para estudiar el efecto que tiene un medio heterogéneo sobre la interfase, se introducen en la caja de simulación descrita en la sección de anterior obstáculos cilíndricos inmóviles cuyos ejes de simetría son paralelos al eje z . Los obstáculos se distribuyen de manera aleatoria en el espacio, variando su densidad, la cual está definida como $\phi = \pi \sigma^3 l_z N_{obs}/\mathcal{V}$, donde, l_z es la altura de la caja de simulación y σ el radio de los obstáculos.

La figura 3.11 muestra la interfases para tres simulaciones con diferentes densidades de obstáculos. A de la izquierda el sistema no tiene obstáculos, es decir, $\phi = 0,00$; en el medio la densidad de obstáculos es $\phi = 0,25$ y la derecha $\phi = 0,50$. En los tres casos se mantiene la temperatura constante en $T = 0,05$; la repulsión en $\kappa = 5,0$; la densidad de partículas en $n_\xi^\sigma = 10$ y el radio de los obstáculos en $\sigma = 5$ unidades de celda.

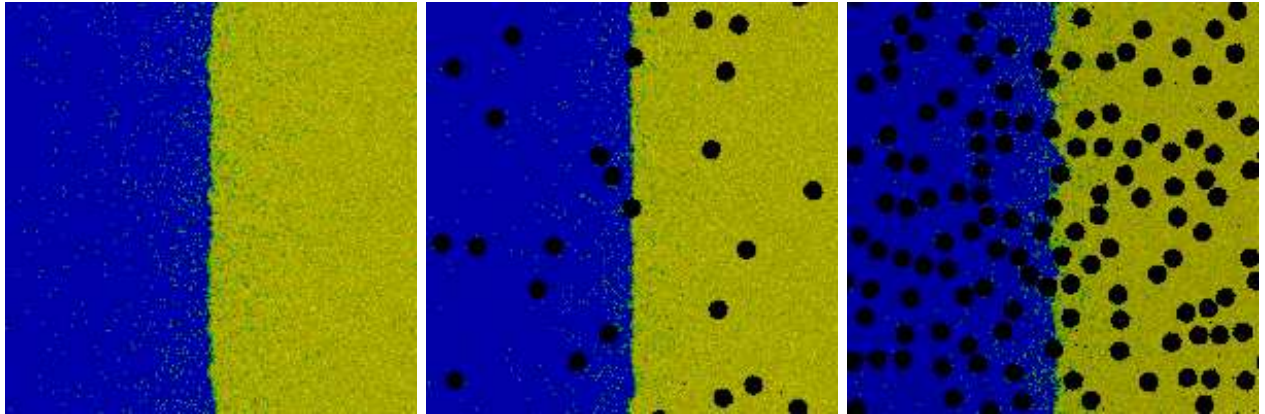


Figura 3.11: *Formación de la interfase para diversas densidades de obstáculos luego de $t = 10000$ iteraciones. Los parámetros usados son: $\kappa = 5$, $n_{\xi} = 5$, $T = 0,05$ y densidades de obstáculos $\phi = 0,00$ (izquierda), $\phi = 0,25$ (medio) y $\phi = 0,50$ (derecha).*

En la figura 3.11 vemos que la interfase se desvía de la línea central pasando por los obstáculos que están más cercanos a ella. Este fenómeno se origina por el desbalance que introduce la presencia de los obstáculos en la presión que ejercen ambos fluidos sobre la interfase. La presión que ejerce el fluido que contiene un obstáculo cercano a la interfase es menor que la presión que ejerce el fluido de fase contraria, es decir, los obstáculos absorben la presión que el fluido ejerce sobre la interfase, haciendo que las partículas que se encuentran entre la interfase y el obstáculo se desplacen, y en consecuencia el fluido que ejerce mayor presión ocupa este espacio deformando la interfase. Durante las simulaciones se observó que la deformación de la interfase es independiente del radio de los obstáculos.

En la figura 3.12 se caracteriza la deformación de la interfase con la variación de la densidad de obstáculos ϕ . Para ello se utiliza el espesor ζ debido a que, la rugosidad hace que en promedio la interfase sea más ancha. En esta figura se muestra los puntos de la simulación de ζ , con $\kappa = 5$, $n_{\xi}^{(\zeta)} = 5$, $T = 0,05$ y un tiempo de simulación de $t = 10000$ iteraciones. El perfil de densidad con la corrección de volumen viene dado por:

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{a_2}{a_4}} \tanh \frac{x}{(\zeta(1-\phi))}, \quad (3.37)$$

donde, $(1 - \phi)$ es la corrección hecha en la densidad por la presencia de los obstáculos.

De la expresión anterior y con los resultados de las simulaciones se extrae el mejor ajuste de ζ y se gráfica en función de ϕ . En la figura 3.37 se aprecia que ζ se incrementa linealmente con el aumento de la densidad de los defectos ϕ . Esto se debe a que al incrementarse el valor de ϕ , la probabilidad de que los obstáculos se encuentren cerca de la interfase también crece linealmente y, por consiguiente, la deformación se incrementa de la misma forma. Las barras de error son relativamente grandes, ya que, la distribución aleatoria de los obstáculos

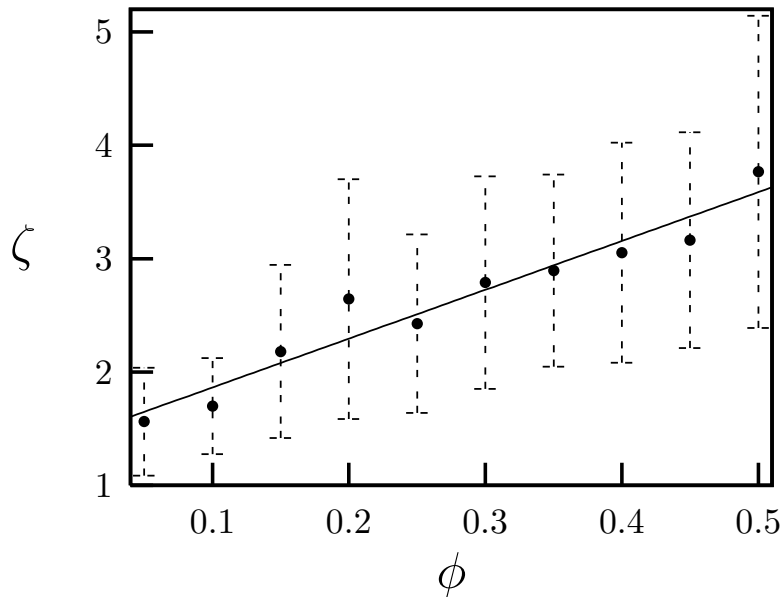


Figura 3.12: Ancho de la interfase ζ en función de la densidad de obstáculos ϕ . Para $\kappa = 5$, $n_{\xi}^{\zeta} = 5$, $T = 0,05$ y tiempos de simulación de $t = 10000$ iteraciones. Las barras de error, vienen dadas por la desviación estándar de la dispersión de los puntos en el ajuste de la ecuación 3.29.

introducen un error significativo en el cálculo de ζ .

3.4. Separación de fluidos binarios.

Cuando se mezcla un fluido binario obteniendo un estado homogéneo a alta temperatura, y este es enfriado, el mismo pasa a un estado de dos fases separadas por una interfase. Pero, antes de llegar a este estado final se forman dominios de cada una de las fases los cuales crecen algebraicamente con el tiempo [1, 2]. Este crecimiento se puede expresar como $R_t \sim t^\alpha$, donde R_t es el radio promedio del dominio de la fase y α es el exponente de crecimiento de dicho dominio. Este proceso de separación ha sido investigado experimentalmente [69], analíticamente [2] y numéricamente con ecuaciones de diferenciales [71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 66]. Otras técnicas numéricas se han implementado para la descripción del proceso de separación de fase, tal es el caso de hidrodinámica con el método lattice gases [78, 79, 80, 81], con el método lattice Boltzmann [82] y dinámica de partículas disipativa [83, 84, 89].

Los estudios numéricos que se han hecho en separación de fases, incluyen métodos en todas las escalas. En la escala *macroscópica* los métodos están basados en solución numérica de la ecuación de Navier-Stokes [91] o la ecuación de Cahn-Hilliard [43, 71, 92]. En la escala *mesoscópica*, se han usado los métodos lattice Boltzmann [85, 86, ?, 88], lattice gases [74, 75], dinámica de partículas disipativa [89] y modelos de Ising [90], entre otros. Finalmente, a escala *microscópicas* tenemos la dinámica molecular clásica [66].

Los métodos de simulación a un nivel mesoscópico proporcionan una alternativa que requiere un esfuerzo computacional razonable. Sobre todo si se quiere estudiar algún fenómeno que requiere de un número considerable de partículas que se desplazan por un medio heterogéneo, como es el caso de los procesos de separación de fases. Es por ello que en esta sección se utiliza la técnica de la dinámica de colisión multipartículas con repulsión para simular la separación de fases, empleando los mismos procedimientos implementados en la sección anterior.

3.4.1. Separación de fases en un medio libre.

Comenzaremos con describir la separación de dos fases en un espacio con un volumen $\mathcal{V} = L \times L \times 1$ sin obstáculos, con condiciones de contorno periódicas en los ejes x y y , y reflexivas en el eje z , para luego comparar los resultados con las leyes de crecimiento clásicas en dos dimensiones [1, 2]. Para ello se emplean los mismos parámetros espaciales que se usaron en la sección 3.2.3, pero en esta ocasión se distribuyen las partículas de la fase A y B al azar por todo el espacio usando una distribución uniforme, para así poder describir un fluido de dos fases caliente y en un estado homogéneo. Luego, el fluido se enfría a una temperatura menor que la temperatura crítica, haciendo que la configuración homogénea pierda estabilidad y se formen dominios de ambas fases.

Para estudiar el efecto que tiene los obstáculos en la formación de dominios se simula en un sistema cuyo volumen $\mathcal{V} = L \times L \times 1$ con $L = 100$ y con condiciones periódicas en los ejes x y y , y reflexivas en el eje z . Se aplican las reglas de separación que se usaron en la sección anterior fijando los valores de $n_\xi^\zeta = 5$, $\kappa = 5$, $T = 0,09$. En la figura 3.13 se muestra las configuraciones del sistema a diferentes tiempos de simulación, observándose una clara definición de los dominios de fase a medida que transcurre el tiempo.

Para caracterizar la formación de los dominios, se mide el exponente de crecimiento de los mismos, para ello se emplea la función de correlación espacial discretizada en celdas,

$$C[r, t] = \langle \Phi_t(\mathbf{r}_{\xi'}) \Phi_t(\mathbf{r}_\xi) \rangle_{\xi, \xi'} , \quad (3.38)$$

donde, $r = \mathbf{r}_\xi - \mathbf{r}_{\xi'}$ es la distancia entre los centros de las celdas ξ y ξ' , $\langle \dots \rangle_{\xi, \xi'}$ es un promedio espacial sobre todo el conjunto de celdas ξ y ξ' posibles y $\Phi_t(\mathbf{r}_{\xi'})$ es la diferencia de densidades de las especies A y B en la celda ξ en el tiempo t , y se define como

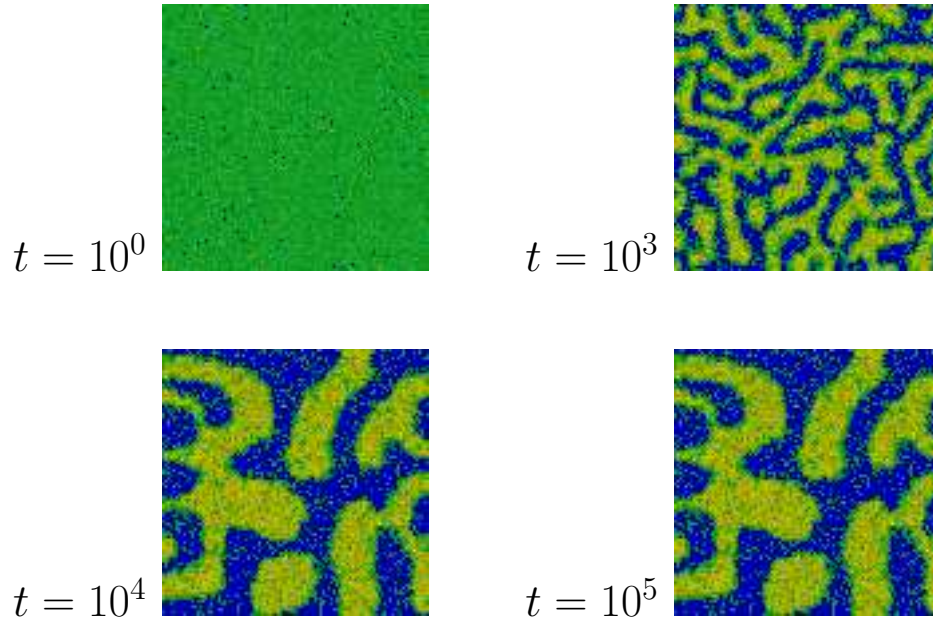


Figura 3.13: Fotos del sistema para $\kappa = 5,0$, $n_\xi^\zeta = 5$, $T = 0,09$ y tiempos de simulación de $t = 0, 1000, 10000$ y 100000 de arriba hacia abajo.

$$\Phi(\mathbf{r}_\xi, t) = (n_\xi^\zeta(\mathbf{r}_\xi, t) - n_\xi^{\zeta'}(\mathbf{r}_\xi, t)) . \quad (3.39)$$

La medida del radio promedio de los dominios de las fases en el tiempo t , R_t , se define como la distancia r a la cual ocurre el primer cero de función de correlación espacial de la ecuación 3.38.

$$R_t = \text{mín} \{r \forall C[r, t]\} = 0 . \quad (3.40)$$

De la simulación para un instante de tiempo t , un lado $L = 200$, con una densidad de $n_\xi^\zeta = 5$, una temperatura $T = 0,09$ y parámetro de repulsión de $\kappa = 5$, se calcula R_t y obtiene la figura 3.14, la cual muestra la evolución temporal del radio promedio de los dominios R_t en escala logarítmica, se observa que inicialmente el crecimiento de R_t es lento y a partir de un tiempo de $t \simeq 100$ interacción el valor de R_t se incrementa de forma lineal en ésta escala. Con la pendiente de esta figura es posible calcular el exponente de crecimiento de fase $\alpha \approx 0,37$.

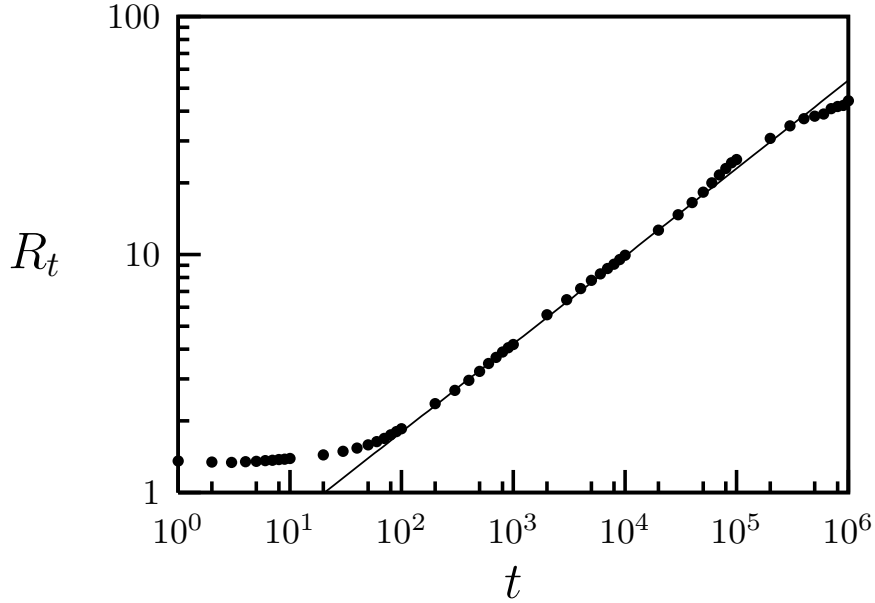


Figura 3.14: El tamaño medio de la fase R_t como función del tiempo t . Para una $n_\xi = 5$, $T = 0,09$, $\kappa = 5,0$ y $L = 200$. La línea sólida es la mejor recta que pasa entre los puntos a partir de $t = 100$ iteraciones.

El comportamiento de R_t muestra que existe un mecanismo de crecimiento de agregado de partículas a partir de $t = 100$, como primera fase del crecimiento. La velocidad de esta agregación depende de la densidad n_ξ , la temperatura T y el parámetro de repulsión κ . Para tiempos menores de $t = 100$ se observa que el crecimiento de los dominios es prácticamente nulo, se debe al hecho de que tanto la técnica como la medida no poseen la suficiente resolución como para detallar la separación de las fases dentro de la celda. La figura 3.14 también muestra que existe un cambio de escala en el valor de R_t luego de $t \simeq 10^4$ iteraciones. En este momento el radio promedio de los dominios $R_t \approx 1/4L$, es decir, que ya el sistema se ha separado en dos dominios bien definidos, por lo tanto, el cambio de escala es consecuencia de la unión de los dominios con ellos mismos a través de las fronteras periódicas.

Para el análisis del efecto que tiene la temperatura T y la repulsión κ sobre la formación de dominios, se mantiene constante la densidad de partículas en $n_\xi^\zeta = 5$. En la figura 3.15 se presentan los valores del exponente α en función de la temperatura T para $L = 100$ y $\kappa = 5$. Se observa que, a bajas temperaturas el exponente es muy cercano al valor teórico de $\alpha = 1/2$ [2], pero al incrementar la temperatura el valor del exponente desciende hasta llegar a un valor un poco mayor de $\alpha = 0,2$. Si se continua aumentando la temperatura, $T > 0,2$; el efecto térmico es tan fuerte, que las partículas de la misma fase no logran mantenerse cohesionadas, esto puede evidenciarse por el incremento del error en la medida del exponente, así como también en las fluctuaciones de los valores de los exponentes.

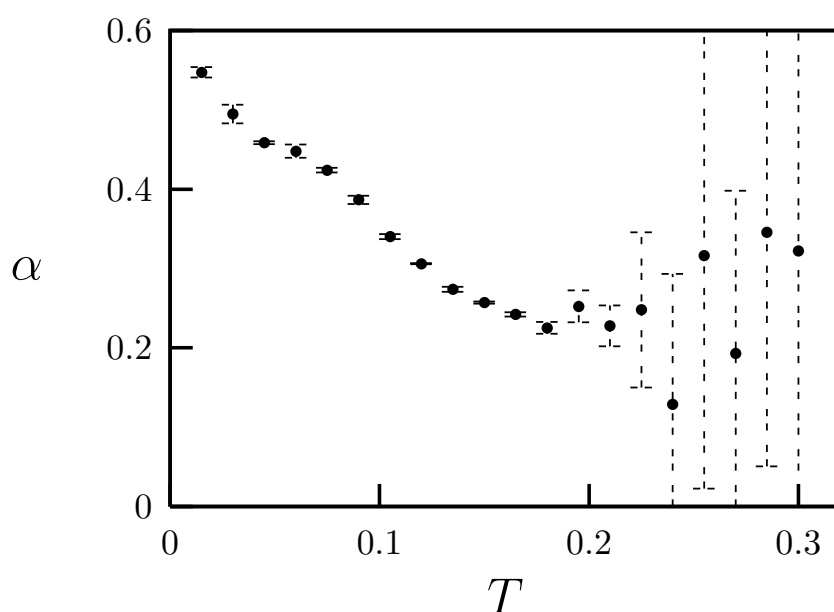


Figura 3.15: Exponente de crecimiento de la fase α en función de la temperatura T , para $n_\xi^\zeta = 5$ y $\kappa = 5$. Las barras de error representan la desviación estándar de la dispersión de los puntos en el ajuste de la recta $R_t \sim t^\alpha$.

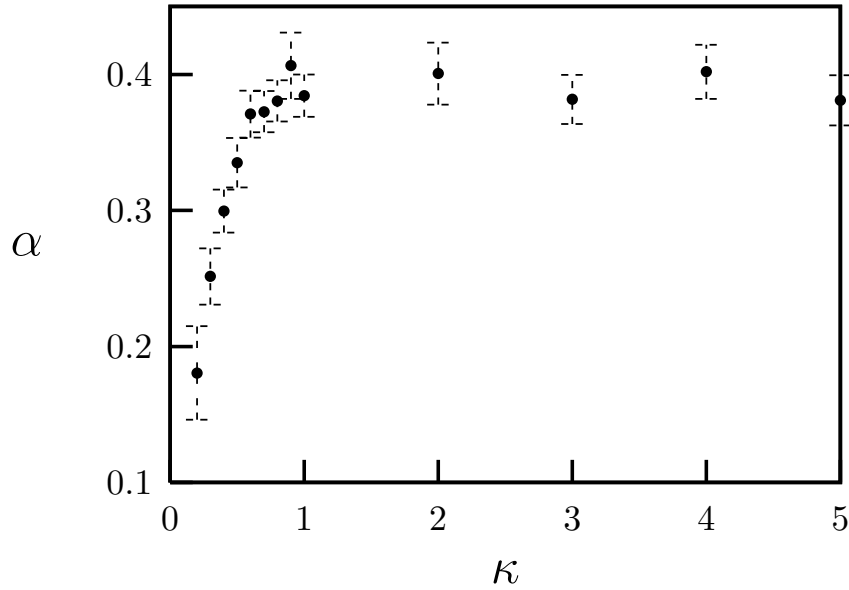


Figura 3.16: *El exponente de crecimiento de la fase α como función del parámetro de repulsión κ . Para una $n_\xi = 5$ y $T = 0,09$. Las barras de error, es la desviación estandar de la dispersión de los puntos en el ajuste de las recta ??.*

De igual modo, la figura 3.16 muestra el efecto que posee el parámetro de repulsión en el exponente de crecimiento. Para ello se mantiene el lado $L = 100$ y la temperatura se fija en $T = 0,09$; mientras que se varía el parámetro de repulsión κ . Se observa que para valores de κ bajos, el exponente de crecimiento α también es bajo y este último se incrementa a medida que aumenta el valor de κ hasta estabilizarse en un valor asintótico de $\alpha \approx 0,40$. La razón de que α no continúe incrementándose con el aumento del parámetro de repulsión κ , es porque este parámetro κ rota el vector de velocidad del centro de masa de una fase hacia la dirección del vector posición, que separa los centros de masa de las fases, del tal manera que estos centros de masa se alejen, (ver sección 3.2.1). En tal sentido, una vez que el parámetro de repulsión hace que los vectores de velocidad de los centros de masa estén en la dirección del vector posición que separan a dichos centros, los vectores de velocidad

no pueden rotar más, aunque se continúe incrementando el valor del parámetro κ , y por consiguiente el exponente α no sigue incrementándose a partir de este punto.

3.4.2. Separación de fases en un medio con obstáculos.

Para estudiar el efecto que tiene los obstáculos en la formación de dominios se simula en un sistema cuyo volumen $\mathcal{V} = L \times L \times 1$ con $L = 100$ y con condiciones periódicas en los ejes x y y , y reflexivas en el eje z . En este volumen se introducen obstáculos cilíndricos inmóviles cuyos ejes de simetría son paralelos al eje z , y que se encuentran distribuidas al azar dentro del sistema. Se aplican las reglas de separación que se usaron en la sección anterior fijando los valores de $n_\xi = 5$, $\kappa = 5$, $T = 0,09$ y variando la densidad de obstáculos $\phi = 0,00; 0,25$ y $0,50$. La figura 3.17 muestra la evolución temporal de las simulaciones para estos tres valores de ϕ . En la figura se observa que existe una mayor cantidad de dominios en el sistema a medida que se aumenta la densidad de obstáculos ϕ , es decir, la introducción de partículas inmóviles inhibe la separación de fases. Esto sucede porque al formarse un dominio entre un conjunto de obstáculos, éste crece hasta que su borde llega a los obstáculos y los mismos frenan el crecimiento, porque reducen la línea de contacto del dominio con el resto del medio, produciendo un aislamiento parcial del dominio. Este efecto se puede notar en las figuras 3.18, donde se destaca un dominio que está rodeado por las partículas inmóviles.

Para observar como influye la presencia de los obstáculos en el crecimiento y formación de las fases, en la figura 3.19 se presenta el tamaño medio de la fase R_t en función del tiempo, para densidades de obstáculos de $\phi = 0,00; 0,25$ y $0,50$; donde los círculos representa un sistema sin obstáculos, los triángulos a un sistema con densidad de obstáculos de $\phi = 0,25$ y los cuadrados un sistema con $\phi = 0,50$. Se nota que inicialmente el crecimiento de las fases es el mismo para todos los sistemas, ya que el tamaño de las fases formados son más pequeños que la distancia media entre los obstáculos. Sin embargo, para $t \approx 10^3$ iteraciones, el crecimiento de los dominios del sistema con densidad de obstáculos de $0,50$ se separa del crecimiento de los demás sistemas. Seguidamente, a $t \approx 10^4$ iteraciones, el crecimiento de los

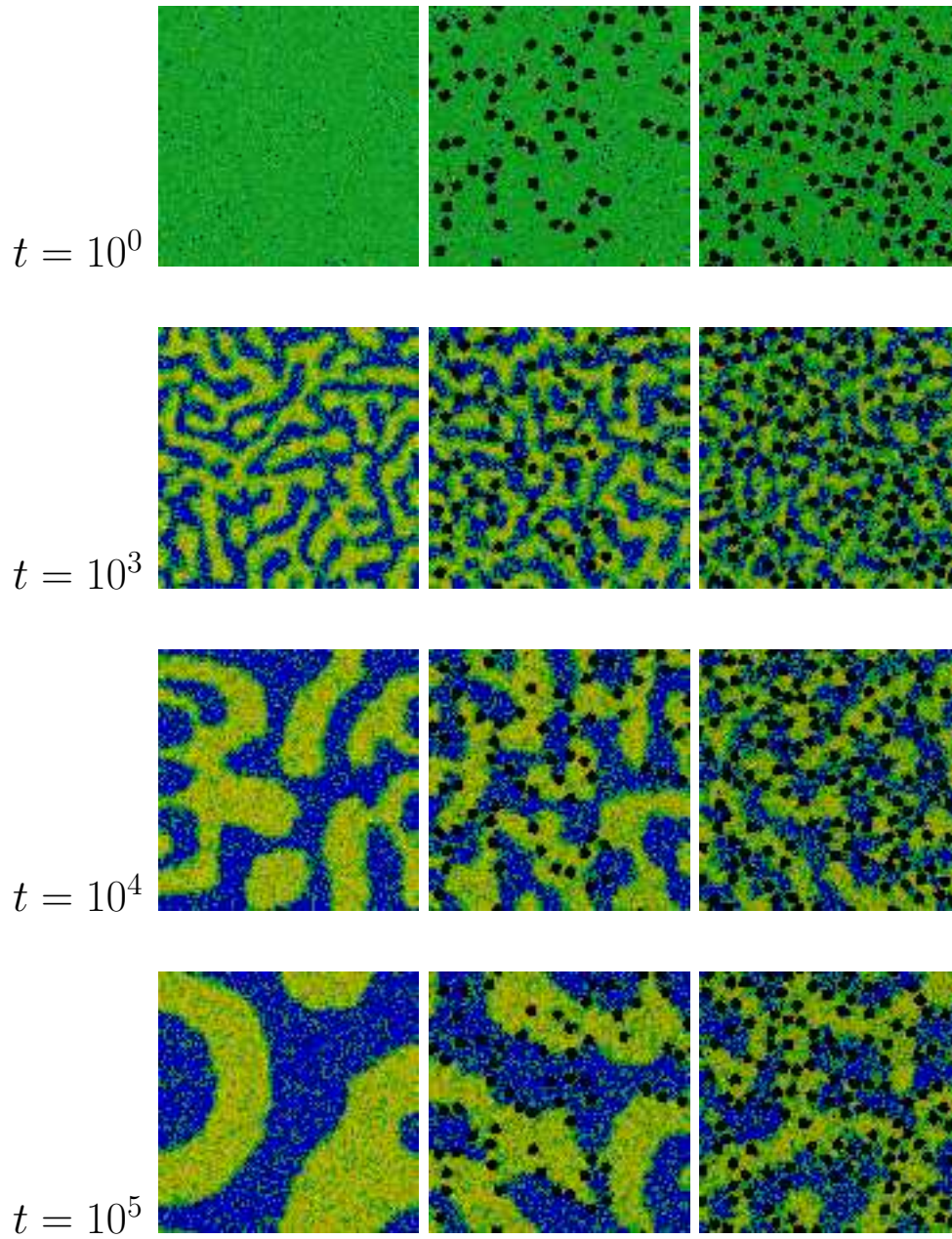


Figura 3.17: Sistema con densidad de obstáculos $\phi = 0,00$; $0,25$ y $0,50$ (de izquierda a derecha). Para $\kappa = 5$, $n_{\xi}^{\xi} = 5$, $T = 0,09$ y tiempos de simulación de $t = 0$, 1000 , 10000 y 100000 (de arriba hacia abajo). Los círculos negros representa a los obstáculos cilíndricos.

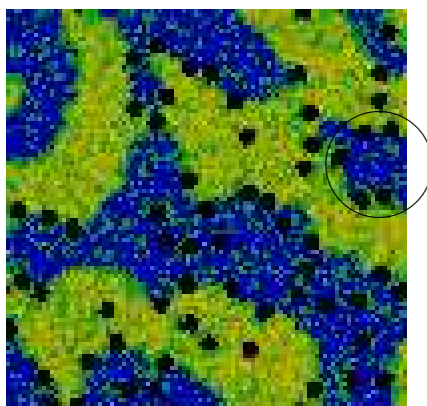


Figura 3.18: Fotos del sistema a una densidad de obstáculos $\phi = 0,25$ y $\kappa = 5,0$, $n_{\xi} = 5$, $T = 0,09$ y tiempos de simulación de $t = 100000$ iteraciones. La región encerrada por una circunferencia muestra un dominio rodeado por obstáculos.

dominios del sistema con $\phi = 0,25$ y el sistema sin obstáculos ($\phi = 0$) se separan.

La figura 3.20 resume el efecto que tiene la presencia de obstáculos sobre la velocidad crecimiento de las fase. Aquí se observa que a medida que se aumenta el valor de la densidad de obstáculos ϕ el exponente de crecimiento de la fase α se reduce.

3.5. Conclusiones.

En el estudio de formación de dominios y separación de fases. La técnica de la dinámica de colisión multipartículas es válida para un amplio rango de temperatura, como lo muestra la comparación de los datos de las simulaciones con la ecuación 3.14. Se obtiene un muy buen ajuste, aún a bajas temperaturas, donde a pesar de los efectos de correlación, el error en el cálculo del coeficiente de difusión no llegan a ser significativo.

Se sabe que cuando se introducen de obstáculos en un sistema en el que hay difusión de partículas, se observa que el coeficiente de difusión depende del diámetro de los obstáculos, ya que el camino libre medio entre los obstáculos cambia al variar el diámetro de éstos. Este

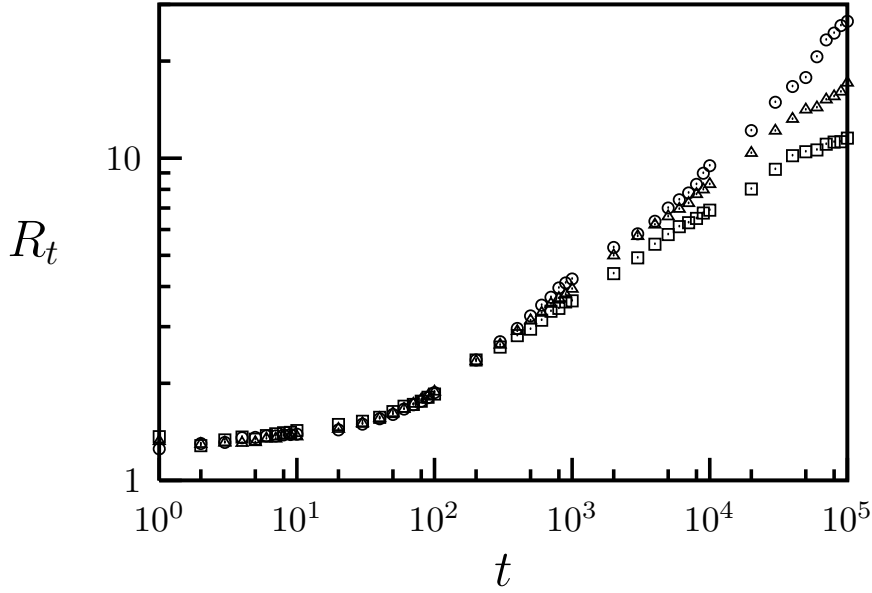


Figura 3.19: *Tamaño medio de la fase R_t en función del tiempo t . Para $\phi = 0,00$ (\circ), $0,25$ (Δ) y $0,50$ (\square); con $n_\xi = 5$, $T = 0,09$, $\kappa = 5$.*

comportamiento no la logra reproducir la ecuación 3.16, por el nivel de aproximación en la que fue desarrollada. Sin embargo la simulación con dinámica de colisión de multipartículas si captura este efecto. Además, hay que resaltar que la discrepancia entre los valores de la teoría y la simulación aumenta, al incrementar la temperatura, porque los efectos de campo no son tomados en cuenta en las aproximaciones hechas en el modelo teórico.

Se modificó la técnica de colisión multipartículas para introducir repulsión entre partículas de diferentes especies. Al comparar los resultados teóricos de un modelo molecular de Ising para interfases [56], tenemos que el perfil de la diferencia de densidad $\Phi(x)$, el ancho de la interfase ζ y la tensión superficial Γ ; se ajustan muy bien a los resultados obtenidos de las simulaciones con dinámica de colisión multipartículas con repulsión. Mostrando que la modificación hecha a esta técnica de simulación mesoscópica es suficiente a ciertas condiciones

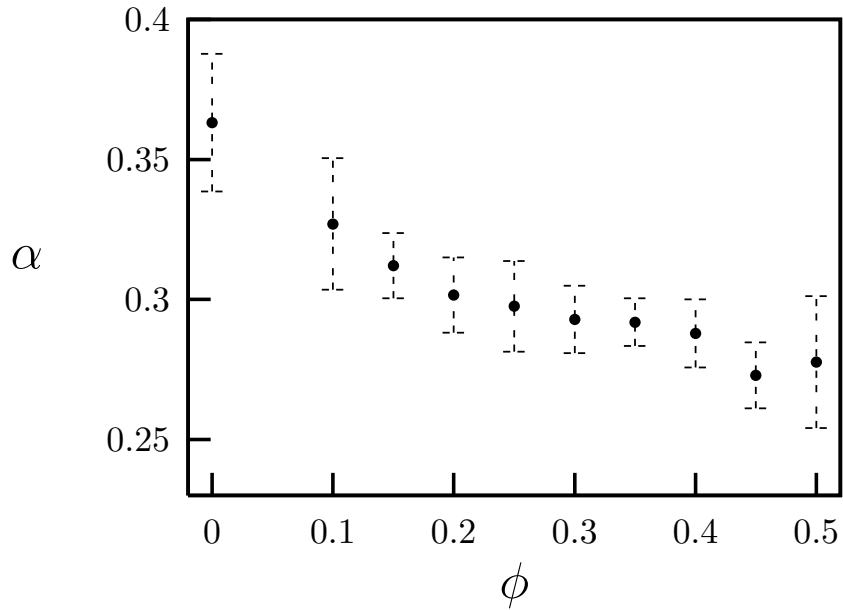


Figura 3.20: *Exponente de crecimiento de la fase α en función la densidad de obstáculos ϕ , para $n_\xi^z = 5$, $T = 0,09$ y $\kappa = 5$. Las barras de error representa la desviación estándar de la dispersión de los puntos en el ajuste de $R_t \sim t^\alpha$.*

para la descripción de fluidos binarios inmiscibles.

La inclusión del parámetro de rotación, que toma en cuenta las posiciones y cantidad de partículas de diferentes especies en una celda de simulación, es suficiente para estabilizar la interfase de dos fluidos inmiscibles. El ancho de la interfase es el parámetro que caracteriza toda su termodinámica. Este parámetro de orden depende de la temperatura, de la densidad de partículas y del parámetro de repulsión. A pesar de que la nueva técnica de simulación no contempla una componente atractiva entre la partículas de una misma especie, es posible obtener el valor de la temperatura a partir del cual la interfase posee un comportamiento lineal con respecto a ésta, lo que es característico en interfases líquido–gas, y que se ha observado en simulaciones realizadas con otras técnicas [54].

La inclusión de obstáculos inmóviles en el medio de simulación hace que la interfase se desvíe de su línea central, pasando por los obstáculos. Esto es por efecto de la diferencia de presión generada por los obstáculos quienes absorben parte de la presión del fluido. La desviación es posible medirla mediante el ancho de la interfase ζ , el cual muestra un incremento lineal respecto a la densidad de los obstáculos.

Con la técnica dinámica de colisión multipartículas con repulsión se encuentra que el tamaño medio de las fases R_t posee una ley de escala con el tiempo $R_t \sim t^\alpha$, y que el valor del exponente depende de la temperatura T y del parámetro de repulsión κ . Recobrando su valor teórico de $\alpha = 1/2$, para un crecimiento de dos fluido newtonianos inmiscibles y de proporciones de 50 – 50 inicialmente mezclados homogéneamente a $T = 0,02$ y $\kappa > 1$. Encontrando cambios de escalas en el crecimiento de los dominios de fase, éste fenómeno sólo aparece cuando la descripción del fluido es a una escala mesoscópica o macroscópica.

En cuanto al efecto de la inclusión de obstáculos en el crecimiento de los dominios, vemos que estos hacen que aumente el número de dominios y disminuye la velocidad de crecimiento de los mismos. Sin embargo, para poder que se comience a sentir el efecto de la presencia de los obstáculos sobre el exponente α , es necesario que el tamaño de los dominios sea igual o mayores que el espacio libre que existe entre los obstáculos, como lo refleja el decaimiento en el exponente de crecimiento α al aumentar la densidad de obstáculos ϕ en la figura 3.19.

Somos engañados por la apariencia
de la verdad.
Quinto Horacio Flaco

Conclusiones Generales.

Adicionalmente a las conclusiones particulares de cada capítulo, en esta sección se presenta las conclusiones generales de este trabajo.

Se mostró que la velocidad con la cual los dominios de fase crecen es más baja cuando las impurezas u obstáculos están presentes en el sistema. En otras palabras, el tamaño promedio de los dominios resultantes en el estado inhomogéneo del sistema decrece cuando la densidad de impurezas aumenta. Esto sugiere que las inhomogeneidades espaciales pueden ser empleadas como un mecanismo de selección para modular el tamaño de los patrones en sistemas espaciotemporales.

Cuando las impurezas están presentes en los sistemas se observa una deformación en la interfaz. En esta condiciones la interfaz está conformada por pequeños segmentos que se extienden entre obstáculos, lo que sugiere que las impurezas puede ser utilizadas como un mecanismo de control para el desarrollo de patrones.

En los sistemas discretos: redes de mapas acoplados y agentes multiculturales; la presencia de impurezas afecta las propiedades críticas, modificando la frontera y el exponente de la transición de fase entre el estado heterogéneo y el estado homogéneo.

Cuando se incrementa el rango de interacción en los dos sistemas discretos, se encuentra que en ambos casos las transiciones de fase pasan de ser de segundo orden a ser de primer orden. Obteniendo, para rangos de interacción relativamente bajos, las mismas propiedades que han sido observadas en estos sistemas con acoplamiento global.

Por último, las tres técnicas de modelado de sistemas espacio temporales utilizadas en esta tesis mostraron ser eficientes para el estudio del crecimiento y formación de fases en medios heterogéneos, pudiéndose caracterizar con todas ellas el fenómeno de crecimiento de dominios dentro de los límites que cada técnica impone.

Bibliografía

- [1] A. J. Bray, *Adv. Phys.*, **43**, 357, (1994).
- [2] M. San Miguel, M. Grant, and J. D. Gunton, *Phys. Rev. A*, **31**, 1001 (1985); H. Furukawa, **31**, 1103 (1985).
- [3] F. Qiu, G. Peng, V. V. Ginzburg, A. C. Balazs, H. Y. Chen, D. Jasnow, *J. Chem. Phys.* **115**, 3779-3784, (2001)
- [4] R. Paul, S. Puri and H. Rieger, *Phys. Rev. E* **71**, 61109 (2005).
- [5] *Chaos* **2**, 3 (1992); *Coupled Map Lattices: Theory and Experiments*, editado por K. Kaneko (Word Scientific, Singapore, 1993).
- [6] R. V. Solé y S. C. Manrubia *Orden y caos en sistemas complejos*. Ediciones UPC (1996).
- [7] J. Miller y D. A. Huse, *Phys. Rev. E*, **48**, 2528, (1993).
- [8] M.G. Cosenza, R. Kapral, *Chaos* **4**, **99** (1994).
- [9] Kunihiko Kaneko *Theory and Applications of Coupled Map Lattices*. Editado por John Wiley & Sons (1993).
- [10] P.M. Gade, H.A. Cerdeira, R. Ramaswamy, *Phys. Rev. E* **52**, 2478 (1995).
- [11] John von Neumann *Theory of Self-reproducing Automata* (editado y completado por A. W. Burks) 1949.

- [12] Steven H. Strogatz *Nonlinear Dynamics and Chaos: With applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering*. (editado por Perseus Books Group) 1994.
- [13] Evolving Cellular Automaton (EvCA) home page, Santa Fe Institute. <http://www.santafe.edu/~evca/Projects/evca.html>.
- [14] M.G. Cosenza, K. Tucci, *Phys. Rev. E* **64**, 026208 (2001); *Phys. Rev. E* **65**, 036223 (2002)
- [15] S. Jalan, R.E. Amritkar, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 014101 (2003)
- [16] Axelrod Robert, "The dissemination of culture" *J. Conflict Resolution*, **41**, 203-226 (1997).
- [17] P. Marcq, H. Chaté y P. Manneville *Phys. Rev. Lett*, **77**, 4003, (1996).
- [18] P. Marcq, H. Chaté y P. Manneville, *Phys. Rev. E*, **55**, 2606, (1997).
- [19] P. Marcq y H. Chaté, *Phys. Rev. E*, **57**, 1591, (1997).
- [20] A. Lemaître y H. Chaté, *Phys. Rev. Lett*, **82**, 1140, (1999).
- [21] L. Angelini, *Phys. Lett. A*, **307**, 41, (2003).
- [22] K. Tucci, M. Cosenza y O. Alvarez-Llamoza, *Phys. Rev. E*, **67**, 066217 (2003).
- [23] D. Suppa, O. Kuksenok, A. C. Balazs and J. M. Yeomans *J. Chem. Phys.*, **116**, 6305-6310, (2002).
- [24] K. Yurekli, A. Karim, E. J. Amis y R. Krishnamoorti, *Macromolecules* **36**, 7256 (2003)
- [25] P. Lind, J. Corte-Real y J. Gallas, *Phys. Rev. E*, **69**, 026209, (2004)
- [26] A. Ribeiro and P. Lind, *Phys. Scr.*, **T118**, 165-167, (2005).
- [27] C. Castellano, M. Marsili y A.Vespigniani, *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 3536 (2000)
- [28] P. Grassberger, *Z. Phys. B - Condensed Matter* **48**, 255-260 (1982)

- [29] Orlando Álvarez, *Tesis de grado para el título de maestría* (Universidad de Los Andes) (2001).
- [30] D. Vilone, A. Vespignani, and C. Castellano, *Eur. Phys. J. B* **30** (2002) 299.
- [31] K. Klemm, V. M. Eguiluz, R. Toral, and M. San Miguel, *Phys. Rev. E* **67** 026120 (2003).
- [32] K. Klemm, V. Eguiluz, R. Toral, M. San Miguel, *Physica A*, **327** 1 (2003).
- [33] K. Klemm, V. M. Eguiluz, R. Toral, and M. San Miguel, *Phys. Rev. E* **67** 045101(R) (2003).
- [34] J. C. González-Avella, M. G. Cosenza, and K. Tucci, *Phys. Rev. E* **72** 065102(R) (2005).
- [35] Y. Shibanaï, S. Yasuno, and I. Ishiguro, *J. Conflict Res.* **45** 80 (2001).
- [36] J. C. González-Avella, V. M. Eguiluz, M. G. Cosenza, K. Klemm, J.L. Herrera and M. San Miguel, *Phys. Rev. E* **73** 046119 (2006).
- [37] J. Greig, *J. of Conflict Resolution* **46** 225 (2002).
- [38] M. N. Kuperman, *Phys. Rev. E* **73** 046139 (2006).
- [39] D. H. Rothman, S. Zaleski, *Lattice-gas cellular automata: simple models of complex hydrodynamics*. Cambridge University Press, London, (1997)
- [40] B. Chopard, M. Droz, *Cellular automata modeling of physical systems*. Cambridge University Press, London, (1998)
- [41] P. J. Hoogerbrugge, J. Koelman, *Europhys Lett* **19**, 155, (1992).
- [42] P. Español, *Phys Rev E* **57**, 2930, (1998).
- [43] J. W. Cahn, J. E. Hillard, *J. Chem. Phys.* **28**, 258 (1958).
- [44] A. Malevenets y R. Kapral., *Europhys Lett.*, **44**, 512, (1998).
- [45] A. Malevenets y R. Kapral., *J. Chem. Phys.*, **110**, 8605, (1999).

- [46] A. Malevenets y R. Kapral., *J. Chem. Phys.*, **112**, 7260, (2000).
- [47] J. Lebenhaft y R. Kapral., *J. Stat. Phys.*, **20**, 25, (1979).
- [48] S. Toxvaerd y J. Stecki, *J. Chem. Phys.*, **102**, 7163 (1995).
- [49] J. Stecki y S. Toxvaerd, *J. Chem. Phys.*, **103**, 4352 (1995).
- [50] W. Scott, F. Müller-Plathe y W. F. van Gunsteren, *Mol. Phys.*, *82*, 1049 (1994).
- [51] M. Meyer, M. Marèchal y M. Hayoun, *J. Chem. Phys.*, **89**, 1067 (1988).
- [52] P. Linse, *J. Chem. Phys.*, **86**, 4177 (1987).
- [53] J. Gao y W.L. Jorgensen, *J. Phys. Chem.* **92**, 5813 (1988).
- [54] E. Diaz-Herrera, J. Alejandro, G. Ramirez-Santiago, and F. Forstmann, *J. Chem. Phys.*, **110**, 8084 (1999).
- [55] S. Iatsevitch y F. Forstmann, *J. Chem. Phys.*, **107**, 6925 (1997).
- [56] Samuel A. Safran *Statistical Thermodynamics of Surfaces, Interfaces and Membranes*. (Addison–Wesley Publishing Company, (1994).
- [57] A. Malevenets y R. Kapral., *Mesoscopic Multiparticle Collision Model for Fluid Flow and Molecular Dynamics*, in "Novel Methods in Soft Matter Simulations", eds. M. Karttunen, I. Vattulainen and A. Lukkarinen, (Springer- Verlag, Berlin) **640**, 113, (2003).
- [58] T. Ihle and D M. Kroll, *Phys. Rev. E* **63** 020201 (2001).
- [59] M. P. Allen y D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids.*, Clarendon Press. Oxford, (1987).
- [60] D. Frenkel y B. Smit, *Understanding Molecular Simulation.*, Academic Press, (1996).
- [61] Mikko Karttunen, Ilpo Vattulainen y Ari Lukkarinen *Novel Methods in Soft Matter Simulations*. Editado Lect. Notes Phys. 640, Springer-Verlag Heidelberg (2004).

- [62] Y. Hashimoto, Y. Chen y H. Ohashi., *Comp. Phys. Comm.*, **129**, 56, (2000).
- [63] K. Tucci y R. Kapral., *J. Phys. Chem.*, **109**, 21300 (2005).
- [64] K. Tucci y R. Kapral., *J. Chem. Phys.*, **120**, 8262 (2004)
- [65] C. Echeverria, K. Tucci and R. Kapral, *Journal of physics: Condensed Matter*, **18**, 1, (2006).
- [66] M. Laradji, S. Toxvaerd y O. G. Mouritsen, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 2253, (1996).
- [67] A. Giacometti, M. Rossi and L. Battiston, *Phys. Rev. E*, **73**, 036214 (2006).
- [68] E.D. Siggia, *Phys. Rev. A*, **20**, 595 (1979).
- [69] F. Perrot, D. Beysens, Y. Garrabos, T. Frölich, P. Guenoun, M. Bonetti, and P. Bravais, *Phys. Rev. E*, **59**, 3079 (1999).
- [70] F. J. Solis y M. Olvera de la Cruz, *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 3350 (2000).
- [71] A. Chakrabarti, R. Toral, y J. D. Gunton, *Phys. Rev. B*, **39**, 4386 (1989).
- [72] O. T. Valls and J. E. Farrell, *Phys. Rev. E*, **47**, R36 (1993).
- [73] P. J. Love, P. V. Coveney, y B. M. Boghosian, *Phys. Rev. E*, **64**, 021503 (2001).
- [74] A. N. Emerton, P. V. Coveney, y B. M. Boghosian, *Phys. Rev. E*, **55**, 708 (1997).
- [75] V. M. Kendon, J.-C. Desplat, P. Bladon, y M. E. Cates, *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 576 (1999).
- [76] A. J. Wagner y J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 1429 (1998).
- [77] S. Jury, P. Bladon, S. Krishna, y M. E. Cates, *Phys. Rev. E*, **59** R2535 (1999).
- [78] U. Frisch, D. d'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, and J.-P. Rivet, *Complex Systems* **1**, 649 (1987)
- [79] D. H. Rothman and J. M. Keller, *J. Stat. Phys.*, **52**, 1119 (1988)

- [80] G. D. Doolen (ed.), *Physica D*, **47** (1991)
- [81] C. Appert y S. Zaleski, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1 (1990).
- [82] S. Chen y G. D. Doolen, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **30**, 329 (1998).
- [83] P. J. Hoogerbrugge y J. M. V. A. Koelman, *Europhys. Lett.*, **19**, 155 (1992)
- [84] E. G. Flekkøy y P. V. Coveney, *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 1775 (1999).
- [85] X. Shan and H. Chen H, *Phys. Rev. E*, **47**, 1815 (1993)
- [86] X. Shan and H. Chen, *Phys. Rev. E*, **49**, 2941 (1994).
- [87] M. R. Swift, W. R. Osborn, y J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 830 (1995)
- [88] M. R. Swift, E. Orlandini, W. Osborn, y J. M. Yeomans, *Phys. Rev. E*, **54**, 5041 (1996).
- [89] K. E. Novik y P. V. Coveney, *Phys. Rev. E*, **61**, 435 (2000).
- [90] P. Fratzl, O. Penrose, R. Weinkamer, y I. Zizak, *Physica A* **279**, 100 (2000).
- [91] G. K. Batchelor, *An introduction to fluid dynamics*, (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1967).
- [92] J. E. Farrell y O. T. Valls, *Phys Rev B*, **40**, 7027 (1989).

Anexos

1. C. Echeverria, K. Tucci and R. Kapral, "Diffusion and reaction in crowded environments", *Journal of physics: Condensed Matter*, Vol. 18, 1-12, 2006.
2. C. Echeverria, K. Tucci and M. Cosenza, "Phase ordering induce by defects in chaotic bistable media." *European Physics Journal: Special Topics*, Vol. 143, 249-251, 2007.
3. C. Echeverria, K. Tucci and M. Cosenza, "Phase growth in bistable systems with impurities." *Phys. Rev. E*, enviado 2007.