

BC-C  
370

F

# Fenómenos de crecimiento y fractura de materiales

Oscar Antonio PLA PERALONSO

Instituto de Ciencia de Materiales (C. S. I. C.). Sede B.  
Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma.

Noviembre 1990.

MEMORIA PRESENTADA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS POR LA  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID



Reg BC 47474

---

Esta memoria pretende ser la recopilación de los trabajos realizados bajo la dirección de Francisco Guinea López sobre modelos estadísticos para intentar comprender los fenómenos de crecimiento, y en particular, los relacionados con la fractura de materiales. En este empeño, he contado también con la experiencia en fenómenos de crecimiento de Paul Meakin y Len Sander, y, sobre todo, con el apoyo entusiasta de Enrique Louis Cereceda, de Rafael Garcia Molina, y del propio Paco Guinea, sin los cuales estas notas no se habrían escrito.

Durante el periodo en que los trabajos se desarrollaron mi sustento corrió a cargo de la Universidad Autónoma de Madrid por medio de una plaza de Profesor Ayudante por nueve meses, y desde hace tres años del Ministerio de Educación y Ciencia a través de una beca de Formación de Personal Investigador. Este mismo organismo me permitió una estancia de tres meses en la Universidad de California en Santa Barbara. También colaboró en la financiación de esta memoria la Obra Social de la Caja de Madrid mediante la concesión de un crédito de ayuda para su realización.

# Contenidos

|  |           |
|--|-----------|
| Introducción.  | 1         |
| <b>1 Generalidades</b>   | <b>3</b>  |
| 1.1 Teoría de la elasticidad en dos dimensiones.                       | 3         |
| 1.1.1 Solución al problema de un anillo circular.                      | 5         |
| 1.1.2 Elasticidad bidimensional en sistemas anisótropos.               | 6         |
| 1.1.3 Vibraciones armónicas y modos normales.                          | 7         |
| 1.2 Percolación.   | 8         |
| 1.2.1 Percolación y conductividad.                                     | 8         |
| 1.3 Fractales en Física.   | 10        |
| 1.3.1 Auto-similitud y auto-afinidad.                                  | 11        |
| 1.3.2 Fenómenos de crecimiento.  | 12        |
| 1.3.3 Multifractalidad.  | 15        |
| <b>2 Percolación elástica.</b>   | <b>17</b> |
| 2.1 Discretización del medio continuo.                                 | 17        |
| 2.1.1 Modelo de fuerzas centrales.                                     | 17        |
| 2.1.2 Red triangular y reconstrucción $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ .     | 18        |
| 2.1.3 Conexión entre el modelo discreto y el modelo elástico continuo. | 20        |
| 2.2 Métodos de cálculo.  | 21        |
| 2.2.1 Medida de los módulos elásticos.                                 | 23        |
| 2.2.2 Escalamiento finito y renormalización fenomenológica.            | 23        |
| 2.3 Fenomenología.   | 24        |
| 2.3.1 Universalidad.   | 24        |
| 2.4 Aproximaciones simples.  | 25        |
| 2.4.1 Grados de libertad.  | 26        |
| 2.4.2 Aproximación de agujeros perfectos.                              | 26        |
| 2.4.3 Teoría de Medio Efectivo.  | 28        |
| 2.5 Renormalización Fenomenológica.                                    | 35        |
| 2.6 Esqueleto que mantiene la estructura.                              | 35        |
| 2.7 Medios inhomogéneos.   | 36        |
| <b>3 Fractura Mecánica.</b>  | <b>39</b> |
| 3.1 Modelos estadísticos en la fractura de materiales.                 | 40        |
| 3.2 El modelo de Fractura Mecánica.                                    | 41        |

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| 3.2.1    | Métodos de cálculo . . . . .                                  | 44         |
| 3.2.2    | Cálculos analíticos de la dimensión fractal. . . . .          | 48         |
| 3.2.3    | Modelo de películas delgadas. . . . .                         | 48         |
| 3.3      | Variaciones y ampliaciones del modelo. . . . .                | 49         |
| 3.3.1    | Fractura en medios isótropos. . . . .                         | 49         |
| 3.3.2    | Fractura en medios anisótropos. . . . .                       | 49         |
| 3.3.3    | Plasticidad. . . . .  | 52         |
| 3.3.4    | Reducción del ruido y dendritas. . . . .                      | 53         |
| 3.3.5    | Distintos regímenes en leyes de fractura no lineales. . . . . | 53         |
| 3.3.6    | Fractura en modelos con fuerzas angulares. . . . .            | 57         |
| 3.3.7    | Fragilización y fractura. . . . .                             | 57         |
| <b>4</b> | <b>Procesos dinámicos en fenómenos de crecimiento.</b>        | <b>59</b>  |
| 4.1      | Procesos auto-organizados. . . . .                            | 59         |
| 4.1.1    | Modelos sencillos. . . . .                                    | 60         |
| 4.1.2    | Autómatas celulares y avalanchas. . . . .                     | 63         |
| 4.1.3    | Modelos exactos. . . . .                                      | 63         |
| 4.1.4    | Terremotos . . . . .  | 64         |
| 4.2      | Leyes de escala en fenómenos de crecimiento. . . . .          | 64         |
| 4.2.1    | Crecimiento, apantallamiento y auto-organización. . . . .     | 65         |
| 4.2.2    | Avalanchas en el modelo de DB. . . . .                        | 65         |
| 4.2.3    | Ruido y disipación. . . . .                                   | 74         |
|          | <b>Conclusiones.</b>  | <b>77</b>  |
|          | <b>Referencias</b>  | <b>78</b>  |
| <b>A</b> | <b>Métodos numéricos de cálculo.</b>                          | <b>85</b>  |
| A.1      | Métodos exactos. . . . .                                      | 85         |
| A.2      | Métodos iterativos. . . . .                                   | 86         |
| A.2.1    | Jacobi y Gauss-Siedel. . . . .                                | 86         |
| A.2.2    | Gradientes Conjugados. . . . .                                | 87         |
| A.3      | Otros métodos . . . . .                                       | 88         |
| <b>B</b> | <b>Ecuaciones de la elasticidad en coordenadas polares.</b>   | <b>91</b>  |
| <b>C</b> | <b>Ecuaciones de equilibrio en la red triangular.</b>         | <b>93</b>  |
| C.1      | Subrutinas FORTRAN. . . . .                                   | 95         |
| <b>D</b> | <b>Analogías entre electrostática y elasticidad.</b>          | <b>105</b> |
| <b>E</b> | <b>Publicaciones y comunicaciones generadas.</b>              | <b>107</b> |

# Índice de Figuras

|      |   |    |
|------|---|----|
| 1.1  | Deformaciones de compresión y cizalla en un cuadrado. . . . .   | 4  |
| 1.2  | Anillo circular considerado en el texto. . . . .  | 6  |
| 1.3  | Generación de la alfombra de Sierpinski (Sierpinski Gasket). . . . .  | 11 |
| 1.4  | Generación de un fractal auto-afín. . . . .   | 12 |
| 1.5  | Fractal generado por el método de DB. . . . .   | 13 |
| 1.6  | Ajustes del radio de giro y del radio dimensional para el fractal de la figura 1.5. . . . .   | 15 |
| 2.1  | Redes bidimensionales simples. . . . .  | 18 |
| 2.2  | Variantes de la red triangular consideradas. . . . .  | 19 |
| 2.3  | Comportamiento de los módulos de compresibilidad y cizalla para agujeros perfectos. . . . .   | 27 |
| 2.4  | Sustitución de la red que rodea un enlace por el medio efectivo. . . . .  | 28 |
| 2.5  | $a^*$ y $c^*$ en función de las constantes de fuerza efectivas. . . . .   | 30 |
| 2.6  | Evolución de los distintos módulos como función de $p$ para el caso isótropo ( $\alpha = k_a/k_b$ ). . . . .  | 32 |
| 2.7  | Evolución de los distintos módulos como función de $p$ para el caso anisótropo. . . . .   | 33 |
| 2.8  | Desviaciones típicas en el módulo de compresibilidad. . . . .   | 34 |
| 2.9  | Distribución de tensiones para $\lambda_0 = \mu_0$ . . . . .  | 36 |
| 2.10 | Distribución de tensiones para $k_a/k_b = 0.05$ ( $\bullet k_b, +k_a$ ). . . . .  | 37 |
| 3.1  | Curva característica de muelles y fusibles. . . . .   | 40 |
| 3.2  | Distintas elecciones para la rotura aleatoria de muelles. . . . .   | 42 |
| 3.3  | Resultados para compresión y cizalla usando distintos modelos y $\eta=1$ . . . . .  | 43 |
| 3.4  | Aspecto de las fracturas para dos combinaciones distintas de dilatación y cizalla con los modelos I y II. . . . .   | 45 |
| 3.5  | Redes relajadas. En la parte superior las posiciones tal y como aparecen después de la relajación. La inferior muestra cómo ve el sistema las tensiones de los distintos muelles. . . . . | 46 |
| 3.6  | Enlaces rotos en la fractura de la figura 3.5. . . . .  | 47 |
| 3.7  | Resultados de dilatación para distintas anisotropías y distintos $\eta$ . . . . .   | 50 |
| 3.8  | Variación de las dimensiones fractales aparentes en función del número de muelles rotos y del grado de anisotropía. . . . .   | 51 |
| 3.9  | Aspecto de distintas fracturas al variar el contador $s$ . . . . .  | 52 |
| 3.10 | Evolución de $\sigma_{max}$ durante la fractura para $p_i \propto \sigma_i$ . . . . .   | 54 |

|      |  |    |
|------|--|----|
| 3.11 | Una de las fracturas generadas con $p \propto \sigma(1 + (\sigma/0.45)^9)$ y ajuste del radio de giro promediado sobre 5 muestras. . . . .           | 55 |
| 3.12 | Dos distintos comportamientos para $p \propto \sigma(1 + (\sigma/0.45))$ . . . . .   | 56 |
| 4.1  | Modelo de avalanchas en una dimensión. . . . .   | 61 |
| 4.2  | Distribución de tiempos de relajación $D(t)$ para el caso estático y para distintos $\epsilon$ . . . . .   | 67 |
| 4.3  | Distribución de número de sitios perturbados $D(s)$ para el caso estático y para distintos $\epsilon$ . . . . .                                      | 68 |
| 4.4  | Relación entre tiempos de relajación y número de sitios perturbados en el modelo II y $\epsilon = 10^{-4}$ . . . . .                                 | 69 |
| 4.5  | Distribución de tiempos de relajación $D(t)$ para el caso dinámico y para distintos $\epsilon$ . . . . .   | 70 |
| 4.6  | Distribución de campos de rotura $D(E)$ para el caso estático y para distintos $\epsilon$ . . . . .  | 70 |
| 4.7  | Distribución de campos de rotura $D(E)$ para el caso dinámico y para distintos $\epsilon$ . . . . .  | 71 |
| 4.8  | Relación entre campo eléctrico $E$ y tiempos de relajación por dos métodos distintos. . . . .  | 72 |
| 4.9  | Disipación en la evolución del DB y su densidad espectral de potencia para una de las realizaciones con el modelo I y $\epsilon = 10^{-4}$ . . . . . | 73 |
| 4.10 | Relación entre campo eléctrico y disipación. . . . .   | 74 |
| 0.1  | Desplazamientos, coordenadas y nodos considerados en la red triangular. . . . .  | 94 |

# Índice de Tablas

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 1.1 | Resultados de compresión para un anillo elástico. . . . .  | 7  |
| 1.2 | Probabilidades críticas para distintas redes. . . . .  | 9  |
| 1.3 | Distintos exponentes críticos para la percolación. . . . .   | 10 |
| 2.1 | Relación entre constantes elásticas y constantes de la red. . . . .  | 20 |
| 3.1 | Dimensiones fractales para compresión y cizalla con los distintos modelos y distintos $\eta$ según [MLS*89] ajustando el radio de giro $R_g$ en función del número de muelles rotos. . . . . | 44 |
| 3.2 | Dimensiones fractales obtenidas mediante la aproximación de las cuñas para DB y MB. . . . .  | 48 |
| 4.1 | Exponentes del modelo BTW para dimensión 2 y 3. . . . .  | 62 |
| 4.2 | Número de muestras distintas consideradas. . . . .   | 66 |

# Introducción.

El estudio de la fractura de materiales tiene, desde el punto de vista tecnológico, una innegable utilidad, sin embargo, todavía estamos lejos de comprender de una manera sencilla porqué y cómo un determinado material, bajo acciones externas, pierde su cohesión y se rompe. Se sabe que el número de factores que entran en juego puede ser muy grande, y que una variación en uno de ellos puede variar el comportamiento del sistema: temperatura, humedad, elementos químicos que atacan el material, cristalografía del sistema y defectos en la misma...

Por otro lado, y desde principios de los años 80, han aparecido multitud de modelos teóricos simples de crecimiento que pretenden estudiar, de una manera unificada, diversos fenómenos morfológicos que aparecen en la Naturaleza, como rayos, dendritas, copos de nieve, coliflores, nubes y arrecifes de coral. Cada uno de ellos caracterizado por una medida de su complejidad o forma en que aparecen las ramificaciones en su estructura.

Este último campo de trabajo es lo que se conoce genéricamente con el nombre de fractales. En principio, a primera vista, pareciera que los elementos que se tratan y se analizan tuvieran más que ver con el mundo artístico y el diseño de formas que con el estudio de la Naturaleza. Un juego que pasa por explorar el Universo de Mandelbrot (divulgador y propulsor del "paradigma fractaliano"), en el que, cada vez que se reduce la escala y se mira más en detalle, se descubren formas nuevas, junto con reproducciones exactas de zonas encontradas anteriormente en escalas mayores [Dew85]. Cuatro conceptos pseudo-matemáticos<sup>1</sup> que permiten generar costas, países, montañas e incluso planetas con apariencia asombrosa de realidad. Figuras ramificadas, que coloreadas con un poco de imaginación, podrían aparecer en una exposición de art-deco. Y estudios sobre la distribución de galaxias o de los capilares sanguíneos en la retina del ojo humano; todo (o al menos casi todo) en la Naturaleza parece admitir el apellido fractal.

Es la sencillez del concepto de fractal y la aplicabilidad a las formas que se estudian lo que hace de esta, más que teoría, fenomenología, una herramienta de gran utilidad a la hora de comparar las predicciones teóricas con la realidad. No se tratará por tanto, por lo menos en este trabajo, de deducir el porqué de este comportamiento fractal, sino de desarrollar (principalmente en los capítulos 3 y 4) determinados modelos estadísticos en los cuales un posible análisis de los resultados es vía el concepto de fractalidad.

Otro tema que ha atraído recientemente la atención en el campo de la Física Estadística es el de procesos que evolucionan de forma natural a un estado crítico (procesos auto-organizados). En este estado crítico se observa que se producen reorganizaciones del sistema

---

<sup>1</sup>Pseudo, debido a que no poseen rigor ni formalismo matemático. Los matemáticos estudian los fractales desde un punto de vista más formal y menos aplicado.



o avalanchas en todas las escalas de magnitud. Estas avalanchas son tanto espaciales como temporales, y permiten relacionar el que la distribución espacial sea fractal, con el que la distribución temporal sea de tipo ruido  $1/f^\phi$ . Este tipo de procesos temporales también está presente en la Naturaleza, y se ha detectado en multitud de fenómenos de transporte como en resistencias, en la luminosidad de estrellas, en los cambios en el cauce del río Nilo, en el ritmo de paso de vehículos por una autopista, e incluso en el tipo de música que resulta más agradable al oído humano. Todos estos fenómenos corresponden al caso de ruido  $1/f$  o ruido parpadeante (flicker noise). Otros casos de ruido con apellido son el ruido blanco (white noise) o ruido  $1/f^0$ , y el ruido marrón (brown noise) o ruido  $1/f^2$ .

La estructura de esta memoria es la siguiente: En el capítulo 1 se darán algunas nociones básicas y conceptos que se utilizarán más adelante en el desarrollo de los distintos temas que se tratan. El capítulo 2 está dedicado a la percolación elástica como primera aproximación para llevar a cabo el estudio de la fractura de materiales, y en el capítulo 3 se estudiarán distintos modelos estadísticos de propagación de la fractura, haciendo especial hincapié en el modelo de Fractura Mecánica (Mechanical Breakdown, MB), y en sus posibles variantes que puedan mejorarlo para reproducir situaciones reales. El capítulo 4 es el trabajo más reciente de los que aquí se exponen y trata sobre la auto-organización en fenómenos de crecimiento, incluyendo una introducción al tema. Por último se han añadido varios apéndices que se dedican a cuestiones que no están directamente relacionadas con el objetivo de este trabajo, pero que su consulta puede ser útil.

# Capítulo 1

## Generalidades

En este capítulo se estudian de manera sencilla ciertos conceptos que serán necesarios más adelante como base al trabajo que se desarrolle. Sin embargo, no pueden considerarse estas notas como revisión exhaustiva a los distintos temas. He procurado por ello que la bibliografía en este capítulo sea escasa y dirigida sobre todo a distintos artículos y libros que hacen revisiones o tratados sobre estos temas.

### 1.1 Teoría de la elasticidad en dos dimensiones.

La teoría de la elasticidad, trata, según la definición de [LL70], de la mecánica de los cuerpos sólidos, considerados como medios continuos. Bajo la acción de fuerzas externas dichos medios cambian su forma y su volumen, cambiando la posición espacial de la mayoría de sus puntos. Un punto de coordenadas  $\mathbf{x}$ , después de la deformación, pasa a tener por coordenadas  $\mathbf{x}'$ , estando dicha deformación caracterizada por el vector  $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$ , donde tanto  $\mathbf{u}$  como  $\mathbf{x}'$  dependen de las coordenadas de  $\mathbf{x}$ ,  $x_i$ ,  $i = 1, 2$ <sup>1</sup>. Generalmente los problemas que se tratan inducen pequeñas deformaciones en el material, por lo que se pueden tratar linealmente:

$$d\mathbf{u} = \boldsymbol{\epsilon} d\mathbf{x}, \text{ donde } \epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.1)$$

El tensor simétrico  $\boldsymbol{\epsilon}$  se denomina tensor de deformaciones del material, y tiene dos invariantes (cantidades que no dependen del sistema de coordenadas elegido para representarlo):  $Tr(\boldsymbol{\epsilon}) = \sum_{i=1}^2 \epsilon_{ii}$  y  $Tr(\boldsymbol{\epsilon}^2) = \sum_{i,j=1}^2 \epsilon_{ij}^2$ .  $Tr(\boldsymbol{\epsilon})$  representa la variación de superficie después de aplicar la deformación:  $S' = S(1 + Tr(\boldsymbol{\epsilon}))$ . Si  $Tr(\boldsymbol{\epsilon}) = 0$ , al aplicar la deformación, la superficie del cuerpo en cuestión no cambia, solamente su forma. Esta deformación se denomina *cizalla*. El caso opuesto es que el material experimente una deformación sin cambio de forma, pero cambiando su superficie (*compresión*); entonces el tensor de deformaciones viene dado por  $\boldsymbol{\epsilon} = constante \times \mathbf{I}$ , donde  $\mathbf{I}$  es el tensor identidad  $I_{ij} = \delta_{ij}$ .

Para determinar el estado del sistema, y derivar las ecuaciones de equilibrio es necesario conocer la energía libre del sistema,  $F$ , en función de  $\boldsymbol{\epsilon}$ . La expresión se obtiene usando el

<sup>1</sup>La teoría de la elasticidad se desarrolla en la mayoría de los tratados para materiales tridimensionales, reduciendo luego una dimensión para obtener el caso plano. Aquí, para simplificar las ecuaciones y las deducciones, se tratará de desarrollar directamente el caso plano, remitiéndose en algunas deducciones en las que la elasticidad tridimensional es necesaria, a la bibliografía

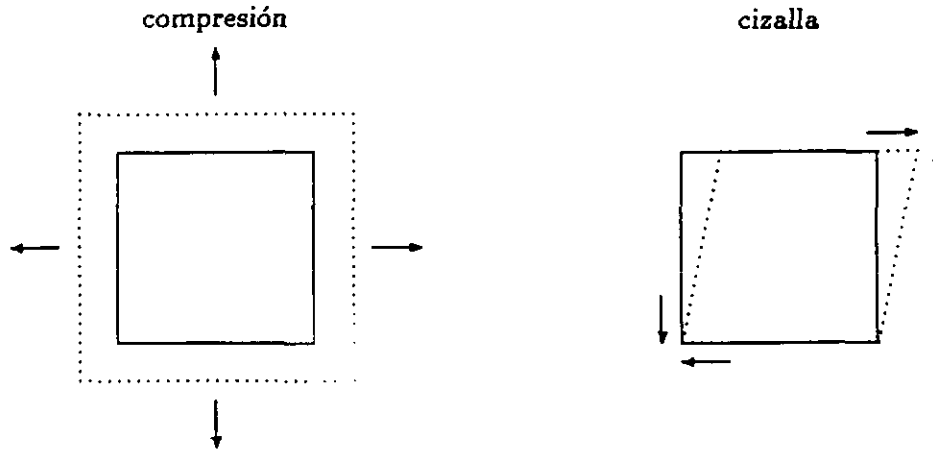


Figura 1.1: Deformaciones de compresión y cizalla en un cuadrado.

hecho de que la deformación es pequeña y por tanto  $F$  se puede expresar como suma de potencias de los invariantes de  $\epsilon$ :

$$F = \frac{1}{2}\lambda[T\text{r}(\epsilon)]^2 + \mu T\text{r}(\epsilon^2). \quad (1.2)$$

Esta es la expresión general para la energía libre de un cuerpo isótropo deformado. En ella no aparece el término lineal en  $T\text{r}(\epsilon)$  debido a que la energía libre no depende del signo de la deformación. Los parámetros  $\lambda$  y  $\mu$  son los coeficientes Lamé característicos del material. Atendiendo a las dos posibles deformaciones independientes que pueden existir, *compresión* y *cizalla*,  $F$  se puede expresar como suma de dos contribuciones independientes:

$$F = \frac{1}{2}\kappa(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})^2 + \mu(2\epsilon_{xy}^2 + \frac{1}{2}(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2). \quad (1.3)$$

Donde  $\kappa = \lambda + \mu$  es el módulo de compresibilidad y  $\mu$  es el módulo de cizalla. En esta última ecuación los subíndices de  $\epsilon$  son las coordenadas convencionales  $x$  e  $y$  en dos dimensiones, notación que se mantendrá en lo siguiente.

Las fuerzas de reacción del sistema frente a las deformaciones externas se denomina tensor de esfuerzos del material, y se obtiene mediante la relación termodinámica

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial F}{\partial \epsilon_{ij}}, \quad (1.4)$$

de donde las componentes de  $\sigma$ , que a su vez es un tensor simétrico por ser simétrico el tensor de desplazamientos, se pueden poner en función de las componentes de  $\epsilon$  de la forma<sup>2</sup>:

$$\sigma_{xx} = (\lambda + 2\mu)\epsilon_{xx} + \lambda\epsilon_{yy},$$

<sup>2</sup> $\epsilon_{xy} = \epsilon_{yx}$ , por tanto aparece dos veces en  $F$ , mientras que para derivar  $\sigma_{xy}$  sólo hay que tener en cuenta una de ellas.

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= 2\mu\epsilon_{xy}, \\ \sigma_{yy} &= \lambda\epsilon_{xx} + (\lambda + 2\mu)\epsilon_{yy}.\end{aligned}\quad (1.5)$$

Es conveniente introducir ahora dos nuevas constantes elásticas, que son dependientes de las anteriores, pero que, en ciertos problemas, dan una descripción más sencilla de las características del material. Si se aplica al material una dilatación uniaxial:  $\sigma_{xx} = T$ ,  $\sigma_{xy} = 0$ ,  $\sigma_{yy} = 0$ , se define el cociente de Poisson como  $\gamma = -u_{xx}/u_{yy}$ , y el módulo de Young  $E = T/u_{xx}$ . La relación entre estos nuevos parámetros y los módulos anteriores es:

$$\gamma = \frac{\kappa - \mu}{\kappa + \mu} \text{ y } E = \frac{4\kappa\mu}{\kappa + \mu}; \quad (1.6)$$

y la relación inversa:

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \gamma)} \text{ y } \kappa = \frac{E}{2(1 - \gamma)}. \quad (1.7)$$

Una vez conocidas las características del material, se quieren conocer las ecuaciones de equilibrio, que, dadas unas deformaciones o unas fuerzas actuando sobre el mismo, permitan conocer los esfuerzos y los desplazamientos en cada uno de sus puntos. En el equilibrio [LL70]  $\sum_j \partial\sigma_{ij}/\partial x_j = 0$ , de donde las ecuaciones de equilibrio se pueden expresar como:

$$(\lambda + \mu)\nabla(\nabla\mathbf{u}) + \mu\nabla^2\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad (1.8)$$

donde  $\nabla$  es el vector gradiente  $\nabla \equiv (\partial_x, \partial_y)$ .

### Elasticidad de Cosserat.

Se puede hacer una descripción de la elasticidad de forma que aparezcan rotaciones locales del sistema:

$$d\mathbf{u} = \mathbf{\Omega}d\mathbf{x}, \text{ donde } \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.9)$$

En este caso el sistema responde, no sólo a las fuerzas aplicadas, sino también a los momentos [Now86]. Aparecerían también nuevas constantes elásticas relacionando los momentos con las rotaciones y con los desplazamientos, hasta tener un total de 6 constantes elásticas para el caso isótropo. En lo sucesivo se supondrá siempre que las rotaciones locales no son importantes, y por tanto no se adoptará esta formulación. La elasticidad de Cosserat se aplica a materiales con una longitud de escala característica, materiales magnéticos, cristales líquidos, etc.

#### 1.1.1 Solución al problema de un anillo circular.

Un problema sencillo de resolver y que, como se verá más adelante, puede dar bastante intuición sobre problemas más complicados, es el de un anillo circular de radios  $R_i$  y  $R_e$ , en el que su parte externa se encuentra sometida a deformaciones o fuerzas constantes, y sobre su parte interna no actúa ninguna fuerza.

Por la simetría del problema, el sistema de coordenadas más adecuado para tratarlo es el de coordenadas polares <sup>3</sup>  $r$  y  $\theta$ . Para resolver las ecuaciones de equilibrio existen varios

<sup>3</sup>Los distintos parámetros y relaciones entre coordenadas se dan en el apéndice B.

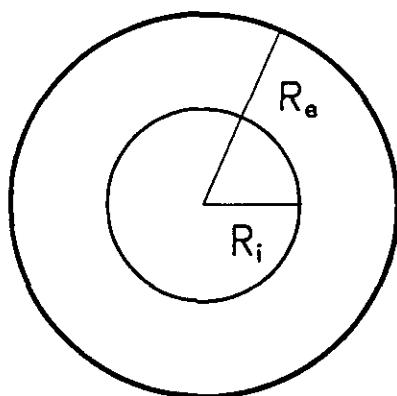


Figura 1.2: Anillo circular considerado en el texto.

métodos: series de potencias, integrales de Cauchy[Mus53], o, para problemas más sencillos, como es nuestro caso, simplemente probar con un ansatz de la forma:

$$\begin{aligned} u_r &= ar^n \cos(m\theta), \\ u_\theta &= br^n \sin(m\theta), \end{aligned} \quad (1.10)$$

que tiene cuatro soluciones para la ecuación 1.8:

$$n = m + 1, \quad b = -\frac{\lambda(m+2) + \mu(m+4)}{\lambda m + \mu(m-2)} a. \quad (1.11)$$

$$n = m - 1, \quad b = -a. \quad (1.12)$$

$$n = -m + 1, \quad b = \frac{\lambda(m-2) + \mu(m-4)}{\lambda m + \mu(m+2)} a. \quad (1.13)$$

$$n = -m - 1, \quad b = a. \quad (1.14)$$

Donde si se hubiera escogido

$$\begin{aligned} u_r &= ar^n \sin(m\theta), \\ u_\theta &= br^n \cos(m\theta), \end{aligned} \quad (1.15)$$

las soluciones hubieran sido las mismas pero cambiando  $a$  por  $-a$ .

Una vez que se tienen las soluciones para los desplazamientos en forma general, hay que aplicar las condiciones de contorno. Se estudian dos casos, ambos para compresión poniendo  $m = 0$  en la ecuación 1.10. Estos casos dependen de la condición de contorno en  $R_e$  (fuerzas o desplazamientos constantes). La condición de contorno en  $R_i$  es siempre  $\sigma_{rr}(R_i) = 0$ .

Para una deformación de cizalla, se puede encontrar una solución para los desplazamientos  $u_r$  y  $u_\theta$  con  $m = 2$  imponiendo la expresión 1.15, sin embargo, las expresiones son bastante más complicadas y largas.

### 1.1.2 Elasticidad bidimensional en sistemas anisótropos.

Hasta aquí se han tratado medios elásticos isótropos, que se describen con sólo dos constantes elásticas; sin embargo, los materiales que se encuentran en la Naturaleza no todos

| Compresión uniforme  |                            | Desplazamientos uniformes  |
|--|----------------------------|--|
| $\sigma_{rr}(R_e) = \alpha$ c.c. en el borde   |                            | $u_r(R_e) = \alpha R_e$  |
| $\frac{\alpha R_e^2}{2(R_e^2 - R_i^2)} \left\{ \frac{r}{\lambda + \mu} + \frac{R_i^2}{\mu r} \right\}$ | $u_r(r)$                   | $\frac{\alpha R_e^2}{\mu R_e^2 + (\lambda + \mu) R_i^2} \left\{ \mu r + \frac{(\lambda + \mu) R_i^2}{r} \right\}$  |
| $\frac{\alpha R_e^2}{2(R_e^2 - R_i^2)} \left\{ \frac{r}{\lambda + \mu} - \frac{R_i^2}{\mu r} \right\}$ | $\epsilon_{rr}(r)$         | $\frac{\alpha R_e^2}{\mu R_e^2 + (\lambda + \mu) R_i^2} \left\{ \mu r - \frac{(\lambda + \mu) R_i^2}{r} \right\}$  |
| $\frac{\alpha R_e^2}{R_e^2 - R_i^2} \left\{ 1 - \frac{R_i^2}{r^2} \right\}$                            | $\sigma_{rr}(r)$           | $\frac{2(\lambda + \mu)\mu\alpha R_e^2}{\mu R_e^2 + (\lambda + \mu) R_i^2} \left\{ 1 - \frac{R_i^2}{r^2} \right\}$ |
| $\frac{\alpha R_e^2}{R_e^2 - R_i^2} \left\{ 1 + \frac{R_i^2}{r^2} \right\}$                            | $\sigma_{\theta\theta}(r)$ | $\frac{2(\lambda + \mu)\mu\alpha R_e^2}{\mu R_e^2 + (\lambda + \mu) R_i^2} \left\{ 1 + \frac{R_i^2}{r^2} \right\}$ |
| $\pi\alpha^2 R_e^2 \frac{\mu R_e^2 + (\lambda + \mu) R_i^2}{2(R_e^2 - R_i^2)\mu(\lambda + \mu)}$       | $F_{total}$                | $\pi\alpha^2 R_e^2 \frac{2(R_e^2 - R_i^2)\mu(\lambda + \mu)}{\mu R_e^2 + (\lambda + \mu) R_i^2}$                   |

Tabla 1.1: Resultados de compresión para un anillo elástico.

tienen todas las simetrías. Una deformación cualquiera, en principio, puede inducir respuestas del material (tensiones) en todas las direcciones, y viceversa, una fuerza externa puede deformar el material de forma no simétrica. Esto se expresa diciendo que  $\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} \epsilon_{kl}$ , donde  $i, j, k$  y  $l$  pueden tomar los valores  $x$  ó  $y$ . Estas constantes elásticas convencionalmente se escriben en notación de Voigt usando subíndices enteros:  $xx \equiv 1$ ,  $yy \equiv 2$  y  $xy \equiv 3$ . La energía libre más general que se puede escribir en dos dimensiones en función de todas las posibles constantes elásticas, es:

$$F = \frac{1}{2} C_{11} \epsilon_{xx}^2 + \frac{1}{2} C_{22} \epsilon_{yy}^2 + 2C_{33} \epsilon_{xy}^2 + C_{12} \epsilon_{xx} \epsilon_{yy} + 2C_{13} \epsilon_{xx} \epsilon_{xy} + 2C_{23} \epsilon_{yy} \epsilon_{xy}, \quad (1.16)$$

donde usando las simetrías del problema particular se puede reducir el número de constantes elásticas [LL70]. Por ejemplo, para el caso anisótropo en que la dirección  $x$  no es equivalente a la  $y$ , pero hay una invariancia de rotación de  $180^\circ$ , al hacer el cambio  $x \rightarrow -x$  ó  $y \rightarrow -y$ , entonces  $\epsilon_{xy} \rightarrow -\epsilon_{xy}$ . Imponiendo la invariancia (la energía elástica no puede depender del cambio de signo), se obtiene que  $C_{13} = C_{23} = 0$ . En el caso de que se tengan todas las posibles simetrías, se reduce al caso isótropo, obteniéndose de nuevo los coeficientes de Lamé:

$$C_{12} = \lambda, C_{33} = \mu \text{ y } C_{11} = C_{22} = \lambda + 2\mu. \quad (1.17)$$

De esta forma, dado un cristal regular, se pueden usar sus simetrías para deducir el número de constantes elásticas que le caracterizan.

### 1.1.3 Vibraciones armónicas y modos normales.

También, conociendo las propiedades elásticas de un material cristalino (sus constantes elásticas), se pueden deducir sus modos normales de vibración, la relación de dispersión de dichos modos, velocidad del sonido en el material, etc. [LL70, AM81]

Las ecuaciones del movimiento son:

$$\rho \ddot{u}_i = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad (1.18)$$

donde  $\rho$  es la densidad del material por unidad de superficie y  $\ddot{u}_i$  indica la derivada temporal dos veces del desplazamiento  $u_i$ . En estas ecuaciones se toman como solución prueba ondas planas de la forma  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{R} - \omega t)}$  (la solución final es combinación lineal de todas las soluciones expresadas en forma de ondas planas). Entonces las ecuaciones del movimiento se reducen a resolver

$$\begin{pmatrix} C_{11}k_x^2 + 2C_{13}k_xk_y + C_{33}k_y^2 - \rho\omega^2 & C_{13}k_x^2 + (C_{12} + C_{33})k_xk_y + C_{23}k_y^2 \\ C_{13}k_x^2 + (C_{12} + C_{33})k_xk_y + C_{23}k_y^2 & C_{33}k_x^2 + 2C_{23}k_xk_y + C_{22}k_y^2 - \rho\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k_x} \\ u_{k_y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

de donde se pueden obtener la relación de dispersión,  $\omega(\mathbf{k})$ , y la velocidad del sonido  $\mathbf{U} = \partial\omega(\mathbf{k})/\partial\mathbf{k}$ .

## 1.2 Percolación.

El problema matemático de la percolación es sencillo de definir. Sea una serie de elementos regularmente dispuestos en el espacio, en el plano, o en general en cualquier dimensión. Cada uno de estos elementos está presente con probabilidad  $p$ , y ausente con probabilidad  $1 - p$ . Para  $p = 1$  el sistema está completo y se puede recorrer pasando de un elemento a otro, mientras que para  $p = 0$  el sistema está vacío. Entre medias hay algunos valores de  $p$  para los cuales se puede ir, elemento a elemento, visitando todo el sistema, y otros en los que la zona del sistema que se puede alcanzar partiendo de un punto es limitada. Entonces se dice que hay una probabilidad crítica  $p_c$  a partir de la cual ya el sistema no se encuentra totalmente conectado y sus elementos forman *clusters* o islas de distintos tamaños.

Este simple planteamiento se aplica en Física y en Estadística para estudiar problemas tales como: flujo de fluidos en medios porosos (permeabilidad de filtros), variación de la conductividad en una película delgada producida por evaporación de un metal y de un compuesto cerámico, mantenimiento de redes de comunicaciones (teléfonos, carreteras, ferrocarriles, ...), transición ferromagnetismo-paramagnetismo en aleaciones, transición conductor-aislante en semiconductores dopados, propagación de incendios y epidemias (en bosques, en cultivos, en poblaciones, ...), propagación de noticias y rumores, formación de geles poliméricos, transición de estados localizados a no localizados en sistemas desordenados: localización de Anderson, flujo de nutrientes a través de conducciones en organismos vivos, etc.

Es por esta gran cantidad de temas a los que se puede aplicar que hay cientos de artículos y publicaciones que se refieren directamente a la percolación. Como primera introducción al tema, incluso con conocimientos mínimos de Física, es recomendable el libro de Efron [Efr87], y, como introducción más avanzada y con una completa bibliografía, el de Stauffer [Sta85].

### 1.2.1 Percolación y conductividad.

Dentro de los problemas físicos a los que se aplica la percolación son los relacionados con el transporte de alguna magnitud los que tienen mayor interés por sus posibles aplicaciones

prácticas. Por ello plantearemos como modelo el problema de la conductividad, cuyas propiedades y parámetros se pueden aplicar mediante analogías para el estudio de otros problemas.

### Probabilidad crítica.

El problema consiste en una red en la que los puntos se unen por resistencias eléctricas y se aplica una diferencia de potencial (una pila) entre los extremos de dicha red. Al ir eliminando resistencias, la intensidad total que pasa por el circuito va disminuyendo hasta que llega un punto en el cual la corriente no puede pasar de un extremo a otro de la red porque ésta se encuentra desconectada. La relación entre el número de resistencias que quedan en ese momento y las que había con la red completa se denomina probabilidad crítica  $p_c$  y depende del tipo de red que se trate. Para dimensión 1 el problema es trivial, ya que basta con quitar una sola resistencia para que no pase corriente ( $p_c=1$ ).

También esta  $p_c$  depende de si los elementos que se quitan son resistencias (enlaces) o nodos (quitar un nodo equivale a quitar todas las resistencias que confluyen en ese nodo).

| Red           | Dimensión | $p_c$ (nodos) | $p_c$ (enlaces) |
|---------------|-----------|---------------|-----------------|
| Kagomé        | 2         | 0.6527        | 0.435           |
| Hexagonal     | 2         | 0.6962        | 0.6527          |
| Cuadrada      | 2         | 0.59275       | 0.5             |
| Triangular    | 2         | 0.5           | 0.34729         |
| Diamante      | 3         | 0.428         | 0.388           |
| Cúbica simple | 3         | 0.3117        | 0.2492          |
| b. c. c.      | 3         | 0.245         | 0.1785          |
| f. c. c.      | 3         | 0.198         | 0.119           |
| h. c. p.      | 3         | 0.204         | 0.124           |

Tabla 1.2: Probabilidades críticas para distintas redes.

### Magnitudes y exponentes críticos.

Además de la conductividad eléctrica  $\sigma$  (intensidad / potencial entre extremos), se pueden definir otras magnitudes que también cambian su valor al llegar la transición:

- Probabilidad de percolación  $P(p)$ : probabilidad de que un elemento del sistema pertenezca al cluster infinito. (Para  $p < p_c$   $P(p)=0$ ).
- Longitud de correlación  $\xi(p)$ : distancia media entre dos elementos cualesquiera del mismo cluster. (Se hace  $\infty$  justo en la transición).
- Tamaño medio de los clusters finitos  $N(p)$ : es el número medio de elementos a los que se puede acceder desde uno dado. (Es  $\infty$  para  $p > p_c$ ).

Cada una de las magnitudes se caracterizan por su comportamiento cerca de la transición, definiéndose para cada una un exponente con el que cambian suavemente su valor.



| Magnitud | Comportamiento        | Valor del exponente |     |
|----------|-----------------------|---------------------|-----|
|          |                       | 2D                  | 3D  |
| $\sigma$ | $(p - p_c)^t$         | 1.3                 | 2.0 |
| $\xi$    | $(p_c - p)^{-\nu}$    | 4/3                 | 0.9 |
| P        | $(p - p_c)^\beta$     | 5/36                | 0.4 |
| N        | $(p_c - p)^{-\gamma}$ | 43/18               | 1.8 |

Tabla 1.3: Distintos exponentes críticos para la percolación.

Los exponentes en las transiciones de fase de segundo orden definen su *universalidad*. Si en dos problemas distintos, al acercarse la transición, dos magnitudes tienen el mismo exponente crítico se dice que pertenecen a la misma universalidad. Esto sucede en la percolación, donde los exponentes de la tabla 1.3 son independientes del tipo de red que se trate y de si la percolación es de nodos o de enlaces, tan solo varían con la dimensión del sistema.

### Esqueleto (backbone).

Cuando se produce el proceso de ir quitando resistencias de la malla, la intensidad que pasa por cada una de las que quedan no es la misma en todas ellas. Hay algunas que contribuyen más que otras a que la corriente pase a través del sistema. De hecho hay algunas por las cuales no pasa ninguna corriente. La estructura que queda después de quitar estas resistencias inútiles para la corriente es lo que se denomina esqueleto o backbone que mantiene la estructura. Justo en la transición el backbone tiene estructura en todas las escalas de magnitud y por tanto es un fractal (ver más abajo).

### Superpercolación.

Un problema análogo (dual) al de la conductividad es el de la superpercolación o superconductividad en el cual en vez de quitar las resistencias lo que se hace es unir los nodos o poner un elemento superconductor entre ellos. El comportamiento de la conductividad es ahora:

$$\sigma(p) \sim (p_c - p)^{-s}, \quad (1.20)$$

donde el sistema es superconductor para  $p < p_c$ . Para dimensión 2  $s = t$ , mientras que para dimensión 3  $s = 0.75$  [HDV84].

## 1.3 Fractales en Física.

En la introducción comenté ya algunos puntos y problemas que se estudian desde el punto de vista de los fractales. Utilizaré esta sección para ahondar un poco más en el concepto de fractal y sus distintas variantes, procurando exponer algunos métodos sencillos de cómo generar fractales y de cómo medir la dimensión fractal. Sobre este tema han ido apareciendo distintos libros [Man82,JB87,Fed88,Wic89] y multitud de *proceedings*, de entre los cuales

uno de los más recientes es [AF89]. Por esto no pretendo ser exhaustivo, ya que el campo ha llegado a hacerse bastante amplio, y simplemente trataré de recoger la filosofía general, dejando otros puntos más especializados para el capítulo 3, que tiene más relación con el tema.

### 1.3.1 Auto-similitud y auto-afinidad.

Uno de los ejemplos más típicos para explicar en qué consiste un fractal es el de la medida de la distancia entre dos puntos de una costa. Sea una costa, el borde de un lago, una frontera sinuosa entre dos países o un río; y se quiere medir la distancia, a lo largo de nuestro elemento geográfico, entre dos puntos del mismo. Para hacerlo tomemos en principio una unidad de medida cualquiera, por ejemplo una regla de 1km.. A continuación volvamos a repetir la medición con una regla más pequeña (100 m.). El resultado será una medida mayor que la realizada en primer lugar, ya que existen irregularidades (cabos, golfos, etc.) que la regla grande no puede detectar y se las salta. Si existieran irregularidades a todas las escalas, la longitud total medida crecería conforme se disminuye la regla, y llegaríamos a la conclusión de que la distancia entre dos puntos a través de la costa es infinita. Este hecho se puede reinterpretar diciendo que existe una relación entre nuestra regla  $r$  y la longitud medida por la misma  $l(r)$ , de forma que  $l(r) \propto r^D$ . Si  $D \sim 1$  la costa es casi una línea recta.  $D$  (la dimensión fractal o dimensión de Hausdorff) es por tanto una característica de cuánto irregular es el objeto que se está midiendo.

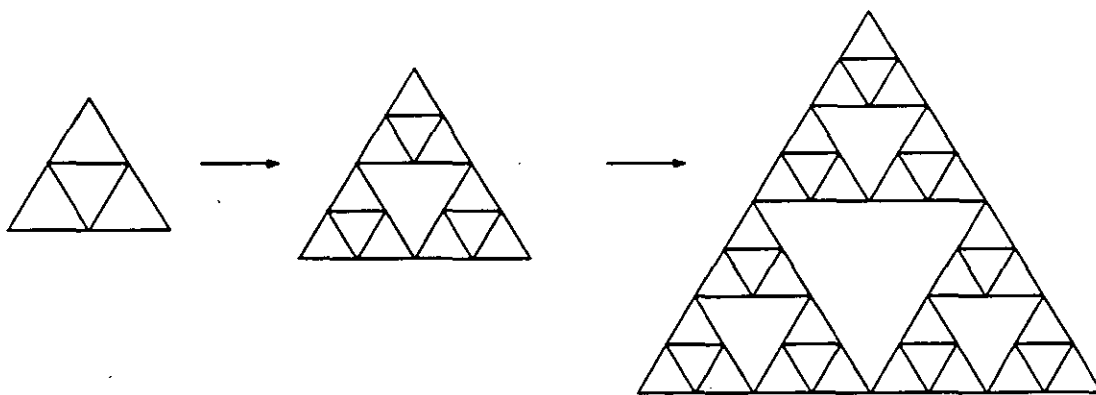


Figura 1.3: Generación de la alfombra de Sierpinski (Sierpinski Gasket).

El ejemplo anterior muestra cómo los fractales aparecen de manera espontánea en la Naturaleza. Para imitarla se pueden crear fractales de forma matemática mediante la utilización de modelos recursivos, repitiendo estructuras en ciertos patrones en los cuales cada paso de la generación del fractal es *similar* al anterior. La figura 1.3 muestra uno

de dichos modelos. En cada paso el número de lados de triángulos<sup>4</sup> se multiplica por 3 mientras que el lado del triángulo mayor se multiplica por 2, de donde la dimensión fractal es  $D = \ln 3 / \ln 2 = 1.58$ . Este tipo de comportamiento, parecido al del párrafo anterior al hablar de las costas, se denomina auto-similitud, ya que una generación es similar en el aspecto a las demás y a partes más pequeñas dentro de su misma estructura. Además hay un solo parámetro  $D$  que los relaciona.

En la muchos casos se pueden aplicar las hipótesis de auto-similitud, intentando describir el sistema midiendo sus dimensiones y el número de objetos cuya posible distribución fractal



Figura 1.4: Generación de un fractal auto-afín.

nos interesa, y obteniendo una dimensión. Sin embargo las cosas no son siempre tan sencillas. En la figura 1.4 se da un ejemplo de construcción matemática claramente anisótropo en el cual cada dirección juega un papel distinto y el análisis expuesto anteriormente carece de sentido. En cada paso de la generación la masa (longitud de rectas, número de puntos) se multiplica por 7 y la dimensión se multiplica por 5 en el eje horizontal ( $D_x = \ln 7 / \ln 5 = 1.21$ ) y por 3 en el vertical ( $D_y = \ln 7 / \ln 3 = 1.77$ ). Ahora la masa escala como  $m(l_x, l_y) = Al_x^{D_x} + Bl_y^{D_y}$  y el sistema se dice que tiene estructura auto-afín.

### 1.3.2 Fenómenos de crecimiento.

Un problema de gran interés en física, no solo a nivel teórico, sino que también tiene importantes aplicaciones tecnológicas, es el de formación y crecimiento de materiales a partir de sus constituyentes [Lan80]. En este proceso de crecimiento se producen inestabilidades que pueden alterar la estructura final del material tomando formas variadas. Esto es similar a lo que ocurre en las llamadas células de Hele-Shaw, compuestas por dos superficies separadas una pequeña distancia y entre en las cuales un fluido viscoso es desplazado por otro de menor viscosidad (aceite por agua) [BKL\*86]. Se observa entonces que se producen ramificaciones en el desplazamiento del fluido de forma dendrítica.

### Diffusion-Limited-Aggregation (DLA).

Dentro del campo de la física uno de los primeros modelos con éxito que logró describir fenómenos fractales del tipo de los que ocurren en la Naturaleza fué el de Agregación Limitada por Difusión [WS81, WS83] (Diffusion-Limited-Aggregation, DLA). Este modelo, en su variante más sencilla, consiste en difundir partículas en forma de camino libre aleatorio

<sup>4</sup>Cualquier otra medida de la densidad como número de triángulos o de intersecciones de líneas daría el mismo resultado.

(random walk<sup>5</sup>) en una determinada red. Cuando una partícula llega a las proximidades de una semilla (es decir, una posición en la red que es primer vecino de una posición ocupada por otra partícula), se para quedando asociada al agregado. Si por el contrario la partícula en su recorrido aleatorio se aleja del agregado, ésta se suprime, lanzando otra nueva partícula y repitiendo el procedimiento. El resultado es una estructura bastante ramificada parecida a la de la figura 1.5, en la cual se pueden observar ramas y agujeros grandes y pequeños, en todos los órdenes de magnitud, lo cual hace que la estructura, como se verá más adelante, pueda considerarse fractal.

#### Dielectric Breakdown (DB).

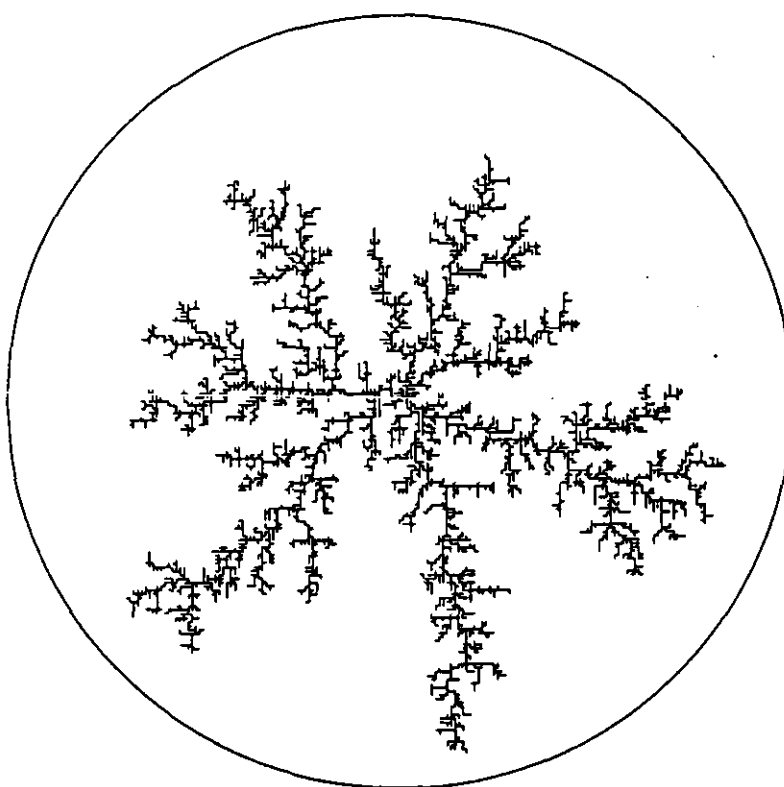


Figura 1.5: Fractal generado por el método de DB.

El modelo anterior es equivalente al modelo de Rotura Dieléctrica (Dielectric Breakdown, DB) [NPW84], en el cual el recorrido libre aleatorio se sustituye por un potencial eléctrico. En el modelo DLA, la propagación aleatoria de las partículas tiene la forma de una ecuación de difusión  $D\nabla^2 u = \partial u / \partial t$ , donde  $u$  es la probabilidad de que la partícula se encuentre en el punto  $x$  en el paso  $k$ , y  $D$  es la constante de difusión. Si se considera que se lanzan partículas de forma suficientemente lenta, la ecuación se convierte en la ecuación de Laplace.

<sup>5</sup>En cada punto de la red la partícula elige entre los primeros vecinos de ese punto, dirigiéndose en el paso siguiente a uno de ellos con probabilidad  $1/z$ , siendo  $z$  la coordinación de la red

Siguiendo la analogía el campo de probabilidades se reemplaza por un potencial eléctrico, con lo cual queda la ecuación de equilibrio de un campo eléctrico en ausencia de cargas externas  $\nabla^2\phi = 0$ . Las condiciones de contorno se obtienen también del modelo DLA imponiendo potencial nulo en el agregado (las partículas no pasan al agregado por lo que la probabilidad allí es cero), y constante a una cierta distancia del mismo.

La agregación de una nueva partícula a la estructura se produce de forma aleatoria y con probabilidad proporcional al campo eléctrico  $\mathbf{E} = -\nabla\phi$  en la frontera del agregado  $p_i = |\mathbf{E}_i| / \sum_i |\mathbf{E}_i|$ . El resultado se muestra en la figura 1.5 y contiene 4010 partículas. El círculo exterior tiene de radio 100 en unidades de la distancia entre primeros vecinos de la red, y es allí donde se aplica el potencial constante.

El resolver la ecuación de Laplace resulta mucho más costoso en tiempo de ordenador que el difundir partículas de forma aleatoria; sin embargo, el modelo DB resulta mucho más versátil para estudiar problemas relacionados. Uno de ellos es el que surge al considerar  $p_i$  de la forma  $p_i = |\mathbf{E}_i|^\eta / \sum_i |\mathbf{E}_i|^\eta$  el cual permite variar la estructura resultante desde agregados muy compactos ( $\eta = 0$ ) a muy ramificados y casi lineales ( $\eta$  grande).

Resultados idénticos a los obtenidos mediante DLA y DB se pueden obtener de forma experimental mediante el crecimiento de cristales a partir de partículas y geles poliméricos en suspensión, o mediante deposición electrolítica.

### Medidas de la dimensión fractal.

El cuantificar la dimensión fractal de un determinado sistema puede resultar un problema complicado y para hacerlo hay gran variedad de métodos [DQR\*89]. Sin embargo, para muchos propósitos prácticos es suficiente un análisis sencillo basado en suponer que el sistema, por lo menos en alguna escala, se comporta de forma auto-similar (o auto-afín dependiendo del problema). Esto implica que  $M(R) \propto R^D$ , donde nos interesa conocer  $D$ . En la figura 1.6 se muestra la obtención de  $D$  por dos formas distintas de considerar  $R$ . La más corriente en la literatura consiste en, para cada nueva partícula que se adhiere al agregado, determinar el radio de giro definido como  $R_g^2 = (1/M) \sum_{i=1}^M R_i^2$ . El origen de coordenadas se puede poner en el punto en donde se comenzó el crecimiento o bien calcular el centro de masas del sistema; esto no tiene gran influencia en los resultados. El comportamiento cuando el agregado es pequeño se puede observar que es bastante errático, tendiendo a una línea recta según se produce el crecimiento (la pendiente de la figura es  $D = 1.72$  para  $R_g$ ). Otra forma de llegar a un resultado parecido consiste en ver cuántas partículas se encuentran dentro de distintos círculos de radios  $R$ , una vez el crecimiento ha llegado a su fin. El comportamiento es el opuesto que para  $R_g$ , ya que para  $R$  grande el agregado no está completo, hay zonas que se llenarían en un crecimiento posterior, y por ello la curva tiende a ser horizontal. La recta que ajusta  $M$  en función de  $R$ , tiene pendiente  $D = 1.70$ , ligeramente inferior al ajuste para  $R_g$ , lo cual parece ser un efecto de la medida [FHMJ86].

Los resultados anteriores para la dimensión fractal del DB concuerdan bastante bien con los que se referencian normalmente en la literatura ( $D = 1.71$ ), pero puede ser coincidencia. Para dar un resultado fiable hay que promediar sobre el mayor número posible de configuraciones, de forma que el error estadístico disminuya.

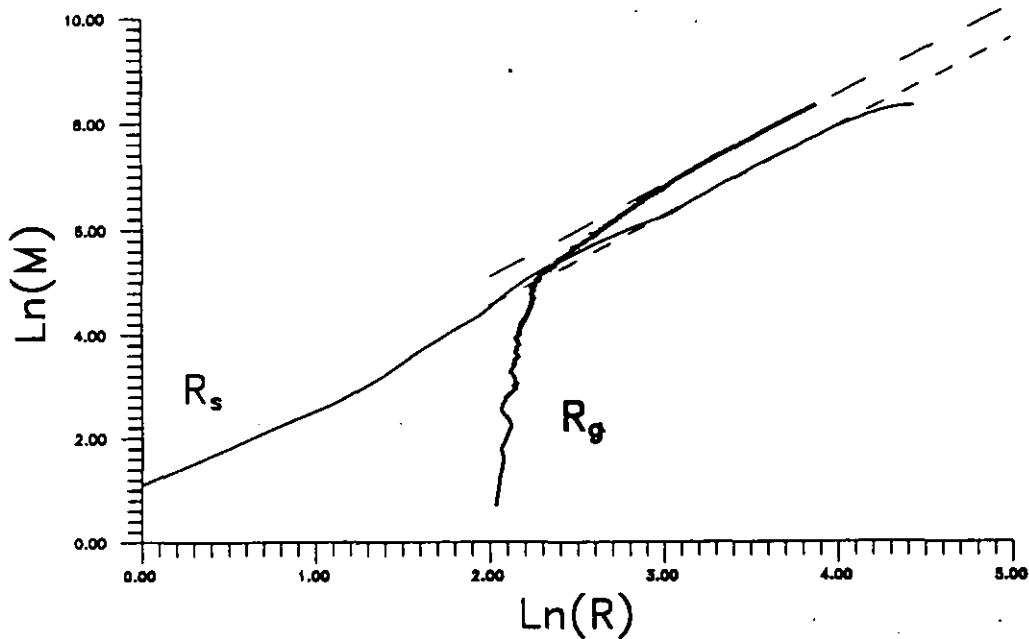


Figura 1.6: Ajustes del radio de giro y del radio dimensional para el fractal de la figura 1.5.

### 1.3.3 Multifractalidad.

Hace unos pocos años la interpretación de las estructuras se amplió mediante la idea de multifractalidad. En este contexto se pueden definir una serie de exponentes [HJK\*86] que dan cuenta del comportamiento de los distintos momentos de una determinada distribución:

$$D_q = \lim_{l \rightarrow 0} \left( \frac{1}{q-1} \frac{\ln \chi(q)}{\ln l} \right), \quad (1.21)$$

donde  $\chi(q) = \sum_i p_i^q$ .  $D_0$  es la dimensión fractal,  $D_1$  la dimensión de información y  $D_2$  la de correlación.

El análisis proviene de definir singularidades, cada una de ellas caracterizada por una potencia  $\alpha(q)$  ( $p_i^q \sim l^{\alpha q}$ ) y que posee su propia dimensión (o extensión espacial)  $f(\alpha)$ . Es por medio de esta función que se suele caracterizar el problema ya que

$$D_q = \frac{1}{q-1} [q\alpha(q) - f(\alpha(q))] \quad \text{y} \quad \alpha(q) = \frac{d}{dq} [(q-1)D_q]. \quad (1.22)$$

Este método se puede aplicar para caracterizar las distribuciones de fractales generados matemáticamente [HJK\*86], o bien para sistemas aleatorios como DLA [MCSW86, ACdL86].

## Capítulo 2

# Percolación elástica.

En este capítulo se abordará el problema de la percolación elástica, y de los distintos comportamientos que se encuentran al variar las constantes elásticas del medio. La percolación elástica se aplica para estudiar varios fenómenos de interés tecnológico, como pueden ser la corrosión de materiales, redes aleatorias en materiales covalentes, cristales poliméricos o sólidos amorfos.

Se comenzará por definir el modelo que se va a utilizar, y ver cómo este modelo se relaciona con la teoría de la elasticidad expuesta en el capítulo 1, para pasar a continuación a estudiar los métodos de cálculo utilizados y algunos de los trabajos y líneas que se han seguido para estudiar el problema<sup>1</sup>, comentando los resultados y algunas aproximaciones analíticas.

### 2.1 Discretización del medio continuo.

#### 2.1.1 Modelo de fuerzas centrales.

La teoría de la elasticidad expuesta en el capítulo 1 trata a los medios de manera continua, sin embargo, a la hora de elaborar modelos teóricos de materiales, es más sencillo pensar en ellos como compuestos de unidades fundamentales (átomos o monocristales), unidos por fuerzas que dan cohesión a la estructura.

Son estas fuerzas, o los potenciales de las que éstas se derivan, las que dan lugar a los distintos modelos para deducir las propiedades del material. De las aproximaciones sencillas que se pueden encontrar una de las más utilizadas es el hamiltoniano de Born[BH54]:

$$H = \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \sum_{ij} [(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij}]^2 + \frac{1}{2}\beta \sum_{ij} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)^2; \quad (2.1)$$

donde  $\mathbf{v}_i$  y  $\mathbf{v}_j$  son los desplazamientos de los puntos  $i$  y  $j$  de su posición de equilibrio,  $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$  el vector de módulo unidad que une estos puntos, y  $\alpha$  y  $\beta$  dos parámetros que ajustan las contribuciones central y angular a la energía del sistema. Otra aproximación que sigue una

---

<sup>1</sup>La bibliografía de la percolación elástica es bastante abundante y, por supuesto, no pretendo citar todos los trabajos; solamente citaré los que a mi juicio son más representativos, otros trabajos se encuentran en la bibliografía de los que aquí se comentan.

filosofía parecida a la anterior es el hamiltoniano de Keating[Kea66]:

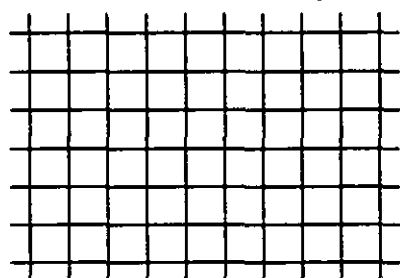
$$H = \frac{1}{2}\alpha \sum_{ij} [(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij}]^2 + \frac{1}{2}\beta \sum_{ijk} [\hat{\mathbf{r}}_{ik}(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) + \hat{\mathbf{r}}_{ij}(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_k)]^2, \quad (2.2)$$

que también se descompone en dos contribuciones: una central moderada por la constante  $\alpha$ , y otra angular de parámetro  $\beta$ , en la que la suma  $ijk$  se extiende a puntos tales que  $j$  y  $k$  son distintos vecinos de  $i$  (ángulos con vértice en el punto  $i$ ). La diferencia entre los dos modelos consiste en que, mientras que 2.2 es rotacionalmente invariante (una rotación del sistema de referencia no produce cambio de energía), 2.1 no lo es.

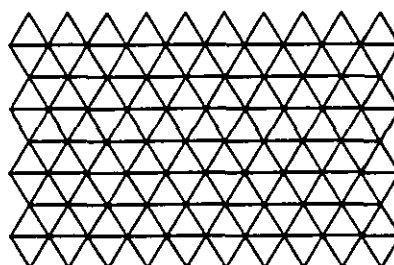
La característica común de las dos aproximaciones anteriores es el potencial cuadrático que une los puntos  $i$  y  $j$ . Es esta contribución de fuerzas centrales ( $\beta = 0$ ) la que se estudiará detalladamente en este capítulo.

### 2.1.2 Red triangular y reconstrucción $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ .

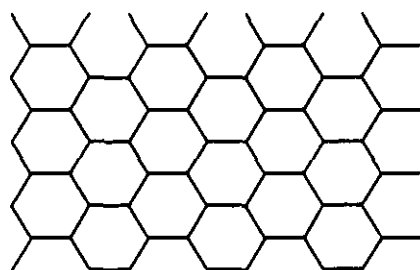
Con este modelo de fuerzas centrales la conexión entre nodos de la red se realiza mediante muelles (potenciales centrales armónicos) que conectan estos puntos. Ahora hace falta definir la red bidimensional de puntos entre los que dichos muelles actúan. De las redes



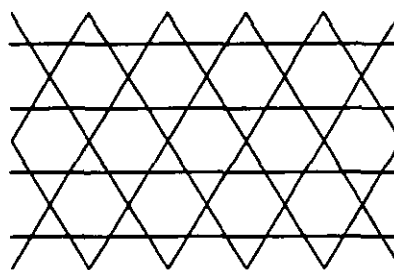
cuadrada



triangular



hexagonal



kagomé

Figura 2.1: Redes bidimensionales simples.

bidimensionales regulares simples, bajo la interacción de sólo fuerzas centrales, las redes



hexagonal y cuadrada son inestables bajo fuerzas externas de cizalla ( $\mu = 0$ ) (al aplicar fuerzas tales como en la figura 1.1 el sistema se puede reducir a una línea sin costo de energía). Por ello, y para poder mantener la interacción de fuerzas centrales, se ha elegido trabajar con la red triangular con distintas reconstrucciones para poder simular medios con distintas constantes elásticas. La red kagomé, como se verá mas adelante, al considerarla como una red triangular diluida, también resulta dar una descripción trivial de los módulos elásticos.

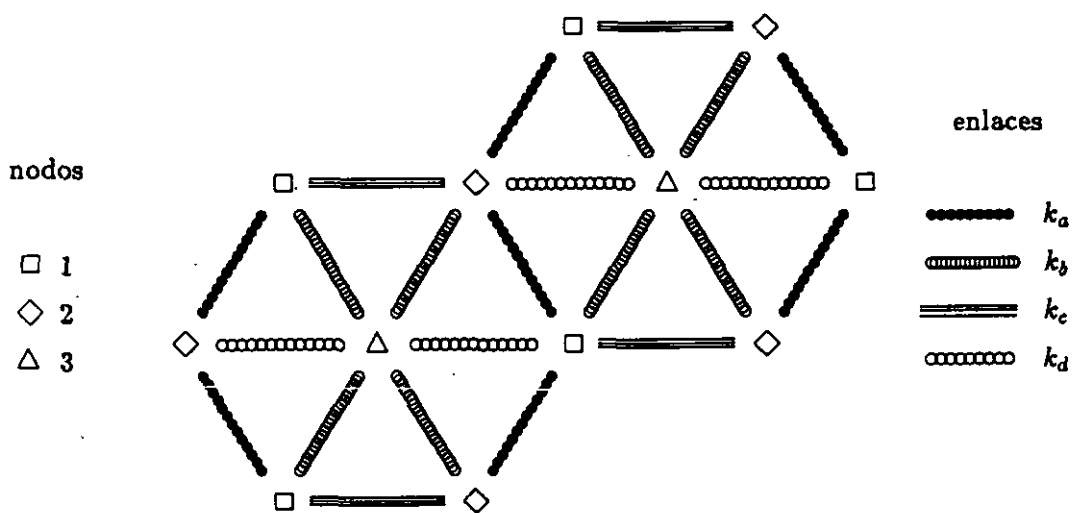


Figura 2.2: Variantes de la red triangular consideradas.

La figura 2.2 contiene todas las variantes de la red triangular que se van a considerar aquí. Estas son:

$$\begin{array}{l}
 k_a = k_b = k_c = k_d \quad \text{red triangular,} \\
 \left. \begin{array}{l} k_b = k_a \\ k_c = k_d \end{array} \right\} \quad \text{red triangular anisótropa, y} \\
 \left. \begin{array}{l} k_a = k_c \\ k_b = k_d \end{array} \right\} \quad \text{reconstrucción } \sqrt{3} \times \sqrt{3}.
 \end{array}$$

Para las dos primeras hay un solo nodo por celda unidad, y para la reconstrucción  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  (red hexagonal o de panal de abeja superpuesta a la triangular), son tres los nodos por celda unidad (modelo que repetido periódicamente llena el plano).

### 2.1.3 Conexión entre el modelo discreto y el modelo elástico contínuo.

Para relacionar este modelo con la teoría de la elasticidad del capítulo 1 hay que encontrar la relación entre los parámetros macroscópicos del material (constantes elásticas) y los microscópicos (constantes de recuperación de los muelles). Para ello se aplica una deformación determinada a la red, se relaja ésta, y se calcula la energía acumulada por celda unidad<sup>2</sup>, comparándola luego con la energía por unidad de superficie  $F$  que se obtiene en el contínuo (fórmula 1.16) (ver tabla 2.1).

| Reconstrucción $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$              |                          |  |
|--|--------------------------|--|
| Deformación  | $F$ contínuo             | $F$ en la red  |
| Compresión $u_x = \delta x$<br>$u_y = \delta y$        | $2\kappa\delta^2$        | $\frac{\sqrt{3}}{3}(k_a + 2k_b)\delta^2$               |
| Cizalla $u_x = \delta\frac{2}{\sqrt{3}}y$<br>$u_y = 0$ | $\frac{2}{3}\mu\delta^2$ | $\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{k_a k_b}{2k_a + k_b}\delta^2$ |

| Anisotropía  |                             |   |
|--|-----------------------------|---|
| Deformación  | $F$ contínuo                | $F$ en la red                             |
| Eje horizontal $u_x = \delta x$<br>$u_y = 0$           | $\frac{1}{2}C_{11}\delta^2$ | $\frac{\sqrt{3}}{24}(k_b + 8k_c)\delta^2$ |
| Eje vertical $u_x = 0$<br>$u_y = \delta y$             | $\frac{1}{2}C_{22}\delta^2$ | $\frac{3\sqrt{3}}{8}k_b\delta^2$          |
| Cizalla $u_x = \delta\frac{2}{\sqrt{3}}y$<br>$u_y = 0$ | $\frac{2}{3}C_{33}\delta^2$ | $\frac{\sqrt{3}}{6}k_b\delta^2$           |

Tabla 2.1: Relación entre constantes elásticas y constantes de la red.

Otra forma mucho más elegante de obtener estas relaciones consiste en comparar la relación de dispersión  $\omega(\mathbf{k})$  que se obtiene de las ecuaciones de equilibrio

$$D(\mathbf{k})\mathbf{u}_{\mathbf{k}} = \rho\omega^2\mathbf{u}_{\mathbf{k}} \quad (2.3)$$

(sección 1.1.3), donde  $D(\mathbf{k})$  se denomina matriz dinámica del problema, con las que se obtienen para la red triangular en el límite de longitud de onda larga ( $\mathbf{k}$  pequeño). Esta matriz dinámica para la reconstrucción más general de la figura 2.2, y para cualquier longitud de

<sup>2</sup>Para ver cómo calcular energías y desplazamientos en la red de muelles ir al apéndice C.

onda, tiene la forma:

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\omega_a^2 + \frac{1}{2}\omega_b^2 + \omega_c^2 + \omega_d^2 & 0 & \frac{3}{2}\omega_a^2 + \frac{3}{2}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 - \omega_c^2 & -\frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 - \omega_c^2 & -\frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 & 0 & 0 & 0 \\ (-\frac{1}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)\omega_b^2 - e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_d^2)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y} & \frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & 0 & \frac{3}{2}\omega_a^2 + \frac{3}{2}\omega_b^2 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 - \omega_c^2 & \frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\omega_a^2 + \frac{1}{2}\omega_b^2 + \omega_c^2 + \omega_d^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2}\omega_a^2 + \frac{3}{2}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (-\frac{1}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)\omega_b^2 - e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_d^2)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y} & -\frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (-\frac{1}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)\omega_b^2 - e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_d^2)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y} & -\frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (-\frac{1}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)\omega_b^2 - e^{-i\frac{3}{2}k_x}\omega_d^2)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y} & \frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2}i\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & -\frac{3}{2}\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_y}\omega_b^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \omega_b^2 + 2\omega_d^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3\omega_b^2 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Como se vé, esta matriz tiene dimensión 6 debido a que hay tres nodos por celda unidad; mientras que la definida en la fórmula 1.19 tiene dimensión 2, por lo cual las matrices no se pueden comparar directamente, y habría que comparar la relación de dispersión que se obtiene al resolver el sistema en cada caso. El problema reside en que el calcular esta relación es un proceso algebraico tedioso y complicado. Sí se puede calcular para el caso anisótropo, en el que al tener un solo nodo por celda unidad, la matriz dinámica se reduce a [Per87]:

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \omega_a^2 + 2\omega_c^2 - \cos(\frac{k_x}{2})\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)\omega_a^2 - 2\cos(k_x)\omega_c^2 & -\sqrt{3}\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)\text{sen}(\frac{k_x}{2})\omega_a^2 \\ -\sqrt{3}\text{sen}(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)\text{sen}(\frac{k_x}{2})\omega_a^2 & 3\omega_a^2 - 3\cos(\frac{k_x}{2})\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)\omega_a^2 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Se toma la masa de cada nodo uno:  $\omega_i^2 \equiv k_i$ ,  $\rho = 1$  para el caso de la red triangular y  $\rho = 2/\sqrt{3}$  para el contínuo. La aproximación de longitud de onda larga implica hacer  $\text{sen}(x) \approx x$ ,  $\cos(x) \approx 1 - \frac{x^2}{2}$ , y despreciar términos de orden superior a  $x^2$ . De esta forma se obtienen, via la relación de dispersión, los mismos resultados de la tabla 2.1 para la anisotropía.

## 2.2 Métodos de cálculo.

A la hora de resolver el problema de forma numérica se plantea la relajación de las ecuaciones de equilibrio cuando en el sistema faltan una serie de enlaces. En este aparatado

discutiré distintos procedimientos que se han ido utilizando para resolverlo, así como detalles concretos de las simulaciones que hemos realizado.

Al estar estudiando un problema de transición de fase de segundo orden, cerca de la transición, se observa el fenómeno de *critical slowing down* o amortiguamiento crítico como consecuencia de que las longitudes de correlación se hacen muy grandes. Esto hace que al introducir una perturbación en el sistema tal como quitar un enlace más a la estructura, el proceso dinámico de relajación se haga enormemente lento (de hecho justo en la transición es infinitamente lento). Por ello los métodos numéricos usados y su precisión, sobre todo cerca de la transición, son esenciales para poder abordar el problema con éxito. Dos tipos de métodos se pueden distinguir: métodos iterativos y de matriz de transferencia. Estos últimos usan muestras en forma de banda de longitud grande y anchura variable característica  $L$ . Son exactos para cada muestra particular, por lo cual dan mejores resultados para calcular parámetros críticos; sin embargo no dan información local sobre la estructura (tensiones y deformaciones locales) que puede ser interesante conocer para estudiar el problema. Son los métodos iterativos los que dan dicha información ya que lo que hacen es, partiendo de una solución *prueba* inicial de todos los desplazamientos en la muestra, aplicar un cierto procedimiento hasta que se cumple un determinado criterio de convergencia. Además, en estos métodos las muestras pueden ser de formas variadas, no necesariamente bandas.

Nosotros empleamos muestras hexagonales de la red triangular caracterizadas por la longitud del lado del hexágono  $L$ , expresada en unidades de la distancia entre primeros vecinos. Las condiciones de contorno (dilatación o cizalla) se imponen fijando los desplazamientos en el borde de la muestra y dejando al resto del sistema relajarse al equilibrio. Las mismas ecuaciones de equilibrio (apéndice C) se aplican tras quitar una fracción  $1 - p$  de los enlaces presentes (cada muestra tiene en total  $3L(3L - 1)$  enlaces). Hemos probado dos métodos iterativos para resolver estas ecuaciones: método de gradientes conjugados (MGC) y método de relajación (MR) (Jacobi o Gauss-Siedel) y hemos contrastado la bondad de cada uno de dos formas: La primera y más sencilla consiste en ver cuanta fuerza se acumula en los nodos de la red (las ecuaciones de equilibrio tratan de hacer nula esta fuerza). Según este criterio el MGC da mucho mejores resultados (fuerzas en los nodos menores) para el mismo número de iteraciones que el MR. La otra forma de verificar que el MGC es mucho más potente que el MR en el problema de la percolación elástica consiste en analizar la distribución de tensiones de los muelles de la estructura. Tal como se discutirá más adelante, existen dos tipos de muelles: unos que mantienen la estructura y por tanto acumulan mucha tensión (*backbone*), y otros que no acumulan casi tensión y si se quitaran no variarían los módulos elásticos macroscópicos de la red. Estos dos tipos de muelles forman los dos picos en la distribución de tensiones (figura 2.9), que deben aparecer para que los resultados sean fiables. Esto no sucede para el MR incluso después de un gran número de iteraciones (aparece solamente un pico más ancho), por lo que la fiabilidad del método es bastante baja. Sólo serían relevantes los resultados obtenidos por este método para  $p \sim 1$  donde hay muy pocos enlaces en el pico de tensiones nulas. Para el MGC sin embargo aparecen los dos picos, dependiendo la distancia entre los mismos del error elegido. De esta forma se puede variar el error para que la distancia entre los picos no sea muy grande y por tanto la convergencia se obtenga para un número de iteraciones menor.

El error del MGC (ver apéndice A) se fijó en  $10^{-9}$  para la mayoría de los cálculos expuestos aquí y en  $10^{-12}$  para los cálculos referentes al *backbone*. El número de pasos necesario (iteraciones) para obtener el error límite anterior aumenta conforme se aproxima

la transición, siendo también bastante mayor para  $k_a \neq k_b$  que para  $k_a = k_b$ .

### 2.2.1 Medida de los módulos elásticos.

Una vez que se ha conseguido el equilibrio de la forma mejor posible para una cierta proporción  $1 - p$  de enlaces rotos, los módulos elásticos se calculan evaluando la energía que acumulan todos los enlaces que se encuentran en la red

$$F = \frac{1}{2} \sum_{ij} (v_i - v_j)^2, \quad (2.6)$$

de forma que, debido a que la energía libre es proporcional a los módulos elásticos para las deformaciones que se consideran:

$$\frac{F}{F^0} = \frac{C_{nm}}{C_{nm}^0}, \quad (2.7)$$

donde  $F^0$  es la energía de la red completa.  $C_{nm}^0$  se puede obtener de los parámetros de la red en la tabla 2.1, pero aquí hemos preferido usar  $C_{nm}/C_{nm}^0$  que toma el valor 1 para  $p = 1$ .

### Promedios.

Para calcular las propiedades generales del sistema (exponentes y parámetros críticos) se toman en consideración varias medidas de los módulos elásticos para un tamaño dado y en función de  $p$ . En concreto, en los resultados que se presentarán más adelante se han usado hexágonos de lado ( $L$ ) comprendido entre 6 y 48 en unidades de la distancia entre nodos para la red sin deformar, y entre 10 y 200 realizaciones distintas (más realizaciones para los tamaños más pequeños) para cada  $L$  y  $p$ . De todos estos datos se hace un promedio para obtener

$$\frac{C_{nm}(L, p)}{C_{nm}^0(L)} = \frac{1}{n_{\text{real}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{real}}} \frac{C_{nm}^i(L, p)}{C_{nm}^0(L)} \quad (2.8)$$

$$\frac{\Delta C_{nm}(L, p)}{C_{nm}^0(L)} = \frac{1}{n_{\text{real}} C_{nm}^0(L)} \sqrt{n_{\text{real}} \sum_{i=1}^{n_{\text{real}}} (C_{nm}^i(L, p))^2 - \left( \sum_{i=1}^{n_{\text{real}}} C_{nm}^i(L, p) \right)^2}. \quad (2.9)$$

Logicamente, cuanto mayor sea el número de realizaciones ( $n_{\text{real}}$ ), los promedios serán más próximos las magnitudes que se buscan; sin embargo, sobre todo para tamaños grandes, no es posible obtener muchas muestras debido a que el tiempo de ordenador requerido se hace bastante grande.

### 2.2.2 Escalamiento finito y renormalización fenomenológica.

Los exponentes y parámetros críticos son propiedades del sistema en el límite termodinámico ( $L \rightarrow \infty$ ), el cual no es posible alcanzar mediante la simulación numérica. La manera usual de tratar el problema es mediante hipótesis de escala [Bar83], definiendo una nueva variable  $y = L/\xi(p)$ , donde  $\xi(p)$  es la longitud de correlación que tiene el comportamiento de la tabla 1.3. De esta forma se tienen tres comportamientos para sistemas con longitud característica  $L$ : si  $y \gg 1$  el sistema finito es equivalente al límite termodinámico; para  $y \sim 1$  se produce

en el sistema finito un cambio de comportamiento de forma similar a la transición de fase en el sistema infinito, lo que implica que aparentemente la transición se produzca para  $p_c(L) \neq p_c(\infty) = p_c$ ; y finalmente, si  $y \ll 1$  predominan los efectos de tamaño finito y de superficie inducidos por las fronteras de la muestra.

Desarrollando estas hipótesis de escala se puede ver que en la mayoría de los casos  $p_c(L) - p_c \sim L^{1/\nu}$  y que (para el caso de la conductividad del capítulo 1)  $\sigma(p_c) \sim L^{t/\nu}$  para  $L$  grande (escalamiento finito), obteniendo los exponentes críticos de la representación de  $\text{Log}(\sigma(p_c))$  frente a  $\text{Log}(L)$ .

En las expresiones anteriores se presupone conocido  $p_c$ , que se ha de obtener por otros métodos (por ejemplo extrapolando en la representación de  $1/L$  frente a  $p_c(L)$  para  $L \rightarrow \infty$ ), con lo que hay que realizar dos cálculos con la propagación de errores que ello conlleva. Para poder obtener los parámetros críticos de una sola tirada, se puede interpretar el problema de una manera análoga al grupo de renormalización en el cual las magnitudes para los distintos tamaños se reescalan según  $\sigma'(p) = b^{t/\nu} \sigma(p)$ , con  $b = L'/L$ . El punto fijo de esta transformación resulta ser  $p_c$ . Representando

$$\frac{\text{Log} \left( \frac{\sigma(L', p)}{\sigma(L, p)} \right)}{\text{Log} \left( \frac{L'}{L} \right)} \text{ frente a } p \quad (2.10)$$

para dos o más valores distintos de  $L$  y  $L'$ , existe un punto de corte cuya ordenada es  $p_c$  y de abcisa  $t/\nu$ . Este método se denomina renormalización fenomenológica, aplicándose con bastante éxito al problema de la conductividad [Sah85].

## 2.3 Fenomenología.

Si en la red triangular de muelles se van quitando enlaces al azar en proporción  $1 - p$  con respecto al número total de enlaces al mismo tiempo que se relaja la red, para una probabilidad  $p_{\text{cen}} > p_c$  ( $p_c$  es la probabilidad crítica para la red triangular y el problema de la conexión  $p_c = 0.34729$ ), la red pierde todas sus propiedades elásticas, anulándose todos sus módulos. Esto es debido a la libertad rotacional de los enlaces alrededor de los nodos en el modelo de fuerzas centrales. Si en el modelo se introdujera una interacción angular 2.1 o 2.2 el punto en que el material deja de tener módulos elásticos sería justamente  $p_c$ . En particular, para las redes cuadrada y hexagonal con el modelo de fuerzas centrales  $p_{\text{cen}} = 1$ , ya que pueden plegarse sin costo de energía.

Otro problema análogo consiste, en vez de quitar los enlaces (hacer la constante de recuperación de los muelles nula), en hacer la unión entre nodos rígida (constante de recuperación infinita). Este caso, por ser el análogo a la superconductividad en la percolación escalar se denomina superelástico. Ahora los módulos elásticos divergen cuando se aproxima  $p_{\text{cen}}$  por abajo ( $p \lesssim p_{\text{cen}}$ ).

### 2.3.1 Universalidad.

El interés por la percolación elástica<sup>3</sup> se originó en un trabajo de Feng y Sen [FS84] en el cual mantenían que, contrariamente a la hipótesis aventurada anteriormente por de Gennes,

<sup>3</sup>Una revisión del tema en castellano se puede encontrar en [Mol88].

la percolación elástica pertenecía a una universalidad distinta a la percolación normal o escalar. Esto quiere decir que el exponente con el que los módulos elásticos van a cero cerca de la transición es distinto (en este caso además es mayor) que el que se encuentra en el problema de la conductividad discutido en el capítulo 1. En este mismo artículo también se establecían diferencias de universalidad entre percolación en el modelo de fuerzas centrales y en el modelo de Born (fuerzas centrales y angulares):

$$\begin{aligned} C_{nm}(p) &\sim (p - p_c)^F && \text{(Modelo Born),} \\ C_{nm}(p) &\sim (p - p_{cen})^f && \text{(Fzas centrales),} \end{aligned} \quad (2.11)$$

con  $f=2.4$  y  $F=1.2$ . Casi simultáneamente aparecieron dos trabajos relacionados. En el primero Kantor y Webman [KW84] con un modelo similar al de Keating sugirieron una cota mínima al valor de  $F$ :  $F = d\nu + 1$ , donde  $d$  es la dimensión del sistema y  $\nu$  el exponente crítico de la longitud de correlación  $\xi$ . Por otro lado Bergman y Kantor [BK84] obtuvieron resultados analíticos exactos con fuerzas centrales en la alfombra de Sierpinski (Sierpinski gasket), que, dentro de la aproximación, indicaban que  $f = d - 1$  y  $\kappa/\mu = 4/d$  en la transición. Posteriormente fueron apareciendo más trabajos teóricos aplicando matriz de transferencia [Ber85], para el problema superelástico [Ber86,SG85,BL88], o un modelo de discos [Fen85].

Experimentalmente también se han obtenido resultados, en todos ellos el umbral de percolación coincidía con el escalar, por lo que el exponente que dan ha de tomarse como el relacionado con modelos que incluyen fuerzas angulares. Para hojas finas de cobre y aluminio [Ben84]  $F=3.5$ , para polvo de plata compactado [DHZ85]  $F=3.8$ , y para polímeros metálicos [SLM87]  $F \sim 5$ .

Resumiendo, hasta el momento, los mejores resultados apuntaban a  $p_{cen}=0.65$ ,  $f \sim 1$  y  $F \sim 3$ , con lo que parecía claro que a pesar de su similitud la universalidad de los dos problemas era distinta. Este hecho se comenzó a cuestionar con el trabajo de Roux y Hansen [RH88], en el cual, mediante matriz de transferencia, determinaban que  $p_{cen}=0.642$  y en ese punto, usando escalamiento finito, obtenían  $f \sim 3$ , coincidiendo pues la universalidad de los dos problemas. Por otro lado Arbabi y Sahimi mostraban resultados [AS88] en los cuales los exponentes críticos dependían de cómo se produjera la percolación, ya fuera de enlaces como en los demás trabajos comentados, de nodos, o de enlaces correlacionados. Este efecto, que no ocurre en la percolación escalar, hace pensar en una nueva fuente de no-universalidad. Seguidamente se sucedieron varios trabajos: de Hansen y Roux en los cuales calculaban la distribución fractal [HR89] y multifractal [HR88] en  $p_{cen}=0.642$  del esqueleto de enlaces que mantiene la estructura en el modelo de fuerzas centrales, coincidiendo la primera con los datos referentes a los modelos de fuerzas angulares; y de Sahimi y Arbabi en el cual calculan la distribución multifractal para ambos modelos, coincidiendo sólo el momento 0 (fractal) y el segundo [SA89].

## 2.4 Aproximaciones simples.

Discutiré ahora algunas aproximaciones simples en las que hemos trabajado para intentar describir el comportamiento de los sistemas elásticos al eliminar sus elementos de forma aleatoria. Estas aproximaciones analíticas tienen la desventaja de ser de tipo campo medio, con lo cual no reproducen correctamente el comportamiento cerca de la transición, aunque

para zonas alejadas de la misma se ajustan bastante bien a los resultados obtenidos mediante simulación.

#### 2.4.1 Grados de libertad.

La forma más sencilla de estimar el umbral de percolación consiste en emplear un argumento de ligaduras [FTG85]. Cuando  $p$  es pequeño el sistema está compuesto de muchos modos de frecuencia nula, cuya fracción está dada por el número de grados de libertad ( $Nd$ ) menos el número de ligaduras ( $\frac{1}{2}zNp$ ):

$$f = \frac{Nd - \frac{1}{2}zNp}{Nd} = 1 - \frac{zp}{2d} \quad (2.12)$$

De esta forma  $f$  se anula para  $p_{cen} = 2d/z$  ( $z$  es la coordinación de la red).

En particular para la red kagomé que tiene coordinación 4  $p_{cen} = 1$ . Esto también se puede ver si consideramos la red como la triangular a la que se han quitado la tercera parte de sus enlaces, pero para la red triangular  $p_{cen} = 2/3$ , con lo que también resulta que la red kagomé es inestable bajo deformación de cizalla, aunque esto sea más difícil de ver de forma gráfica que para las redes hexagonal y cuadrada.

#### 2.4.2 Aproximación de agujeros perfectos.

Otra aproximación de tipo campo medio consiste en considerar el sistema como compuesto de agujeros en un medio elástico que no interactúan entre sí, de donde la energía será la acumulada en el medio elástico que queda después de relajarse al equilibrio. Esto se puede calcular analíticamente considerando anillos perfectos cuyos resultados para  $F_{total}$  se dan en la tabla 1.1. Si se toma  $R_1^2/R_2^2 = 1 - p$ , se obtiene que para el módulo de compresibilidad (ecuación 2.7):

$$\kappa = \frac{\kappa^0 p}{1 + \left(\frac{\lambda^0}{\mu^0} + 1\right)(1 - p)}, \quad (2.13)$$

resultado que es independiente de que las condiciones de contorno sean de fuerzas o desplazamientos constantes. Para obtener el comportamiento del módulo de cizalla, en las simulaciones se observa que para el módulo de Young<sup>4</sup>:

$$E^0 = \frac{2pE^0}{5 - 3p}, \quad (2.14)$$

que es independiente de  $\lambda^0/\mu^0$ . Como sólo hay dos parámetros elásticos diferentes, entonces

$$\mu = \frac{2p\mu^0 \left(\frac{\lambda^0}{\mu^0} + 1\right)}{6 - 4p + \frac{\lambda^0}{\mu^0}(3 - p)}. \quad (2.15)$$

En la figura 2.3 se muestran en líneas continuas los resultados de las ecuaciones anteriores, y con puntos discretos los obtenidos mediante simulación numérica en un hexágono

<sup>4</sup>Este resultado podría haberse obtenido de forma similar al del módulo de compresibilidad del capítulo 1, pero el cálculo, tal y como se comentó allí, es más complicado que el simple ajuste de unos datos.



de  $L = 24$  eliminando bandas hexagonales concéntricas. En ella se ve que el sistema de red triangular con fuerzas centrales y geometría hexagonal se ajusta bastante bien a los resultados elásticos analíticos para sistemas circulares.

Volviendo a la aproximación de agujeros no interactuantes, esto equivale a extrapolar el comportamiento en  $p = 1$ , para todo el rango de  $p$ 's, es decir:

$$\frac{\kappa}{\kappa^0} \sim 1 - (1 - p) \left( 2 + \frac{\lambda^0}{\mu^0} \right), \quad (2.16)$$

que para  $\lambda^0/\mu^0 = 1$  coincide con el resultado de contar el número de grados de libertad,

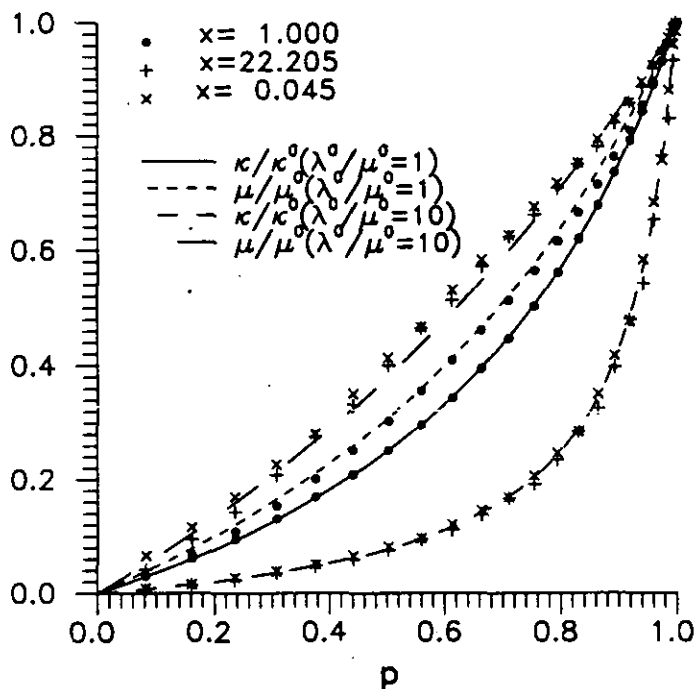


Figura 2.3: Comportamiento de los módulos de compresibilidad y cizalla para agujeros perfectos.

y también con el del Medio Efectivo que se expondrá posteriormente. Sin embargo resulta peligroso extrapolar este resultado para todo  $\lambda^0/\mu^0$  [GGL88a], lo que implicaría que  $p_{cen}$  depende de  $\lambda^0/\mu^0$  ( $p_{cen} = 1 - (2 + (\lambda^0/\mu^0))^{-1}$ ). Un argumento sencillo [Tyv88, RHG88, DT88] prueba que esta dependencia no es cierta. Se tienen tres redes distintas, una compuesta únicamente por muelles de constante de recuperación  $k_\alpha$ , otra por muelles  $k_\beta$  con  $k_\beta > k_\alpha$ , y la última compuesta por una mezcla cualquiera de los dos tipos de muelles. Independientemente de las condiciones de contorno se cumplirá que  $F_\alpha(p) \leq F_{\alpha\beta}(p) \leq F_\beta(p)$ . En concreto, para deformaciones simples que dan las constantes elásticas,  $F_\alpha$  y  $F_\beta$  se anulan en  $p_{cen}$ , con lo que la probabilidad crítica para cualquier mezcla, y en particular para la reconstrucción  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , también es  $p_{cen}$  y por lo tanto es independiente de  $\lambda^0/\mu^0$ .

### Constantes microscópicas y módulos macroscópicos.

De la tabla 2.1 se deduce que

$$\frac{\lambda}{\mu} = \frac{4x^2 + x + 4}{9x}, \quad x = \frac{k_a}{k_b}, \quad (2.17)$$

con lo que hay dos formas distintas de representar un mismo medio elástico ya que 2.17 es invariante si se toma  $x$  o  $x^{-1}$ . En la figura 2.3 se comprueba esta equivalencia de representaciones, aunque, como se verá más adelante, para la percolación el comportamiento es distinto si se considera  $x$  o su inverso.

En la ecuación anterior también se observa que los límites de la red cuadrada ( $k_a = 0$ ) y la red hexagonal ( $k_b = 0$ ) producen divergencias en la expresión, indicando que en ambos casos  $\mu = 0$ .

### 2.4.3 Teoría de Medio Efectivo.

En las aproximaciones expuestas más arriba se ha estimado de forma campo medio el valor de  $p_{cen}$ . Ahora se pretende determinar el comportamiento del sistema en la zona  $p > p_{cen}$  mediante un argumento usado anteriormente para otros problemas. La aplicación al problema de la percolación elástica se debe a Feng, Thorpe y Garboczi [FTG85].

El procedimiento consiste en considerar que un muelle de constante de recuperación  $\alpha$  ve el resto de la red como si de una red completa se tratara, todos sus elementos de constante  $\alpha^{ef}$ . Al aplicar una deformación uniforme  $\delta^{ef}u$  aparece un desplazamiento extra  $\delta u$  entre los puntos 1 y 2 debido al muelle extraño  $\alpha$ . Para anular esta deformación es preciso introducir dos fuerzas de módulo  $f$  aplicadas en ambos extremos 1 y 2 de  $\alpha$  de forma que

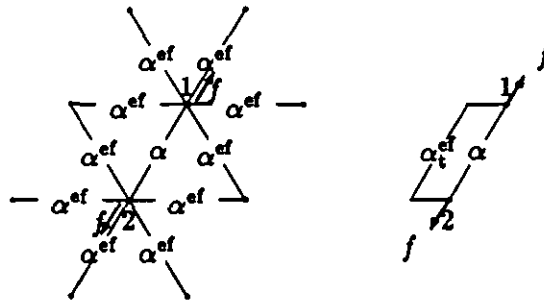


Figura 2.4: Sustitución de la red que rodea un enlace por el medio efectivo.

$f = \delta^{ef}u(\alpha^{ef} - \alpha)$ . Al quitar la deformación externa  $\delta^{ef}u$  el desplazamiento extra  $\delta u$  vuelve a aparecer puesto que no hemos quitado  $f$ . Para calcularlo se introduce en paralelo con  $\alpha$  una constante de fuerza  $\alpha_t^{ef} = \alpha^{ef}/a^* - \alpha^{ef}$  que da cuenta de todas las conexiones entre 1 y 2 exceptuando  $\alpha$ , y donde  $0 < a^* < 1$  es una constante que se calculará más tarde. De esta forma se obtiene que  $f = \delta u(\alpha_t^{ef} + \alpha)$  y por tanto

$$\delta u = \delta^{ef}u \left( \frac{a^*(\alpha^{ef} - \alpha)}{\alpha^{ef} - a^*(\alpha^{ef} - \alpha)} \right). \quad (2.18)$$

La aproximación de campo medio consiste en considerar que la esperanza matemática (valor medio de  $\delta u$ )  $\langle \delta u \rangle$  es 0, y que por tanto en promedio la red no siente los cambios en  $\alpha$ :

$$\int P(\alpha') \left( \frac{a^*(\alpha^{ef} - \alpha')}{\alpha^{ef} - a^*(\alpha^{ef} - \alpha')} \right) d\alpha' = 0. \quad (2.19)$$

Para nuestro caso en que  $\alpha'$  toma valores  $\alpha$  con probabilidad  $p$  y 0 con probabilidad  $1 - p$   $P(\alpha') = p\delta(\alpha - \alpha') + (1 - p)\delta(\alpha')$ , dando como resultado final

$$\frac{\alpha^{ef}}{\alpha} = \frac{p - a^*}{1 - a^*}, \quad (2.20)$$

que se anula cuando  $p_{cen} = a^*$ .

La constante  $a^*$  es la que da cuenta de todas las conexiones entre 1 y 2 cuando la red tiene todas sus constantes de fuerza  $\alpha^{ef}$ , de forma que  $f a^* = \alpha^{ef}(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1)\hat{\mathbf{r}}_{12}$ , donde  $\hat{\mathbf{r}}_{12}$  es el vector unitario que une los puntos 1 y 2. En espacio Fourier  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}} = -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{k})\mathbf{F}_{\mathbf{k}}$ , siendo  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  la matriz dinámica para la red de Bravais del problema. Como en espacio real el par de fuerzas se puede expresar como  $\mathbf{F}_j = f\hat{\mathbf{r}}_{12}(\delta_{j1} - \delta_{j2})$  se encuentra que

$$\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1 = \frac{2f}{N} \sum_{\mathbf{k}} (1 - \cos(\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}_{12})) \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{r}}_{12}. \quad (2.21)$$

Introduciendo aquí el valor de  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  se llega a que [FTG85]  $a^* = 2d/z = p_{cen}$ , que es el mismo resultado obtenido por los otros métodos.

La teoría de Medio Efectivo que se ha expuesto aquí ha demostrado dar resultados muy próximos a los obtenidos en simulaciones numéricas, no sólo para redes simples sino también en sistemas con interacciones a segundos vecinos [GT85], para el problema superelástico [GT86], en redes cuya composición es aleatoria [Gar88], o para tratar el problema de la percolación de nodos [TG87].

### Caso isótropo.

Vamos ahora a aplicar las ideas anteriores para estudiar la percolación en la reconstrucción  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  que permite describir medios elásticos isótropos tales que [PGGL90]  $1 \leq \lambda/\mu \leq \infty$ . El mismo razonamiento de Medio Efectivo se puede aplicar ahora para cada constante de fuerza separadamente, obteniendo que

$$\frac{k_a^{ef}}{k_a} = \frac{p^a - a^*}{1 - a^*} \quad (2.22)$$

y

$$\frac{k_b^{ef}}{k_b} = \frac{p^b - b^*}{1 - b^*}. \quad (2.23)$$

Para estimar el comportamiento se pueden calcular los modos de frecuencia nula del sistema, considerando ahora que el número de ligaduras es  $\frac{N}{3}(6p^b + 3p^a)$ . De esta forma se obtiene que  $2p_{cen}^b + p_{cen}^a = 2$ . Como las relaciones de Medio Efectivo han de anularse para  $p_{cen}^a = a^*$  y  $p_{cen}^b = b^*$  parece razonable que entre  $a^*$  y  $b^*$  haya una relación equivalente  $2b^* + a^* = 2$ . Esta relación se puede comprobar que se cumple calculando  $a^*$  y  $b^*$  de la forma que se expone más abajo.

La forma más simple de considerar el material diluido consiste en quitar enlaces sin mirar de qué tipo de enlace se trata, es decir  $p^a = p^b = p$ , de forma que el cálculo de las constantes de fuerza efectiva en función de  $p$  se hace autoconsistentemente de las ecuaciones 2.22 y 2.23.

$$\frac{k_a^{ef}}{k_b^{ef}} = \frac{k_a}{k_b} \frac{a^*(p - a^*)}{(1 - a^*)(2p - 2 + a^*)}, \quad (2.24)$$

donde también  $a^*$  depende de  $k_a^{ef}/k_b^{ef}$ . Los módulos elásticos  $C_{nm}/C_{nm}^0$  se obtienen ahora sustituyendo el valor de las constantes efectivas en la tabla 2.1.

Para calcular  $a^*$  hay que tener en cuenta que la celda unidad tiene tres nodos y que por tanto la matriz dinámica 2.4 tiene dimensión seis mientras el espacio en que se tienen los muelles es de dimensión dos. La fuerza aplicada en los puntos 1 y 2 de la malla tiene la forma en espacio Fourier:

$$\mathbf{F}_k = f(v_1 \hat{\mathbf{r}}_{12} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} - v_2 \hat{\mathbf{r}}_{12} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_2}), \quad (2.25)$$

donde  $\hat{\mathbf{r}}_{12}$  es el vector usual de dimensión dos que une los puntos 1 y 2, y se usa la matriz  $v_i$  de dimensión  $6 \times 2$  para convertirlo en dimensión seis y colocarlo según qué tipo de nodo (ver figura 2.2) sea el nodo  $i$ <sup>5</sup>.  $\mathbf{R}_i$  representa la posición de la celda a la que pertenece el nodo  $i$ .

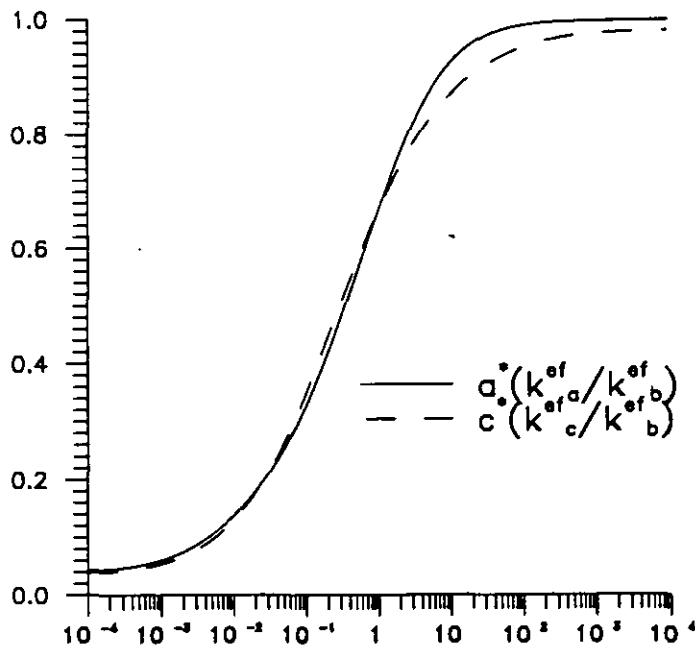


Figura 2.5:  $a^*$  y  $c^*$  en función de las constantes de fuerza efectivas.

<sup>5</sup>La matriz 2.4 está construida con sus filas y columnas siguiendo el orden en que se expresan los nodos en la figura 2.2.

Al aplicar dicha fuerza obtendremos los desplazamientos que se producen en los tres puntos de la celda unidad, pero sólo nos interesan estos desplazamientos de forma independiente por lo que hay que proyectar al subespacio correspondiente al tipo de nodo que sea el nodo  $i$  ( $p_i$ )

$$u_i = p_i \frac{3\sqrt{3}}{8\pi^2} \int_{\text{ZB}} \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{k}) f(v_2 \hat{\mathbf{r}}_{12} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_2} - v_1 \hat{\mathbf{r}}_{12} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} d\mathbf{k}. \quad (2.26)$$

Con todo esto se puede obtener la constante  $a^*$  aplicando un nuevo truco de proyección:

$$a^* = \frac{k_a^{\text{ef}}}{k_b^{\text{ef}}} \frac{3\sqrt{3}}{8\pi^2} (v_1 \hat{\mathbf{r}}_{12} + v_2 \hat{\mathbf{r}}_{12}) \int_{\text{ZB}} \left( p_2 \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{k}) (v_2 \hat{\mathbf{r}}_{12} - v_1 \hat{\mathbf{r}}_{12} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)}) - p_1 \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{k}) (v_2 \hat{\mathbf{r}}_{12} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)} - v_1 \hat{\mathbf{r}}_{12}) \right) d\mathbf{k}. \quad (2.27)$$

Debido a la forma de la matriz dinámica ésta no es fácil de invertir por lo que todo el proceso se realiza numéricamente mediante un método de integración de dar pesos en recintos triangulares [AS54].

La forma de  $a^*$  se puede ver en la figura 2.5 donde se observa que el comportamiento es diferente cuando la red tiende a la hexagonal y  $a^*$  tiende a 1 que cuando es hacia la cuadrada y  $a^*$  a 0.

En la figura 2.6 se muestran los resultados de medio efectivo para los distintos módulos junto con simulaciones numéricas con  $L=24$  que ajustan bastante bien a la teoría. Son notables las diferencias de comportamiento dependiendo de la descripción microscópica elegida para obtener las constantes macroscópicas. Estas diferencias existen desde  $p$  próximo a 1, justo donde la teoría de Medio Efectivo está mejor fundamentada. En esta zona

$$\frac{\kappa}{\kappa^0} = 1 - (1-p) \frac{\left(\frac{k_a}{k_b} - 4\right) a^* + 4}{(1-a^*) a^* \left(\frac{k_a}{k_b} + 2\right)}. \quad (2.28)$$

Ahora ya  $k_a/k_b$  y  $k_b/k_a$  no tienen el mismo comportamiento tal y como ocurría en el ecuación 2.13 al estudiar el caso de agujeros perfectos. Sin embargo, y según la teoría de Medio Efectivo, estas diferencias desaparecen cerca de la transición. En esta zona  $a^* \rightarrow 2/3$  y  $k_a^{\text{ef}}/k_b^{\text{ef}} \rightarrow 1$ , con lo que se comportan como  $k_a^{\text{ef}}/k_b^{\text{ef}} \sim 1 + \delta$  y  $3a^* \sim 2 + \delta$  con  $\delta \rightarrow 0$ , obteniéndose que

$$\kappa \sim 6\mu^0(p - p_{\text{cen}}), \quad (2.29)$$

$$\mu \sim 3\mu^0(p - p_{\text{cen}}), \quad (2.30)$$

$$\frac{\kappa}{\mu} = 2. \quad (2.31)$$

Los resultados anteriores son típicos de campo medio dando exponente crítico 1, el cual no tiene porqué ser el real que define la universalidad. Sin embargo, y a pesar de ser campo medio, el valor al que tiende el cociente de los módulos elásticos parece bastante exacto y coincide con el que predicen otros modelos [BK84].

En los resultados recientemente expuestos resulta en cierta medida sorprendente que dos representaciones de los mismos módulos elásticos puedan tener comportamientos tan distintos al eliminar elementos de su estructura, sobre todo teniendo en cuenta que al

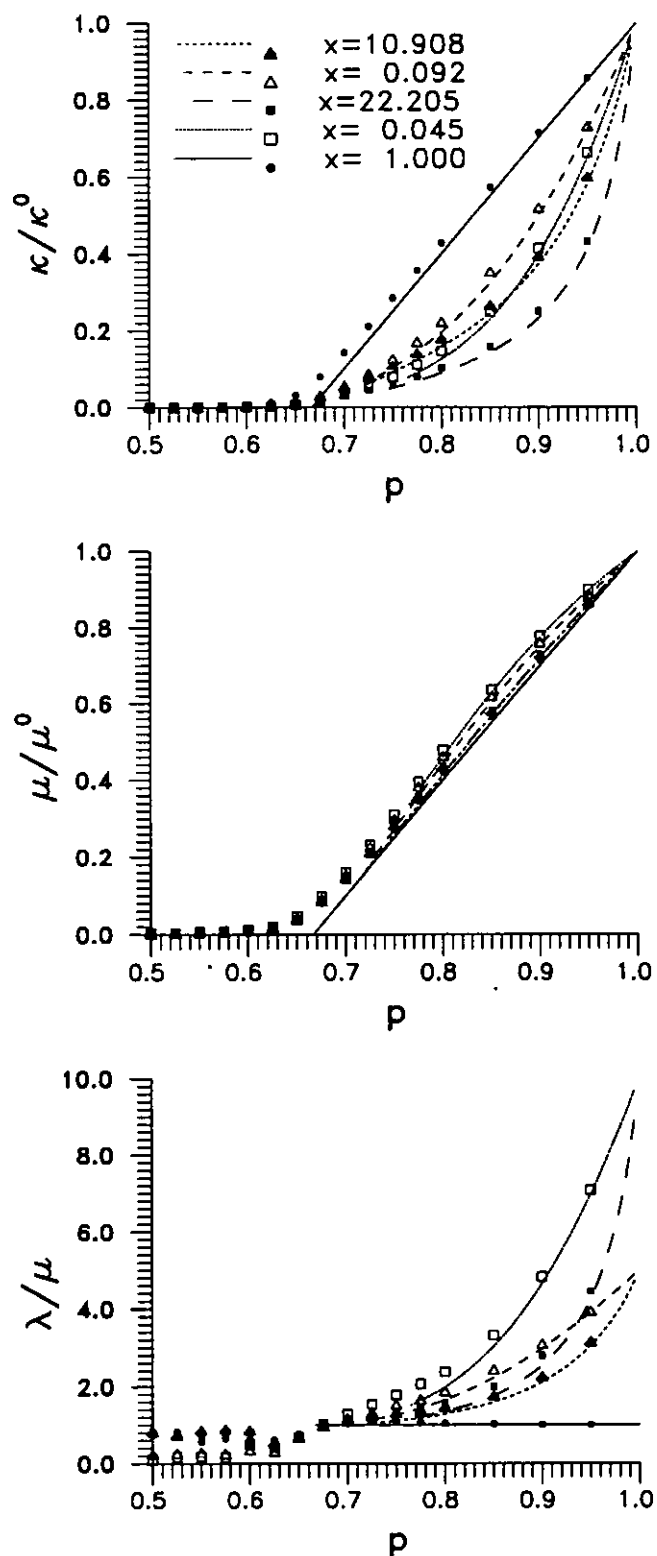


Figura 2.6: Evolución de los distintos módulos como función de  $p$  para el caso isótropo ( $x = k_a/k_b$ ).

analizar el problema de agujeros perfectos no se observaban estas diferencias. La cuestión es pues si es posible eliminar material de alguna manera que mantenga a lo largo del proceso el mismo comportamiento para las dos descripciones microscópicas. Esto puede abordarse de dos maneras, ambas con respuesta negativa a la cuestión. Se pueden hacer distintas la probabilidad de romper enlaces  $k_a$  ( $p^a$ ) de la de romper  $k_b$  ( $p^b$ ) mediante  $p^a = \alpha p^b$ , donde  $\alpha$  puede ser función de  $k_a/k_b$ . Ahora la ecuación autoconsistente es ligeramente distinta pero los valores de  $a^*$  y  $b^*$  no cambian. Como anteriormente se discutió  $a^*$  tiene una cierta asimetría dependiendo de los valores de  $k_a^{ef}/k_b^{ef}$  que provoca que la diferencia de comportamientos se mantenga para cualquier forma que se quiera dar a  $\alpha$ . La otra posibilidad consiste en correlacionar la eliminación de muelles de forma que por ejemplo cada vez que se elimina uno de tipo  $k_a$  se retiren también dos de tipo  $k_b$ . Esto acerca los comportamientos, pero no los hace iguales. Sólo son iguales en el límite de correlación muy grande equivalente al modelo de agujeros perfectos, pero en este caso  $p_{cen}=0$ .

#### Caso anisótropo.

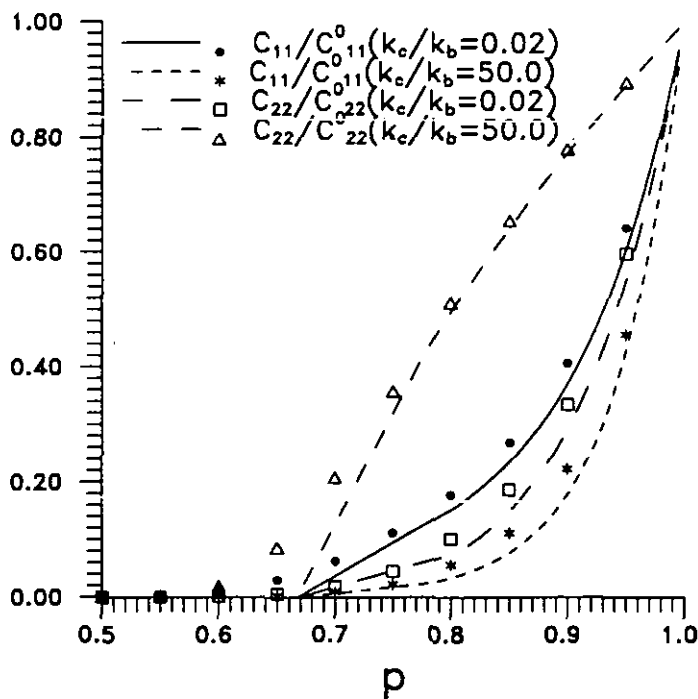


Figura 2.7: Evolución de los distintos módulos como función de  $p$  para el caso anisótropo.

Para el caso anisótropo se puede aplicar el mismo procedimiento que para el caso isótropo sin más que cambiar  $a$  por  $c$  en todos los razonamientos. La diferencia estriba en que la matriz 2.5 es mucho más simple y resulta sencillo invertirla, pudiendo fácilmente llegar a

una expresión de  $c^*$  (ver gráfica 2.5) de la forma:

$$c^* = \frac{\sqrt{3} k_z^{ef}}{4\pi^2 k_b^{ef}} \int_{\text{ZB}} \frac{1}{2 \frac{k_z^{ef}}{k_b^{ef}} + f(k_x, k_y)} dk, \quad (2.32)$$

donde

$$f(k_x, k_y) = \frac{(\cos \frac{k_x}{2} - \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_y)^2}{1 + \cos k_x \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_y - \cos k_x - \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_y}. \quad (2.33)$$

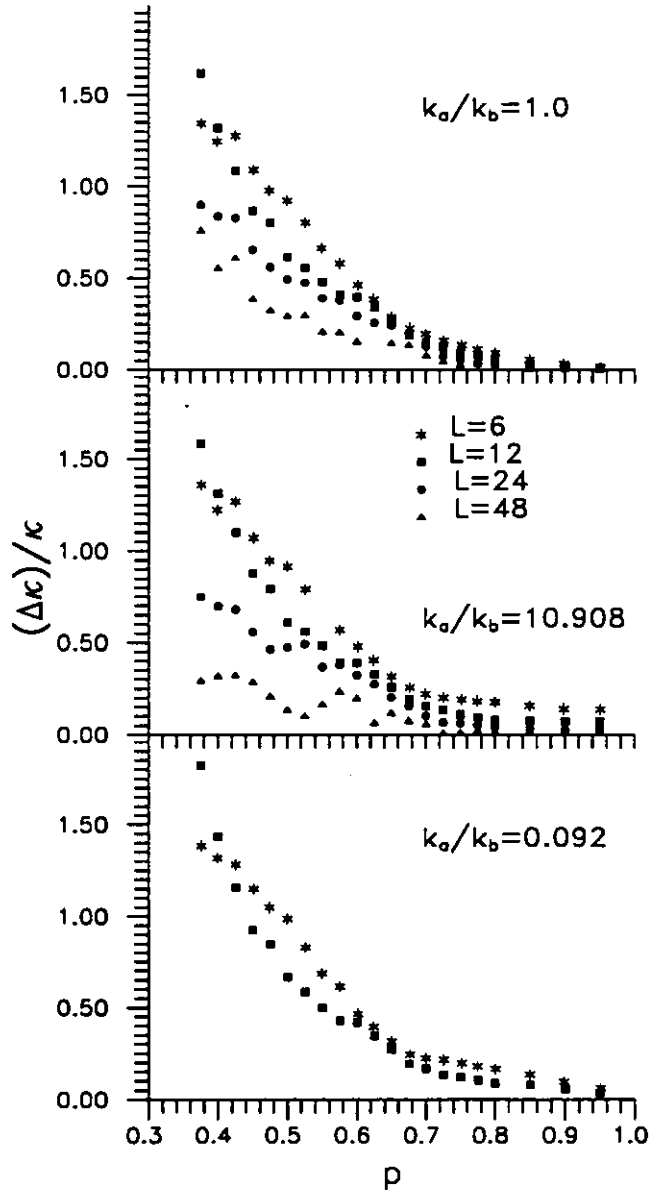


Figura 2.8: Desviaciones típicas en el módulo de compresibilidad.

Los resultados se muestran en la gráfica 2.7 donde el tamaño de las simulaciones es  $L=40$ . Aunque los valores de éstas no son muy fiables debido a que aquí sólo se considera



una muestra y además se utiliza el MR, se puede observar que la teoría de Medio Efectivo sigue funcionando bastante bien. En la misma gráfica se representan solamente dos módulos ya que el módulo de cizalla al poseer el sistema sólo dos tipos de muelles distintos es proporcional al de compresión según el eje vertical  $C_{22}$  (ver tabla 2.1).

## 2.5 Renormalización Fenomenológica.

Anteriormente, en la sección 2.2.2, se discutieron procedimientos para calcular de forma bastante exacta exponentes y probabilidades críticos. En concreto el método de la renormalización fenomenológica se ha aplicado ya a la percolación superelástica [SG85]. ¿Por qué entonces no aplicarlo nosotros para muestras hexagonales?, y poder comparar así con otros resultados en que utilizan bandas y método de matriz de transferencia. El error estadístico al aplicar el método (expresión 2.10) es

$$\frac{\frac{\Delta C_{nm}(L',p)}{C_{nm}(L',p)} + \frac{\Delta C_{nm}(L,p)}{C_{nm}(L,p)}}{\ln \frac{L'}{L}}, \quad (2.34)$$

que influencia directamente el error en el exponente crítico e indirectamente en  $p_{cen}$ . En la figura 2.8 se tratan estos errores para el módulo de compresibilidad  $\kappa$ , siendo similar el comportamiento para otras constantes elásticas<sup>6</sup>. En ésta se puede ver que el error disminuye conforme aumenta  $L$ , pero de todas formas este es del orden de  $1/2 \ln(L'/L)$ , que no es suficiente para dar un valor fiable del exponente, ni tampoco para determinar  $p_{cen}$ , donde es necesario un error menor de 0.008 (0.65-0.642), que son los valores que se barajan en la literatura. Esta es una de las razones por las cuales se llegó al resultado erróneo de que  $p_{cen}$  dependía de  $\lambda^0/\mu^0$  [GGL88a], conjuntamente con que también contribuyen efectos de superficiales de las muestras [GGL88b].

Para poder aplicar el método con fiabilidad son necesarios tamaños más grandes con el incremento de tiempo de ordenador que ello conlleva. De momento el problema es inabordable de esta forma hasta que haya computadores varias veces más rápidos que los que hoy en día poseemos.

## 2.6 Esqueleto que mantiene la estructura.

Otra forma de llevar a cabo el análisis del problema de la percolación elástica consiste en ver para cada valor de  $p$  cuántos muelles hay con una tensión determinada (*backbone*). En concreto tiene interés el ver cerca de la percolación cómo pasa el sistema de soportar tensiones a que no haya respuesta a acciones externas [DTT86]. Las figuras 2.9 y 2.10 muestran este proceso. En la primera de ellas se estudia el caso más sencillo en el que sólo hay un tipo de muelles en la red ( $\kappa_a = \kappa_b$ ). Conforme  $p$  disminuye aumenta el número de muelles que soportan una tensión menor que  $10^{-10}$  (marcado en la figura con  $\Delta$ ), que a efectos prácticos se puede considerar nula, a la vez que se diversifican los valores de las

<sup>6</sup>El que  $\Delta\kappa/\kappa$  se haga grande para  $p$  pequeño no implica que haya errores numéricos, simplemente lo que ocurre es que, debido a la geometría de la deformación, localmente hay zonas con módulos muy pequeños mientras que globalmente los módulos se anulan. Esto no ocurre para deformaciones uniaxiales en que al llegar la percolación la estructura se desconecta totalmente

tensiones de los que aguantan la estructura. En la segunda figura aparecen ya dos tipos distintos de muelles en la reconstrucción  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ . El comportamiento de cada uno de

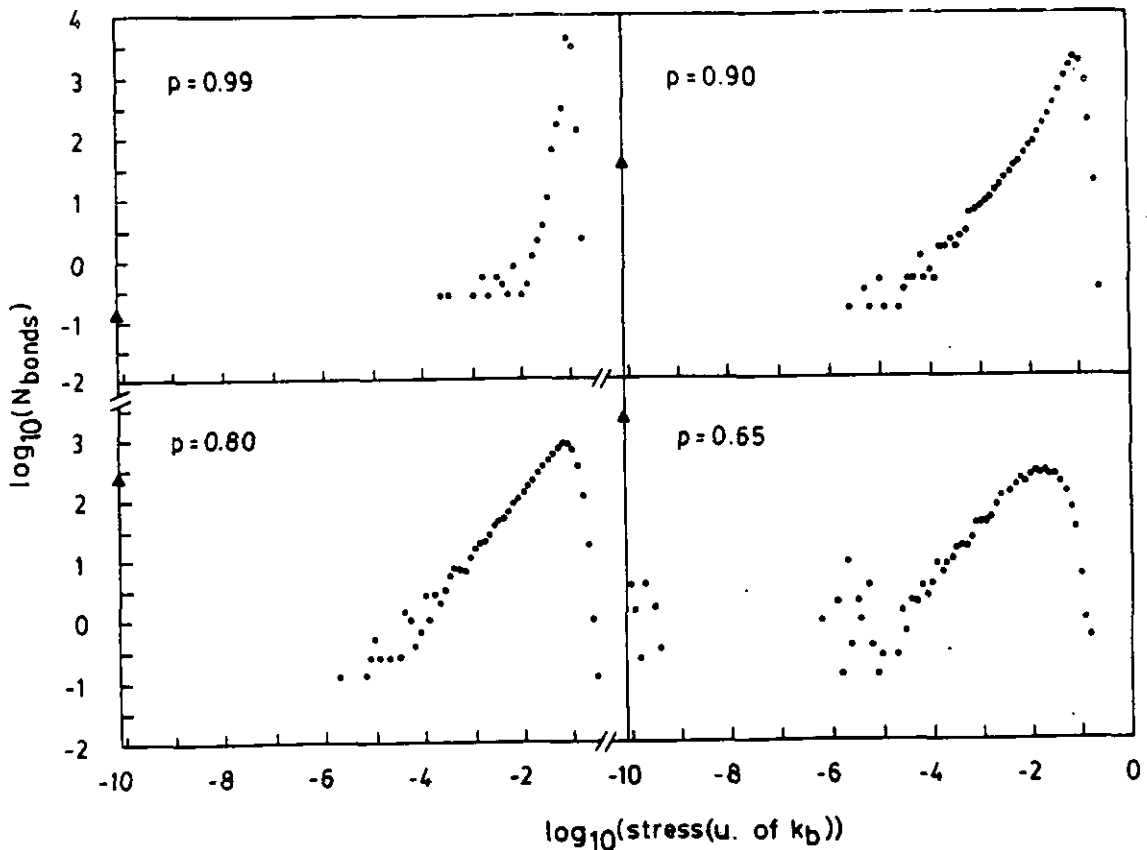


Figura 2.9: Distribución de tensiones para  $\lambda_0 = \mu_0$ .

ellos separadamente es muy similar a cuando hay un sólo tipo de muelles, sin embargo ahora hay dos picos para  $p$  próximo a 1, indicando que para deformaciones homogéneas cada tipo de enlace acumula distinta tensión, lo cual da lugar a los distintos comportamientos dependientes de  $k_a/k_b$  estudiados más arriba. Al acercarse el umbral de percolación las tensiones se distribuyen más homogéneamente y los dos picos se van juntando con lo que la estructura se hace independiente del valor de  $k_a/k_b$  de partida como cabría esperar.

## 2.7 Medios inhomogéneos.

Una forma de realizar la percolación elástica de forma no homogénea y similar a lo que ocurre en problemas de corrosión y en cierto tipo de materiales aglomerados, consiste en asignar una probabilidad de rotura distinta a los muelles dependiendo de la distancia a la que se encuentren del centro del sistema (foco de la corrosión). Esta probabilidad será menor para muelles alejados del centro que para aquellos próximos al mismo, con lo que el

problema es similar al de agujeros perfectos en el que  $p_{cen}=0$ . Durante el proceso de rotura habrá zonas que localmente se encuentren cerca de la percolación y por tanto a su alrededor

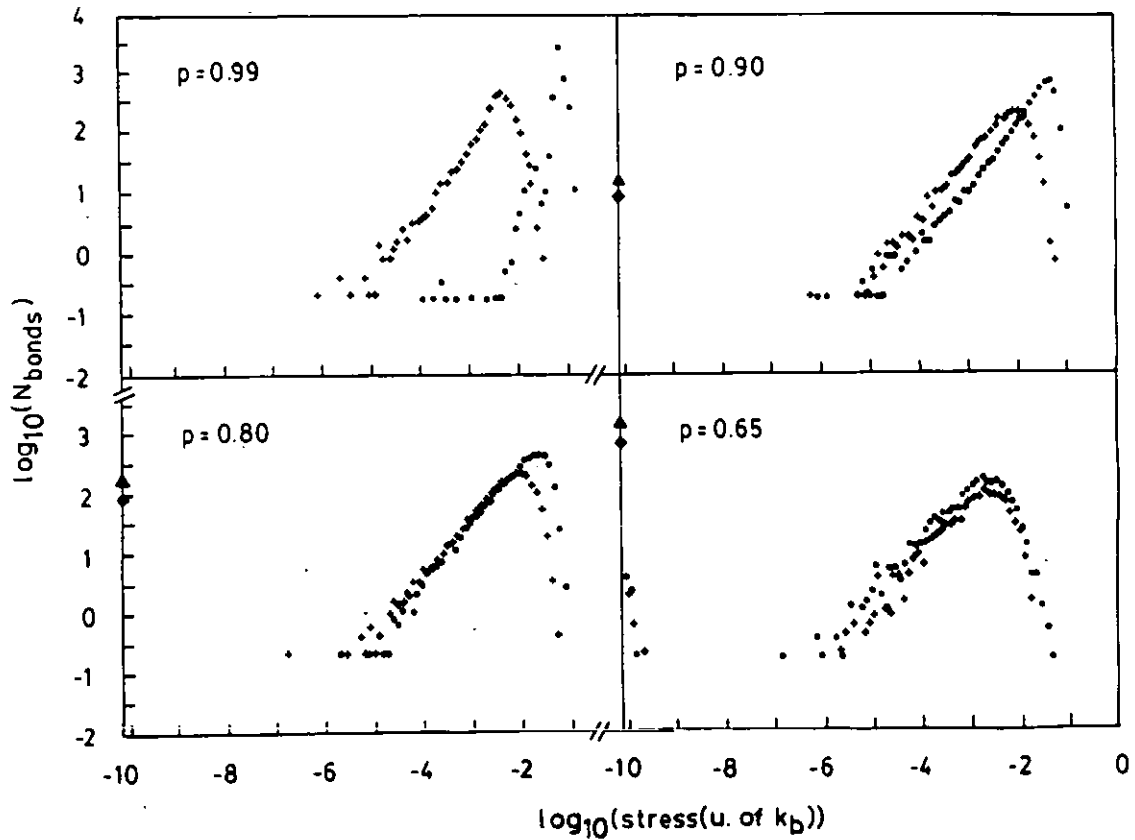


Figura 2.10: Distribución de tensiones para  $k_a/k_b = 0.05$  ( $\bullet k_b, +k_a$ ).

comenzarán a aparecer correlaciones que, debido a la geometría circular del problema y a la condición de contorno libre en el centro de la muestra, no llegan a tener alcance infinito sino que se restringen a la zona en que se produce la transición. Las constantes elásticas ahora varían localmente con lo cual el comportamiento, aunque es parecido al de agujeros perfectos, tiene ciertas particularidades que pueden ser útiles para estudiar problemas de corrosión.

## Capítulo 3

# Fractura Mecánica.

Desde principios de siglo la fractura de materiales ha sido objeto de extensivos estudios debido a la gran importancia tecnológica de este proceso. Sobre este tema se publican continuamente libros y artículos en revistas especializadas (p.e. *Engineering Fracture Mechanics*) y de carácter más general. La fenomenología de los procesos que provocan la fractura, tal y como se comentó en la introducción, es muy amplia; por ello los puntos de vista desde los que se aborda el proceso y los métodos usados para hacerlo son muy variados. Entre estos procesos destacan por su importancia en aplicaciones prácticas a nivel industrial y de diseño y fabricación de materiales, la fragilización por hidrógeno (hydrogen embrittlement) y la corrosión por esfuerzos (stress corrosion). Por lo que respecta a los métodos teóricos estos van desde la resolución analítica de las ecuaciones de equilibrio elásticas, hasta teorías fenomenológicas, pasando por métodos de simulación y de elementos finitos. En [LP83] se analizan detalladamente estos temas, discutiendo además su importancia tecnológica.

En este capítulo estudiaremos la fractura de supuestos materiales bajo el punto de vista de la Mecánica Estadística. Los modelos que se van a revisar pretenden dar una versión bastante simplificada de cómo se produce la fractura en un material bidimensional. Su aplicación por tanto (aunque se puede hacer una extensión de los modelos a tres dimensiones) está limitada a láminas delgadas y películas de materiales de pequeño grosor. Desafortunadamente, hasta el momento, no existe ningún resultado experimental que haya sido hecho bajo las condiciones un tanto peculiares que se utilizan en las simulaciones. La comparación con la realidad se basa pues en decir que las fracturas que se obtienen en ambos casos tienen el mismo aspecto. Por otro lado, el estudio de la fractura con modelos sencillos no ha hecho más que comenzar, y lo que se pretende es comprender y depurar los modelos para que se aproximen lo más posible a la realidad. Ya en la introducción se comentó la complejidad del problema que se pretende abordar y en el que el número de variables que influyen es bastante grande (*temperatura, humedad, defectos, etc.*), por ello simplificarlo no es fácil y puede requerir todavía algunos años el llegar a describir la fractura de la forma adecuada.

Al igual que en los capítulos anteriores la bibliografía no pretende ser exhaustiva, sino simplemente ampliación y aclaración de lo aquí expuesto. Describiré de forma breve algunos de los modelos que han aparecido recientemente para abordar el problema, para pasar seguidamente al estudio del modelo de Fractura Mecánica (*Mechanical Breakdown, DB*), análogo, como se verá más adelante, del modelo de Dielectric Breakdown para sistemas

vectoriales.

### 3.1 Modelos estadísticos en la fractura de materiales.

Debido a que el empeño inicial es tratar de simplificar lo más posible el problema, los primeros intentos para atacarlo fueron (todavía se continúa trabajando en esta línea) simplificando el medio elástico (vectorial) por un medio eléctrico (escalar); en concreto con un modelo de fusibles aleatorios. En la figura 3.1 se muestran las características de un fusible y

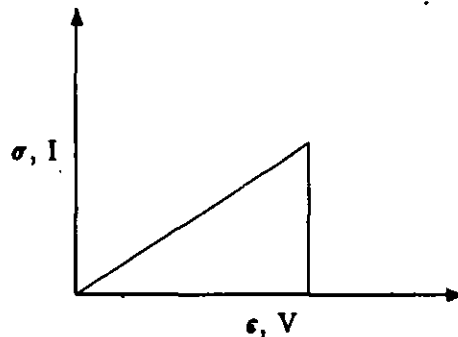


Figura 3.1: Curva característica de muelles y fusibles.

de un muelle, las cuales resultan ser idénticas. La deformación (voltaje) es lineal con fuerza acumulada (intensidad) hasta que se produce la rotura. A partir de este punto el desplazar los extremos del elemento no produce ninguna fuerza (el elemento se rompe)<sup>1</sup>. En principio los modelos estaban basados en la percolación discutida en el capítulo anterior. El punto de partida es una red de fusibles en la cual falta una fracción  $1 - p$  de los mismos [dARH85]. Una vez relajado el sistema, se fija un umbral en el voltaje, eliminando todos los fusibles que soporten un voltaje superior al umbral y volviendo a relajar el sistema, repitiendo el proceso hasta que la red queda desconectada. Este mismo procedimiento se puede aplicar para muelles (fuerzas centrales) en la red triangular [SG86,BS88] o para el modelo de Born (ecuación 2.1) [HS89], en donde ahora la condición de contorno es de tracción uniaxial. La fractura resultante en estos modelos depende de la concentración de material presente  $p$ . Si ésta es alta la fractura se produce de forma frágil (brittle fracture), de forma lineal y muy rápida; mientras que si  $p$  es pequeña los defectos hacen que se formen muchas fracturas pequeñas antes que el sistema se disgregue, resultando una fractura dúctil. Otra posibilidad consiste en, partiendo de la red de fusibles completa, asignar un umbral de fusión aleatorio a cada elemento [KBR\*88], obteniendo resultados parecidos.

Mención a parte merece el modelo de varillas (beam model). En este modelo los elementos que constituyen el material se comportan como muelles en la dirección paralela a

<sup>1</sup>Un efecto similar ocurre en dieléctricos (ver los trabajos de Duxbury citados p.e. en [dAHH89]) y superconductores, en los que inicialmente la intensidad (voltaje) es constante e independiente del voltaje (intensidad), para a partir de un voltaje (intensidad) de ruptura comportarse de manera lineal.

los mismos, y, al doblarse, también ofrecen resistencia como si de una varilla se tratara. De esta forma los elementos se pueden colocar en una red cuadrada sin anular el módulo de cizalla. La fractura puede provenir de estiramiento o bien de flexión, como al romper un lápiz o una rama. Los primeros estudios en este modelo [HHR89a] se basan, al igual que la mayoría de los trabajos citados anteriormente, en calcular la distribución de tensiones a lo largo del proceso y en el momento de la ruptura total del sistema. En tres de los modelos: fusibles, muelles (fuerzas centrales) y varillas estas distribuciones son exponenciales del tamaño de las muestras con exponente común a todos los modelos [dAHHR89]. Posteriormente, y mediante la introducción de efectos de memoria en la fractura [HKdA89], el modelo de varillas permite la obtención de fracturas no lineales y con forma de fractal, que desaparece al introducir plasticidad en el modelo [Her89].

Todos los modelos citados hasta ahora son deterministas, en el sentido de que la forma y aspecto final de la fractura dependen tan solo de las condiciones iniciales. En lo siguiente se verá otro tipo de mecanismos que permiten mayor libertad a la propagación de la fractura. La variedad y complejidad de las fracturas reales permite que modelos dispares puedan coexistir y aplicarse con éxito a problemas parecidos dependiendo de los materiales.

### 3.2 El modelo de Fractura Mecánica.

En el capítulo 1 se estudió brevemente el modelo DLA como análogo al DB [NPW84] y cómo estos modelos reproducían la fenomenología de procesos de agregación. El caso de la fractura puede estudiarse de forma similar. Ahora se trata de un medio elástico vectorial en el cual el campo de desplazamientos se relaja según la ecuación 1.8<sup>2</sup>. Microscópicamente (capítulo 2) una red triangular de muelles reproduce en sistemas grandes estas ecuaciones elásticas del continuo, por tanto usaremos estas redes estudiadas con detalle en el capítulo anterior para sobre ellas introducir el proceso de fractura. Para definir el modelo [LG87], una vez que se tiene el medio, hay que concretar las condiciones de contorno externas, los criterios y leyes para producir la fractura, y la forma de llevar al equilibrio el sistema cada vez que ocurre un suceso de fractura. Este último punto se analizará más adelante junto con los detalles de las simulaciones llevadas a cabo.

El caso más simple de fractura es cuando esta se propaga en un medio libre de defectos. Entonces la velocidad con que lo hace es proporcional a la tensión a la que se encuentran los bordes de la fractura. En la red de muelles esta tensión es la acumulada en los distintos elementos. Para el muelle  $i$ ,  $\sigma_i = k_i |u_\alpha - u_\beta|$ , donde  $\alpha$  y  $\beta$  son los nodos que conecta el muelle  $i$ . La probabilidad de propagarse la fractura (quitar el muelle  $i$ ) es entonces proporcional a la tensión a la que está sometido ese muelle. De forma algo más general a una potencia de dicha tensión:

$$p_i = \frac{\sigma_i^\eta}{\sum_i \sigma_i^\eta}. \quad (3.1)$$

Tomando un número aleatorio, uno de los muelles del conjunto  $i$  se elimina, devolviendo a continuación el sistema al equilibrio y repitiendo de nuevo el proceso de fractura con las tensiones y el conjunto  $i$  correspondientes a la nueva situación.

Falta por definir qué se considera la superficie de la fractura en la red triangular (el conjunto de  $i$ -es). De las muchas elecciones posibles estudiaremos tres, todas ellas basadas en

<sup>2</sup>Las analogías entre electrostática (ecuación de Laplace) y elasticidad se pueden ver en el apéndice D.

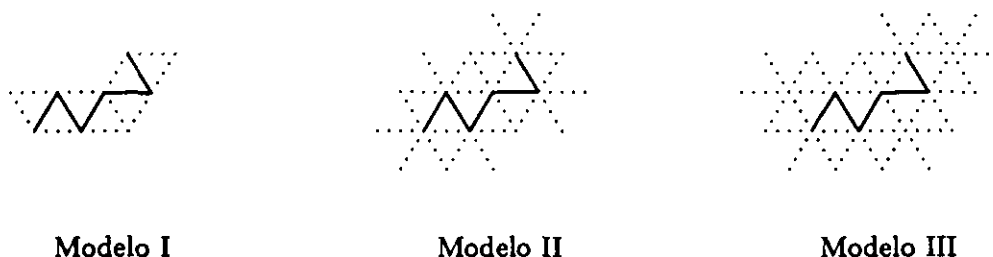


Figura 3.2: Distintas elecciones para la rotura aleatoria de muelles.

criterios de vecindad a muelles que han fallado anteriormente [MLS\*89]. Estas posibilidades se denominarán modelo I (los cuatro muelles más próximos), modelo II (los diez que se relacionan con los nodos que conectaba el roto), y modelo III (dieciocho, los diez anteriores más los que pertenecen a los nodos más próximos al muelle roto).

Como deformaciones externas se considerarán en principio las de la tabla 2.1 para el caso isótropo: dilatación y cizalla uniaxial según el eje  $x$ . El aspecto de los resultados usando los distintos modelos se muestra en la figura 3.3. En ella destaca, para el caso de la cizalla, la aparente falta de aleatoriedad y la forma de  $\times$  que se obtiene independientemente del modelo. Análogo resultado se observa si la cizalla se aplica en el eje  $y$  ( $u_x = 0, u_y = \delta x$ ) o en ambos ejes ( $u_x = \delta y, u_y = \delta x$ ). La forma de cada una de las dos aspas es muy parecida a cómo se produce la fractura bajo deformación externa uniaxial. En este caso la forma es lineal a lo largo del eje ortogonal a donde se aplica la deformación. En [HHR89b] se estudia este problema sobre el modelo I, analizando para caracterizar la distribución de la fractura generada, no sólo el radio de giro  $R_g$ , sino también el comportamiento del tensor de inercia  $I_{ij} = \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle$ , llegando a la conclusión de que la cizalla es equivalente a dos deformaciones uniaxiales superpuestas. Esto se puede ver haciendo una rotación de  $45^\circ$  del sistema de coordenadas<sup>3</sup> para la cizalla uniaxial ( $u'_x = \delta y', u'_y = 0$ ), obteniéndose que

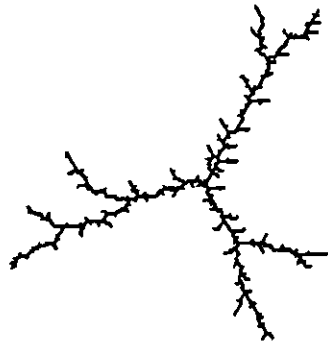
$$u_x = \frac{\delta}{2}x + \frac{\delta}{2}y, \quad (3.2)$$

$$u_y = -\frac{\delta}{2}y - \frac{\delta}{2}x. \quad (3.3)$$

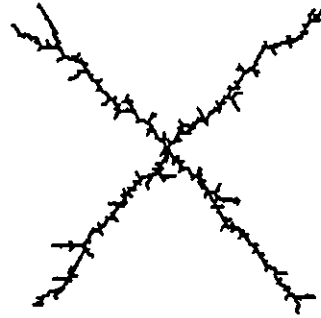
Esta deformación corresponde a una dilatación uniaxial en el eje  $x$ , más una compresión (que se comporta exactamente igual que la dilatación al ser el sistema lineal) en el eje  $y$ , más una rotación del sistema que no genera tensiones.

En este mismo trabajo se estudia un modelo escalar ( $i$  fusibles ?), el cual resulta ser independiente de la coordinación elegida para definir la superficie de la fractura. Esto no

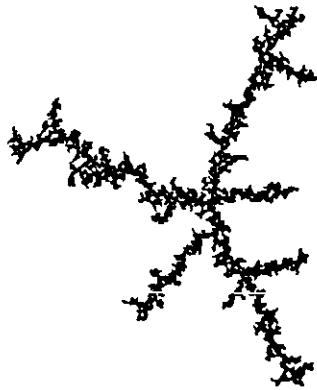
$$\begin{array}{l} \text{s} \\ u_x = u'_x \cos\theta + u'_y \sin\theta \\ u_y = -u'_x \sin\theta + u'_y \cos\theta \end{array} \quad y \quad \begin{array}{l} x' = x \cos\theta - y \sin\theta \\ y' = x \sin\theta + y \cos\theta \end{array}$$



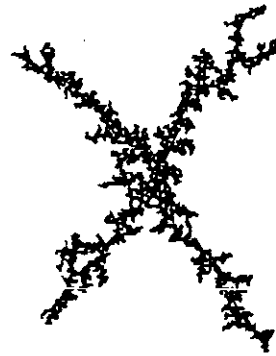
dilatacion mod I  
1520 enl



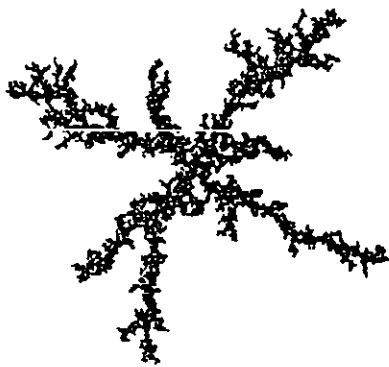
cizalla mod I  
1657 enl



dilatacion mod II  
3005 enl



cizalla mod II  
3088 enl



dilatacion mod III  
3922 enl



cizalla mod III  
3177 enl

Figura 3.3: Resultados para compresión y cizalla usando distintos modelos y  $\eta=1$ .



ocurre con el caso elástico en donde se observa que si la coordinación es mayor las ramas tienden a ser más densas, lo cual incrementa la dimensión fractal<sup>4</sup> que se obtiene.

| $\eta=1$   | modelo |      |      | $\eta=2$   | modelo |      |      |
|------------|--------|------|------|------------|--------|------|------|
|            | I      | II   | III  |            | I      | II   | III  |
| dilatación | 1.35   | 1.51 | 1.66 | dilatación | 1.12   | 1.16 | 1.45 |
| cizalla    | 1.42   | 1.62 | 1.65 | cizalla    | 1.17   | 1.49 | 1.40 |

Tabla 3.1: Dimensiones fractales para compresión y cizalla con los distintos modelos y distintos  $\eta$  según [MLS\*89] ajustando el radio de giro  $R_g$  en función del número de muelles rotos.

El efecto del exponente  $\eta$  es análogo al que se produce en el modelo DB, recuperándose el modelo de Eden para  $\eta=0$ , y obteniendo evolución completamente lineal  $D=1$  para  $\eta=\infty$ .

Se pueden también componer deformaciones obteniendo resultados tales como los de la figura 3.4. En ella la primera deformación corresponde a una dilatación uniaxial en el eje  $y$  combinada con cizalla en el eje  $x$ . El aspecto es similar al de una deformación uniaxial inclinada  $30^\circ$  respecto de la horizontal, pero con una cierta componente ortogonal algo menor que se aprecia mejor en el modelo I. Si se hace un giro de  $-30^\circ$  queda que

$$u_x = -\frac{\sqrt{3}}{6}\delta x + \frac{\delta}{2}y, \quad (3.4)$$

$$u_y = \frac{\sqrt{3}}{2}\delta y - \frac{\delta}{2}x. \quad (3.5)$$

De nuevo se tiene una dilatación, una compresión y una rotación, marcando el carácter de la fractura la dilatación que es la que tiene mayor peso.

En la parte derecha de la misma figura se muestra que, al menos para el tamaño mostrado, el incluir una pequeña ( $\sim 1\%$ ) anisotropía en forma de cizalla no varía apreciablemente el aspecto de la fractura.

### 3.2.1 Métodos de cálculo

La parte más importante (por lo menos la que mayor tiempo de ordenador consume) es la de relajar la red de muelles cada vez que uno de ellos se rompe. De hecho las figuras que se han visto anteriormente representan sólo de forma esquemática la fractura. El material queda (con una deformación de dilatación de  $\delta=0.1$ ) como muestra la parte superior de la figura 3.5. El sistema de resolver las ecuaciones de potenciales armónicos que conectan los puntos es siempre lineal (ver apéndice C). Por ello, el resultado es siempre independiente del valor que se toma para  $\delta$  en la deformación. Las tensiones siguen también esta linealidad por lo que en realidad la ley de probabilidad ve los muelles como si sus tensiones fueran las de la parte inferior de la citada figura.

<sup>4</sup>En el capítulo 1 se comenta cómo medir esta dimensión como relación entre el número de muelles rotos y la distancia del centro a la que se encuentran.

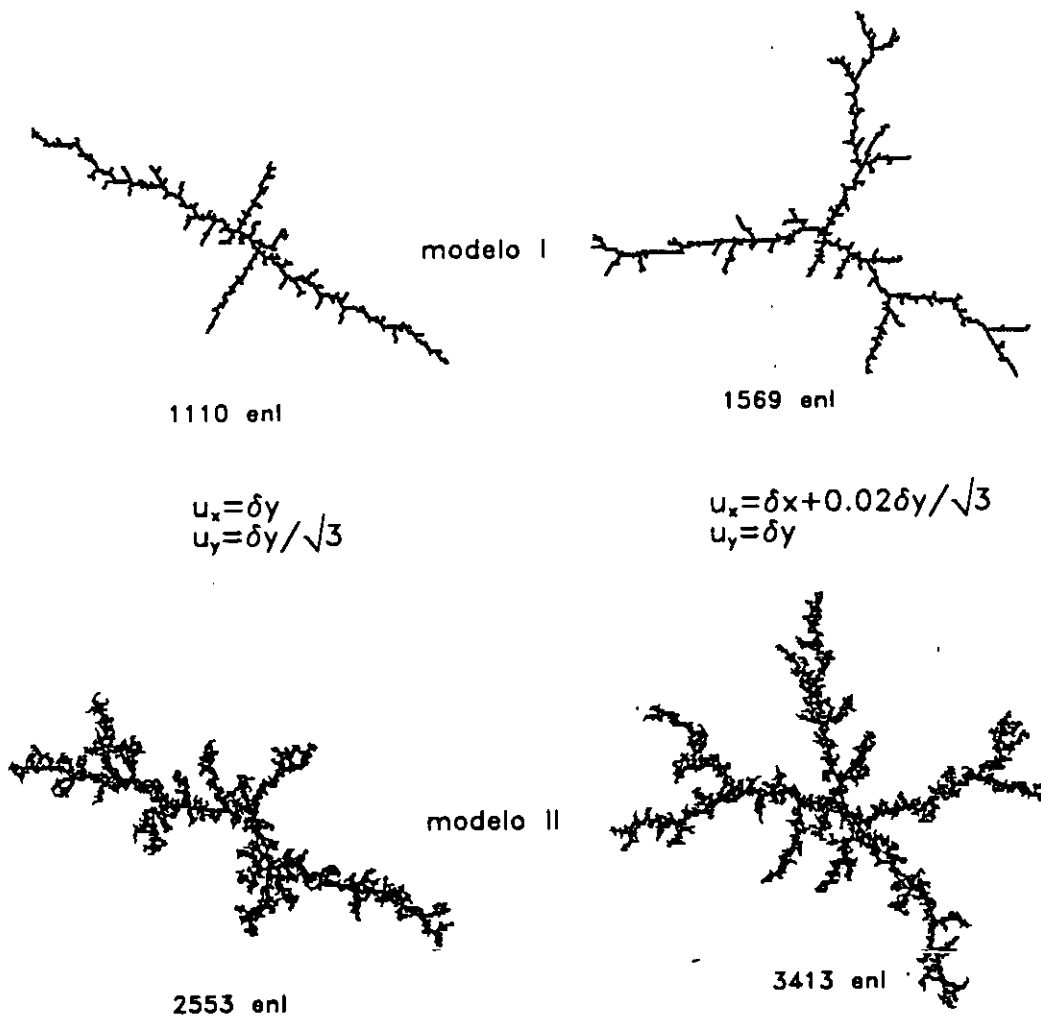


Figura 3.4: Aspecto de las fracturas para dos combinaciones distintas de dilatación y cizalla con los modelos I y II.

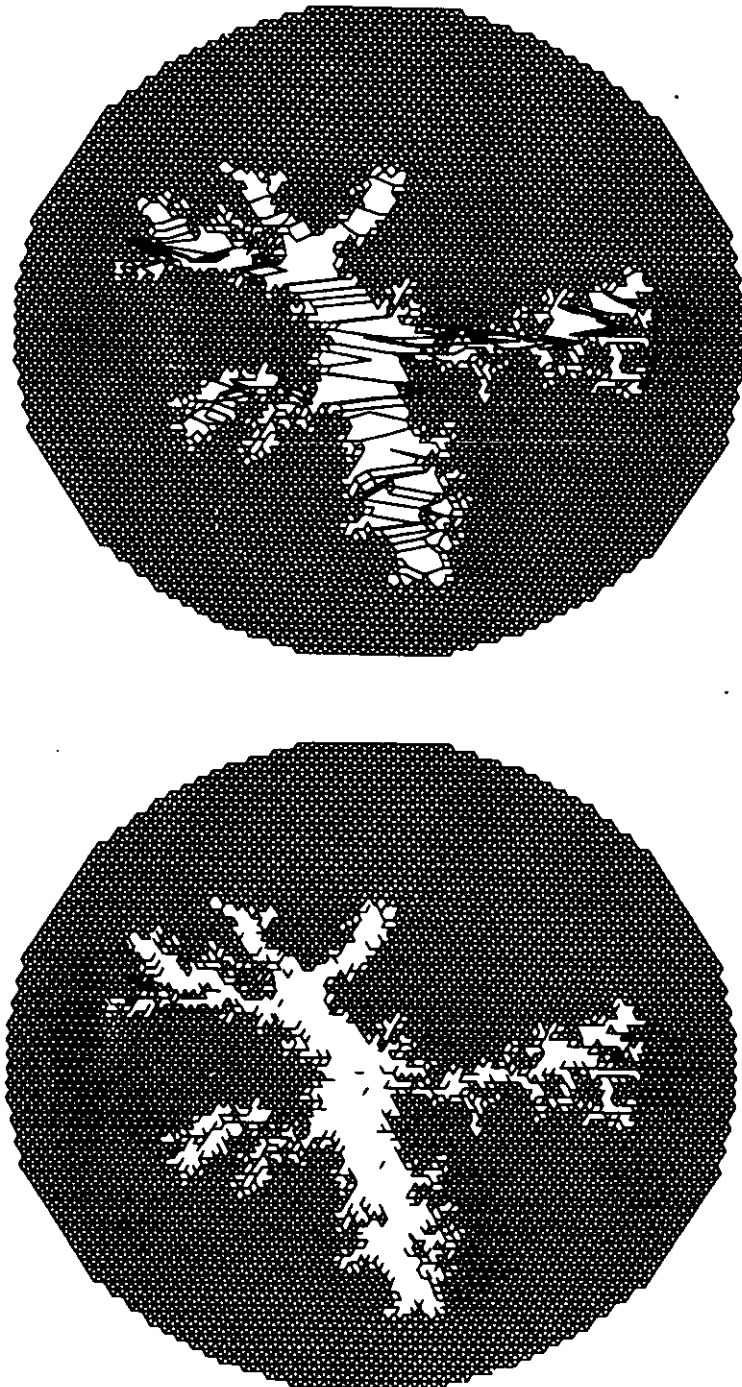


Figura 3.5: Redes relajadas. En la parte superior las posiciones tal y como aparecen después de la relajación. La inferior muestra cómo ve el sistema las tensiones de los distintos muelles.

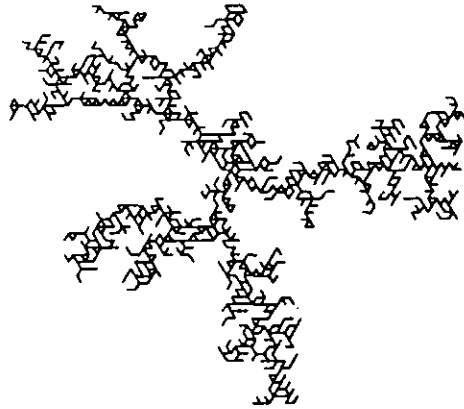


Figura 3.6: Enlaces rotos en la fractura de la figura 3.5.

El problema de la relajación de la red, aunque importante, no es tan crucial como en el caso de la percolación. Ahora hay un número aleatorio que entra en juego, y no es necesario obtener la distribución de tensiones con tanta precisión como anteriormente. Precisiones altas muestran, a la hora de promediar sobre varias fracturas realizadas en las mismas condiciones, las mismas dispersiones que precisiones moderadas cuando se pretende estimar la dimensión fractal. Sin embargo la operación sigue siendo costosa, y por ello se han ideado varios métodos para reducir en lo posible el tiempo de cálculo, sobre todo en un primer paso, en el estudio de distintos fenómenos, cuando se está interesado sólo en resultados cualitativos. Se puede relajar la red de forma selectiva moviendo la zona que se encuentra con desplazamiento fijo (el bastidor en donde se imponen las condiciones de contorno), o prestando mayor atención (más iteraciones) a la zona en que se ha producido la última fractura. Se puede también fijar un número de iteraciones (método de Gauss-Siedel) aunque esto incluye efectos de plasticidad [Her89].

Las simulaciones mostradas aquí están realizadas con condiciones de contorno fijas (no móviles) situadas en una circunferencia de radio 87 (74 para el caso no lineal) en unidades de la distancia entre primeros vecinos de la red, centrada en el defecto (se elimina un nodo con sus seis muelles) que sirve de punto de partida a la fractura. La fractura se para cuando llega a 10 unidades de la condición de contorno. La relajación se realiza mediante Gauss-Siedel hasta que el error máximo en cualquiera de los nodos es inferior a 0.026. En estas condiciones se necesitó una media de 10 horas de CPU de DEC station 3100 para obtener cada una de las fracturas.

A pesar de no ser un problema tan complicado numéricamente como el de la percolación, por lo expuesto anteriormente, se ve que los tamaños que se pueden tratar son bastante limitados. Es impensable poder llegar a romper, con los métodos que conocemos, más de 5000 ó 6000 muelles. Para el modelo DLA que usa caminos aleatorios sí es posible llegar más lejos. Para la elasticidad también existe una formulación en términos de *random walk* [Rou87], pero en su forma actual no es aplicable al problema de la fractura. Muchas de las

cuestiones relacionadas directamente con la aplicabilidad del modelo a fracturas reales pasan por poder tratar sistemas más grandes, ya sea con otros métodos iterativos más rápidos, o mediante un procedimiento parecido al camino libre aleatorio, que permita recorrer en cada paso una fracción limitada del medio, y no su totalidad.

### 3.2.2 Cálculos analíticos de la dimensión fractal.

En el contexto del DB es posible el análisis simplificado de la dimensión fractal viendo la singularidad que crea una cuña de ángulo  $\varphi$  a potencial fijo 0 y potencial 1 en el infinito. Este problema se puede resolver analíticamente [BBRT85, TS85], obteniéndose de la ecuación de Laplace, mediante separación de variables o aplicación conforme, que sobre la superficie de la cuña

$$\phi(r, \theta) = Cr^{\frac{\epsilon}{2\pi - \varphi}} \cos\left(\frac{\pi}{2\pi - \varphi}\theta\right). \quad (3.6)$$

Esto lleva a que el campo se comporta como  $r^{\epsilon-1}$  con  $\epsilon = \pi/(2\pi - \varphi)$ , y  $D = 1 + \epsilon$ . El mismo problema se puede resolver para la cuña en un medio elástico [ABM88] en donde  $\sigma_{\theta\theta}$  y  $\sigma_{r\theta}$  se comportan con  $r$  de la misma forma que el campo eléctrico en el problema electrostático, pero ahora  $\epsilon$  viene dado por la solución de la ecuación

$$\text{sen}[\epsilon(2\pi - \varphi)] = -\epsilon \text{sen}(2\pi - \varphi). \quad (3.7)$$

Esto permite una estimación analítica [LG89] bastante aproximada de la dimensión fractal

| $\phi$ | 0   | $\pi/3$ | $\pi/2$ | $2\pi/3$ |
|--------|-----|---------|---------|----------|
| DB     | 1.5 | 1.6     | 1.67    | 1.75     |
| MB     | 1.5 | 1.51    | 1.55    | 1.62     |

Tabla 3.2: Dimensiones fractales obtenidas mediante la aproximación de las cuñas para DB y MB.

en función del ángulo de la singularidad tal como muestra la tabla anterior.

### 3.2.3 Modelo de películas delgadas.

Recientemente ha aparecido un modelo muy similar al MB para estudiar la fractura en películas de pintura y capas finas de polímeros adheridas sobre materiales [Mea87a]. El modelo parte de una red triangular de muelles de constante de fuerza  $k$  y con sus nodos conectados por un muelle adicional  $k_s$  ( $k_s < k$ ) a puntos fijos del sustrato, dispuestos también sobre una red triangular. Para simplificar el modelo la fractura actúa solamente sobre los muelles duros que conectan la capa de pintura. Ahora no hay criterio de vecindad y los muelles pueden romperse en cualquier lugar de la muestra con probabilidad

$$p_i \propto e^{-\frac{\sigma_i^2}{2kk_B T}}, \quad (3.8)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzman y  $T$  la temperatura. Los resultados dependen ahora de  $k/T$ , obteniéndose que para valores grandes del cociente anterior se observan fracturas

lineales por todo el material formando una especie de pavimento, de forma similar a como se descascarilla la pintura. Si el cociente no es grande aparecen multitud de defectos pequeños que terminarán por disgregar el material en forma más parecida a la corrosión (el material se pulveriza).

### 3.3 Variaciones y ampliaciones del modelo.

En la sección anterior se planteó el modelo como análogo al DB y se estudiaron distintas variantes dependientes de cómo asignar la probabilidad de rotura. Ahora lo que se pretenderá es, partiendo del modelo II, estudiar qué mejoras o variaciones se pueden introducir para aplicarlo a problemas concretos o bien ajustarlo a problemas reales.

#### 3.3.1 Fractura en medios isótropos.

En el capítulo 2 se vió que para la reconstrucción  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  el comportamiento en la percolación elástica dependía no solamente de los módulos elásticos, sino también de cómo estos módulos se implementaban en el sistema por medio de dos posibilidades para la elección de las constantes microscópicas. En el modelo MB, y para deformaciones simples, no aparecen diferencias notables en la estructura (dimensión fractal) dependiendo de  $\lambda/\mu$  ni de la representación elegida para  $\eta = 1, 2$ . No existen resultados sobre deformaciones compuestas (compresión + cizalla), pero, por lo expuesto anteriormente, puede ocurrir que los pesos de una deformación sobre otra dependan de  $\lambda/\mu$  y por tanto tener para la misma deformación compuesta distintos aspectos en función de los parámetros elásticos.

#### 3.3.2 Fractura en medios anisótropos.

Existen varios métodos para hacer anisótropa (unidireccional) la fractura. El primero de ellos, consistente en hacer que la dilatación o la compresión sea uniaxial, ya se comentó anteriormente. Otra posibilidad reside en que el material en cuestión tenga naturaleza anisótropa. Al comienzo del capítulo anterior en la figura 2.2, se citaron las posibilidades de la red triangular. Ahora usaremos la red anisótropa con muelles de dos constantes de fuerza distintas  $k_c$  y  $k_b$  [Per87]. Para poder ver con claridad el efecto de la anisotropía se usan condiciones de contorno de dilatación uniforme ( $\equiv$  compresión uniforme), ya que, como se vió anteriormente, deformaciones uniaxiales o de cizalla pueden enmascarar los resultados. La ley probabilística de rotura es la misma que anteriormente, donde el efecto de la anisotropía se encuentra ya incluido en  $\sigma_i$ . Aspectos para distintos valores de  $k_c/k_b$  se muestran en la figura 3.7. En ella se observa que debido a la coordinación de la red y al valor de los parámetros elásticos macroscópicos (ver tabla 2.1)

$$\frac{C_{11}}{C_{22}} = \frac{1 + 8\frac{k_c}{k_b}}{9}, \quad (3.9)$$

el intercambio  $k_c$  por  $k_b$  cambia la dirección de la fractura pero también su aspecto: valores extremos de  $k_c/k_b$  tienden a hacer las ramas más gordas, lo que quiere decir que las tensiones en las puntas son menores que cuando  $k_c/k_b$  tiende a 1. Habría que estudiar qué sucede en el problema elástico de una cuña cuando el medio es anisótropo.

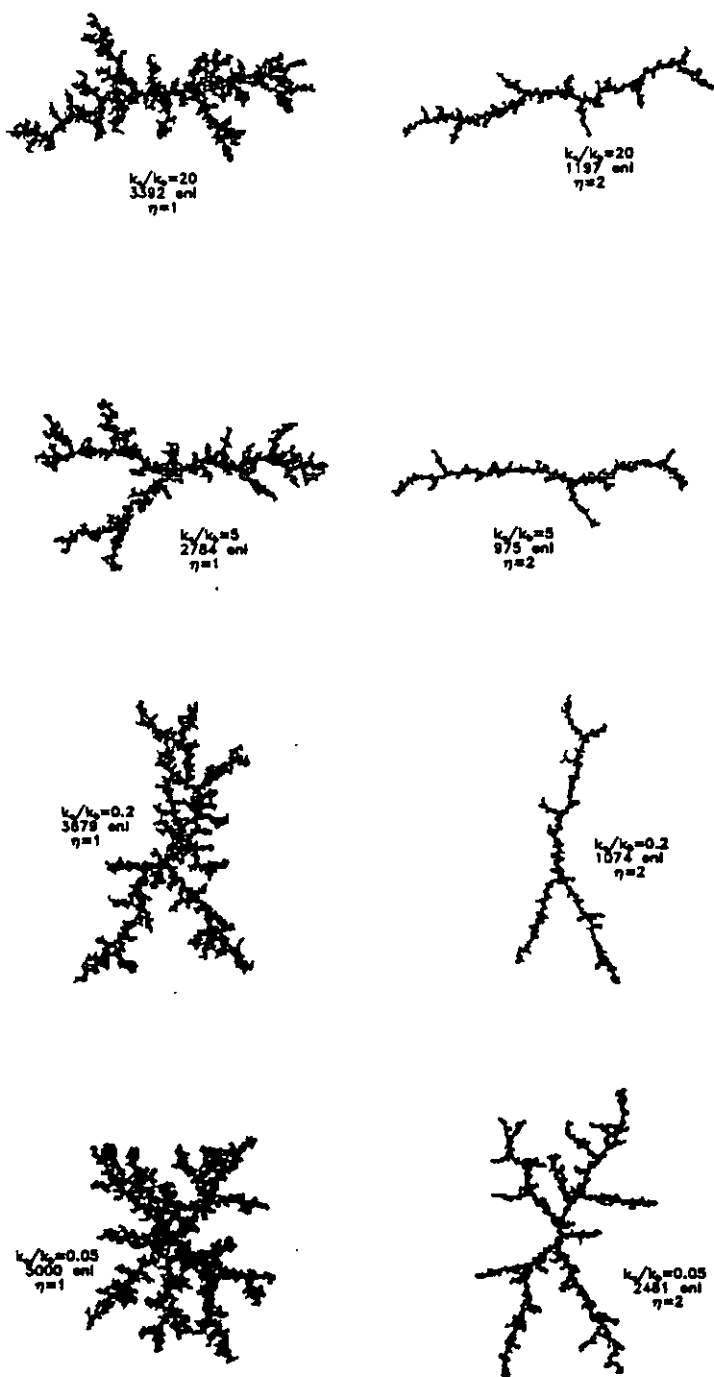


Figura 3.7: Resultados de dilatación para distintas anisotropías y distintos  $\eta$ .

Para estudiar el comportamiento de escala de los objetos generados ahora ya no sirven las hipótesis de auto-similitud, sino que debido a la anisotropía hay que considerar separadamente las direcciones  $x$  e  $y$  de forma auto-afín. El procedimiento es el mismo que para el radio de giro expuesto en el capítulo 1, solo que ahora se hace separadamente para  $x$  y para  $y$ . Se obtienen de esta forma dos dimensiones de Hausdorff distintas, una moviéndonos sobre el eje  $x$ ,  $D_x$ , y otra sobre el  $y$ ,  $D_y$ . El caso de la anisotropía ya ha sido estudiado en el contexto del DLA mediante la asignación de probabilidades de incorporar o no una partícula que llega al agregado dependiendo de la dirección por donde llegue [BBRT85]. Allí, y en simulaciones hechas con 50000 partículas en la red cuadrada se comprueba que las dimen-

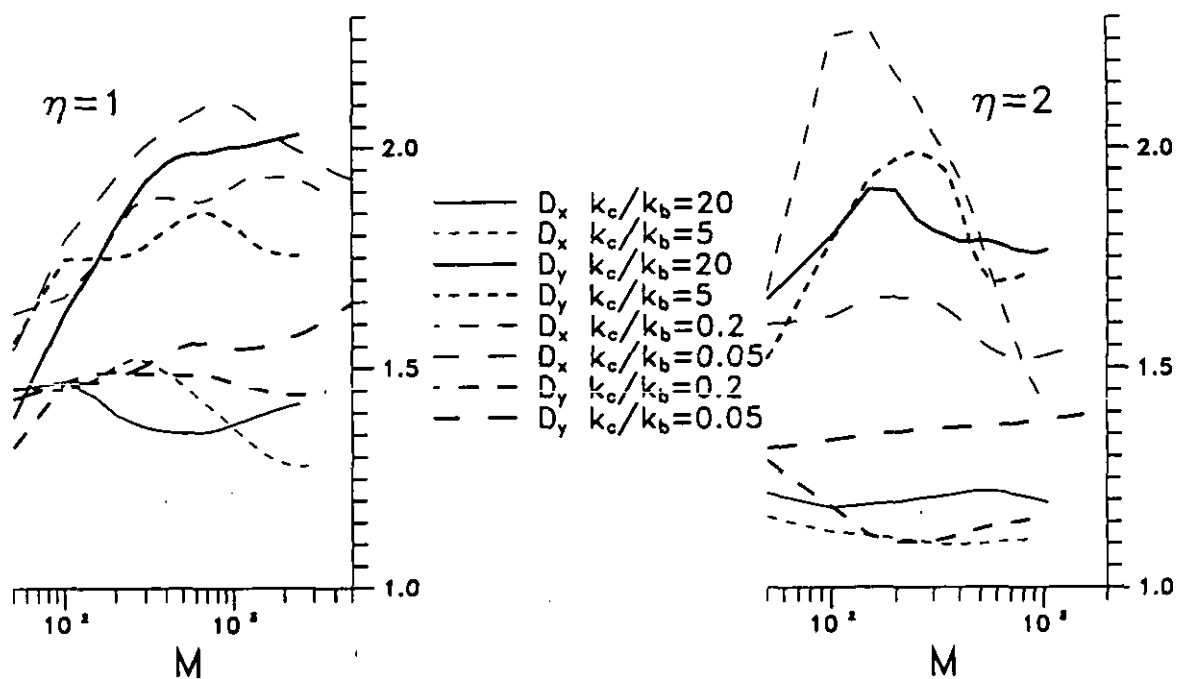


Figura 3.8: Variación de las dimensiones fractales aparentes en función del número de muelles rotos y del grado de anisotropía:

siones fractales son independientes del grado de anisotropía, valiendo 1.5 en la dirección en que se produce el crecimiento y 3 en la ortogonal. En la figura 3.8 se observa la evolución de las dimensiones fractales con el número de muelles rotos  $M$ , habiendo promediado tres muestras para cada uno de los casos. Debido a que los tamaños que se pueden obtener son mucho más limitados que para el DLA, las gráficas no dan información concluyente. Sin embargo se pueden observar las tendencias. Para  $\eta=1$  parece ser buena  $D_x=1.5$ , pero  $D_y \sim 2$  debido posiblemente a la coordinación. Para  $\eta=2$  no se posee información sobre el DLA con la que comparar, simplemente observar en la gráfica que tanto  $D_x$  como  $D_y$  tienden a disminuir; igual que ocurre en el caso isótropo, pero ahora en las dos direcciones.



### 3.3.3 Plasticidad.

Al hablar en este mismo capítulo de los métodos de cálculo se comentó una de las posibilidades para introducir la plasticidad en el modelo consiste en hacer pequeño el tiempo de relajación de la red. Otra forma de obtener resultados parecidos [LGL88] consiste en, al producirse el fallo de un elemento, dejar que a partir de ese momento el muelle mantenga constantemente una fracción  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ) de la tensión con que rompió (ver figura 3.1). De esta forma cada muelle roto ejerce una fuerza  $\alpha\sigma_i$  sobre el resto de la red. Si  $\alpha=0$  nos

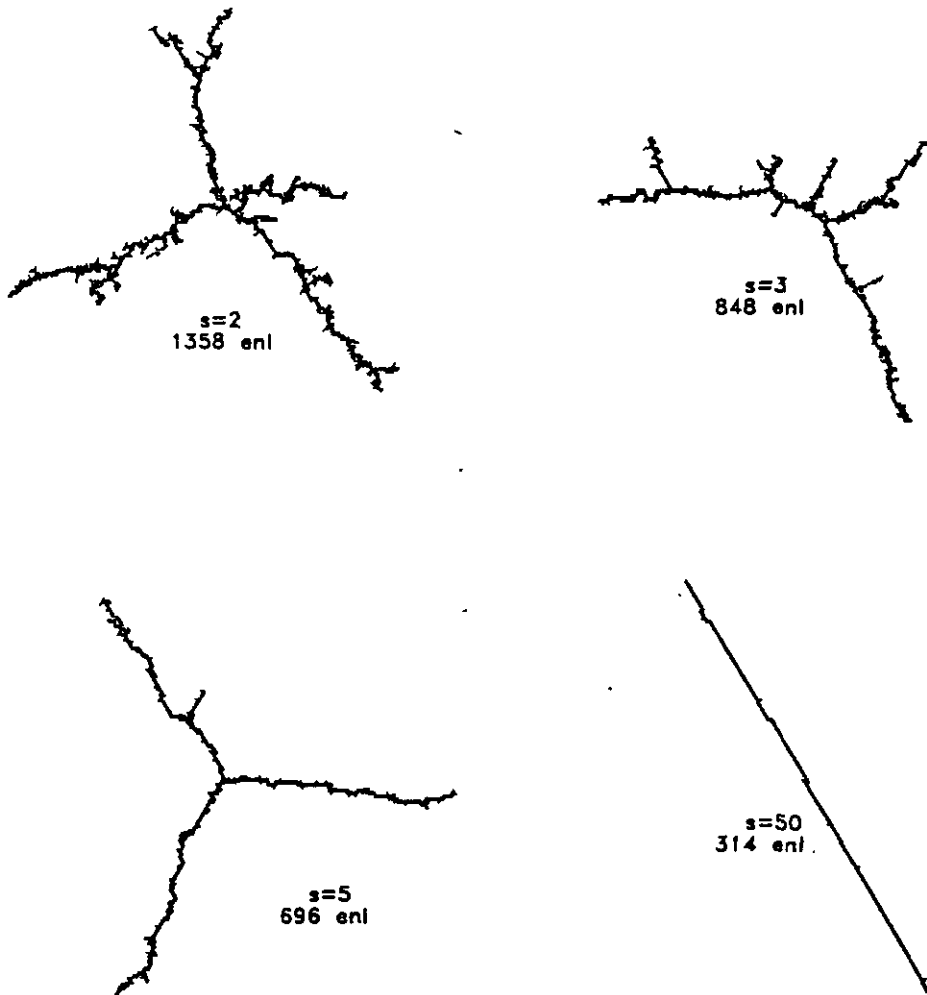


Figura 3.9: Aspecto de distintas fracturas al variar el contador  $s$ .

encontramos en el caso general discutido anteriormente, y conforme  $\alpha$  aumenta el agregado se va haciendo más denso. Recuperando en parte el esquema de agujeros perfectos, lo que ocurre es que los muelles que ya han fallado están ejerciendo una presión de sentido contrario a la deformación externa que impide que se formen puntas en donde la tensión pueda crecer. En concreto, cuando se llega a  $\alpha=1$  el crecimiento es en forma de expansión radial tal y como sucede en el modelo de Eden.

### 3.3.4 Reducción del ruido y dendritas.

Para investigar la naturaleza fractal y la forma asintótica de las leyes de crecimiento de distintos agregados se puede estudiar lo que sucede cuando en las mismas se eliminan parte de las fluctuaciones [Mea87b]. Esto se hace mediante la introducción de contadores. No se añade una nueva partícula hasta que (en el modelo DLA) llegan  $s$  caminos aleatorios distintos al mismo punto de la frontera del agregado. Se produce entonces, para  $s$  suficientemente grande una transición (con  $s$ ) desde agregados fractales a formas dendríticas que poseen la misma anisotropía de la red y ramificaciones regulares. El mismo proceso se observa para sistemas elásticos con condiciones de contorno móviles [NGL88]. El proceso es similar a cuando se varía el exponente  $\eta$  en la ley de probabilidad expuesta más arriba. Ahora  $p_i \sim (\sigma_i / \sum_i \sigma_i)^s$  (la figura 3.9 contiene algunos casos de  $s$  con condiciones de contorno fijas). La forma es parecida pero la dependencia es más fuerte en  $\eta$  que en  $s$ . Las dos leyes pesan más los muelles con mayor tensión a la hora de romper, con lo que es mucho más probable que la fractura se propague por las puntas. Por otro lado es mucho menos probable que dentro de la zona apantallada (lejos de las puntas) se pueda formar alguna estructura que acumule tensión. El caso límite se puede ver para  $s=50$  en donde el crecimiento es completamente lineal.

### 3.3.5 Distintos regímenes en leyes de fractura no lineales.

Como ya se comentó en la introducción y al comienzo de este capítulo, en la fractura de materiales reales entran en juego muchos factores tales como temperatura, dislocaciones, ... que provocan que el proceso no sea necesariamente lineal con las tensiones acumuladas localmente. En estas fracturas reales la probabilidad de fallo local va a ser una función, en principio indeterminada y dependiente del material que se trate, de dichas fuerzas. Dicha función puede ser descompuesta en términos de potencias de  $\sigma$ , dando lugar cada uno de estos términos a un régimen distinto (parecido a los distintos casos en función de  $\eta$  estudiados más arriba) en la propagación de la fractura.

Para ver esta competencia entre varios exponentes estudiaremos aquí, para el caso en que sólo dos de ellos son responsables de la fractura, cómo y en qué condiciones se produce el paso entre regímenes dominados por uno u otro exponente. Para ello se trabaja con leyes de probabilidad de la forma

$$p_i \propto \sigma_i \left[ 1 + \left( \frac{\sigma_i}{\sigma_0} \right)^{\eta-1} \right], \quad (3.10)$$

donde  $\sigma_0$  fija la escala de la preponderancia de uno u otro régimen [PGL\*90b]. En principio cabe esperar que la tensión en las puntas crezca indefinidamente si la muestra es infinita, por lo que al final predominará el efecto del exponente  $\eta$  y de las tensiones altas. Sin embargo para las simulaciones que se pueden realizar no es tan fácil obtener ese régimen. La tensión máxima  $\sigma_{\max}$  (ver figura 3.10), para condiciones de contorno de desplazamientos uniformes, crece muy rápidamente, para después disminuir conforme avanza la fractura. Esto ocurre también en el caso de anillos elásticos discutido en el capítulo 1, en donde para dilatación uniforme (ver tabla 1.1)  $\sigma_{\theta\theta}(R_i)$  disminuye<sup>5</sup> al aumentar  $R_i$ . Si para acelerar los

<sup>5</sup>En la misma tabla se observa que  $\sigma_{\theta\theta}$  aumenta para c.c. de fuerza en los bordes, y quizás ésas sean más adecuadas. Sin embargo aquí hemos considerado más realista para aplicaciones prácticas una deformación uniforme que la de fuerzas constantes, además de que en el límite de sistemas suficientemente grandes las

cálculos se pretendiera usar condiciones de contorno móviles ( $R_i/R_e = \text{constante}$ ) el máximo se alcanza antes todavía ya que su posición viene fijada por la distancia a la que se colocan

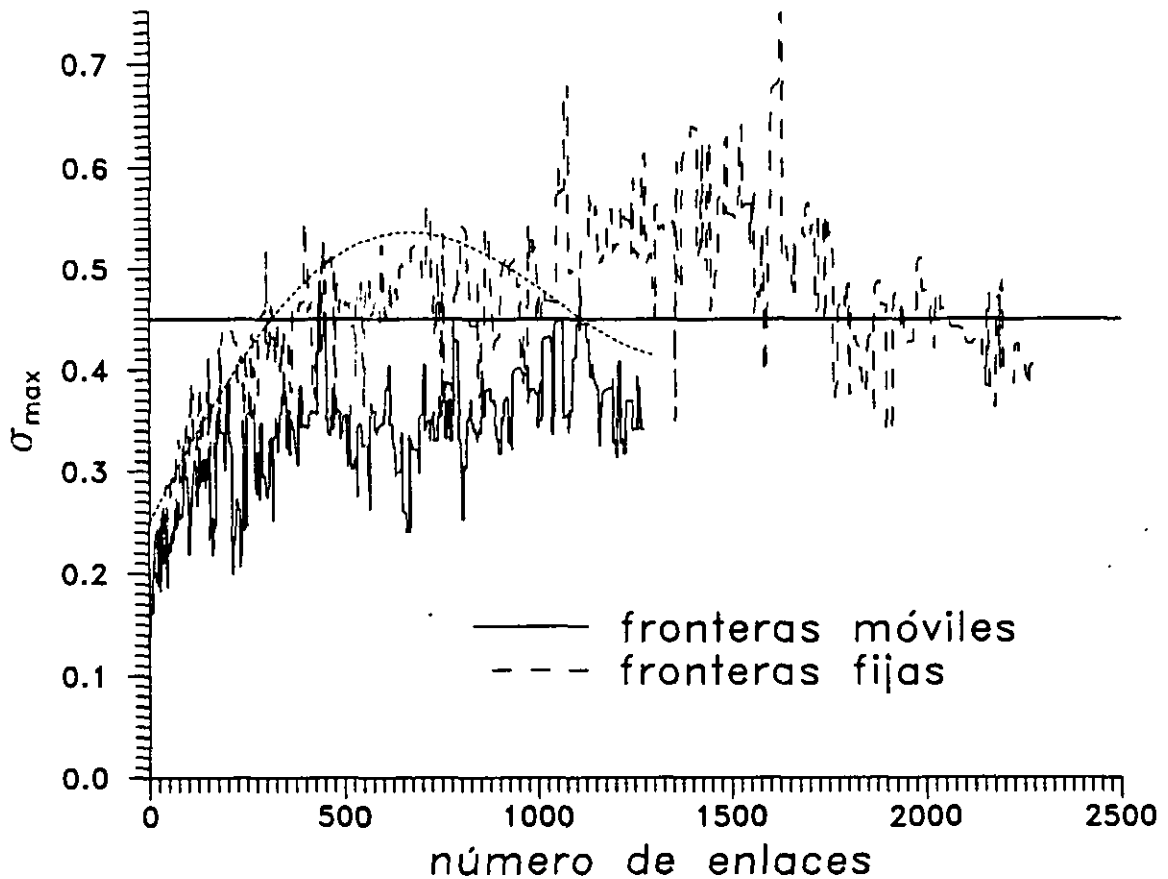


Figura 3.10: Evolución de  $\sigma_{\max}$  durante la fractura para  $p_i \propto \sigma_i$ .

los desplazamientos fijos. En la figura 3.11 se muestra el aspecto de una fractura obtenida con  $\eta=10$  y  $\sigma_0=0.45$ . En su parte inferior se hace el ajuste del número de muelles rotos  $M$  frente al radio de giro promediado a 5 muestras distintas. El resultado es reproducible produciéndose el cambio de régimen en todos los casos para aproximadamente el mismo  $M$ . En la gráfica 3.10 se muestra con línea de trazos el valor promedio de la evolución de  $\sigma_{\max}$  (se han suavizado las oscilaciones que varían en una anchura de  $\pm 0.1$  alrededor de la línea). Cuando la fractura llega a las proximidades de la frontera se produce el cambio de régimen inverso debido al decrecimiento de las tensiones en las puntas, de ahí el grosor que se observa en las puntas del agregado de la figura 3.11.

Si el exponente  $\eta$  no es lo suficientemente grande como para atraer al sistema rápidamente a tensiones altas entonces la fenomenología es más rica y no siempre se obtiene el mismo resultado tal y como muestra la figura 3.12 para  $\eta=2$  y el mismo  $\sigma_0$ . En la parte derecha se estudia un caso en donde se suceden los cambios de régimen de forma sucesiva, dando lugar a una dimensión fractal intermedia. En el otro caso de la misma figura el

dos condiciones de contorno son equivalentes.

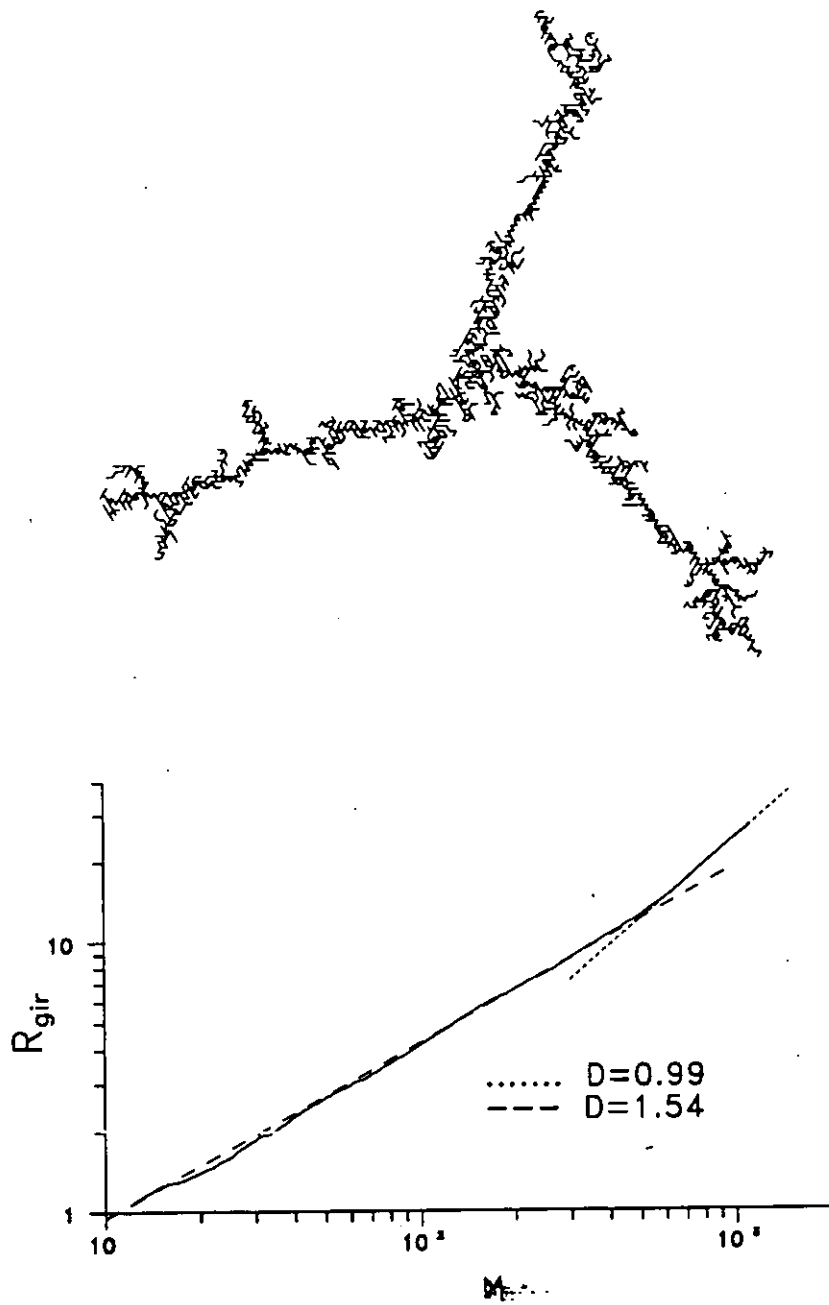


Figura 3.11: Una de las fracturas generadas con  $p \propto \sigma(1 + (\sigma/0.45)^9)$  y ajuste del radio de giro promediado sobre 5 muestras.

aspecto es parecido, pero el ajuste indica que ha habido un cambio de régimen definido.

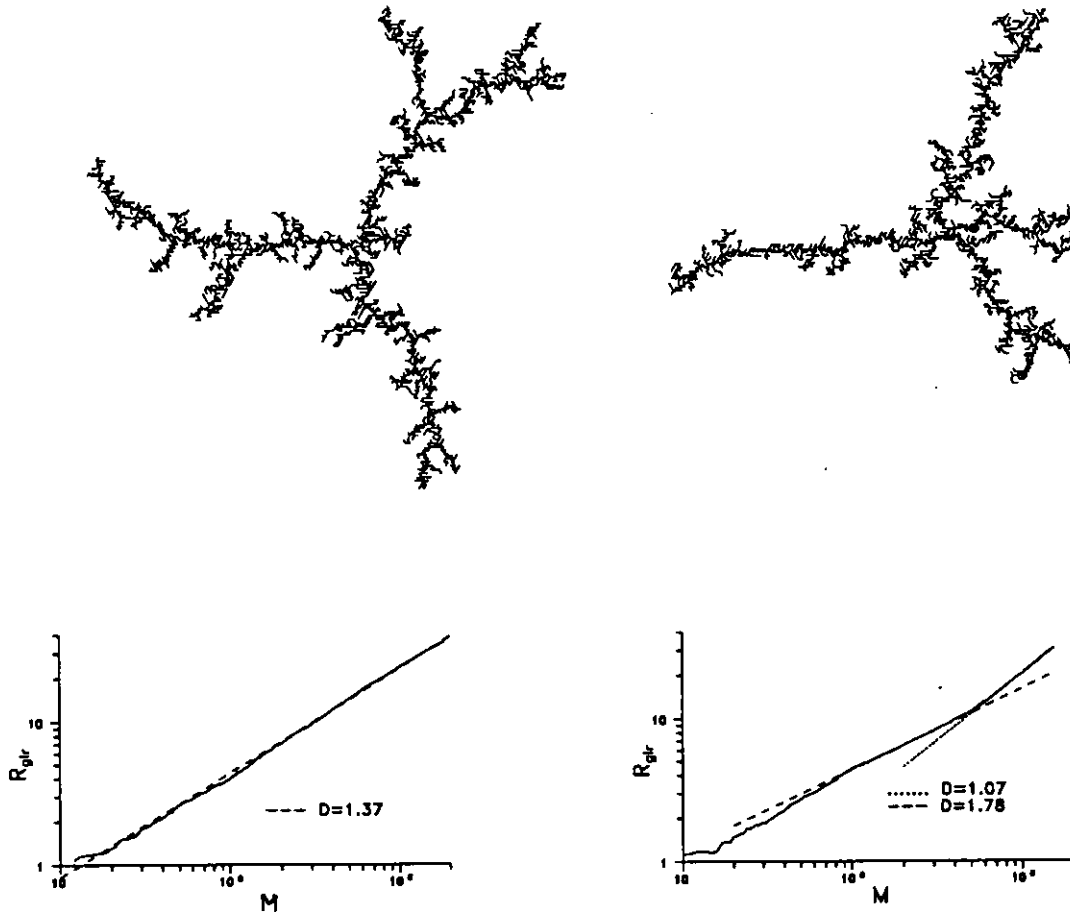


Figura 3.12: Dos distintos comportamientos para  $p \propto \sigma(1 + (\sigma/0.45))$ .

La combinación de dos leyes de potencias hace que ahora el resultado dependa del valor de la deformación externa aplicada  $\delta$ , siendo el cambio de comportamiento definido por  $\sigma_0/\delta$ , donde  $\sigma_0$  es una característica del material. Cabe esperar que experimentalmente se observen en materiales reales este tipo de fenómenos donde son las puntas (zonas con tensiones altas) de la fractura las que tienden a dominar la forma en que se produce el crecimiento haciendo que su aspecto según se produce la propagación tienda a ser prácticamente lineal. En estos materiales, como ya se comentó anteriormente, la probabilidad de fractura como función de la tensión puede ser más complicada, sin embargo, localmente, siempre se está cerca de la situación descrita en esta sección. Puede ocurrir ahora, como se ha visto para las simulaciones, que se produzca un cambio de régimen de forma abrupta o bien que el sistema no sepa en cuál quedarse, produciéndose cambios continuamente.

### Leyes de probabilidad que saturan.

Dentro del mismo contexto de fenómenos no lineales se puede pensar en materiales en los cuales hay un cierto límite relativo en los esfuerzos que puede soportar el mismo, pero la fractura no es lo suficientemente rápida (p.e. corrosión por esfuerzos (*stress corrosion*)) y el material vuelve a su posición de equilibrio cada vez que una porción microscópica del mismo falla. En tales procesos, una vez superado un cierto umbral de tensiones  $\sigma_0$ , la probabilidad de fallar será independiente de la tensión local acumulada. A este tipo de fenómenos pueden ser aplicadas leyes de crecimiento de la forma

$$p_i \propto \exp\left(-\frac{\sigma_0}{\sigma_i}\right), \quad (3.11)$$

$$p_i \propto \tanh\left(\frac{\sigma_i}{\sigma_0}\right), \text{ o} \quad (3.12)$$

$$p_i \propto \theta(\sigma_i - \sigma_0). \quad (3.13)$$

### 3.3.6 Fractura en modelos con fuerzas angulares.

Si se incluyen fuerzas angulares en la relajación puede ocurrir lo mismo que para la percolación elástica: que el problema se convierta en el DB escalar. Esto ocurre, a pesar de que la relajación del sistema es distinta, para el modelo de Born (ec. 2.1) y la red cuadrada [YLS89] en donde la dimensión fractal de los agregados se hace próxima a 1.7. Sin embargo para la red triangular esta dimensión tiende a 1.8 en el modelo de Born [YLS89], y a 2 en el modelo de Keating (ec. 2.2) [LGG\*88], que tiene la ventaja sobre el de Born de ser rotacionalmente invariante.

### 3.3.7 Fragilización y fractura.

Un problema interesante y de gran actualidad en el campo tecnológico desde hace tiempo es el de la corrosión de materiales por medio de otros agentes (por ejemplo hidrógeno) que se van difundiendo en su estructura. Esta corrosión produce que el material se haga más frágil y que incluso en ausencia de otras perturbaciones externas se produzca su fractura.

Dentro del marco de este trabajo, se puede introducir este efecto en la energía libre elástica  $F$  mediante un campo de difusión que tiende a dilatar la celda unidad bidimensional:

$$F = \frac{\lambda}{2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})^2 + \mu(\epsilon_{xx}^2 + \epsilon_{yy}^2 + 2\epsilon_{xy}^2) - cw(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}), \quad (3.14)$$

donde  $c$  es la constante de acoplo entre los dos campos: el de difusión,  $w$ , y el de desplazamientos  $u$ . Esta ecuación es la misma que resulta cuando se consideran influencias térmicas en los sistemas elásticos [LL70], con lo que el mismo planteamiento teórico sirve para aplicarlo en problemas prácticos de fragilización por calentamiento (los *sietes* que aparecen en carreteras, aceras y superficies de cemento tienen cierto parecido con muchas de las figuras expuestas anteriormente en este mismo capítulo).

Como  $w$  satisface la ecuación de Laplace ( $\nabla^2 w = 0$ ), hay que primero aplicar la difusión, y luego dejar relajar el sistema elástico. Se crea pues un nuevo tiempo en el sistema, la relajación del campo de difusión, con el que se puede jugar dependiendo del problema que se quiera tratar.

Las condiciones de contorno pueden ser muy variadas: se puede dejar difundir partículas por entre las grietas que se formen o bien aplicar un campo de difusión constante. Para el campo elástico se pueden poner condiciones de contorno de compresión, de cizalla, fijas (sin ninguna deformación externa, ya que el propio campo de difusión se encarga de deformar localmente el sistema y de crear las tensiones necesarias para que se pueda romper con arreglo a las leyes expuestas más arriba), o bien otras cualquiera.

### Solución radial.

Si se supone que la solución es simplemente radial como para el caso de agujeros perfectos del capítulo 1 (ver también apéndice B), las soluciones se pueden expresar analíticamente como:

$$w(r) = A + B \operatorname{Ln} r \quad \text{y} \quad (3.15)$$

$$u(r) = \left( Cr + \frac{D}{r} + \frac{cB}{2(\lambda + 2\mu)} r \operatorname{Ln} r \right) \hat{r}, \quad (3.16)$$

donde  $A$ ,  $B$ ,  $C$  y  $D$  son constantes que se determinan mediante las condiciones de contorno.

A partir de este planteamiento teórico es fácil obtener una versión discreta, para la red triangular y el modelo de fuerzas centrales, de la energía libre  $F$ , y derivar las ecuaciones de equilibrio.

De momento todavía no hay resultados sobre este problema en el plano teórico, pero sí es posible predecir que en sistemas de este tipo será más fácil la comparación entre las simulaciones y resultados experimentales. Es posible llevar a cabo experimentos (quizás incluso ya están realizados y publicados) sin necesidad de aplicar ninguna fuerza externa, simplemente calentando de forma controlada un material, o bien difundiendo en el mismo otra sustancia (hidrógeno, ácidos, etc.).

## Capítulo 4

# Procesos dinámicos en fenómenos de crecimiento.

La motivación de este capítulo es doble: por un lado se trata de estudiar fenómenos en los cuales hay una invariancia genérica de escala (criticalidad auto-organizada), y por otro el de fenómenos de crecimiento, aplicando la experiencia adquirida al tratar los temas del capítulo anterior. Interconectar estos dos problemas es pues el propósito del presente capítulo.

Por ser el tema de los procesos auto-organizados bastante reciente es posible hacer una revisión de los trabajos motivados por este tipo de procesos y de los problemas a los que se ha aplicado. Intentaré pues, en la primera parte de este capítulo, realizar dicha revisión, aún a sabiendas que muchos trabajos no estarán reflejados en la misma. De todas formas puede ser una guía de introducción a un tema que atrae últimamente el interés de buena parte de los investigadores dentro de la Física Estadística.

En la segunda parte se analizarán las dos aproximaciones que hasta el momento, y que yo conozca, han aparecido para estudiar los fenómenos de crecimiento fractal bajo las hipótesis de auto-organización.

### 4.1 Procesos auto-organizados.

Ya en la introducción de este trabajo se dedicó un párrafo a los fenómenos auto-organizados, en los cuales se relacionan entre sí los procesos espaciales fractales con los procesos temporales y de generación de ruido  $1/f$ . Parecido tipo de interrelación existe en el punto crítico de una transición de fase de segundo orden. En este punto se tiene, por un lado, el fenómeno de opalescencia crítica (las funciones de correlación espaciales decaen en forma de potencia), que se observa, por ejemplo, en materiales transparentes, que, al sufrir un cambio de fase de segundo orden, se vuelven opacos. Y por otro lado se tiene el amortiguamiento crítico (critical slowing down), en el cual no hay una escala de tiempos característica del sistema. La diferencia fundamental entre los dos sistemas, auto-organización y transición de fase de segundo orden, consiste en que en este último hace falta un parámetro que de lugar a la transición (temperatura, probabilidad ...), mientras que en el primero no es necesario dicho parámetro, sino que el estado crítico es intrínseco al problema o al modelo. Recientemente se ha sugerido [CCGS90] que los fenómenos auto-organizados se deben a efectos de tamaño finito, perdiéndose el comportamiento en forma de ley de potencia para el límite



termodinámico, cosa que no ocurre en las transiciones de fase de segundo orden.

La actualidad de los fenómenos de auto-organización es debida a los recientes trabajos de Bak, Tang y Wisenfeld [BTW87,BTW88,WTB89] (BTW) en los que estudian varios modelos discretos similares al movimiento de arena en una duna.

Aunque parece ser que los movimientos de arena reales no siguen las reglas de auto-organización<sup>1</sup> [JLN89] la relevancia del modelo reside en su sencillez y, a la vez, en la cantidad de repercusiones físicas que contienen las hipótesis básicas. Son muchos los problemas de interés físico en los cuales nos encontramos con sistemas marginalmente estables, en los cuales una pequeña perturbación puede inducir cambios generales en la estructura del sistema. Esto parece suceder en materiales magnéticos [BW90,CS90], en los cuales, el que los sistemas tengan una cierta frustración (distintos niveles energéticos equivalentes cercanos a la energía del estado fundamental), puede estar relacionado con que se manifiesten de forma auto-organizada.

Para concretar más en estos modelos intentaré exponer de manera simplificada algunos de ellos, donde, aunque no sean compatibles con la arena real, el hablar de granos y avalanchas de arena puede ser útil para tratar de entender cómo funcionan.

#### 4.1.1 Modelos sencillos.

Comenzaremos por estudiar los modelos iniciales propuestos por BTW, para más adelante considerar distintas variaciones posteriores.

En una dimensión se considera un sistema discreto de sitios, a cada uno de los cuales se le asocia un entero  $h_i$  que puede representar la altura de la capa de arena en dicho punto. Además, en cada uno de estos puntos se define la pendiente en el punto como  $z_i = h_i - h_{i-1}$ . El añadir un grano de arena en un punto equivale a hacer

$$\begin{aligned} z_i &\rightarrow z_i + 1, \\ z_{i-1} &\rightarrow z_{i-1} - 1. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Si la pendiente excede un cierto valor crítico, entonces entra en funcionamiento el proceso dinámico de un grano de arena que cae al lugar siguiente:

$$\begin{aligned} z_i &\rightarrow z_i - 2, \\ z_{i\pm 1} &\rightarrow z_{i\pm 1} + 1, \text{ para } z_i > z_c. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Se usan condición de contorno cerrada para la parte izquierda de la duna, y condición de contorno abierta en la parte derecha (la arena desaparece del sistema):

$$\begin{aligned} z_0 &\rightarrow 0, \\ z_N &\rightarrow z_N - 1, \\ z_{N-1} &\rightarrow z_{N-1} + 1, \text{ para } z_N > z_c. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Si partiendo del sistema vacío, se añaden partículas en puntos aleatorios del sistema, y se van aplicando las reglas de relajación dinámica anteriores, se llega a una situación marginalmente estable, independientemente de las condiciones de contorno, en la que  $z_i = z_c$  en todos sus puntos. En este estado, un grano de arena añadido en el punto  $n$ , va saltando de sitio en

<sup>1</sup>Un trabajo reciente [HSK\*90] muestra que apilamientos de pequeño tamaño sí se comportan según las hipótesis de auto-organización, desapareciendo estos efectos para tamaños mayores.

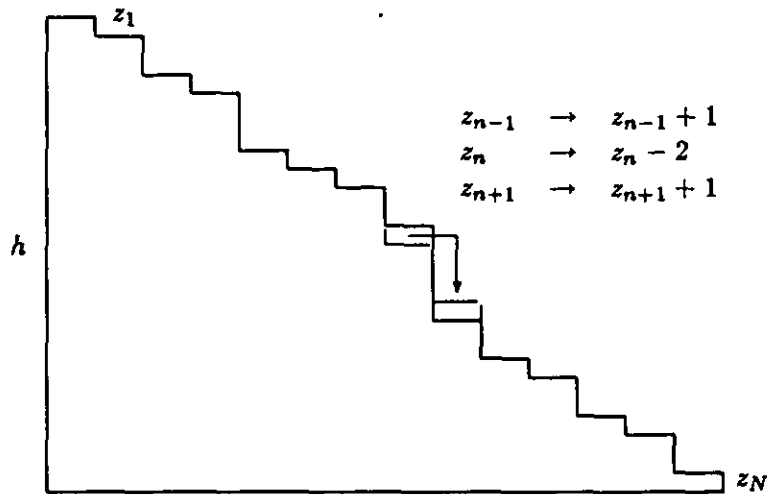


Figura 4.1: Modelo de avalanchas en una dimensión.

sitio hasta llegar al sitio  $N$ , abandonando el sistema y dejándolo como estaba. Entonces, el número de saltos necesarios para que la perturbación desaparezca es un número aleatorio comprendido entre 1 y  $N$ , no habiendo correlación entre los sucesos, por lo que se obtiene un ruido blanco o  $1/f^0$ .

Al aumentar la dimensión la trivialidad del problema desaparece. En dos dimensiones, las reglas 4.1 y 4.2 se convierten en

$$\begin{aligned}
 z_{i,j} &\rightarrow z_{i,j} + 2, \\
 z_{i-1,j} &\rightarrow z_{i-1,j} - 1, \\
 z_{i,j-1} &\rightarrow z_{i,j-1} - 1,
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

y

$$\begin{aligned}
 z_{i,j} &\rightarrow z_{i,j} - 4, \\
 z_{i\pm 1,j} &\rightarrow z_{i\pm 1,j} + 1 \\
 z_{i,j\pm 1} &\rightarrow z_{i,j\pm 1} + 1, \text{ para } z_{i,j} > z_c,
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

donde los puntos se encuentran en una red cuadrada  $1 \leq i, j \leq N$ . Para ver que ahora el estado mínimamente estable en que todas las pendientes son iguales a  $z_c$ , no es un atractor de la dinámica, se considera que se lanzan dos granos de arena, y se aplican las reglas dinámicas. Los sitios vecinos se harán inestables ( $z > z_c$ ), y los vecinos de los vecinos, y así, en forma de cascada, la perturbación se expande por todo el sistema, cambiando el estado de éste. El estado estacionario es ahora lo que se denomina estado auto-organizado, en el cual, una pequeña perturbación en un punto puede provocar, desde sólo la caída de un grano de un nivel a otro, hasta una reorganización general del sistema.

BTW introducen la perturbación de dos formas distintas: una consiste en elegir una situación aleatoria lejos del equilibrio con  $z_{i,j} > z_c$ , y dejar evolucionar el sistema hasta

que no se producen más saltos de arena; entonces se perturba el sistema aplicando la regla dinámica a un sitio con  $z = z_c$ . Repitiendo el proceso varias veces, se obtiene la distribución de granos de arena que cambian su posición<sup>2</sup> ( $D(s)$ ) y la distribución de tiempos como número de veces que es necesario aplicar las reglas 4.5 a todo el sistema hasta llegar al equilibrio ( $D(t)$ ). La otra posibilidad consiste en partir de una superficie plana ( $z < z_c$ ) e ir añadiendo unidades de arena de forma aleatoria. Cada grano que se añade provoca, cuando se llega a un estado en el que hay algunos  $z$  tales que  $z > z_c$ , reorganizaciones del sistema en forma de avalanchas, de las cuales se puede obtener  $D(s)$  y  $D(t)$  sin tener que reinicializar el sistema tan a menudo como en el método anterior. El resultado es que para ambos procedimientos tanto  $D(s)$  como  $D(t)$  se comportan en forma de potencias:

$$\begin{aligned} D(s) &\sim s^{-\sigma}, \text{ y} \\ D(t) &\sim t^{-\tau}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Y además el exponente es independiente del método utilizado para obtener  $D(s)$  y  $D(t)$ .

| d | $\sigma$ | $\tau$ |
|---|----------|--------|
| 2 | 1.00     | 0.43   |
| 3 | 1.37     | 0.92   |

Tabla 4.1: Exponentes del modelo BTW para dimensión 2 y 3.

El valor concreto de  $z_c$  es una variable irrelevante del problema. Puede tomar cualquier valor entero siempre que  $z_c \geq 2d$ , donde  $d$  es la dimensión en la que se encuentra el autómata, sin que se altere la dinámica del problema.

Para estudiar el ruido BTW introducen la función  $F(t)$  que representa el número de saltos que se producen en el instante  $t$  después de haber introducido la perturbación. Como la perturbación no vuelve al sitio de donde ha partido,  $F(t)$  representa la disipación de energía en el tiempo  $t$ . La densidad espectral de potencia  $S(f)$  que se obtiene a partir de formar una sucesión aleatoria de los distintos  $F(t)$  es la que se comporta como  $f^{-1.57}$  para  $d=2$  y como  $f^{-1.08}$  para  $d=3$ .

Hay una versión vectorial del modelo BTW [MW90] en la cual los exponentes que se obtienen son ligeramente distintos. La ventaja que tiene este modelo vectorial, es que se puede relacionar directamente las  $z$  con pendientes reales (diferencias entre alturas), no como en los modelos anteriores en que esta relación sólo se cumple para  $d=1$ , y en los demás casos se explica como una pendiente promedio.

Los mismos Tang y Bak desarrollaron una teoría de campo medio [TB88a, TB88b] alrededor de la pendiente crítica  $z_c$ , en la cual se definen, a parte de los exponentes anteriores  $\sigma$  y  $\tau$ , otros relacionados con la teoría de transiciones de fase de segundo orden; obteniendo resultados bastante compatibles con los de sus autómatas celulares.

A continuación mencionaré, de forma mucho más breve que para el modelo BTW, algunos otros cálculos y modelos que han ido apareciendo motivados por la idea de la auto-

<sup>2</sup>O, lo que es lo mismo, de sitios perturbados; ya que, con las reglas de evolución anteriores, la perturbación no puede ir hacia atrás.

organización, que ha llegado a aplicarse con éxito hasta al *juego de la vida* [BCC89], precursor de los autómatas celulares y de los procesos de organización.

#### 4.1.2 Autómatas celulares y avalanchas.

##### Escalamiento y universalidad en avalanchas.

Kadanoff et al. [KNWZ89] han estudiado recientemente distintas variantes del modelo BTW para  $d=1$  y  $d=2$ . Introducen en una dimensión modelos no triviales en los cuales, en la *relajación del sistema* (ecuación 4.2), el número de partículas que saltan de un sitio a otro es variable y depende del modelo escogido, evitando así el estado marginalmente estable. Las distintas distribuciones resultantes se analizan desde el punto de vista multifractal y desde el punto de vista de escalamiento finito, buscando con ello la dependencia de las distribuciones con el tamaño de las muestras. Las conclusiones son que para  $d=1$  el análisis multifractal ajusta mejor a los datos, mientras que para  $d=2$  los dos análisis dan resultados satisfactorios. Por otro lado, encuentran distintas universalidades (distintos exponentes en las distribuciones) dependiendo de los modelos usados.

##### Avalanchas sin auto-organización.

La imagen de granos de arena cayendo en una duna es parecida a la de gotas de agua que resbalan en un cristal. Cuando una gota adquiere dimensión suficiente  $h_c$ , ésta cae, arrastrando con ella todas las que se encontraban por debajo en el cristal, provocando una avalancha que *limpia* parcialmente el cristal. Experimentos y simulación numérica [JH89] parecen indicar que el fenómeno es de tipo  $1/f^2$ . Otras simulaciones más amplias para  $d=1$  y  $d=2$  [CRMF89] muestran que las distribuciones de tiempos entre avalanchas dependen de  $h_c$ , contrariamente a lo que ocurre en los sistemas auto-organizados.

##### Modelo BTW continuo.

Este modelo es esencialmente el mismo que el de BTW, pero en el cual la pendiente puede tomar valores continuos [Zha89] y se le asocia el significado de *energía*. Las leyes dinámicas y de adición de *energía* son las mismas que para BTW. La novedad más importante del trabajo de Zhang es que, cuando se alcanza el estado auto-organizado, la *energía* en cada punto de la red se concentra al rededor de determinados valores, como si estuviera cuantizada. Cada uno de esos valores representa un atractor dinámico del sistema. La forma y distribución de los picos (densidad de *energía* frente a *energía*) depende del grado de anisotropía del sistema [Jan90], mientras que el resto de propiedades (exponentes  $\sigma$  y  $\tau$ ), parecen no ser tan sensibles a variaciones en la anisotropía del modelo.

#### 4.1.3 Modelos exactos.

Hasta aquí la mayoría de los trabajos citados son simulaciones numéricas, pero también ha habido intentos de describir los procesos auto-organizados de forma analítica. Hwa y Kardar [HK89] han estudiado por medio de técnicas de renormalización dinámica la evolución de un modelo continuo no lineal en presencia de ruido cuya dimensión crítica es 4. Una de las características de este modelo es la anisotropía del sistema, que determina

de alguna forma la dinámica, junto con las leyes de conservación implícitas en el modelo. Esta combinación anisotropía-conservación ha motivado otros trabajos, estudiando bajo qué condiciones modelos con unas determinadas características poseen auto-organización o no [GLS90].

Dhar y Ramaswamy estudian una variante del modelo BTW que resulta ser equivalente para  $d=2$  a un modelo de percolación dirigida resuelto exactamente [DR89], y para  $d=3$  (la dimensión crítica) la solución también es exacta. Los exponentes también difieren con los del modelo anterior y con las simulaciones, y no parece claro cual de ellos compagina mejor con estas últimas.

Finalmente reseñar otro trabajo reciente [Dha90], que aunque sólo está resuelto exactamente para la red de Bethe, plantea de forma elegante las bases algebraicas para tratar los modelos BTW de forma genérica.

#### 4.1.4 Terremotos

La distribución de magnitudes de los terremotos detectados se conoce desde hace tiempo que sigue una ley de potencia [GR56]. Es por tanto una buena medida experimental para contrastar los resultados de modelos surgidos a la luz de los procesos auto-organizados y que pretenden explicar estos fenómenos.

Citaré brevemente dos trabajos. En el primero [SS89] se desarrolla una teoría de campo medio basada en la energía disipada en cada proceso independiente y discute la naturaleza auto-organizada del fenómeno, en el que no sólo las distintas fallas producen los terremotos, sino que éstos también influyen en la futura distribución de defectos, y por tanto en los terremotos posteriores. En el segundo [CL89] se estudia un modelo continuo determinista, en contraposición con los modelos de avalanchas en los que la aleatoriedad marca la dinámica. En este último modelo la aleatoriedad se encuentra en las condiciones iniciales, evolucionando sin embargo igualmente que los modelos de avalanchas al estado auto-organizado. De este último modelo existe una reciente versión en forma de autómatas celulares [Nak90].

## 4.2 Leyes de escala en fenómenos de crecimiento.

Teniendo en cuenta las ideas expuestas en la sección anterior nos proponemos ahora el ver cómo se pueden aplicar éstas en el marco de los fenómenos de crecimiento. El punto de partida que inicialmente se podría tomar, pensando en el hecho de que en muchos modelos de crecimiento (DLA, DB y MB) el resultado tiene aspecto fractal (ver capítulos 1 y 3), es que ya tenemos medio camino andado, sólo resta encontrar la secuencia temporal cuya densidad se comporte en forma de potencia y su relación con la distribución espacial. El problema reside en que para los fenómenos de crecimiento esta última relación resulta ser trivial: *masa = tiempo*. Cada vez que se añade una nueva partícula corre el reloj una unidad. Hay, por tanto que cambiar el enfoque del problema, buscando una masa, en principio distinta de la que define la dimensión fractal, y un tiempo que se relacione con la masa, por lo menos a priori, de manera no trivial.

Existen dos aproximaciones para solucionar este problema, la primera se basa en la existencia de zonas apantalladas y zonas en las que se realiza el crecimiento. La segunda se centra en las reorganizaciones o avalanchas que se producen cada vez que se añade una nueva partícula al agregado.

### 4.2.1 Crecimiento, apantallamiento y auto-organización.

El modelo apareció en un reciente trabajo de Alstrøm, Trunfio y Stanley[ATS90], en el que estudian, bajo el mismo punto de vista, el problema de percolación por invasión y el DB. Se basa en clasificar las partículas que componen el agregado en dos fases dinámicas distintas: una fase extinta o completamente apantallada, alrededor de la cual no se va a producir crecimiento; y una fase superviviente o activa, a partir de la cual el agregado continúa evolucionando. La identificación de cada una de las fases se hace en función de la probabilidad que tiene cada partícula de tener un nuevo vecino. Dejando un poco de lado la percolación por invasión, en la cual la probabilidad característica  $p^*$  que divide las fases, se toma de diferente manera; para el DB, esta  $p^*$  se define como:

$$\ln p^* = \sum_i p_i \ln p_i, \quad (4.7)$$

donde  $i$  se extiende sobre todos los sitios que se encuentran en la frontera del agregado. La elección de  $p^*$  se hace a través de las propiedades multifractales (ver capítulo 1) de la distribución de probabilidades  $D(p_i)$ , y representa la probabilidad dominante en dicha distribución.

Una vez definida esta probabilidad característica, se identifican los sitios supervivientes como aquellos que tienen una probabilidad de crecer  $p \geq p^*$ . A continuación, empezando por estos sitios supervivientes, y siguiendo el orden en que los nodos se unieron al agregado, se van eliminando nodos hasta llegar a la semilla inicial. El resultado es el conjunto de ramas muertas (lugares en los cuales no se vuelve a producir crecimiento, o por lo menos la probabilidad de producirse es casi despreciable) del agregado inicial. La distribución del número de nodos que pertenecen a cada una de las ramas se comporta en forma de ley de potencia  $D(s) \sim s^{-\sigma}$  con  $\sigma = 1.5$ . Para introducir el tiempo, se asocia con cada nodo un número que da el orden en que ese nodo entró a formar parte del agregado. El tiempo asociado para cada rama, se define entonces como la diferencia entre el orden del último nodo que se adhirió a la rama y el del primero. La distribución de los tiempos así definidos es aproximadamente constante, lo que implica que el ruido asociado es  $1/f^2$ .

### 4.2.2 Avalanchas en el modelo de DB.

El otro modelo[PGL90a] consiste en pensar en términos de avalanchas. Cada vez que se añade una nueva partícula al agregado o se rompe un nuevo muelle, se reorganizan los potenciales o las tensiones. Estas reorganizaciones pueden ser pequeñas, cuando el nuevo elemento se encuentra dentro de la zona apantallada del agregado, o muy grandes, si este nuevo elemento hace que las puntas se hagan más finas, o genera una nueva punta a partir de otra zona externa del agregado. De esta forma, en el proceso de crecimiento habrá reorganizaciones (avalanchas) en todos los órdenes de magnitud, si bien limitado por el tamaño finito del agregado.

Para realizar el estudio nos concentraremos en el modelo de DB con  $\eta = 1$  [NPW84], ya que como se vió (capítulo 1) es equivalente al DLA, y en los cálculos es más sencillo que el MB al tener una sola variable sobre la que iterar.

### Autómata celular para el modelo de DB.

Los ingredientes principales del modelo son la ley de crecimiento elegida y la ecuación de Laplace que da el comportamiento del potencial electrostático  $\nabla^2 \phi = 0$  con las condiciones de contorno  $\phi = 0$  en el agregado y  $\phi = 1$  en el electrodo externo. Para resolverla aproximadamente en su forma discreta se pueden elegir gran variedad de métodos. El más sencillo puede ser el método de Jacobi (ver apéndice A), que llamaremos método I, y consiste en resolver de forma iterativa el sistema de ecuaciones. Esto se puede interpretar como la relajación del sistema de potenciales de forma difusiva:

$$\phi_i^{t+1} = \frac{1}{z} \sum_j \phi_j^t, \quad (4.8)$$

donde  $z$  es la coordinación de la red (en nuestro caso en que usaremos la red cuadrada  $z=4$ ), y la suma en  $j$  se extiende a los primeros vecinos del nodo  $i$ . La relajación parará cuando para todos los nodos se obtenga que  $|\phi_i^{t+1} - \phi_i^t| < \epsilon$ , siendo  $\epsilon$  una medida del error.

Otra forma de abordar el problema, de manera más parecida que el anterior a los autómatas celulares expuestos más arriba en este mismo capítulo, consiste en que  $\epsilon$  tome el significado de la pendiente crítica en el sistema y ajustar los potenciales con arreglo a un criterio parecido. Éste será el método II.

$$\phi_i^{t+1} = \frac{1}{z} \sum_j \phi_j^t, \text{ si } |\phi_i^t - \frac{1}{z} \sum_j \phi_j^t| > \epsilon \text{ y} \quad (4.9)$$

$$\phi_i^{t+1} = \phi_i^t, \text{ en otro caso.} \quad (4.10)$$

Ambos modelos tienen el mismo comportamiento para valores extremos de  $\epsilon$  (0 e  $\infty$ ). Para  $\epsilon=0$  es necesario un número infinito de pasos para relajar el sistema y conforme  $\epsilon$  aumenta el número de iteraciones necesario disminuye, no siendo necesario relajar el sistema cuando  $\epsilon$  toma el valor del potencial en el electrodo externo.

La ley de crecimiento será de forma aleatoria con probabilidad proporcional al campo eléctrico  $E_{ij} = |\phi_i - \phi_j|$ , donde  $i$  y  $j$  son nodos primeros vecinos de los cuales uno de ellos ya pertenece a agregado ( $\phi = 0$ ).

| $\epsilon$ | modelo | num. muestras |
|------------|--------|---------------|
| $10^{-1}$  | II     | 4             |
| $10^{-3}$  | II     | 3             |
| $10^{-4}$  | II     | 3             |
| $10^{-4}$  | I      | 6             |

Tabla 4.2: Número de muestras distintas consideradas.

### Procesos estáticos.

El crecimiento se comienza poniendo un punto de la red a potencial nulo y el electrodo externo se coloca en un círculo de radio 100 en unidades de la distancia entre primeros

vecinos alrededor de dicho punto. Se considera terminada la muestra cuando hay 5000 partículas o bien cuando el agregado llega a una distancia de 10 unidades de la red del electrodo externo.

Para 3000 partículas se analiza todo el perímetro (enlaces susceptibles de romperse), viendo en cada caso el tiempo (número de iteraciones) necesario para que la perturbación desaparezca. En la gráfica 4.2 se muestra que las distribuciones se ajustan bastante bien (por lo menos en un cierto rango) a un comportamiento exponencial  $D(t) \propto t^{-\tau}$  con  $\tau \sim 1.4$ , independientemente del modelo y de  $\epsilon$ . Cuando  $\epsilon$  se hace grande la distribución tiende a una delta centrada en el origen, ya que ninguno de los cambios posibles perturba el sistema. Esto es en cierta medida lo que ocurre para  $\epsilon = 10^{-1}$  en donde el número de pasos necesario para reestablecer el equilibrio es siempre muy pequeño.

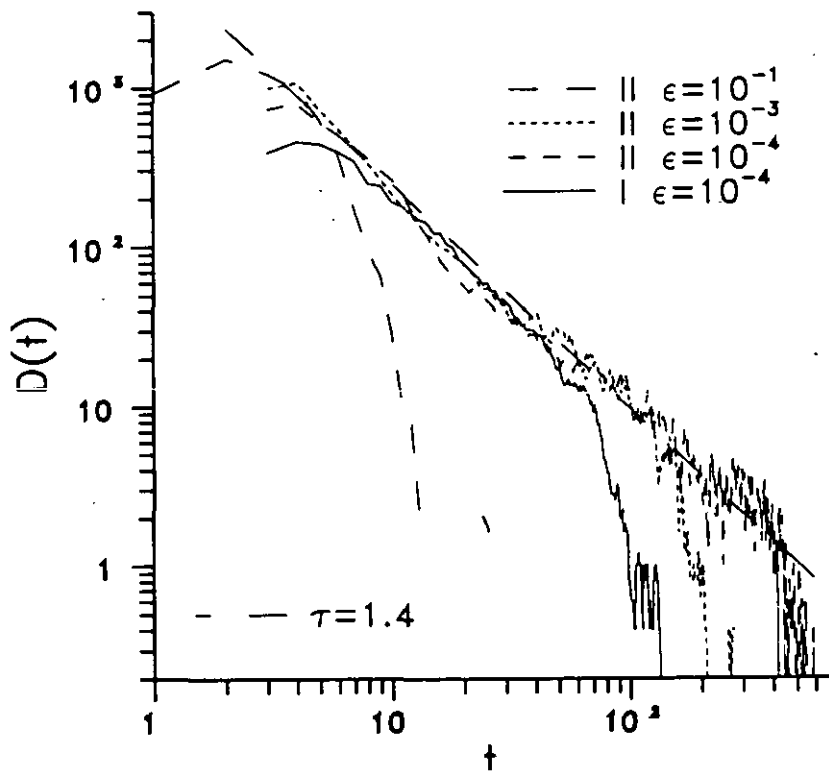


Figura 4.2: Distribución de tiempos de relajación  $D(t)$  para el caso estático y para distintos  $\epsilon$ .

Antes de continuar exponiendo resultados conviene comentar algo sobre la suavización de las distribuciones. Estas se obtienen en principio simplemente contando el número de veces que en el conjunto de muestras consideradas se produjo un determinado número de iteraciones. El resultado suele tener bastante ruido y ser muy irregular debido a que desgraciadamente no se pueden tener muchas muestras que suavicen los resultados, por ello se recurre a promediar sobre puntos vecinos ( $D'(i) = (1/(2n+1)) \sum_{j=-n}^n D(i+j)$ ). Para las distribuciones de tiempos presentadas aquí  $n = 2$  y para la de sitios perturbados se aplicó dos veces el procedimiento, una con  $n = 2$  y otra con  $n = 1$ . Para  $\epsilon = 10^{-1}$  no fué necesario aplicar la suavización en ningún caso. Las distribuciones de  $E$  que se verán más adelante,



al ser cantidades continuas, no necesitan suavizarse; lo que se hace es determinar el número de puntos de que se quiere conste la distribución. Las aquí expuestas tienen 200 puntos.

Para determinar el alcance espacial de la perturbación hay que tener en cuenta el modelo que se usa. El modelo I es equivalente a la ecuación de difusión con constante de difusión unidad  $\nabla^2 \phi = \partial \phi / \partial t$ , donde siempre hay difusión y siempre hay cambios en el potencial.

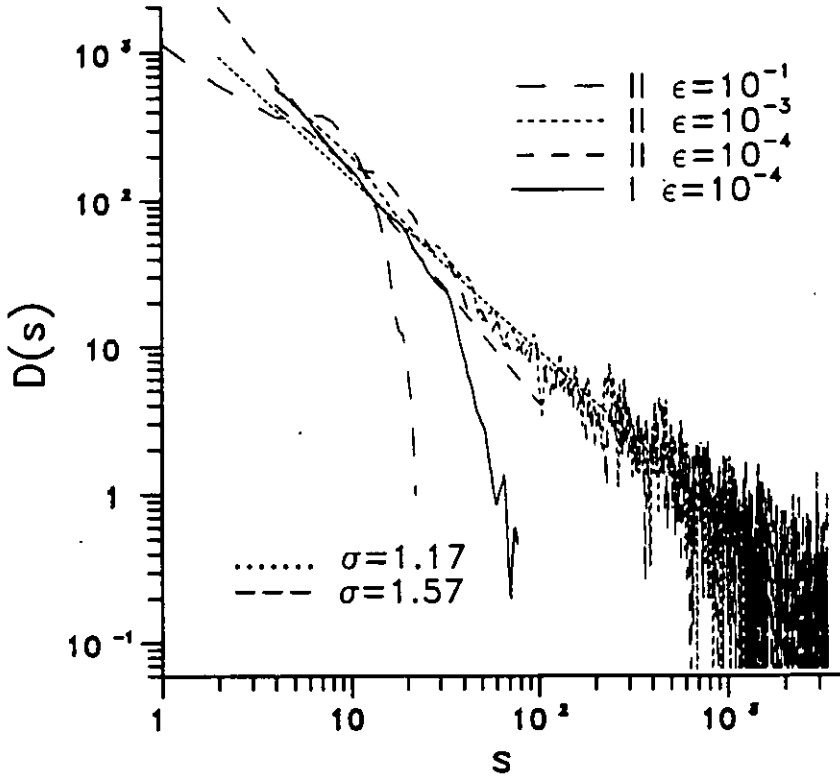


Figura 4.3: Distribución de número de sitios perturbados  $D(s)$  para el caso estático y para distintos  $\epsilon$ .

Por ello dimensionalmente se obtiene que hay que ver cuántos nodos cambian su valor por encima de  $\epsilon t$ , donde  $t$  es el tiempo en que se amortigua la perturbación. Es conocido que en este tipo de sistemas el alcance de la perturbación se comporta como un random walk, de donde  $r \sim \sqrt{t}$  y  $s \sim t$ , lo cual a su vez implica que  $D(s) \sim D(t)$ , también en forma de ley de potencia  $D(s) \propto s^{-\sigma}$ . El resultado se puede ver en la gráfica 4.3, en la cual se observa que  $\sigma \sim 1.6$ , lo cual parece que no se ajusta a lo expuesto anteriormente. Para que todo resulte consistente hay que estimar una cota mínima de error en  $\pm 0.1$ , que resulta razonable, dado que el número de datos, aunque es del orden de  $10^4$ , no resulta suficiente para suavizar las distribuciones.

Para el modelo II basta con ver en cada caso variaciones en el potencial por encima de  $\epsilon$  debido a que por la forma particular de relajar hay muchos nodos en los que el potencial no cambia. Si se hiciera de esta forma para el modelo I resultaría que una perturbación por pequeña que fuera afectaría a gran cantidad de los nodos de la red debido al proceso continuo de difusión. En este modelo también el comportamiento es de la forma  $D(s) \propto s^{-\sigma}$  con  $\sigma \sim 1.2$ . Si se supone que  $s \propto t^\alpha$  (ahora  $\alpha \neq 1$  ya que la propagación de la perturbación no

tiene que ser de tipo random walk), la consistencia de los resultados implica que  $(\sigma - 1)\alpha = r - 1$  con lo que se obtendría  $\alpha \sim 2$ . En la figura 4.4 se muestra el resultado de ajustar una

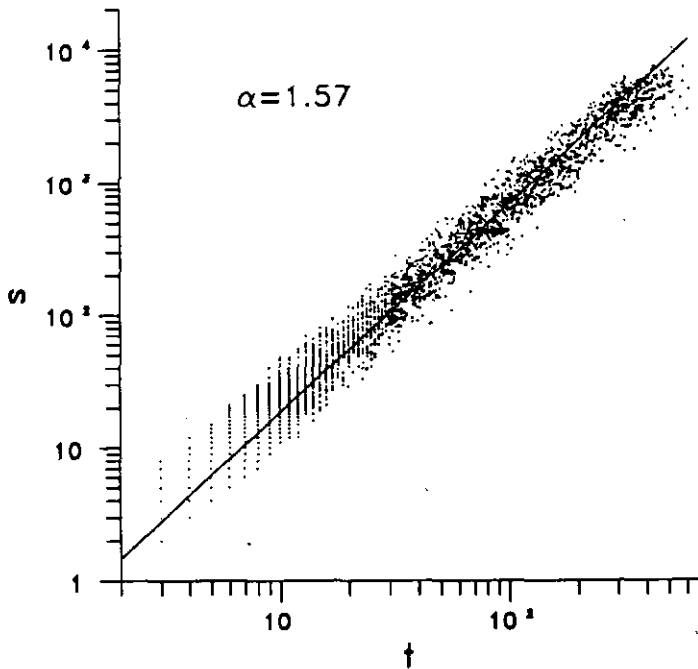


Figura 4.4: Relación entre tiempos de relajación y número de sitios perturbados en el modelo II y  $\epsilon = 10^{-4}$ .

recta a todos los valores de  $s$  y  $t$ . El resultado ( $\alpha \sim 1.6$ ) está bastante de acuerdo con lo anterior si consideramos que la ecuación que relaciona  $\alpha$ ,  $\sigma$  y  $r$  es muy sensible a cambios pequeños en los órdenes de magnitud que se manejan. Esta misma representación tiene mucha más dispersión conforme aumenta  $\epsilon$ , esperando que para  $\epsilon$  pequeño la correlación de los resultados aumente.

#### Procesos dinámicos.

Hasta aquí se han analizado los procesos en equilibrio, que si bien son importantes a la hora de poder definir cómo es la estructura, son los procesos dinámicos durante el crecimiento los que en realidad dan lugar a la misma. Durante el proceso de crecimiento se recogen el mismo tipo de datos que anteriormente para el caso estático, observando, como se verá más adelante, que también el comportamiento es en forma de leyes de potencias con exponentes distintos al caso anterior. Para evitar posibles efectos de frontera y de formación inicial del agregado se considerarán para realizar la estadística los puntos que entran a formar parte del mismo desde que éste tiene 500 partículas hasta 3000. La distribución de tiempos para la amortiguación de las perturbaciones se puede ver en la gráfica 4.5. Esta es aproximadamente constante (exponente muy próximo a 0) con bastantes oscilaciones para el modelo II.

En el modelo II la difusión se para siempre que el posible campo de potenciales es menor que  $\epsilon$  por lo que  $\epsilon$  viene a ser una cota mínima a los posibles valores de  $E$  (gráfica 4.6). Esto hace que los huecos que normalmente quedan en la estructura no se apantallen, aumentando

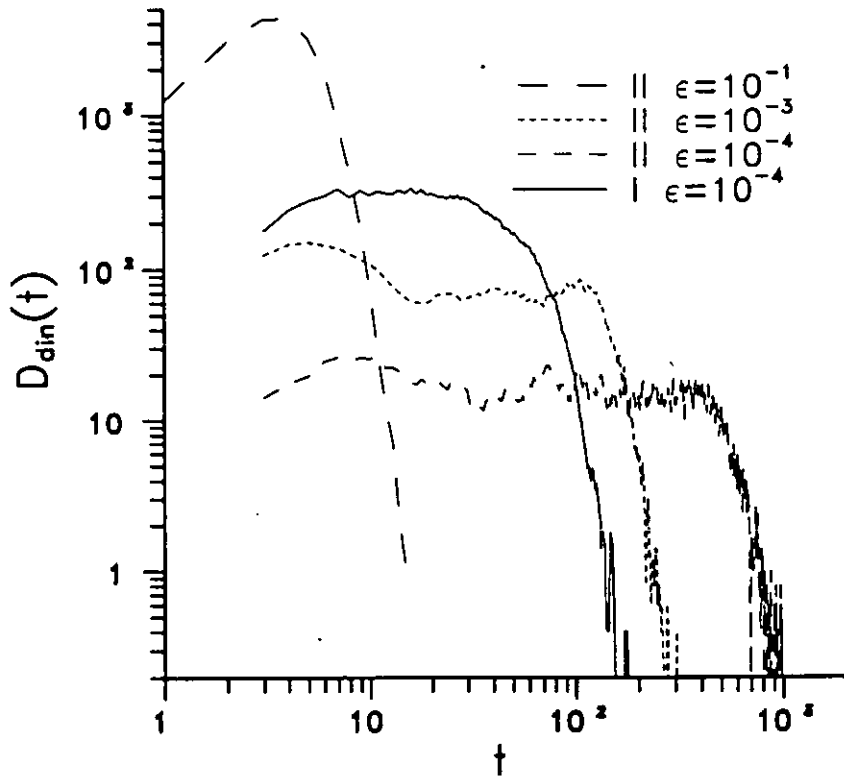


Figura 4.5: Distribución de tiempos de relajación  $D(t)$  para el caso dinámico y para distintos  $\epsilon$ .

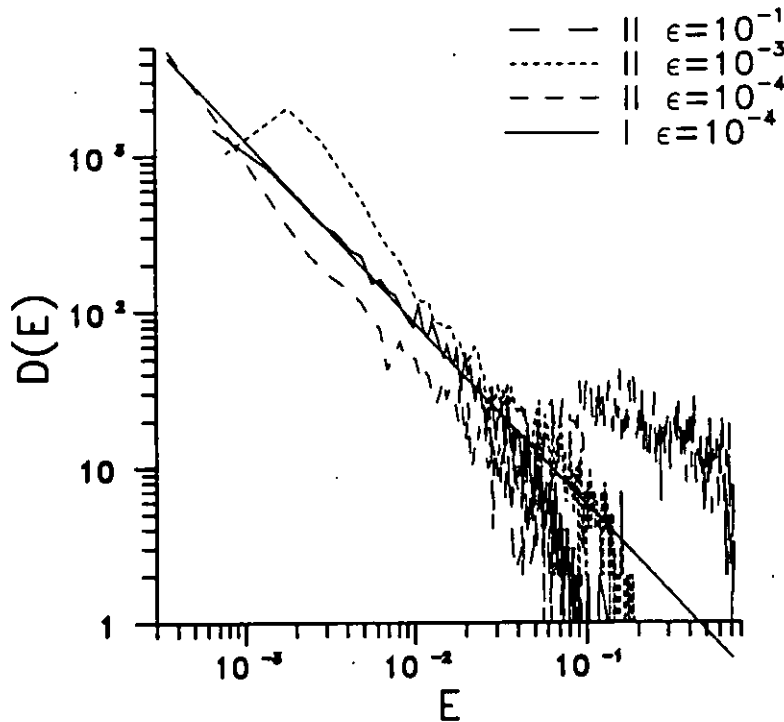


Figura 4.6: Distribución de campos de rotura  $D(E)$  para el caso estático y para distintos  $\epsilon$ .

la dimensión fractal. Por ejemplo, para  $\epsilon = 10^{-1}, 10^{-3}, 10^{-4}$ , las dimensiones fractales son 2, 1.9 y 1.8 respectivamente. Esto no ocurre en el modelo II en el cual al producirse siempre difusión los potenciales dentro de los fiordos de la estructura (ver por ejemplo la figura 1.5) pueden disminuir su valor.

La relación entre el comportamiento dinámico y el estático se hace a través de la ley de probabilidad de crecimiento que es en nuestro caso proporcional al campo  $E$ . En la gráfica 4.6 la recta representada es  $D(E) \propto E^{-1.17}$  con lo cual la distribución dinámica es aproximadamente constante para los valores de  $\epsilon$  que producen una estructura tipo DLA (gráfica 4.7).

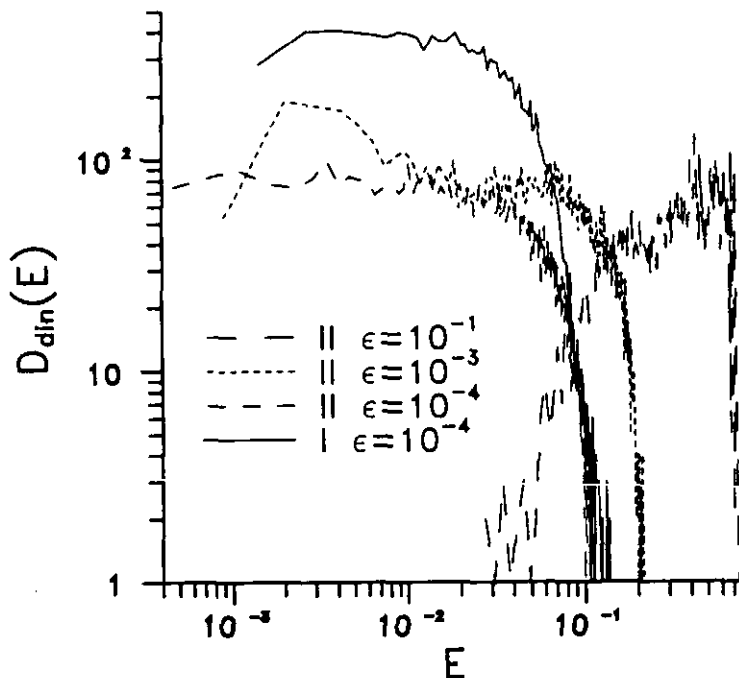


Figura 4.7: Distribución de campos de rotura  $D(E)$  para el caso dinámico y para distintos  $\epsilon$ .

Se puede ver ahora la correlación existente entre la rotura dieléctrica que se produce  $E$  y el tiempo que tarda el sistema en reestablecerse  $t$ . De la parte inferior de la figura 4.8, cuyos datos son en el modelo II y  $\epsilon = 10^{-4}$ , y dentro de la dispersión que hay, parece que esta correlación existe:  $E \propto t^{\tau'}$ . Esto, unido al comportamiento dinámico del campo eléctrico permite suponer que  $D_{\text{din}}(t) \propto t^{-\tau+\tau'}$ . Una forma más precisa de determinar  $\tau'$  es representar  $D_{\text{din}}(t)/D(t)$  frente a  $t$  (parte superior de la figura 4.8). En esta misma figura se ve que conforme  $\epsilon$  aumenta, sobre todo en el modelo II, el ruido en las medidas de las distribuciones aumenta. En estos casos ya no está tan claro que la correlación entre  $E$  y  $t$  sea mediante una ley de potencia sencilla como la expuesta anteriormente pudiéndose dar comportamientos más complicados debido a la forma de relajar del modelo.

Las relaciones dinámicas y comportamientos aquí obtenidos para  $t$  se pueden aplicar de forma análoga al número de sitios perturbados  $s$ , dando resultados razonables dentro de que para estimar bien las medidas espaciales serían necesarias más realizaciones. También es posible estimar los exponentes de forma indirecta vía el exponente  $\alpha$ .

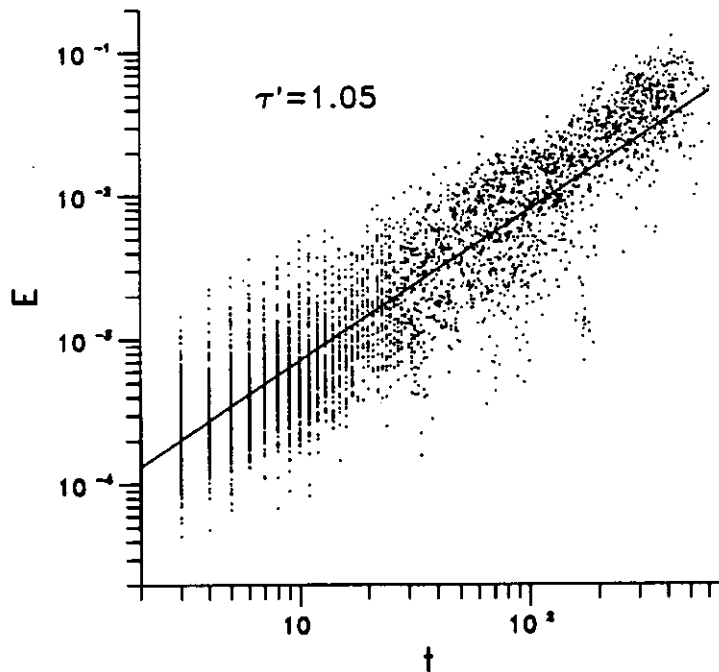
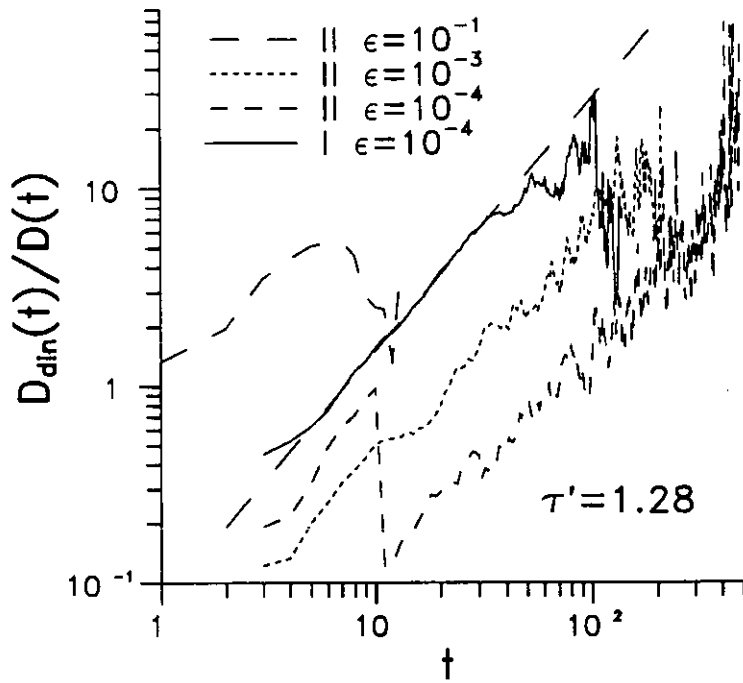


Figura 4.8: Relación entre campo eléctrico  $E$  y tiempos de relajación por dos métodos distintos.

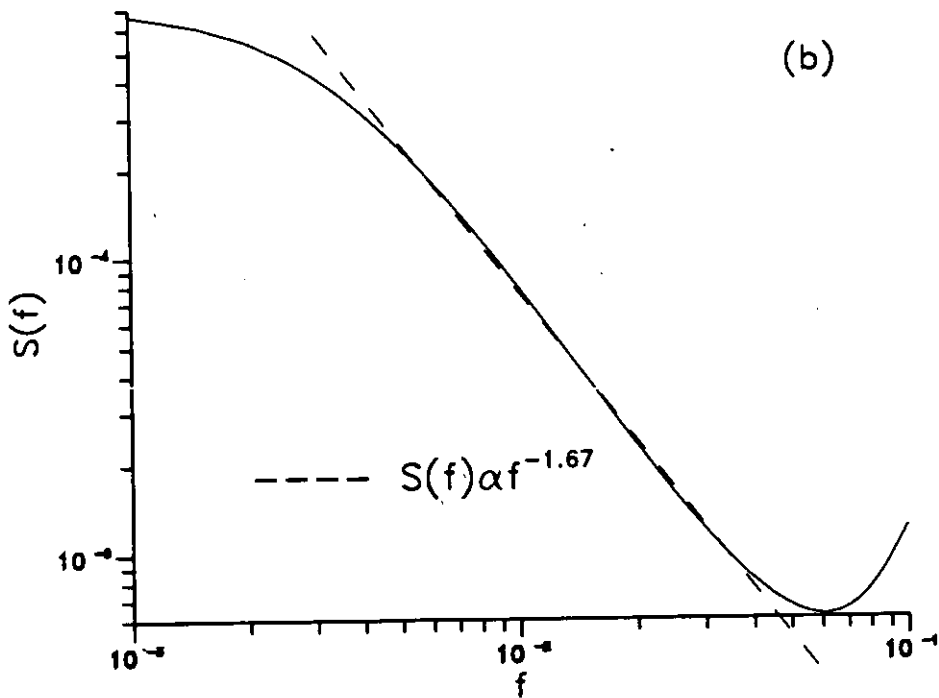
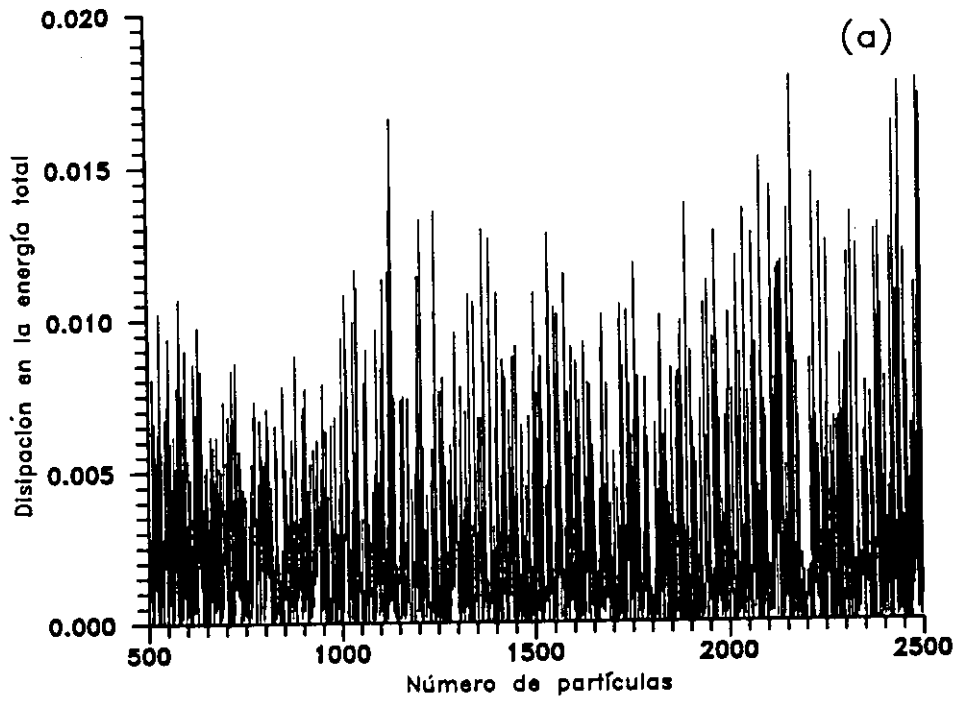


Figura 4.9: Disipación en la evolución del DB y su densidad espectral de potencia para una de las realizaciones con el modelo I y  $\epsilon = 10^{-4}$ .

### Otros modelos y geometrías.

Hemos hecho algún intento de extender estos cálculos a sistemas tridimensionales, sin embargo los resultados parecen ser muy sensibles al tamaño de la célula utilizado (los sistemas más grandes razonables son del orden de  $50 \times 50 \times 50$ ), resultando distribuciones de forma exponencial que enmascaran el posible comportamiento en forma de ley de potencia.

Otra posibilidad interesante consiste en estudiar la dependencia con la ley de rotura utilizada (dependencia con  $\eta$ ), lo cual se puede llevar a cabo en el futuro, si bien debido a que para  $\eta \geq 2$  el número de puntos en la frontera es mucho menor son necesarias muchas más muestras para poder conseguir estadísticas razonables.

### 4.2.3 Ruido y disipación.

Una magnitud que en principio es independiente del método utilizado para relajar el sistema (siempre que se haga *suficientemente* bien), es la disipación producida en todo el sistema al añadir una nueva partícula al agregado. Ahora el tiempo vuelve a recuperar su significado original asociado al proceso de crecimiento y no de difusión. En la figura 4.9(a) se muestra este proceso para una de las muestras crecidas con el modelo I y  $\epsilon = 10^{-4}$ . De ésta se puede obtener mediante el método de máxima entropía [PFTV86] la densidad espectral de potencia  $S(f)$  tal y como se muestra en la gráfica 4.9. El comportamiento resultante es en forma de ley de potencia, de donde nuestro ruido es aproximadamente de tipo  $1/f^{1.7}$ .

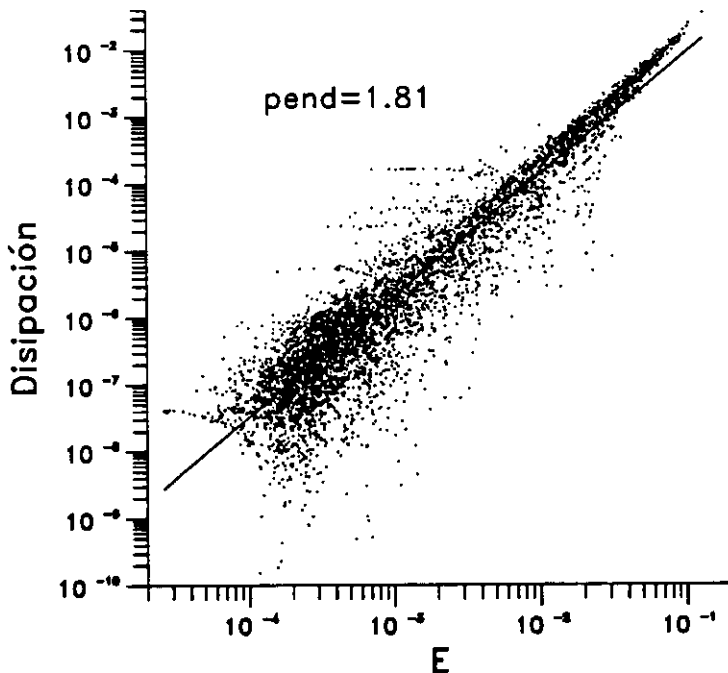


Figura 4.10: Relación entre campo eléctrico y disipación.

Este resultado muestra que de alguna manera es posible conectar la perturbación espacial, que está relacionada con la disipación, con el que se observe un tipo de ruido determinado. Una de las múltiples maneras puede ser el tratar de correlacionar el campo eléctrico con la variación de energía que se produce en el sistema (disipación) al eliminarlo. De la

figura 4.10 parece ser que la relación es aproximadamente cuadrática, de la misma manera que se esperaría en sistemas mucho más sencillos, por ejemplo en el caso en que no se relaja el sistema al equilibrio cada vez que se añade una nueva partícula.

Según lo expuesto anteriormente todavía hay un montón de cuestiones por resolver, pero los resultados son prometedores para poder encontrar en el futuro una relación entre los procesos fractales y los de ruido  $1/f$ , ya sea por la vía de la relación entre  $E$  y disipación o por otra relacionando otras distribuciones expuestas más arriba.



## Conclusiones.

En los capítulos anteriores se han estudiado tres tipos de fenómenos distintos: percolación elástica, fractura en medios elásticos y auto-organización en fenómenos dinámicos de crecimiento. Esto ha sido posible debido a que los mismos procedimientos numéricos son aplicables a los tres problemas.

En el capítulo 2 se vió cómo de la descripción microscópica de la red surge un nuevo tipo de diferenciación en el problema de la percolación. La universalidad (en el sentido del comportamiento de los distintos módulos elásticos, no del exponente crítico) no es la misma dependiendo de cómo se implementen las constantes elásticas, características del medio elástico continuo, en la red de muelles discreta que lo simula. El efecto es corroborado independientemente por métodos analíticos de campo medio (Teoría de Medio Efectivo) que muestran dar resultados bastante exactos. Este tipo fenomenología no ha sido observado en la percolación clásica o escalar, añadiendo mayor riqueza al problema vectorial.

En el capítulo 3 se ha estudiado con cierto detalle el modelo de Louis y Guinea para tratar problemas de fractura mediante una descripción simple de los medios elásticos. Ahondando en el modelo, se han visto distintas variantes, acercándose cada vez más a los materiales reales. En concreto, cuando un material se rompe hay multitud de efectos que entran en juego, lo que hace que la probabilidad que tiene un elemento microscópico de fallar sea una función, en general complicada, de la tensión local. Entonces se tienen varios regímenes de fractura que el sistema elige en función de las condiciones locales. En particular, para medios suficientemente grandes las mayores tensiones en la superficie de la fractura van a dominar en la función antes mencionada, dando lugar a estructuras que tienen forma casi lineal y se propagan muy rápidamente.

Finalmente, en el capítulo anterior se ha mostrado que fenómenos dinámicos que evolucionan fuera del equilibrio responden también a las hipótesis de auto-organización. Dentro de este marco es posible relacionar de forma sencilla distribuciones de perturbaciones estáticas y dinámicas debido a su comportamiento genérico en forma de ley de potencia. Es resaltable también el que la disipación de energía en el sistema durante el proceso de crecimiento posea un ruido característico que estará relacionado con su evolución y por tanto de alguna manera con la dimensión fractal observada.

# Referencias

- [ABM88] C. Atkinson, J. M. Bastero, y J. M. Martínez-Esnaola. *Eng. Fracture Mech.*, **31**, 637, (1988). y referencias allí citadas.
- [ACdL86] C. Altamirano, A. Coniglio, y F. di Liberto. *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 1016, (1986).
- [AF89] A. Aharony y J. Feder, editores. *Fractals in Physics. Essays in honour of Benoit B. Mandelbrot*, North Holland, Amsterdam, (1989). vol. 38 de *Physica D*.
- [AM81] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Holt-Saunders, Tokio, (1981).
- [AS54] M. Abramowitz y I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York, (1954).
- [AS88] S. Arbabi y M. Sahimi. *J. Phys. A*, **21**, L863, (1988).
- [ATS90] P. Alstrøm, P. A. Trunfio, y H. E. Stanley. *Phys. Rev. A*, **41**, 3403, (1990).
- [Bar83] M. N. Barber. En C. Domb y J. L. Lebowitz, editores, *Phase Transitions and Critical Phenomena vol 7*, pag. 145, Academic, New York, (1983).
- [BBRT85] R. C. Ball, R. M. Brady, G. Rossi, y B. R. Thompson. *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 1406, (1985).
- [BCC89] P. Bak, K. Chen, y M. Creutz. *Nature*, **342**, 780, (1989).
- [Ben84] L. Benguigui. *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 2028, (1984).
- [Ber85] D. J. Bergman. *Phys. Rev. B*, **31**, 1696, (1985).
- [Ber86] D. J. Bergman. *Phys. Rev. B*, **33**, 2013, (1986).
- [BH54] M. Born y K. Huang. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Oxford University Press, New York, (1954).
- [BH88] Gh. G. Batrouni y A. Hansen. *J. Stat. Phys.*, **52**, 747, (1988).
- [BHN86] Gh. G. Batrouni, A. Hansen, y M. Nelkin. *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 1336, (1986).
- [BK84] D. J. Bergman y Y. Kantor. *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 511, (1984).

- [BKL\*86] D. Bensimon, L. P. Kadanoff, Sh. Liang, B. I. Shraiman, y C. Tang. *Rev. Mod. Phys.*, **58**, 977, (1986).
- [BL88] D. Burton y C. J. Lambert. *Europhys. Lett.*, **5**, 461, (1988).
- [BS88] P. D. Beale y D. J. Srolovitz. *Phys. Rev. B*, **37**, 5500, (1988).
- [BTW87] P. Bak, C. Tang, y K. Wiesenfeld. *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 381, (1987).
- [BTW88] P. Bak, C. Tang, y K. Wiesenfeld. *Phys. Rev. A*, **38**, 364, (1988).
- [BW90] K. L. Babcock y R. M. Westervelt. *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 2168, (1990).
- [CCGS90] J. M. Carlson, T. J. Chayes, E. R. Grannan, y G. H. Swindle. *Phys. Rev. A*, **42**, 2467, (1990).
- [CL89] J. M. Carlson y J. S. Langer. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 2632, (1989).
- [CRMF89] Z. Cheng, S. Redner, P. Meakin, y F. Family. *Phys. Rev. A*, **40**, 5922, (1989).
- [CS90] X. Che y H. Suhl. *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 1670, (1990).
- [dAHR89] L. de Arcangelis, A. Hansen, H. J. Herrmann, y S. Roux. *Phys. Rev. B*, **40**, 877, (1989).
- [dARH85] L. de Arcangelis, S. Redner, y H. J. Herrmann. *J. Phys. (Paris) Lett.*, **46**, L585, (1985).
- [Dew85] A. K. Dewdney. *Investigación y Ciencia*, **Oct**, 92, (1985).
- [dGA54] P. N. de G. Allen. *Relaxation Methods*. McGraw-Hill, New York, (1954).
- [Dha90] D. Dhar. *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 1613, (1990).
- [DHZ85] D. Deptuck, J. P. Harrison, y P. Zawadzki. *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 913, (1985).
- [DQR\*89] B. Dubuc, J. F. Quiniou, C. Roques-Carmes, C. Tricot, y S. W. Zucker. *Phys. Rev. A*, **39**, 1500, (1989).
- [DR89] D. Dhar y R. Ramaswamy. *Phys. Rev. Lett.*, **63**, 1659, (1989).
- [DT88] A. R. Day y M. F. Thorpe. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2502, (1988).
- [DTT86] A. R. Day, R. R. Tremblay, y A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 2501, (1986).
- [DV82] B. Derrida y J. Vannimenus. *J. Phys. A*, **15**, L557, (1982).
- [DZVS84] B. Derrida, J. G. Zabolitzky, J. Vannimenus, y D. Stauffer. *J. Stat. Phys.*, **36**, 31, (1984).
- [Efr87] A. Efros. *Física y Geometría del Desorden*. Mir, Moscú, (1987).
- [EGS88] R. G. Edwards, J. Goodman, y A. D. Sokal. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 1333, (1988).

- [Fed88] J. Feder. *Fractals*. Plenum, New York, (1988).
- [Fen85] S. Feng. *Phys. Rev. B*, **32**, 510, (1985).
- [FHMJ86] J. Feder, E. L. Hinrichsen, K. J. Måløy, y T. Jøssang. En A. Aharony y J. Feder, editores, *Fractals in Physics. Essays in honour of Benoit B. Mandelbrot*, pag. 104, North Holland, Amsterdam, (1986). vol. 38 de *Physica D*.
- [FS84] S. Feng y P. N. Sen. *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 216, (1984).
- [FTG85] S. Feng, M. F. Thorpe, y E. Garboczi. *Phys. Rev. B*, **31**, 276, (1985).
- [Gar88] E. J. Garboczi. *Phys. Rev. B*, **37**, 318, (1988).
- [GGL88a] R. Garcia-Molina, F. Guinea, y E. Louis. *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 124, (1988).
- [GGL88b] R. Garcia-Molina, F. Guinea, y E. Louis. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2503, (1988).
- [GLS90] G. Grinstein, D.-H. Lee, y S. Sachdev. *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 1927, (1990).
- [GR56] B. Gutenberg y C. F. Richter. *Ann. Geofis.*, **9**, 1, (1956).
- [GT85] E. J. Garboczi y M. F. Thorpe. *Phys. Rev. B*, **31**, 7276, (1985).
- [GT86] E. J. Garboczi y M. F. Thorpe. *Phys. Rev. B*, **33**, 3289, (1986).
- [HDV84] H. J. Herrmann, B. Derrida, y J. Vannimenus. *Phys. Rev. B*, **30**, 4080, (1984).
- [Her88] Hans J. Herrmann. Simulations numeriques. en la École de Physique de la Matière condensée *Methodes de la Mecanique Statistique*. Beg-Rohu. Junio 1988.
- [Her89] H. J. Herrmann. *Physica D*, **38**, 192, (1989).
- [HHR89a] H. J. Herrmann, A. Hansen, y S. Roux. *Phys. Rev. B*, **39**, 637, (1989).
- [HHR89b] E. L. Hinrichsen, A. Hansen, y S. Roux. *Europhys. Lett.*, **8**, 1, (1989).
- [HJK\*86] T. C. Halsey, M. H. Jensen, L. P. Kadanoff, I. Procaccia, y B. I. Shraiman. *Phys. Rev. A*, **33**, 1141, (1986).
- [HK89] T. Hwa y M. Kardar. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 1813, (1989).
- [HKdA89] H. J. Herrmann, J. Kertész, y L. de Arcangelis. *Europhys. Lett.*, **10**, 147, (1989).
- [HR88] A. Hansen y S. Roux. *J. Stat. Phys.*, **53**, 759, (1988).
- [HR89] A. Hansen y S. Roux. *Phys. Rev. B*, **40**, 749, (1989).
- [HS89] G. N. Hassold y D. J. Srolovitz. *Phys. Rev. B*, **39**, 9273, (1989).
- [HSK\*90] G. A. Hald, D. H. Solina, D. T. Keane, W. J. Haag, P. M. Horn, y G. Grinstein. *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 1120, (1990).

- [Jan90] I. M. Jánosi. *Phys. Rev. A*, **42**, 769, (1990).
- [JB87] R. Jullien y R. Botet. *Aggregation and Fractal Aggregates*. World Scientific, Singapore, (1987).
- [JH89] I. M. Jánosi y V. K. Horváth. *Phys. Rev. A*, **40**, 5232, (1989).
- [JLN89] H. M. Jaeger, C. Liu, y S. R. Nagel. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 40, (1989).
- [KBR\*88] B. Kahng, G. G. Batrouni, S. Redner, L. de Arcangelis, y H. J. Herrmann. *Phys. Rev. B*, **37**, 7625, (1988). y referencias allí citadas.
- [KDR\*88] D. Kandel, E. Domany, D. Ron, A. Brandt, y E. Loh. *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 1591, (1988).
- [Kea66] N. Keating. *Phys. Rev.*, **145**, 637, (1966).
- [KNWZ89] L. P. Kadanoff, S. R. Nagel, L. Wu, y S. Zhou. *Phys. Rev. A*, **39**, 6524, (1989).
- [KW84] Y. Kantor y I. Webman. *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1891, (1984).
- [Lan80] J. S. Langer. *Rev. Mod. Phys.*, **52**, 1, (1980).
- [LG87] E. Louis y F. Guinea. *Europhys. Lett.*, **3**, 871, (1987).
- [LG89] E. Louis y F. Guinea. *Physica D*, **38**, 235, (1989).
- [LGG\*88] E. Louis, R. Garcia-Molina, F. Guinea, P. Meakin, y L. Sander. Fracture propagation in an elastic medium including central and bond bending forces. en la 9th. General conference of the Condensed Matter Division of the EPS. Nice 6-9 de Marzo. (1988).
- [LGL88] M. P. López-Sancho, F. Guinea, y E. Louis. *J. Phys. A*, **21**, L1079, (1988).
- [LL70] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Theory of Elasticity*. Pergamon Press, Oxford, (1970).
- [LP83] R. M. Latanision y J. R. Pickens, editores. *Atomistics of Fracture*, NATO Series Plenum, New York, (1983).
- [LT87] M.-A. Lemieux y A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. B*, **36**, 1463, (1987).
- [Man82] Benoit B. Mandelbrot. *The fractal Geometry of Nature*. Freeman, New York, (1982).
- [MCSW86] P. Meakin, A. Coniglio, H. E. Stanley, y T. A. Witten. *Phys. Rev. A*, **34**, 3325, (1986).
- [Mea87a] P. Meakin. *Thin Solid Films*, **151**, 165, (1987).
- [Mea87b] Paul Meakin. *Phys. Rev. A*, **36**, 332, (1987).
- [MLS\*89] P. Meakin, G. Li, L. M. Sander, E. Louis, y F. Guinea. *J. Phys. A*, **22**, 1393, (1989).

- [Mol88] Rafael Garcia Molina. *I Seminario del G.E.C.*, 1, 7, (1988).
- [Mus53] N. I. Muskhelishvili. *Some basic problems of the mathematical theory of elasticity*. P. Noordhoff, Groningen-Holland, (1953).
- [MW90] B. McNamara y K. Wiesenfeld. *Phys. Rev. A*, 41, 1867, (1990).
- [Nak90] H. Nakanishi. *Phys. Rev. A*, 41, 7086, (1990).
- [NGL88] L. Navas, F. Guinea, y E. Louis. *J. Phys. A*, 21, L301, (1988). debido a un error, en la publicación aparece como primer autor L. Fernandez mientras que los trabajos fueron realizados en parte por Lucio Navas.
- [Now86] W. Nowacki. *Theory of Asymmetric Elasticity*. Pergamon, Oxford, (1986).
- [NPW84] L. Niemeyer, L. Pietronero, y H. J. Wiesmann. *Phys. Rev. Lett.*, 52, 1033, (1984).
- [Per87] Oscar A. Pla Peralonso. *Simulación de la fractura de materiales por medio de una red triangular. Dimensión fractal. Anisotropía*. Tesina, Universidad Autónoma de Madrid, Marzo 1987.
- [PFTV86] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teutolsky, y W. T. Vetterling. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, Cambridge, (1986).
- [PGGL90] O. Pla, R. Garcia-Molina, F. Guinea, y E. Louis. *Phys. Rev. B*, 41, 11449, (1990).
- [PGL90a] O. Pla, F. Guinea, y E. Louis. Self-organized criticality in laplacian growth. *Phys. Rev. A Rapid Commun.* en prensa (15 Nov.). (1990).
- [PGL\*90b] O. Pla, F. Guinea, E. Louis, G. Li, L. M. Sander, H. Yan, y P. Meakin. *Phys. Rev. A*, 42, 3670, (1990).
- [Pie86] D. A. Pierre. *Optimization theory with applications*. Dover Publications Inc., New York, (1986).
- [RH88] S. Roux y A. Hansen. *Europhys. Lett.*, 6, 301, (1988).
- [RHG88] S. Roux, A. Hansen, y E. Guyon. *Phys. Rev. Lett.*, 61, 2501, (1988).
- [Rou87] Stéphane Roux. *J. Stat. Phys.*, 48, 201, (1987).
- [SA89] M. Sahimi y S. Arbabi. *Phys. Rev. B*, 40, 4975, (1989).
- [Sah85] M. Sahimi. *J. Phys. A*, 18, 3597, (1985).
- [SG85] M. Sahimi y J. D. Goddard. *Phys. Rev. B*, 32, 1869, (1985).
- [SG86] M. Sahimi y J. D. Goddard. *Phys. Rev. B*, 33, 7848, (1986).
- [SLM87] J. Sofo, J. Lorenzana, y E. N. Martinez. *Phys. Rev. B*, 36, 3960, (1987).

- [SS89] A. Sornette y D. Sornette. *Europhys. Lett.*, **9**, 197, (1989).
- [Sta85] D. Stauffer. *Introduction to Percolation Theory*. Taylor & Francis, London and Philadelphia, (1985).
- [TB88a] C. Tang y P. Bak. *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 2347, (1988).
- [TB88b] C. Tang y P. Bak. *J. Stat. Phys.*, **51**, 797, (1988).
- [TG87] M. F. Thorpe y E. J. Garboczi. *Phys. Rev. B*, **35**, 8579, (1987).
- [TS85] L. A. Turkevich y H. Scher. *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 1026, (1985).
- [Tyv88] S. Tyč. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2500, (1988).
- [VF89] K. V. Vasavada y J. H. Freed. *Computers in Phys.*, **SEP/OCT**, 61, (1989).
- [Wic89] T. Wicsek. *Fractal Growth Phenomena*. World Scientific, Singapore, (1989).
- [WS81] T. A. Witten y L. M. Sander. *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 1400, (1981).
- [WS83] T. A. Witten y L. M. Sander. *Phys. Rev. B*, **27**, 5686, (1983).
- [WTB89] K. Wiesenfeld, C. Tang, y P. Bak. *J. Stat. Phys.*, **54**, 1441, (1989).
- [YLS89] H. Yan, G. Li, y L. M. Sander. *Europhys. Lett.*, **10**, 7, (1989).
- [Zha89] Y. Zhang. *Phys. Rev. Lett.*, **63**, 470, (1989).

## Apéndice A

# Métodos numéricos de cálculo.

En este apéndice se describen los métodos de cálculo que se han utilizado para obtener la mayor parte de los resultados que se presentan en este trabajo. En concreto se trata aquí de cómo resolver de forma aproximada un sistema de ecuaciones lineales con un número grande de incógnitas:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}. \quad (\text{A.1})$$

Este problema es análogo a muchos problemas de optimización en los que se busca encontrar el mínimo de una cierta función  $f(\mathbf{x})$  de  $n$  variables donde  $\mathbf{x} \equiv (x_1, \dots, x_n)$ . Puesto que  $f(\mathbf{x})$  se puede poner como:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots \\ &\approx c - \mathbf{bx} + \frac{1}{2} \mathbf{xAx}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

la condición de que haya un punto extremo ( $\nabla f = 0$ ) implica la ecuación A.1.

La elección de los métodos se ha hecho teniendo en cuenta criterios principalmente de fiabilidad, pero también, y esto se discute más adelante, de relevancia del cálculo que se pretendía realizar. El orden en que se exponen no es el mismo del de los capítulos, si no que va de menor a mayor complejidad del método. En cada uno se comenta en qué parte del trabajo se usó, así como en el trabajo se hacen constantes referencias a este apéndice.

La exposición de los métodos de cálculo no es matemáticamente rigurosa, sino que más bien está pensada para fines prácticos. En la bibliografía se pueden encontrar teoremas y demostraciones formales que conducen a los mismos resultados que aquí se obtienen de forma más intuitiva.

Aquellos métodos que no se han usado en el trabajo no se describen en detalle, remitiéndose a las referencias para una mayor explicación. Los métodos no se comparan entre sí (en lo que a este apéndice se refiere). Para una comparación de los métodos y también para su aplicación al cálculo de densidades de estados ver [LT87].

### A.1 Métodos exactos.

Algoritmos que dan la solución exacta de la expresión A.1 se conocen y se usan desde hace tiempo. Se basan en su mayoría en transformar la matriz  $\mathbf{A}$  operando sobre sus elementos,



para convertirla en una matriz semejante de solución más sencilla, o en un producto de matrices ([PFTV86], capítulo 1). Los procedimientos para estas transformaciones requieren un número grande de operaciones entre los elementos de matriz, por lo que si  $A$  es de dimensión elevada, la precisión necesaria para que al final del proceso el resultado sea de verdad equivalente a la matriz de partida ha de ser bastante grande. Este hecho, unido a que algunas veces la matriz  $A$  está cerca de ser singular ( $\det(A) \approx 0$ ) y del gran número de operaciones que requiere el proceso, hace que en la práctica sea prohibitivo y arriesgado aplicar estos métodos en sistemas grandes.

En algunos casos, y para sistemas en los cuales, o bien el problema inicial se plantea en una red, o las ecuaciones se pueden implementar en una red, es posible encontrar exactamente algunas magnitudes que se obtienen a partir de la solución exacta propiamente dicha. Por ejemplo, para el problema de la percolación y la conductividad discutido en el capítulo 1 se puede, tomando una cadena de longitud finita  $L$  ir añadiendo cadenas de la misma longitud en paralelo como si se formara una bufanda. En cada paso una matriz de dimensión  $L \times L$  da las variaciones al añadir el nuevo elemento. Así hasta que la cinta tiene una longitud mucho mayor que  $L$ , pudiéndose deducir de la Matriz de Transferencia, que es cómo se denomina el método, la intensidad eléctrica total que atraviesa el sistema sin conocer la que existe en cada resistencia en concreto [DV82,DZVS84].

## A.2 Métodos iterativos.

Los métodos iterativos permiten tratar matrices de mayor dimensión que los métodos exactos, aunque la solución sea aproximada. Un método iterativo consiste en repetir un determinado procedimiento un número finito de veces (iteraciones), hasta que el error cometido es menor que un determinado valor, el cual determina la precisión que se desea alcanzar. Tienen la ventaja sobre los métodos exactos que en cada iteración utilizan siempre la misma matriz  $A$ , y por tanto, aunque el número de operaciones que se realizan pueda ser grande, no existe casi propagación de errores.

### A.2.1 Jacobi y Gauss-Siedel.

Dentro de los métodos de relajación el método de Jacobi es el más sencillo y con él se comparan y derivan muchos de los usados actualmente [PFTV86,dGA54]. El método consiste en plantear el sistema de la forma:

$$x'_i = \frac{1}{A_{ii}} \left( b_i - \sum_{j(j \neq i)} A_{ij} x_j \right), \quad (\text{A.3})$$

aplicándose hasta que una cierta función de  $x' - x$ , que puede ser el módulo o el cuadrado del módulo, el máximo de los componentes del vector, o cualquier otro criterio, es menor que un cierto valor que determina la precisión del cálculo. Se puede ver cómo si en cada paso un punto se da cuenta de lo que ocurrió en los puntos que con él se relacionan (generalmente sus primeros vecinos) en el paso anterior. A pesar que este método ya casi no se usa debido a que su convergencia es bastante lenta (en la mayoría de los casos lógicamente se requiere que el error sea bastante pequeño), es bastante sencillo de programar y en casos en que

no es necesario resolver el sistema con gran precisión (ver capítulo 3) puede resultar más conveniente que otros métodos mucho más exactos.

A veces resulta que el sistema tiene inestabilidades o que en determinados puntos  $x_i$  la solución oscila debido a que el método de Jacobi no tiene en cuenta el valor que se obtuvo en el punto en el paso anterior<sup>1</sup>. Por esto se puede introducir la solución encontrada en el paso anterior con un peso  $\omega$  que hace que el sistema converja. Esta convergencia se puede acelerar utilizando los valores de  $x$  que se han calculado en el mismo paso de iteración, dando lugar al método de sobrerelajación:

$$x'_i = \omega x_i + (1 - \omega) \frac{1}{A_{ii}} \left( b_i - \sum_{j(j<i)} A_{ij} x'_j - \sum_{j(j>i)} A_{ij} x_j \right), \quad (\text{A.4})$$

donde  $0 < \omega < 2$ , existiendo métodos que determinan el valor óptimo de  $\omega$  [PFTV86]. Si  $\omega = 0$  el método se denomina de Gauss-Siedel, análogo al de Jacobi, pero usando los valores ya calculados del nuevo vector. Aquí el orden en que se plantean las ecuaciones puede en algunos casos mejorar algo la convergencia, sin embargo el resolver las ecuaciones de forma aleatoria, o en varios sub-vectores generalmente trae problemas adicionales a la hora de programar. La estimación de la convergencia para la sobrerelajación se realiza de manera análoga al método de Jacobi.

### A.2.2 Gradientes Conjugados.

El método de Gradientes Conjugados (GC) es menos intuitivo que los expuestos anteriormente, sin embargo es mucho más eficaz a la hora de resolver aproximadamente cierto tipo de sistemas que, usando los métodos descritos en el punto anterior, presentan una convergencia muy lenta hacia la solución del sistema. Este puede ser el caso de la percolación expuesto en el capítulo 2: cerca de la transición de fase, el *critical slowing down* o amortiguamiento crítico intrínseco al problema plantea serias dificultades. La exposición que sigue está sacada de [Her88], pero se pueden encontrar variaciones y ampliaciones en [PFTV86, VF89] y también, aunque de forma más matemática, en [Pie86].

Partiendo de la ecuación A.1, y de una solución prueba de la misma,  $x_0$ , se puede expresar el error cometido como combinación lineal de una cierta base  $v$  de vectores  $n$ -dimensionales, donde  $n$  es la dimensión de la matriz  $A$ .

$$x - x_0 = \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k v_k. \quad (\text{A.5})$$

Si los vectores  $v$  fueran ortogonales entre sí,  $\alpha_k = \frac{v_k(x-x_0)}{v_k v_k}$ , pero  $x$  es precisamente nuestra incógnita, para que ésta desaparezca de la expresión de  $\alpha$ , es preciso que la base  $v$  sea  $A$  conjugada:

$$v_i A v_j = 0 \text{ con } i \neq j, \quad (\text{A.6})$$

y entonces:

$$\alpha_k = \frac{v_k A(x - x_0)}{v_k A v_k} = \frac{v_k (b - A x_0)}{v_k A v_k} = \frac{v_k g_0}{v_k A v_k}. \quad (\text{A.7})$$

<sup>1</sup>Esto ocurre en el problema de la Fractura Mecánica del capítulo 3, en el cual, al cabo de unos pocos enlaces rotos el método de Jacobi es incapaz de encontrar una solución estable y diverge

El vector  $\mathbf{g}_0 \equiv \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$  es el gradiente de A.2 con signo negativo en el punto  $\mathbf{x}_0$ , es decir, da la dirección de la máxima variación de la función cuadrática A.2 hacia el mínimo. Los vectores  $\mathbf{v}$  se pueden escoger a partir de los  $\mathbf{g}$  siguiendo un procedimiento de ortogonalización parecido al de Gramm-Schmidt de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_0 &= \mathbf{g}_0, \\ \mathbf{v}_{k+1} &= \mathbf{g}_{k+1} + \beta_k \mathbf{v}_k. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Donde partiendo de una solución prueba  $\mathbf{x}_0$ , se generan los siguientes de forma consecutiva, cumpliéndose A.6 y además  $\mathbf{g}_i \mathbf{g}_j = 0$  para  $i \neq j$ .

Con estas definiciones el proceso se puede resumir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k, \\ \mathbf{g}_{k+1} &= \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_{k+1} \quad ( = \mathbf{g}_k + \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{v}_k ), \\ \beta_k &= \frac{\mathbf{g}_{k+1} \mathbf{g}_{k+1}}{\mathbf{g}_k \mathbf{g}_k}, \\ \mathbf{v}_{k+1} &= \mathbf{g}_{k+1} + \beta_k \mathbf{v}_k, \\ \alpha_{k+1} &= \frac{\mathbf{v}_{k+1} \mathbf{g}_{k+1}}{\mathbf{v}_{k+1} \mathbf{A}\mathbf{v}_{k+1}} \quad ( = \frac{\mathbf{v}_{k+1} \mathbf{g}_0}{\mathbf{v}_{k+1} \mathbf{A}\mathbf{v}_{k+1}} ). \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Se repiten los pasos del proceso anterior hasta que el error, que se define por medio de  $\mathbf{g}_k \mathbf{g}_k$ , sea menor que un determinado valor previamente fijado. Este método asegura que como máximo en  $n$  pasos se alcanza la solución del sistema, ya que el espacio en que se mueven los vectores es de dimensión  $n$ ; pero en la práctica la solución se alcanza mucho más rápidamente.

Cuando la matriz  $\mathbf{A}$  define las ecuaciones de equilibrio en una malla, como es el caso de este trabajo, la evaluación de la expresión  $\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$  consiste simplemente en aplicar una vez un procedimiento parecido al de Jacobi a toda la malla. Para evaluar  $\mathbf{A}\mathbf{x}$ , es exactamente igual, cambiando de signo, y quitando los elementos fijos de los bordes (se puede ver cómo si se pusieran condiciones de contorno libres  $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ ).

### A.3 Otros métodos

Recientemente han aparecido métodos nuevos, o aplicaciones de métodos ya conocidos con anterioridad, para tratar de resolver principalmente problemas complejos como es el caso de la percolación y el *critical slowing down* característico, y poder acceder a zonas lo más cercanas posibles a la transición.

Mencionaré dos métodos, en los cuales no soy ni mucho menos un experto, ni conozco a fondo su funcionamiento, pero por los resultados que parecen obtener puede que en muchos problemas merezca la pena probar, a pesar de su aparente complejidad. El primero consiste en la aceleración por transformadas de Fourier [BHN86, BH88]. Se transforma Fourier la ecuación de partida y se aplica el método iterativo favorito: Jacobi, Gauss-Siedel, gradientes conjugados... El hacer transformada Fourier hace que los valores en los puntos se mezclen, no sólo con sus primeros vecinos sino con toda la red, dando cuenta de interacciones a más larga distancia, con lo que se acelera bastante la convergencia para sistemas sobre todo escalares. Para sistemas vectoriales (por ejemplo el caso elástico) no parece haber

gran mejora en la convergencia debido a que la transformada no puede hacerse de manera sencilla.

El otro método es el de multireja o multigrad [KDR\*88,EGS88], en el cual se discretiza el problema en enrejados o redes de distintos tamaños. Los problemas de amortiguamiento crítico aparecen para tamaños grandes, no en los pequeños, por lo que si se tiene el mismo problema con distintos enrejados se puede pasar de un enrejado a otro equivalente más grande, volviendo a la primera en caso de problemas y así, hasta llegar a la solución (para más información ver la referencia).

## Apéndice B

# Ecuaciones de la elasticidad en coordenadas polares.

Relaciones entre coordenadas cartesianas y polares.

Coordenadas:

$$\begin{aligned}x &= r \cos \theta, \\y &= r \operatorname{sen} \theta.\end{aligned}\tag{B.1}$$

Desplazamientos:

$$\begin{aligned}u_x &= u_r \cos \theta - u_\theta \operatorname{sen} \theta, \\u_y &= u_r \operatorname{sen} \theta + u_\theta \cos \theta.\end{aligned}\tag{B.2}$$

Esfuerzos:

$$\begin{aligned}\sigma_{rr} &= \sigma_{xx} \cos^2 \theta + \sigma_{yy} \operatorname{sen}^2 \theta + 2\sigma_{xy} \cos \theta \operatorname{sen} \theta, \\ \sigma_{r\theta} &= (\sigma_{yy} - \sigma_{xx}) \cos \theta \operatorname{sen} \theta + \sigma_{xy} (\cos^2 \theta - \operatorname{sen}^2 \theta), \\ \sigma_{\theta\theta} &= \sigma_{xx} \operatorname{sen}^2 \theta + \sigma_{yy} \cos^2 \theta - 2\sigma_{xy} \cos \theta \operatorname{sen} \theta.\end{aligned}\tag{B.3}$$

Expresiones en coordenadas polares.

Energía libre.

$$\begin{aligned}F &= \left(\frac{\lambda}{2} + \mu\right) \left(\partial_r u_r + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial_\theta u_\theta}{r}\right)^2 + \\ &\mu \left\{ \frac{1}{2} \left(\partial_r u_\theta + \frac{\partial_\theta u_r}{r} - \frac{u_\theta}{r}\right)^2 - 2\partial_r u_r \left(\frac{\partial_\theta u_\theta}{r} + \frac{u_r}{r}\right) \right\}.\end{aligned}\tag{B.4}$$

Tensor de esfuerzos.

$$\begin{aligned}\sigma_{rr} &= \lambda \left(\partial_r u_r + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial_\theta u_\theta}{r}\right) + 2\mu \partial_r u_r, \\ \sigma_{r\theta} &= \mu \left(\partial_r u_\theta + \frac{\partial_\theta u_r}{r} - \frac{u_\theta}{r}\right),\end{aligned}\tag{B.5}$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \lambda \left( \partial_r u_r + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial_\theta u_\theta}{r} \right) + 2\mu \left( \frac{\partial_\theta u_\theta}{r} + \frac{u_r}{r} \right).$$

Ecuaciones de equilibrio.

$$0 = (\lambda + \mu) \left\{ \partial_r^2 u_r - \frac{u_r}{r^2} + \frac{\partial_r u_r}{r} - \frac{\partial_\theta u_\theta}{r^2} + \frac{\partial_r \partial_\theta u_\theta}{r} \right\} + \mu \left\{ \frac{\partial_r u_r}{r} + \partial_r^2 u_r + \frac{\partial_\theta^2 u_r}{r^2} - \frac{u_r}{r^2} - 2 \frac{\partial_\theta u_\theta}{r^2} \right\} \quad (\text{B.6})$$

$$0 = (\lambda + \mu) \left\{ \frac{\partial_r \partial_\theta u_r}{r} + \frac{\partial_\theta u_r}{r^2} + \frac{\partial_\theta^2 u_\theta}{r^2} \right\} + \mu \left\{ 2 \frac{\partial_\theta u_r}{r^2} + \frac{\partial_r u_\theta}{r} + \partial_r^2 u_\theta - \frac{u_\theta}{r^2} + \frac{\partial_\theta^2 u_\theta}{r^2} \right\} \quad (\text{B.7})$$

## Apéndice C

# Ecuaciones de equilibrio en la red triangular.

En este apéndice se pretende explicar cómo implementar de una manera sencilla el hamiltoniano de fuerzas centrales en la red triangular, y cómo expresar las ecuaciones de equilibrio que siguen los nodos de una manera lineal. Este hamiltoniano es:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} k_{ij} [(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \hat{\mathbf{r}}_{ij}]^2, \quad (\text{C.1})$$

donde  $i$  y  $j$  son nodos primeros vecinos de la red triangular,  $k_{ij}$  la constante de fuerza que une los nodos  $i$  y  $j$ ,  $\mathbf{v}_i$  el desplazamiento del nodo  $i$  de su posición de equilibrio, y  $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$  el vector unitario que une dichos nodos.

Las posiciones de equilibrio son aquellas que hacen mínimo el hamiltoniano, o lo que es lo mismo, las que hacen nula la fuerza neta en cada nodo. Para que las ecuaciones que definen estas posiciones de equilibrio sean lineales, se aproxima  $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$  de forma que pueda tener únicamente tres valores:  $(1, 0)$ ,  $(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$  y  $(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ , dependiendo de la orientación del enlace que une los nodos. Por esta simetría de la red triangular conviene expresar los desplazamientos en dos de las tres direcciones principales de la red<sup>1</sup>:

$$\begin{aligned} u_u &= u_x, \\ u_v &= -\frac{1}{2}u_x + \frac{\sqrt{3}}{2}u_y. \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

De esta forma las ecuaciones de equilibrio quedan (ver figura C.1):

$$\begin{aligned} 0 &= k_1(i, j) * (u_u(i+1, j) - u_u(i, j)) + k_1(i-1, j) * (u_u(i-1, j) - u_u(i, j)) + \\ & k_2(i, j) * (u_u(i+1, j+1) + u_v(i+1, j+1) - u_u(i, j) - u_v(i, j)) + \\ & k_2(i-1, j-1) * (u_u(i-1, j-1) + u_v(i-1, j-1) - u_u(i, j) - u_v(i, j)), \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

<sup>1</sup>Hay que tener en cuenta aquí que este cambio de base se refiere sólo a los vectores desplazamiento, no a coordenadas de puntos. El cambio de coordenadas  $x$  e  $y$  a  $i$  y  $j$  es:

$$\begin{aligned} x &= i - \frac{j}{2}, \\ y &= \frac{\sqrt{3}}{2}j. \end{aligned}$$

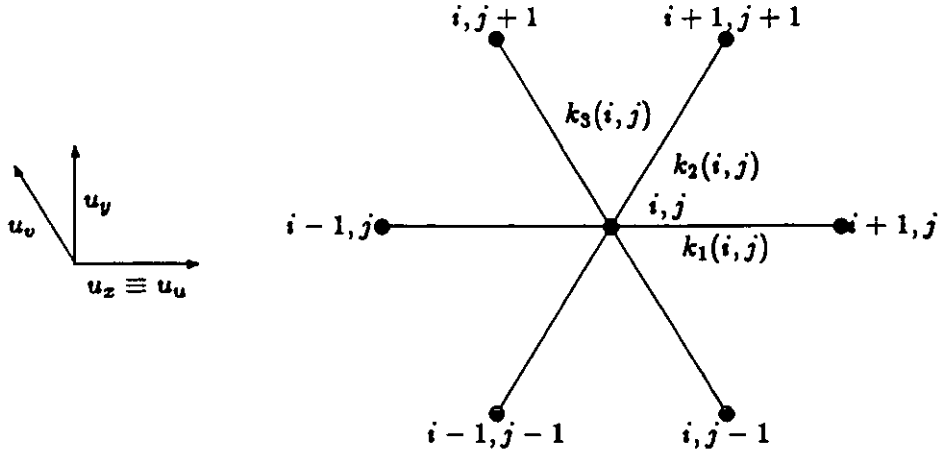


Figura C.1: Desplazamientos, coordenadas y nodos considerados en la red triangular.

$$\begin{aligned}
 0 = & k_3(i, j) * (u_v(i, j + 1) - u_v(i, j)) + k_3(i, j - 1) * (u_v(i, j - 1) - u_v(i, j)) + \\
 & k_2(i, j) * (u_u(i + 1, j + 1) + u_v(i + 1, j + 1) - u_u(i, j) - u_v(i, j)) + \\
 & k_2(i - 1, j - 1) * (u_u(i - 1, j - 1) + u_v(i - 1, j - 1) - u_u(i, j) - u_v(i, j)). \quad (C.4)
 \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones anterior se pueden expresar los desplazamientos  $u_u$  y  $u_v$  de un punto en función de los de sus primeros vecinos:

$$\begin{aligned}
 D = & (k_1(i, j) + k_1(i - 1, j)) * (k_3(i, j) + k_3(i, j - 1)) + \\
 & (k_2(i, j) + k_2(i - 1, j - 1)) * \\
 & (k_1(i, j) + k_1(i - 1, j) + k_3(i, j) + k_3(i, j - 1)), \quad (C.5) \\
 u_u(i, j) * D = & (k_2(i - 1, j - 1) + k_2(i, j) + k_3(i, j - 1) + k_3(i, j)) * \\
 & (k_1(i - 1, j) * u_u(i - 1, j) + k_1(i, j) * u_u(i + 1, j)) + \\
 & (k_3(i, j - 1) + k_3(i, j)) * \\
 & (k_2(i - 1, j - 1) * (u_u(i - 1, j - 1) + u_v(i - 1, j - 1)) + \\
 & k_2(i, j) * (u_u(i + 1, j + 1) + u_v(i + 1, j + 1))) - \\
 & (k_2(i - 1, j - 1) + k_2(i, j)) * \\
 & (k_3(i, j - 1) * u_v(i, j - 1) + k_3(i, j) * u_v(i, j + 1)), \quad (C.6) \\
 u_v(i, j) * D = & (k_1(i - 1, j) + k_1(i, j) + k_2(i - 1, j - 1) + k_2(i, j)) * \\
 & (k_3(i, j - 1) * u_v(i, j - 1) + k_3(i, j) * u_v(i, j + 1)) + \\
 & (k_1(i - 1, j) + k_1(i, j)) *
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 &*(k_2(i-1, j-1) * (u_u(i-1, j-1) + u_v(i-1, j-1)) + \\
 &k_2(i, j) * (u_u(i+1, j+1) + u_v(i+1, j+1))) - \\
 &(k_2(i-1, j-1) + k_2(i, j)) * \\
 &(k_1(i-1, j) * u_u(i-1, j) + k_1(i, j) * u_u(i+1, j)). \quad (C.7)
 \end{aligned}$$

Donde  $D$  puede anularse en dos casos: sólo queda un enlace presente, por lo que se hacen los desplazamientos del nodo igual a los del nodo al que se conecta por el único enlace restante; o bien quedan dos enlaces formando entre ellos ángulo de  $180^\circ$ , en cuyo caso se resuelven las ecuaciones unidimensionales en esa dirección.

## C.1 Subrutinas FORTRAN.

Para ilustrar cómo se pueden implementar estas ecuaciones se dan a continuación dos subrutinas FORTRAN, con distinta eficiencia y complejidad.

La primera consiste en escribir directamente las ecuaciones de equilibrio anteriores:

```

subroutine equi1(error)
c *****
c subrutina que calcula las posiciones de equilibrio u y v en
c una red triangular usando las posiciones ya calculadas
c (metodo de Gauss)
c
c
c las variables ua y va son auxiliares
c
c la variable mb contiene todas las constantes de recuperacion
c de los muelles de la red. Para agilizar el calculo en el
c programa principal hay que hacer
c mb(4,i,j)=mb(1,i,j)+mb(1,i-1,j)+mb(2,i,j)+mb(2,i-1,j-1)
c mb(5,i,j)=mb(3,i,j)+mb(3,i,j-1)+mb(2,i,j)+mb(2,i-1,j-1)
c mb(6,i,j) indica que ese nodo no hay que relajarlo, o bien
c que ese nodo esta aislado
c
c la subrutina devuelve el error como el maximo del modulo
c del vector de entrada y de salida en cualquiera de los
c nodos
c
c *****
implicit real*8(a-h,o-z)
parameter (nd=81)
common/des/u(nd,nd),v(nd,nd)
common/aux/ua(nd,nd),va(nd,nd)
common/eme/mb(6,nd,nd)
do 80 j=1,nd
do 80 i=1,nd

```

```

if(mb(6,i,j).eq.0)go to 70
mb12=mb(2,i-1,j-1)
mb13=mb(3,i,j-1)
mb11=mb(1,i-1,j)
mb1=mb(1,i,j)
mb2=mb(2,i,j)
mb3=mb(3,i,j)
mb4=mb(4,i,j)
mb5=mb(5,i,j)
if(mb4.eq.0)go to 20
if(mb5.eq.0)go to 40
idet=mb4*mb5-(mb2+mb12)**2
if(idet.eq.0)go to 60
ua(i,j)=(mb5*(mb11*ua(i-1,j)+mb1*u(i+1,j))-(mb2+mb12)*
#      (mb13*va(i,j-1)+mb3*v(i,j+1))+(mb3+mb13)*
#      (mb12*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))+mb2*(u(i+1,j+1)+
#      v(i+1,j+1))))/idet
va(i,j)=(mb4*(mb13*va(i,j-1)+mb3*v(i,j+1))-(mb2+mb12)*
#      (mb11*ua(i-1,j)+mb1*u(i+1,j))+(mb1+mb11)*
#      (mb12*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))+mb2*(u(i+1,j+1)+
#      v(i+1,j+1))))/idet
go to 80
20 if(mb5.eq.0)go to 80
ua(i,j)=(mb13*ua(i,j-1)+mb3*u(i,j+1))/(mb13+mb3)
va(i,j)=(mb13*va(i,j-1)+mb3*v(i,j+1))/(mb13+mb3)
go to 80
40 ua(i,j)=(mb11*ua(i-1,j)+mb1*u(i+1,j))/(mb11+mb1)
va(i,j)=(mb11*va(i-1,j)+mb1*v(i+1,j))/(mb11+mb1)
go to 80
60 ua(i,j)=(mb12*ua(i-1,j-1)+mb2*u(i+1,j+1))/(mb12+mb2)
va(i,j)=(mb12*va(i-1,j-1)+mb2*v(i+1,j+1))/(mb12+mb2)
80 continue
error=0.d0
do 100 j=1,nd
do 100 i=1,nd
if(mb(i,j,6).eq.0)go to 100
error=dmax1(error,(ua(i,j)-u(i,j))**2+
#0.333333333333d0*(2*(va(i,j)-v(i,j))+ua(i,j)-u(i,j))**2)
100 continue
do 120 j=1,nd
do 120 i=1,nd
if(mb(6,i,j).eq.0)go to 120
c   u(i,j)=(ua(i,j)+u(i,j))*0.5d0      ! sobrerelajacion
c   v(i,j)=(va(i,j)+v(i,j))*0.5d0
u(i,j)=ua(i,j)
v(i,j)=va(i,j)

```

```

120 continue
    error=dsqrt(error)
    return
end

```

El problema que tiene esta subrutina es que emplea excesivo tiempo al pasar de un punto a otro evaluando todos los `if` necesarios para determinar qué tipo de nodo es el que está tratando. Esto se puede solucionar añadiendo una nueva variable que diga el tipo de nodo, y aunque hay 64 posibilidades, el esfuerzo puede valer la pena si con ello se ahorra tiempo de CPU.

```

subroutine equi2(error)
c *****
c subrutina que calcula las posiciones de equilibrio u y v en
c una red triangular con todas las constantes de recuperacion
c de los muelles iguales usando las posiciones ya calculadas
c (metodo de Gauss)
c
c
c las variables ua y va son auxiliares
c
c la variable muv indica que tipo de nodo es el que se trata
c
c la subrutina devuelve el error como el maximo del modulo
c del vector de entrada y de salida en cualquiera de los
c nodos
c
c *****
    implicit real*8(a-h,o-z)
    parameter (nd=81)
    common/des/u(nd,nd),v(nd,nd)
    common/aux/ua(nd,nd),va(nd,nd)
    common/eme/muv(nd,nd)
    do 64 j=1,nd
    do 64 i=1,nd
    go to (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,21,
# 22,23,24,25,26,27,28,29,30,31,32,33,34,35,36,37,38,39,
# 40,41,42,43,44,45,46,47,48,49,50,51,52,53,54,55,56,57,
# 58,59,60,61,62,63,64)muv(i,j)
c
c ningun enlace roto
c
    1 ua(i,j)=(2*(ua(i-1,j)+u(i+1,j))+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
# ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.16666667d0
    va(i,j)=(2*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
# ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-ua(i-1,j)-u(i+1,j))*0.16666667d0
    go to 64

```

c

c 1 enlace roto

c

```

2 ua(i,j)=(ua(i-1,j)+0.5d0*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-va(i,j-1)-v(i,j+1)))*0.5d0
  va(i,j)=(3*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*ua(i-1,j))*0.125d0
  go to 64
3 ua(i,j)=(3*(ua(i-1,j)+u(i+1,j)))+
#   2*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.125d0
  va(i,j)=(3*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+
#   2*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))-ua(i-1,j)-u(i+1,j))*0.125d0
  go to 64
4 ua(i,j)=(3*(ua(i-1,j)+u(i+1,j))+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*va(i,j-1))*0.125d0
  va(i,j)=(va(i,j-1)+0.5d0*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-ua(i-1,j)-u(i+1,j)))*0.5d0
  go to 64
5 ua(i,j)=(u(i+1,j)+0.5d0*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-va(i,j-1)-v(i,j+1)))*0.5d0
  va(i,j)=(3*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*u(i+1,j))*0.125d0
  go to 64
6 ua(i,j)=(3*(ua(i-1,j)+u(i+1,j)))+
#   2*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1))-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.125d0
  va(i,j)=(3*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+
#   2*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1))-ua(i-1,j)-u(i+1,j))*0.125d0
  go to 64
7 ua(i,j)=(3*(ua(i-1,j)+u(i+1,j))+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*v(i,j+1))*0.125d0
  va(i,j)=(v(i,j+1)+0.5d0*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-ua(i-1,j)-u(i+1,j)))*0.5d0
  go to 64

```

c

c 2 enlaces rotos

c

```

8 ua(i,j)=(3*ua(i-1,j)+
#   2*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.2d0
  va(i,j)=(2*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-ua(i-1,j))*0.2d0
  go to 64
9 ua(i,j)=(3*ua(i-1,j)+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*va(i,j-1))*0.2d0
  va(i,j)=(3*va(i,j-1)+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*ua(i-1,j))*0.2d0
  go to 64

```

```

10 ua(i,j)=(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.5d0
   va(i,j)=(va(i,j-1)+v(i,j+1))*0.5d0
   go to 64
11 ua(i,j)=(3*ua(i-1,j)+
#   2*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1))-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.2d0
   va(i,j)=(2*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+
#   u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-ua(i-1,j))*0.2d0
   go to 64
12 ua(i,j)=(3*ua(i-1,j)+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*v(i,j+1))*0.2d0
   va(i,j)=(3*v(i,j+1)+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*ua(i-1,j))*0.2d0
   go to 64
13 ua(i,j)=(2*(ua(i-1,j)+u(i+1,j))+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-va(i,j-1))*0.2d0
   va(i,j)=(3*va(i,j-1)+
#   2*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))-ua(i-1,j)-u(i+1,j))*0.2d0
   go to 64
14 ua(i,j)=(3*u(i+1,j)+
#   2*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))-v(i,j-1)-v(i,j+1))*0.2d0
   va(i,j)=(2*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-u(i+1,j))*0.2d0
   go to 64
15 ua(i,j)=(ua(i-1,j)+u(i+1,j))*0.5d0
   va(i,j)=(va(i,j-1)+v(i,j+1))*0.5d0
   go to 64
16 ua(i,j)=(2*(ua(i-1,j)+u(i+1,j))+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-v(i,j+1))*0.2d0
   va(i,j)=(3*v(i,j+1)+
#   2*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))-ua(i-1,j)-u(i+1,j))*0.2d0
   go to 64
17 ua(i,j)=(3*u(i+1,j)+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*va(i,j-1))*0.2d0
   va(i,j)=(3*va(i,j-1)+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*u(i+1,j))*0.2d0
   go to 64
18 ua(i,j)=(2*(ua(i-1,j)+u(i+1,j))+
#   u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-va(i,j-1))*0.2d0
   va(i,j)=(3*va(i,j-1)+
#   2*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1))-ua(i-1,j)-u(i+1,j))*0.2d0
   go to 64
19 ua(i,j)=(ua(i-1,j)+u(i+1,j))*0.5d0
   va(i,j)=(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#   ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-ua(i-1,j)-u(i+1,j))*0.5d0
   go to 64

```

```

20 ua(i,j)=(3*u(i+1,j)+
#      2*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1))-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.2d0
va(i,j)=(2*(va(i,j-1)+v(i,j+1))+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-u(i+1,j))*0.2d0
go to 64
21 ua(i,j)=(3*u(i+1,j)+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*v(i,j+1))*0.2d0
va(i,j)=(3*v(i,j+1)+u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*u(i+1,j))*0.2d0
go to 64
22 ua(i,j)=(2*(ua(i-1,j)+u(i+1,j))+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-v(i,j+1))*0.2d0
va(i,j)=(3*v(i,j+1)+
#      2*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1))-ua(i-1,j)-u(i+1,j))*0.2d0
go to 64
c
c 3 enlaces rotos
c
23 ua(i,j)=(2*ua(i-1,j)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-va(i,j-1))*0.333333333d0
va(i,j)=(2*va(i,j-1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-ua(i-1,j))*0.333333333d0
go to 64
24 ua(i,j)=(2*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.5d0
va(i,j)=(va(i,j-1)+v(i,j+1))*0.5d0
go to 64
25 ua(i,j)=ua(i-1,j)
va(i,j)=(va(i,j-1)+v(i,j+1))*0.5d0
go to 64
26 ua(i,j)=(2*ua(i-1,j)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-v(i,j+1))*0.333333333d0
va(i,j)=(2*v(i,j+1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-ua(i-1,j))*0.333333333d0
go to 64
27 ua(i,j)=(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*va(i,j-1))*0.5d0
va(i,j)=va(i,j-1)
go to 64
28 ua(i,j)=(2*ua(i-1,j)+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-va(i,j-1))*0.333333333d0
va(i,j)=(2*va(i,j-1)+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-ua(i-1,j))*0.333333333d0
go to 64
29 ua(i,j)=ua(i-1,j)
va(i,j)=(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*ua(i-1,j))*0.5d0

```

```

    go to 64
30 ua(i,j)=(2*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1))-va(i,j-1)-v(i,j+1))*0.5d0
    va(i,j)=(va(i,j-1)+v(i,j+1))*0.5d0
    go to 64
31 ua(i,j)=(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*v(i,j+1))*0.5d0
    va(i,j)=v(i,j+1)
    go to 64
32 ua(i,j)=(2*ua(i-1,j)+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-v(i,j+1))*0.33333333d0
    va(i,j)=(2*v(i,j+1)+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-ua(i-1,j))*0.33333333d0
    go to 64
33 ua(i,j)=(2*u(i+1,j)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-va(i,j-1))*0.33333333d0
    va(i,j)=(2*va(i,j-1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-u(i+1,j))*0.33333333d0
    go to 64
34 ua(i,j)=(ua(i-1,j)+u(i+1,j))*0.5d0
    va(i,j)=va(i,j-1)
    go to 64
35 ua(i,j)=(ua(i-1,j)+u(i+1,j))*0.5d0
    va(i,j)=(2*(ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1))-u(i+1,j)-ua(i-1,j))*0.5d0
    go to 64
36 ua(i,j)=u(i+1,j)
    va(i,j)=(va(i,j-1)+v(i,j+1))*0.5d0
    go to 64
37 ua(i,j)=(2*u(i+1,j)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-v(i,j+1))*0.33333333d0
    va(i,j)=(2*v(i,j+1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-u(i+1,j))*0.33333333d0
    go to 64
38 ua(i,j)=(ua(i-1,j)+u(i+1,j))*0.5d0
    va(i,j)=v(i,j+1)
    go to 64
39 ua(i,j)=(2*u(i+1,j)+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-va(i,j-1))*0.33333333d0
    va(i,j)=(2*va(i,j-1)+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-u(i+1,j))*0.33333333d0
    go to 64
40 ua(i,j)=u(i+1,j)
    va(i,j)=(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)+
#      ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-2*u(i+1,j))*0.5d0
    go to 64
41 ua(i,j)=(ua(i-1,j)+u(i+1,j))*0.5d0
    va(i,j)=(2*(u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1))-u(i+1,j)-ua(i-1,j))*0.5d0

```

```

    go to 64
42 ua(i,j)=(2*u(i+1,j)+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-v(i,j+1))*0.33333333d0
    va(i,j)=(2*v(i,j+1)+
#      u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-u(i+1,j))*0.33333333d0
    go to 64
c
c 4 enlaces rotos
c
43 ua(i,j)=u(i+1,j)
    va(i,j)=u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-u(i+1,j)
    go to 64
44 ua(i,j)=u(i+1,j)
    va(i,j)=v(i,j+1)
    go to 64
45 ua(i,j)=(ua(i-1,j)+u(i+1,j))*0.5d0
    va(i,j)=(va(i-1,j)+v(i+1,j))*0.5d0
    go to 64
46 ua(i,j)=u(i+1,j)
    va(i,j)=ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-u(i+1,j)
    go to 64
47 ua(i,j)=u(i+1,j)
    va(i,j)=va(i,j-1)
    go to 64
48 ua(i,j)=u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-v(i,j+1)
    va(i,j)=v(i,j+1)
    go to 64
49 ua(i,j)=ua(i-1,j)
    va(i,j)=u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-ua(i-1,j)
    go to 64
50 ua(i,j)=(ua(i-1,j-1)+u(i+1,j+1))*0.5d0
    va(i,j)=(va(i-1,j-1)+v(i+1,j+1))*0.5d0
    go to 64
51 ua(i,j)=u(i+1,j+1)+v(i+1,j+1)-va(i,j-1)
    va(i,j)=va(i,j-1)
    go to 64
52 ua(i,j)=ua(i-1,j)
    va(i,j)=v(i,j+1)
    go to 64
53 ua(i,j)=ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-v(i,j+1)
    va(i,j)=v(i,j+1)
    go to 64
54 ua(i,j)=(ua(i,j-1)+u(i,j+1))*0.5d0
    va(i,j)=(va(i,j-1)+v(i,j+1))*0.5d0
    go to 64
55 ua(i,j)=ua(i-1,j)

```



```

    va(i,j)=ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-ua(i-1,j)
    go to 64
56 ua(i,j)=ua(i-1,j)
    va(i,j)=va(i,j-1)
    go to 64
57 ua(i,j)=ua(i-1,j-1)+va(i-1,j-1)-va(i,j-1)
    va(i,j)=va(i,j-1)
    go to 64
c
c 5 enlaces rotos
c
58 ua(i,j)=u(i+1,j)
    va(i,j)=v(i+1,j)
    go to 64
59 ua(i,j)=u(i+1,j+1)
    va(i,j)=v(i+1,j+1)
    go to 64
60 ua(i,j)=u(i,j+1)
    va(i,j)=v(i,j+1)
    go to 64
61 ua(i,j)=ua(i-1,j)
    va(i,j)=va(i-1,j)
    go to 64
62 ua(i,j)=ua(i-1,j-1)
    va(i,j)=va(i-1,j-1)
    go to 64
63 ua(i,j)=ua(i,j-1)
    va(i,j)=va(i,j-1)
64 continue
    error=0.d0
    do 100 j=1,nd
    do 100 i=1,nd
    if(muv(i,j).eq.64)go to 100
    error=dmax1(error,(ua(i,j)-u(i,j))**2+
#0.333333333333d0*(2*(va(i,j)-v(i,j))+ua(i,j)-u(i,j))**2)
100 continue
    do 120 j=1,nd
    do 120 i=1,nd
    if(muv(i,j).eq.64)go to 120
c    u(i,j)=(ua(i,j)+u(i,j))*0.5d0      ! sobrerelajacion
c    v(i,j)=(va(i,j)+v(i,j))*0.5d0
    u(i,j)=ua(i,j)
    v(i,j)=va(i,j)
120 continue
    error=dsqrt(error)
    return

```

end .

Como se ve esta subrutina es mucho mas complicada que la anterior, pero se han eliminado la mayoría de los if. Si se quisiera hacer para el caso anisótopo sería algo más complicada pero no más larga; y para la reconstrucción  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , además de más complicada, tres veces más larga (habría que pasar por cada una de las tres subredes de nodos de distinto tipo).

## Apéndice D

# Analogías entre electrostática y elasticidad.

| ELECTROSTÁTICA  | ELASTICIDAD  |
|---|--|
| Campo potencial<br>$\phi(\mathbf{x})$   | Vector desplazamiento<br>$\mathbf{u}(\mathbf{x})$  |
| Campo eléctrico<br>$\mathbf{E} = -\nabla\phi$   | Campo desplazamientos<br>$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2}(\nabla^t\mathbf{u}^t + (\nabla^t\mathbf{u}^t)^t)$  |
| Energía libre<br>$F = \frac{1}{2}k\mathbf{E}^2$   | Energía libre<br>$F = \frac{1}{2}(\lambda T r^2(\boldsymbol{\epsilon}) + 2\mu T r(\boldsymbol{\epsilon}^2))$   |
| Corriente<br>$\mathbf{j} = k\mathbf{E}$   | Tensor de esfuerzos<br>$\boldsymbol{\sigma} = \lambda T r(\boldsymbol{\epsilon})\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\epsilon}$  |
| Ecuaciones de equilibrio<br>$\nabla\mathbf{j} + \boldsymbol{\varphi} = 0$<br>$k\nabla^2\phi - \boldsymbol{\varphi} = 0$ | Ecuaciones de equilibrio<br>$\nabla\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = 0$<br>$(\lambda + \mu)\nabla(\nabla\mathbf{u}) + \mu\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{f} = 0$ |

## Apéndice E

# Publicaciones y comunicaciones generadas.

### Publicaciones.

- F. Guinea, O. Pla y E. Louis *Fractal aspects of fracture propagation. Annals of Israel Physical Society.*, vol. 8, pag. 587. (1986)
- O. Pla, R. Garcia-Molina, F. Guinea y E. Louis *Properties of elastic percolating networks in isotropic media with arbitrary elastic constants. Phys. Rev. B*, 41, 11449 (1990).
- P. Meakin, G. Li, L. M. Sander, H. Yan, F. Guinea, O. Pla y E. Louis *Simple Stochastic Models for Material Failure.* Capítulo 7 de *Disorder and Fracture* NATO ASI Series (en preparación).
- O. Pla, F. Guinea, G. Li, L. M. Sander, H. Yan y P. Meakin *Crossover between different growth regimes in crack formation. Phys. Rev. A*, 42, 3670 (1990).
- O. Pla, F. Guinea y E. Louis *Self-organized criticality in laplacian growth. Phys. Rev. A Rapid Commun.* en prensa (15 nov 1990).

### Comunicaciones a congresos.

- F. Guinea, O. Pla y E. Louis *Crack patterns in brittle materials. Anisotropy and macroscopic properties.* Comunicación invitada al 1986 Fall Meeting de la Materials Research Society (Dic. 1986).
- O. Pla, R. Garcia Molina, F. Guinea y E. Louis *Percolación Elástica en dos dimensiones. Parámetros críticos para el módulo de cizalla.* en el I Seminario del Grupo Especializado de Cristalografía. Los Modelos Geométricos y la Física de Materiales. San Lorenzo de el Escorial 23-25 Mayo 1988.
- O. Pla, F. Guinea, E. Louis, G. Li, L. M. Sander, H. Yan y P. Meakin *Crossover between different regimes in crack growth.* APS March Meeting 1989. San Louis MI

- O. Pla, F. Guinea y E. Louis *1/f noise in laplacian growth*. 10th General Conference of the Condensed Matter Division of the EPS. Lisboa. Abril 1990.

### Tesina.

*Simulación de la fractura de materiales por medio de una red triangular. Dimensión fractal. Anisotropía.* (dirigida por el Dr. Francisco Guinea López). Marzo 1987.

... 312  
... 318  
Doctoral ... ~~ACTO COM LAURE~~

Madrid, 5 DICIEMBRE 1920.