

Parte IV
Apéndices

Apéndice A

Teoría de la elasticidad

La teoría de la elasticidad estudia la mecánica de los sólidos considerándolos como medios continuos. Si las deformaciones del sólido tienen lugar a escalas mucho mayores que la atómica, la aproximación de medio continuo es aceptable. Se puede demostrar [376] que en el caso en que el desplazamiento de los átomos respecto de su posición de equilibrio varíe poco con respecto a las distancias interatómicas, la teoría microscópica se reduce a la de medio continuo. En este apéndice se resume la teoría clásica de la elasticidad [347]. En la sección § A.1 se introduce el tensor de deformaciones que permite relacionar las características geométricas de un sólido antes y después de la deformación. Tras la descripción formal de las deformaciones, se introduce el tensor de esfuerzos (§ A.2) que permite describir las fuerzas que causan las deformaciones y, de esta manera, poder obtener la ecuación de movimiento de un sólido considerándolo como un medio continuo. Finalmente, se introduce la relación entre el tensor de esfuerzos y el tensor de deformaciones (relación causa-efecto).

A.1. Tensor de deformaciones

Los sólidos se pueden deformar por diversas causas. El caso más común es la deformación por la aplicación de un esfuerzo externo. Sin embargo, existen mecanismos internos como, por ejemplo, las transiciones de fase estructurales. En esta sección se va a considerar una deformación genérica sin tener en cuenta el mecanismo por el que se produce. Para fijar ideas, supongamos una deformación como la que se esquematiza en la Fig. A.1(a). A causa de la deformación, un punto genérico P , con coordenadas $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ en la base $\{\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3\}$, se transforma en un punto P' con coordenadas

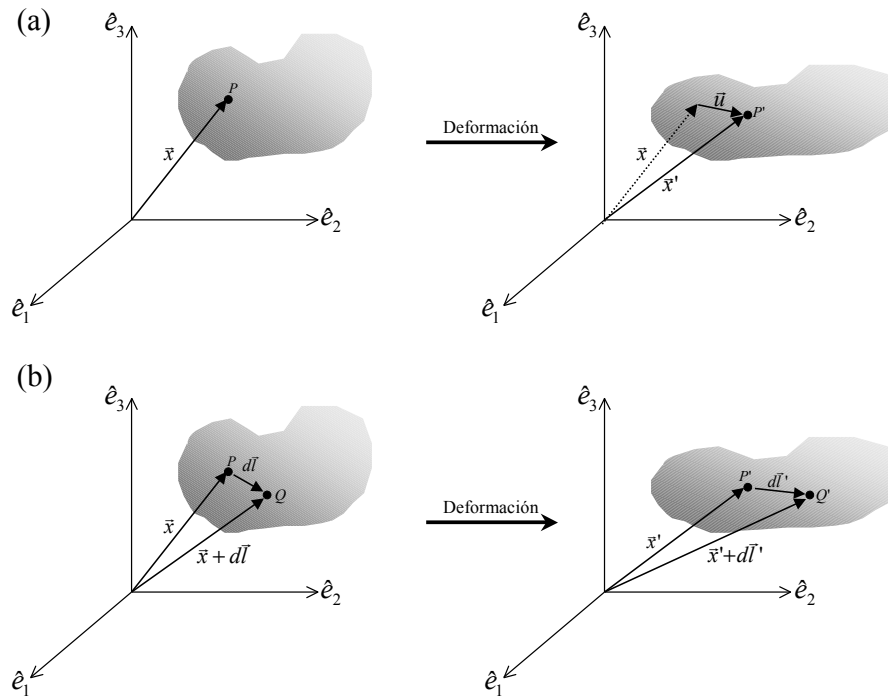


Figura A.1: (a) Esquema de una deformación genérica con vector desplazamiento $\vec{u}(\vec{x})$. (b) Transformación de un elemento de longitud en la deformación presentada en (a).

$\vec{x}' = (x'_1, x'_2, x'_3)$. El vector desplazamiento de esta deformación viene dado por:

$$\vec{u} = \vec{x}' - \vec{x}. \quad (\text{A.1})$$

En general, el desplazamiento depende de cada punto en su posición inicial, de tal forma que $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x})$. Esta descripción de la deformación es la *de Lagrange*, también llamada *descripción material* en el sentido de que se sigue cada uno de los puntos del material durante la transformación. Existe una descripción alternativa que consiste en situarse en un determinado punto del sistema de referencia y permanecer en él durante la deformación observando cómo el sólido “fluye” por dicho punto. Ésta es la *descripción de Euler* o *espacial*. En lo que sigue, utilizaremos la descripción de Lagrange. Veamos, en primer lugar, cómo afecta la transformación al elemento de longitud $d\vec{l} = (dx_1, dx_2, dx_3)$ que, antes de la deformación, une dos puntos P y Q [Fig. A.1(b)] situados en \vec{x} y $\vec{x} + d\vec{l}$, respectivamente. El módulo al cuadrado de $d\vec{l}$ cambia como

$$dl^2 = dx_i dx_i \longrightarrow dl'^2 = dx'_i dx'_i, \quad (\text{A.2})$$

donde, tal y como haremos de aquí en adelante en este apéndice, se ha aplicado el convenio de Einstein de suma a índices repetidos. A partir de la Ec. (A.1) se deduce

que los diferenciales $\{dx_i\}$ transforman como

$$dx_i \longrightarrow dx'_i = dx_i + du_i \equiv A_{ij}dx_j, \quad (\text{A.3})$$

donde se ha definido el tensor de cambio de coordenadas A_{ij} como:

$$A_{ij} = \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (\text{A.4})$$

Así pues, introduciendo el cambio de los diferenciales de las coordenadas en la Ec. (A.2), llegamos a

$$dl'^2 = A_{ki}A_{kj}dx_idx_j \equiv dl^2 + 2\varepsilon_{ij}dx_idx_j, \quad (\text{A.5})$$

donde se ha definido el *tensor de deformaciones* ε_{ij} como:

$$\varepsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2}(A_{ki}A_{kj} - \delta_{ij}) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\frac{\partial u_k}{\partial x_j}\right), \quad (\text{A.6})$$

que es claramente simétrico.

Debido a la deformación, la longitud y la dirección del elemento de longitud $d\vec{l}$ [Fig. A.1(b)] cambian. Suponiendo que la dirección de $d\vec{l}$ viene dada por el vector unitario \hat{n} ($d\vec{l} = dl\hat{n}$), el cambio relativo de longitud viene dado por

$$\frac{dl' - dl}{dl} = \varepsilon_{ij} \frac{dx_idx_j}{dl^2} = \varepsilon_{ij}n_in_j. \quad (\text{A.7})$$

Para llegar a esta expresión, se ha utilizado la Ec. (A.5) y se ha hecho la hipótesis de que $2\varepsilon_{ij}dx_idx_j \ll dl^2$ (deformaciones pequeñas). A nivel de notación, la Ec. (A.7) se puede expresar de forma más compacta como:

$$\frac{dl' - dl}{dl} = \hat{n} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\varepsilon} \cdot \hat{n}. \quad (\text{A.8})$$

Las componentes del vector \hat{n} cambian como¹:

$$n_i \longrightarrow n'_i = \frac{A_{ij}n_j}{\sqrt{A_{pk}A_{pl}n_kn_l}}. \quad (\text{A.9})$$

El denominador es, simplemente, la normalización del vector \hat{n}' . En función del tensor de deformación, se expresa como $\sqrt{1 + 2\varepsilon_{kl}n_kn_l}$ y, para deformaciones pequeñas, se puede aproximar por $1 + \varepsilon_{kl}n_kn_l$.

Por otro lado, el tensor de deformaciones se puede aproximar como

$$\varepsilon_{ij} \simeq \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \quad (\text{A.10})$$

¹Las componentes de un vector cualquiera cambian siguiendo la transformación (A.3).

en el caso en que las deformaciones sean suficientemente pequeñas. Esto es así porque el término $\frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_j}$ es de segundo orden con respecto a los términos que se han retenido en la aproximación (A.10).

Con esta aproximación, y suponiendo un campo de desplazamientos irrotacional², se pueden expresar las componentes de \hat{n}' en función del tensor de deformaciones únicamente:

$$n'_i = \frac{(\delta_{ij} + \varepsilon_{ij}) n_j}{1 + \varepsilon_{kl} n_k n_l}. \quad (\text{A.11})$$

Por otro lado, el cambio que experimenta un elemento de volumen tras la deformación viene dado por:

$$dV \longrightarrow dV' = |Det(\overset{\leftrightarrow}{A})| dV, \quad (\text{A.12})$$

ya que el Jacobiano de la transformación en este caso viene dado por el determinante del tensor $\overset{\leftrightarrow}{A}$. Tomando como base del problema aquella en que $\overset{\leftrightarrow}{A}$ es diagonal y despreciando términos de orden superior a 1 en las derivadas (deformaciones pequeñas), obtenemos:

$$|Det(\overset{\leftrightarrow}{A})| = |A_{11} A_{22} A_{33}| \simeq 1 + \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad (\text{A.13})$$

donde se ha utilizado la Ec. (A.4). En la aproximación que se ha utilizado de deformaciones pequeñas, el determinante de $\overset{\leftrightarrow}{A}$ se puede escribir como

$$|Det(\overset{\leftrightarrow}{A})| = 1 + Tr(\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}), \quad (\text{A.14})$$

utilizando la Ec. (A.10). Introduciendo ahora la relación (A.14) en la Ec. (A.12), se obtiene que el cambio relativo de volumen es la traza del tensor de deformaciones:

$$\frac{dV' - dV}{dV} = Tr(\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}). \quad (\text{A.15})$$

Teniendo en cuenta que la traza de un tensor es invariante bajo cambios de base, concluimos que el cambio de volumen es independiente de la base utilizada, de tal forma que el resultado (A.15), deducido en la base en que $\overset{\leftrightarrow}{A}$ es diagonal, es válido para cualquier base. No obstante, es importante tener presente que dicho resultado es válido sólo en el caso en que las deformaciones son suficientemente pequeñas.

Hasta este punto hemos visto que el tensor de deformaciones $\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}$ define totalmente el cambio del módulo de un elemento de longitud [Ec. (A.8)] así como el cambio de un elemento de volumen [Ec. (A.15)]. Sin embargo, la dirección de un elemento de longitud se puede expresar en función de $\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}$ únicamente en el caso en que el campo de

²Un campo de desplazamientos \vec{u} es irrotacional si $\nabla \times \vec{u} = \vec{0}$, lo que implica que $\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$ y, entonces, $\varepsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ en la aproximación (A.10).

desplazamientos sea irrotacional, siendo necesario, en general, utilizar el tensor \overleftrightarrow{A} de la transformación de coordenadas.

A.1.1. Ecuaciones de compatibilidad

Debido a que el tensor de deformaciones es simétrico, puede tener 6 componentes independientes como máximo. Sin embargo, la Ec. (A.6) demuestra que, si se especifican las tres componentes de \vec{u} , las seis componentes de $\overleftrightarrow{\varepsilon}$ quedan totalmente determinadas. En consecuencia, si el campo de desplazamientos es continuo, no es posible que las seis componentes de $\overleftrightarrow{\varepsilon}$ sean independientes entre sí. En efecto, se puede demostrar [377] que se cumple la *condición de compatibilidad* de St. Venant

$$\nabla \times (\nabla \times \overleftrightarrow{\varepsilon}) = \overleftrightarrow{0}, \quad (\text{A.16})$$

que en, tres dimensiones, da seis ecuaciones de compatibilidad que se pueden escribir de forma resumida como [82]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varepsilon_{ii}}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{jj}}{\partial x_i^2} &= \frac{\partial^2 \varepsilon_{ij}}{\partial x_i \partial x_j}; \quad i \neq j, \\ \frac{\partial^2 \varepsilon_{jk}}{\partial x_i \partial x_k} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{ik}}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 \varepsilon_{ij}}{\partial x_k^2} &= 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{kk}}{\partial x_i \partial x_j}; \quad i \neq j \neq k \neq i. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

De cada una de estas dos ecuaciones se deducen tres independientes que dan lugar a las seis ecuaciones de compatibilidad. A partir de razonamientos geométricos simples se puede entender la necesidad de que existan las ecuaciones de compatibilidad. Supongamos que un sólido elástico se divide en pequeños paralelepípedos y cada uno de los fragmentos se deforma según las seis componentes independientes de $\overleftrightarrow{\varepsilon}$. Si unimos todas las partes deformadas para obtener un sólido deformado, es fácil concebir que las componentes del tensor de deformaciones deben cumplir ciertas relaciones para que los distintos paralelepípedos encajen de forma continua. Estas relaciones vienen dadas precisamente por las ecuaciones de compatibilidad (A.17). Dicho de otra forma: las ecuaciones de compatibilidad son necesarias para que las deformaciones en los sólidos sean continuas. Sin embargo, si existen defectos en el sólido que introducen discontinuidades en el campo de desplazamientos \vec{u} , no tienen porqué cumplirse las condiciones de compatibilidad.

A.2. Tensor de esfuerzos. Ecuación de movimiento

En la sección anterior se ha estudiado cómo se pueden describir geoméricamente las deformaciones en un sólido. Sin embargo, no se han considerado las fuerzas causantes de la deformación. En este apartado se pretende introducir una descripción de las fuerzas que producen las deformaciones así como la dinámica de dichas deformaciones.

La ecuación de movimiento durante una deformación en un sólido se obtiene de forma sencilla a partir de la segunda ley de Newton (Vol. 2 de la Ref. 32). Es decir, igualando el cambio en la cantidad de movimiento del sólido a las fuerzas que actúan sobre él. El cambio de la cantidad de movimiento durante la deformación viene dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} dV, \quad (\text{A.18})$$

donde ρ es la densidad del material que, en general, depende de la posición.

En cuanto a las fuerzas que actúan sobre un elemento de volumen dV , se pueden clasificar en dos tipos: *fuerzas externas* al sólido y *fuerzas internas*. Las primeras, como su nombre indica, son fuerzas debidas al entorno del sólido, como por ejemplo la gravedad. Este tipo de fuerzas actúan sobre todo el volumen del sólido y, debido a esto, también se llaman *fuerzas de volumen*. Las denotaremos como \vec{F}^{vol} o, por unidad de volumen, como \vec{f}^{vol} . Las fuerzas internas que actúan sobre un elemento infinitesimal del sistema, en cambio, son debidas a la interacción de dicho elemento con el resto del sistema.

Para describir el comportamiento de las fuerzas internas, consideremos un elemento de volumen como el que se presenta esquemáticamente en la Fig. A.2(a). En principio consideraremos que el elemento de volumen es un paralelepípedo con caras paralelas a los planos del sistema de coordenadas definido por la base $\{\hat{e}_i\}$. Sin embargo, los resultados finales son válidos para cualquier forma geométrica del elemento de volumen [32]. Denotamos como cara i -ésima aquella que es perpendicular al vector \hat{e}_i . Si las dimensiones del elemento de volumen son suficientemente pequeñas y el elemento de volumen se encuentra en equilibrio, las fuerzas que actúan sobre caras opuestas son iguales en módulo y de sentido opuesto. Este es el motivo por el que sólo se ha indicado la fuerza que actúa sobre una de las caras opuestas. Consideremos ahora, en particular, la cara 3 [Fig. A.2(b)]. El vector normal a esta cara es $\hat{n}_3 \equiv \hat{e}_3$. Si el área S_3 de la cara es suficientemente pequeña, es lógico pensar que la fuerza \vec{F}_3 que actúa sobre dicha cara es proporcional al área S_3 , de tal forma que la fuerza por unidad de área es independiente de S_3 [32]. Esto hace que se acostumbre a utilizar la magnitud \vec{F}_3/S_3

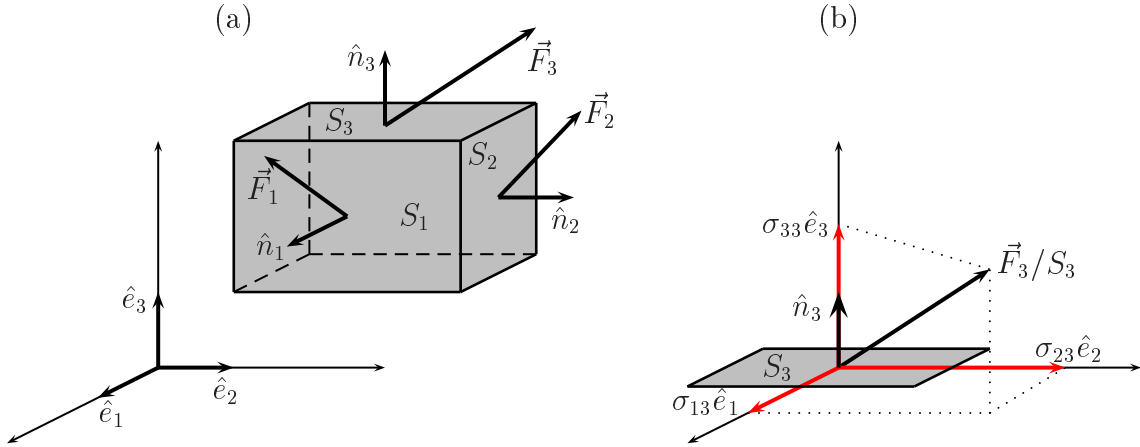


Figura A.2: (a) Fuerzas que actúan sobre las caras de un paralelepípedo en equilibrio. (b) Descomposición en la base $\{\hat{e}_i\}$ de la fuerza por unidad de superficie \vec{F}_3/S_3 que actúa sobre la cara tres del paralelepípedo. La descomposición viene dada por los elementos $\{\sigma_{i3}\}$ del tensor de esfuerzos.

en vez de \vec{F}_3 . En la base $\{\hat{e}_i\}$, esta magnitud se expresa como:

$$\frac{\vec{F}_3}{S_3} = \sigma_{i3}\hat{e}_i, \quad (\text{A.19})$$

donde se ha definido

$$\sigma_{i3} = \frac{F_{i3}}{S_3}. \quad (\text{A.20})$$

Para la cara 1 y 2 del paralelepípedo de la Fig. A.2(a) se pueden definir magnitudes análogas:

$$\sigma_{i1} = \frac{F_{i1}}{S_1}, \quad (\text{A.21})$$

y

$$\sigma_{i2} = \frac{F_{i2}}{S_2}. \quad (\text{A.22})$$

De esta forma se ha definido un conjunto de 9 escalares (tres para cada cara) que caracterizan la fuerza por unidad de superficie que actúa sobre una determinada cara. En forma matricial, podemos escribirlos como

$$(\sigma_{ij}) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{A.23})$$

El elemento σ_{32} , por ejemplo, es la componente en la dirección \hat{e}_3 de la fuerza \vec{F}_2 que actúa sobre la cara 2. Los elementos de la matriz anterior corresponden a los elementos

del *tensor de esfuerzos* $\overset{\leftrightarrow}{\sigma}$ en la base $\{\hat{e}_i\}$. En forma compacta lo simbolizaremos como:

$$\overset{\leftrightarrow}{\sigma} = \sigma_{ij} \hat{e}_i \otimes \hat{e}_j. \quad (\text{A.24})$$

Con esta notación, la fuerza sobre la cara 3, por ejemplo, se puede expresar como:

$$\vec{F}_3 = \overset{\leftrightarrow}{\sigma} \cdot \hat{e}_3 S_3, \quad (\text{A.25})$$

ya que

$$\overset{\leftrightarrow}{\sigma} \cdot \hat{e}_3 = \sigma_{ij} \hat{e}_i \otimes \underbrace{\hat{e}_j \cdot \hat{e}_3}_{\delta_{j3}} = \sigma_{i3} \hat{e}_i, \quad (\text{A.26})$$

lo que demuestra que la expresión (A.25) lleva a (A.19).

Es sencillo convencerse de que la fuerza que actúa sobre una superficie con orientación dada por el vector unitario genérico \hat{n} se puede expresar en términos del tensor de esfuerzos como [32]:

$$\vec{F} = \sigma_{ij} n_j \hat{e}_i S = \overset{\leftrightarrow}{\sigma} \cdot \hat{n} S. \quad (\text{A.27})$$

Una vez caracterizadas todas las fuerzas que actúan sobre un elemento de volumen, la ecuación de movimiento se puede escribir como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} dV = \int_V \vec{f}^{vol} dV + \int_S \overset{\leftrightarrow}{\sigma} \cdot \hat{n} dS, \quad (\text{A.28})$$

que, utilizando el teorema integral de la divergencia, es posible escribir en forma diferencial como:

$$\rho \ddot{u}_i = f_i^{vol} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}. \quad (\text{A.29})$$

A.3. Tensor de constantes elásticas

Para trabajar con la ecuación diferencial (A.29) es útil introducir una relación entre el tensor de esfuerzos y el tensor de deformaciones. Es común aproximar esta relación a primer orden como:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}. \quad (\text{A.30})$$

Esta aproximación es la *ley de Hooke generalizada*. Los coeficientes $\{C_{ijkl}\}$ son las *constantes elásticas* y forman un tensor de cuarto orden $\overset{\leftrightarrow}{C}$ (*tensor de constantes elásticas*). Dado que tanto el tensor de deformaciones como el tensor de esfuerzos son simétricos, las constantes elásticas cumplen:

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk}. \quad (\text{A.31})$$

Pares (ij, kl)	11	22	33	23,32	13,31	12,21
	↓	↓	↓	↓	↓	↓
Voigt (I, J)	1	2	3	4	5	6

Cuadro A.1: Correspondencia de índices en la notación de Voigt.

A partir de estas simetrías se deduce que el tensor de constantes elásticas no puede tener más de 36 elementos independientes. Mediante argumentos termodinámicos, se puede ver que el número de constantes elásticas independientes se reduce a 21. Este número se ve reducido más aún dependiendo de las simetrías del cristal en cuestión. Por ejemplo, en un cristal cúbico hay solamente 3 constantes elásticas independientes y, en un medio isótropo, este número se reduce a 2.

Introduciendo la relación (A.30) en la ecuación de movimiento (A.29) y considerando la aproximación (A.10) para el tensor de deformación, obtenemos:

$$\rho \ddot{u}_i = f_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(C_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right), \quad (\text{A.32})$$

que es la ecuación de movimiento para un medio lineal³.

A.3.1. Notación de Voigt

Tal y como hemos visto, tanto el tensor de deformaciones como el de esfuerzos son simétricos y, debido a esto, las constantes elásticas $\{C_{ijkl}\}$ son simétricas en los pares de índices ij y kl [Ec. (A.31)]. Gracias a estas simetrías es posible definir una notación muy útil que permite expresar los tensores $\overset{\leftrightarrow}{\varepsilon}$ y $\overset{\leftrightarrow}{\sigma}$ como vectores y el tensor $\overset{\leftrightarrow}{C}$ como una matriz. Dicha notación, llamada *notación de Voigt* [378], consiste en hacer corresponder un único índice a un par de índices respecto al que es simétrico un tensor. De esta forma

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &\longrightarrow \varepsilon_I \\ \sigma_{ij} &\longrightarrow \sigma_I \\ C_{ijkl} &\longrightarrow C_{IJ}, \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

donde los índices en mayúsculas corresponden a la notación de Voigt y toman valores enteros entre 1 y 6. El cuadro A.1 resume la definición de dichos índices en función de los pares de índices originales.

³Se considera como medio lineal aquel para el que es válida la ley de Hooke generalizada.

Es preciso señalar que, aunque con la notación de Voigt se reduce el número de índices en los tensores a los que se aplica, dicha operación no es una contracción en el sentido en que se define usualmente dentro del marco del álgebra tensorial.

Apéndice B

Percolación

En este apéndice se introducen algunas ideas sobre *percolación* que son importantes para la discusión de varios puntos relacionados con los resultados que se muestran del 3D-GRFIM en los capítulos 4 y 5. El resumen se centra básicamente en la percolación de nodos¹ y se estructura de la siguiente forma: en la sección § B.1 se presenta la definición de la percolación de nodos y las magnitudes más comunes que se estudian en relación con este modelo. En la sección siguiente [§ B.2] se introducen algunas ideas sobre el análisis de la percolación desde el punto de vista de los fenómenos críticos. En la sección § B.3 se introduce la necesidad de distinguir entre *clusters* infinitos y *clusters spanning* y se discute el significado de la relación de hiperescala en percolación. Finalmente, en la sección § B.4, se define el concepto de animal de red que permite entender desde un punto de vista geométrico el comportamiento de la densidad de *clusters* que se define en la sección § B.1.

B.1. Definiciones fundamentales

El modelo más simple que incluye desorden es, posiblemente, el modelo de *percolación* [243, 253, 254, 379]. Este modelo se define sobre una red tal que, cada uno de sus nodos puede estar, aleatoriamente, en dos estados distintos, a los que es habitual referirse como estado “lleno” (u ocupado) y estado “vacío” (o no ocupado). En la versión más común de la percolación se supone que un cierto nodo está, independientemente del estado de sus vecinos, ocupado con una probabilidad p o vacío con una probabilidad $q = 1 - p$. Además, se supone que la probabilidad p es estacionaria, es decir, es igual para todos los nodos. Los nodos ocupados pueden estar solos (todos

¹Site percolation en inglés.

sus vecinos vacíos) o bien formar grupos de un cierto número de vecinos. Un grupo de vecinos se acostumbra a llamar *cluster*, que se define como el conjunto de nodos ocupados que se pueden conectar con enlaces a primeros vecinos. El tamaño o masa de un *cluster*, que denotaremos por s , se define como el número total de nodos que forman dicho *cluster*. El número medio de *clusters* finitos $N(s;p)$ de tamaño s que ocurren en función de p es, lógicamente, más grande cuanto mayor es el tamaño de la red. Por ello es mejor trabajar con una magnitud intensiva $n(s;p)$ que se define como el número medio de *clusters* finitos de tamaño s que ocurren por unidad de nodo en función de p . Suponiendo una red hipercúbica d -dimensional de L nodos por lado,

$$n(s;p) \equiv \frac{N(s;p)}{L^d}. \quad (\text{B.1})$$

Esta magnitud no es más que la densidad media de *clusters* finitos de tamaño s .

Sumando $n(s;p)$ a todos los valores de s se obtiene el número medio total de *clusters* finitos por unidad de nodo para un cierto valor de p . Denotaremos esta densidad de *clusters* finitos como $n(p)$ y, matemáticamente, viene dada por:

$$n(p) \equiv \sum_s n(s;p). \quad (\text{B.2})$$

La magnitud extensiva asociada a $n(p)$ es el número total de *clusters* finitos $N(p) \equiv n(p)L^d$.

La distribución de tamaños de los *clusters* finitos $D(s;p)$ se define como la probabilidad de que un *cluster* tenga tamaño s y, a partir de los números y densidades introducidos hasta este punto, se escribe como:

$$D(s;p) = \frac{N(s;p)}{N(p)} = \frac{n(s;p)}{n(p)}. \quad (\text{B.3})$$

Para valores pequeños de p , los *clusters* están formados por un número pequeño de nodos, de tal manera que $n(s;p)$ es fuertemente decreciente con s . En cambio, si p es cercana a 1, casi todos los nodos están conectados con sus vecinos y forman un *cluster* grande que se extiende desde un extremo del sistema a los extremos opuestos. A este *cluster* se le acostumbra a llamar *cluster percolante* o *cluster infinito*. Al ir aumentando p desde $p = 0$, el esquema de comportamiento es el siguiente (en función de una cierta concentración p_c): para $p < p_c$, la probabilidad de que tenga lugar un *cluster* infinito es cero y, en cambio, para $p > p_c$, dicha probabilidad es mayor que cero y, naturalmente, depende de p . En este sentido, la fenomenología observada se puede interpretar como la ocurrencia de una transición de fase para $p = p_c$. El valor

de p_c se define con precisión únicamente en el límite termodinámico y depende de las características geométricas de la red. Para la red cúbica simple, por ejemplo, es $p_c = 0.3116$ [254].

Desde un punto de vista más cuantitativo, la probabilidad de que exista un *cluster* infinito P_∞ se define como la fracción de nodos que forman el *cluster* infinito. Si $\langle s \rangle_\infty(p)$ es el tamaño medio del *cluster* infinito,

$$P_\infty(p) \equiv \frac{\langle s \rangle_\infty(p)}{L^d} \quad (\text{B.4})$$

En promedio, para un valor de p dado, hay una fracción p de nodos ocupados. Esta fracción viene dada por la suma de la fracción $P_\infty(p)$ de nodos que forman el *cluster* infinito más la fracción de nodos llenos que forman *clusters* finitos. Esta última fracción viene dada por $n(p)\langle s \rangle(p)$, donde $\langle s \rangle(p)$ es el primer momento de la distribución $D(s; p)$ [Ec. (B.3)], de tal forma que:

$$n(p)\langle s \rangle(p) = \sum_s sn(s; p). \quad (\text{B.5})$$

Finalmente, llegamos a la relación de cierre siguiente:

$$p = P_\infty(p) + \sum_s sn(s; p). \quad (\text{B.6})$$

B.2. La percolación como fenómeno crítico

La probabilidad $P_\infty(p)$ se comporta como un parámetro de orden en la transición que tiene lugar para $p = p_c$ ya que es nula por debajo de p_c y finita por encima. Debido a esto, por analogía con la teoría de fenómenos críticos, se acostumbra a suponer [290] un comportamiento tal que:

$$P_\infty(p) = Au_p^{\beta_p} \theta(p - p_c), \quad (\text{B.7})$$

para valores de p próximos a p_c . La variable de escala a primer orden² es $u_p = p - p_c$. En el exponente crítico se ha añadido un subíndice “ p ” para indicar que se refiere a la percolación. A partir de la Ec. (B.6) se deduce que

$$\sum_s sn(s; p) = p - Au_p^{\beta_p} \theta(p - p_c). \quad (\text{B.8})$$

²Dado que $1/\nu_p > 0$ (ν_p se define en la Ec. (B.11)) en percolación, las correcciones a u_p más allá de primer orden no son importantes en el límite termodinámico [§ 5.1].

También se introducen los exponentes α_p y γ_p de la siguiente forma³:

$$[n(p)]_{sing} = \left[\sum_s n(s; p) \right]_{sing} \sim |u_p|^{2-\alpha} \quad (\text{B.9})$$

$$[n(p)\langle s^2 \rangle(p)]_{sing} = \left[\sum_s s^2 n(s; p) \right]_{sing} \sim |u_p|^{-\gamma}, \quad (\text{B.10})$$

donde el subíndice “*sing*” indica que únicamente se incluye la parte no analítica de cada una de las magnitudes. Por ejemplo, la parte no analítica en la Ec. (B.8) es $A(u_p)^{\beta_p} \theta(p - p_c)$.

La *longitud de conexión* o *longitud de correlación* $\xi(p)$ está relacionada en percolación [380] con el radio típico de los *clusters* finitos más grandes y, cerca del punto crítico, se comporta de acuerdo con un exponente ν_p como:

$$\xi(p) \sim |u_p|^{-\nu_p}. \quad (\text{B.11})$$

La densidad $n(s; p)$ presenta [290, 381] un comportamiento tipo ley de potencias para $p = p_c$: $n(s; p_c) \sim s^{\tau_p}$. Dado este comportamiento, bajo la transformación del GR, $n(s; p)$ transforma como:

$$n(s(b); p(b); b) = b^{\tau_p d_p} n(s; p), \quad (\text{B.12})$$

donde d_p es la dimensión fractal de los *clusters* finitos. Puesto que s transforma como $s(b) = b^{-d_p} s$, se puede definir el siguiente invariante:

$$\mathcal{I}[n(s; p), s] = n(s; p) s^{\tau_p}. \quad (\text{B.13})$$

Por otro lado, este invariante sólo puede depender del invariante formado por s y u_p , que es $\mathcal{I}[u_p, s] = u_p s^{1/\nu_p d_p}$. De esta forma, la hipótesis de escala que resulta para $n(s; p)$ es:

$$n(s; p) = s^{-\tau_p} \hat{n}_p(u_p s^{1/\nu_p d_p}), \quad (\text{B.14})$$

donde \hat{n}_p es una función de escala. Habitualmente, en percolación no se formulan las hipótesis de escala introduciendo de forma directa la dimensión fractal d_p sino que se utiliza preferentemente un exponente⁴ $\sigma_p \equiv 1/\nu_p d_p$ y, esta misma notación se ha

³En la Ref. 254 se pueden encontrar los valores para cada exponente en redes con distintas geometrías.

⁴El exponente $\sigma_p = 1/\nu_p d_p$ relaciona el tamaño máximo de los *clusters* finitos con la distancia a p_c : $s_{max} \sim |u_p|^{-1/\sigma_p}$.

extendido, en algunos casos, al estudio del RFIM con dinámica metaestable atérmica-adiabática (ver, por ejemplo, las Refs. [57, 213, 240]) que se presenta en esta tesis [Capítulo 5]. A partir de la hipótesis de escala (B.14) se obtiene el k -ésimo momento de s (multiplicado por $n(p)$):

$$[n(p)\langle s^k \rangle(p)]_{sing} = \left[\sum_s s^k n(s;p) \right]_{sing} \sim |u_p|^{(\tau_p-1-k)d_p\nu_p}. \quad (\text{B.15})$$

Igualando ahora los miembros derechos de las Ecs. (B.8)–(B.10) con la Ec. (B.15) para el valor de k correspondiente en cada caso, se obtienen las siguientes relaciones entre los exponentes definidos:

$$2 - \alpha_p = (\tau_p - 1)d_p\nu_p \quad (\text{B.16})$$

$$\beta_p = (\tau_p - 2)d_p\nu_p \quad (\text{B.17})$$

$$-\gamma_p = (\tau_p - 3)d_p\nu_p. \quad (\text{B.18})$$

El tamaño finito del sistema es notable en las magnitudes asociadas con la avalancha infinita (ésta atraviesa el sistema), de manera que es necesario tener en cuenta el tamaño en las hipótesis de escala. Suponiendo [253] que la densidad de la avalancha infinita coincide con la de las avalanchas grandes pero finitas (incluidas en $n(s;p)$) y que tienen la misma dimensión fractal, el tamaño medio de la avalancha infinita $\langle s \rangle_\infty(p, L)$ escala como:

$$\langle s \rangle_\infty(p, L) = L^{d_p} \tilde{P}_\infty(u_p L^{1/\nu_p}). \quad (\text{B.19})$$

Esta hipótesis de escala nos permite obtener la hipótesis de escala para $P_\infty(p, L)$ utilizando la definición (B.4):

$$P_\infty(p, L) = L^{d_p-d} \tilde{P}_\infty(u_p L^{1/\nu_p}). \quad (\text{B.20})$$

Por otro lado, introduciendo la dependencia con L en la hipótesis de escala (B.7) vemos que, a parte de la Ec. (B.20), se debe cumplir

$$P_\infty(p, L) = L^{\beta_p/\nu_p} \tilde{P}_\infty(u_p L^{1/\nu_p}). \quad (\text{B.21})$$

Igualando las Ecs. (B.20) y (B.21) llegamos a una importante relación entre exponentes⁵:

$$\beta_p = \nu_p(d - d_p), \quad (\text{B.22})$$

⁵La validez de esta relación fue probada numéricamente [237] en $d = 2$.

que, junto a las relaciones (B.16) y (B.17) nos lleva a la llamada *relación de hiperescala*:

$$2 - \alpha_p = \nu_p d. \quad (\text{B.23})$$

Puesto que en percolación la relación de hiperescala (B.23) está muy ligada a la relación (B.22), también se llama, por extensión, relación de hiperescala a las relaciones del tipo (B.22).

B.3. Número de *clusters*. *Cluster* infinito y *clusters spanning*

En 1984, Aharony *et al.* [382] demostraron que, por encima de la dimensión crítica superior⁶ $d_c = 6$, la relación (B.22) no se cumple y ésto lo atribuyeron a que la relación de hiperescala no se cumple (rotura de hiperescala). Posteriormente, Coniglio [380, 384, 385] propuso una interpretación geométrica para explicar la rotura de hiperescala. Según su interpretación, la relación de hiperescala es equivalente a asumir que, en el umbral de percolación ($p = p_c$), sólo ocurre un *cluster spanning* en un volumen ξ^d , es decir, la parte singular de $n(s; p)$ está asociada únicamente a un *cluster*. Posteriormente, de Arcangelis [386], demostró numéricamente que, efectivamente, existe un número infinito de *clusters* infinitos para $d = 7$, lo que confirmaba la hipótesis de Coniglio. Por otro lado, Newman y Schulman [387, 388] demostraron rigurosamente un teorema según el cual sólo puede haber cero, uno o una infinidad de *clusters* infinitos. Además, también demostraron que, en el caso en que los *clusters* no ocupen una fracción finita del sistema, sólo es posible que haya cero o una infinidad de *clusters*. En principio, estos teoremas parecen ir en el sentido de lo propuesto en las referencias [384, 386] o, al menos, no parecen contradecirse entre sí. Algunos años más tarde, Aizenman *et al.* [389] propusieron un teorema [389] que demuestra que la probabilidad de que exista más de un *cluster* infinito que ocupe una fracción finita del sistema es cero, sea cual sea la dimensión del sistema. Este teorema ha sido demostrado posteriormente de distintas formas⁷ [390–392]. Estos resultados rigurosos

⁶La dimensión crítica superior d_c es la dimensión por encima de la que la solución de campo medio es válida. En percolación es [383] $d_c = 6$.

⁷Una forma cualitativa de enunciar todos estos teoremas es la siguiente: si en una cierta configuración con $p_1 < p$ existe un *cluster* infinito (que ocupa una cierta fracción del sistema distinta de cero) y se continúan ocupando nodos (para llegar a la concentración p), la probabilidad de formar un segundo *cluster* infinito sin que éste sea vecino próximo del *cluster* que ya existía es nula. Por tanto, si el segundo *cluster* es vecino del primero, ambos *clusters* forman un único *cluster*.

parecen contradecir los resultados de de Arcangelis [386]. Sin embargo, no es así [393] puesto que tales teoremas se refieren claramente a *clusters* que ocupan una fracción finita del sistema⁸ (sólo ocurre para $p > p_c$) y, en cambio, de Arcangelis encuentra una infinidad de *clusters spanning* solamente para $p = p_c$ en el límite termodinámico. Más recientemente [392], se han demostrado rigurosamente algunos aspectos relacionados con los *clusters spanning* en $p = p_c$ que confirman y, en algunos aspectos, completan los resultados numéricos de de Arcangelis. En particular, se ha demostrado que en cualquier dimensión $d > 1$, para $p = p_c$, la probabilidad de que ocurra más de un *cluster spanning* no tiende a cero en el límite termodinámico. En el caso en que $d > 6$, se demuestra que ocurren una infinidad de *clusters spanning* con probabilidad 1 (se produce una proliferación de *clusters spanning*). El hecho de que existan varios *clusters spanning* para $d < 6$ no fue resuelto por de Arcangelis [386] (o, al menos, no fue publicado [393]). Sin embargo, sí existen evidencias numéricas de que esto es así [394].

De toda esta discusión, resulta clara la necesidad de distinguir entre *clusters infinitos* y *clusters spanning*, tal y como remarca Stauffer en la Ref. [393]. En el límite termodinámico, existe un único *cluster* infinito que ocupa una fracción finita para $p > p_c$. En cambio, para $p = p_c$, es posible la existencia de más de un *cluster spanning*, pero ninguno ocupa una fracción finita del sistema. En este sentido, la diferencia entre el *cluster* infinito y los *clusters spanning* es que el *cluster* infinito mantiene su identidad al extrapolar al límite termodinámico mientras que los *clusters spanning* no la mantienen. En otras palabras, para un sistema finito puede haber *clusters spanning* que lo sean para un tamaño L pero que dejen de serlo para un tamaño mayor (son *fractales volátiles* [282] cuya existencia depende del tamaño del sistema). En cambio, si un *cluster* es infinito en un sistema de tamaño L , no deja de serlo al aumentar L .

Si suponemos que el número de *clusters spanning* que ocurren para $p = p_c$ aumenta con el tamaño L del sistema con un exponente θ_p y, además, suponemos que las singularidades en $p = p_c$ están asociadas a estos *clusters* que son grandes pero finitos (no ocupan una fracción finita del sistema), la parte singular del número de *clusters* finitos se debe comportar como:

$$[N(p, L)]_{sing} = L^{\theta_p} \tilde{N}_p(u_p L^{1/\nu}), \quad (\text{B.24})$$

⁸El enunciado del primer teorema que demuestra la unicidad del *cluster* infinito es claro en este sentido: “En cualquier modelo irreducible e invariante translacionalmente, si $P_\infty > 0$ entonces existe exactamente un *cluster* infinito (con probabilidad 1)”. La condición $P_\infty > 0$ indica que una fracción finita P_∞ del sistema está ocupada por *clusters* infinitos. Un modelo irreducible es aquel para el que la probabilidad de que un nodo x esté conectado con un nodo y es mayor que cero para cualquier par de nodos x e y .

y la densidad correspondiente viene dada por

$$[n(p, L)]_{sing} = L^{\theta_p - d} \tilde{n}_p(u_p L^{1/\nu_p}). \quad (\text{B.25})$$

Por otro lado, cuando se incluye la dependencia con L en la hipótesis de escala (B.9), ésta se expresa como:

$$[n(p, L)]_{sing} = L^{(\alpha - 2)/\nu_p} \tilde{n}_p(u_p L^{1/\nu_p}). \quad (\text{B.26})$$

Finalmente, de la comparación de esta última expresión con la Ec. (B.25) llegamos a la relación de exponentes que se ha denominado como *violación de hiperescala*:

$$2 - \alpha_p = \nu_p(d - \theta_p). \quad (\text{B.27})$$

Este resultado está de acuerdo con la interpretación de Coniglio [380, 384]: cuando solamente ocurre un *cluster spanning* ($\theta_p = 0$), se recupera la relación de hiperescala [Ec. (B.23)].

Utilizando ahora conjuntamente las Ecs. (B.16), (B.17) y (B.27) es posible obtener la relación de rotura de hiperescala alternativa

$$\beta_p = \nu_p(d - d_p - \theta_p). \quad (\text{B.28})$$

Sin embargo, el exponente β_p se define a partir de P_∞ [Ec. (B.7)], que está relacionado con el *cluster* infinito y no con los *clusters spanning*. Teniendo en cuenta pues los teoremas de unicidad del *cluster* infinito, llegamos a la conclusión de que la relación de hiperescala $\beta_p = \nu_p(d - d_p)$ [Ec. (B.22)] es válida. De cualquier forma, la relación de rotura de hiperescala (B.22) no es consistente con la relación (B.28) a menos que sea $\theta_p = 0$. Es natural pues preguntarse cual es el motivo de tal inconsistencia y cual de las dos relaciones es válida. La inconsistencia radica en el hecho de que la rotura de hiperescala (B.27) está ligada a los *clusters spanning* y es, por tanto, válida únicamente para $p = p_c$. En cambio, la definición de β_p tiene sentido para $p < p_c$. Resumiendo, la relación válida es (B.22) mientras que el exponente β_p que aparece en las expresiones del tipo (B.28) no está realmente asociado con el *cluster* infinito. Por otro lado, es habitual [253] suponer que el *cluster* infinito tiene la misma dimensión fractal que los *clusters* finitos grandes (como pueden ser los *clusters spanning*), sin embargo, esto se debería estudiar con más detalle porque, dado que el *cluster* infinito y los *clusters spanning* no coexisten en el límite termodinámico y que hay una infinidad de *clusters spanning* y sólo un *cluster* infinito, podrían tener también dimensiones fractales

distintas. En este caso, la relación de hiperescala (B.22) podría no ser estrictamente válida sino que debería ser:

$$\beta_p = \nu_p(d - d_\infty), \quad (\text{B.29})$$

donde d_∞ es la dimensión fractal del *cluster* infinito.

B.4. Resultados exactos. Animales de red

El modelo de percolación es suficientemente sencillo como para que se puedan calcular las densidades $n(s; p)$ de forma exacta a partir del número g_{st} de *clusters* distintos de tamaño s y perímetro⁹ t . Es habitual referirse a los distintos *clusters* como *animales de red*¹⁰, nombre debido a Harary [395], y g_{st} es el número de animales. La densidad de *clusters* finitos se expresa en función de g_{st} como:

$$n(s; p) = \sum_t g_{st} p^s q^t. \quad (\text{B.30})$$

El número de configuraciones g_{st} no depende de p y es, por tanto, una magnitud más elemental que $n(s; p)$. El cálculo de los coeficientes g_{st} es computacionalmente pesado y, este es el motivo por el que se conocen de forma exacta únicamente para *clusters* de un tamaño máximo s_{max} del orden de 20 en redes bidimensionales y hasta $s_{max} = 14$ en una red cúbica simple. Las primeras estimaciones en redes bidimensionales se deben a Sykes *et al.* que llegaron a s_{max} del orden de 15 tanto en redes bidimensionales [396] como en la red cúbica simple [398]. A partir de estos desarrollos fue posible obtener estimaciones del umbral de percolación [398, 399] y de los exponentes críticos γ_p [398, 399], β_p [400] y δ_p [401, 402]. Posteriormente, Mertens [397] presentó un algoritmo más rápido que el utilizado por Sykes *et al.* y logró llegar a s_{max} del orden de 20. La Fig. B.1 muestra la densidad $n(s; p)$ correspondiente a una red cuadrada para tres valores de p . Los datos se obtienen a partir del desarrollo (B.30) con los coeficientes g_{st} de la Ref. 396 ($s_{max} = 17$) y los de la Ref. 397 ($s_{max} = 22$). Como se puede ver, a pesar de que $n(s; p)$ se comporta aproximadamente como una ley de potencias en el umbral de percolación ($p_c = 0.593$, [254, 396]), presenta ciertas desviaciones con respecto al comportamiento tipo ley de potencias $n(s; p_c) \sim s^{-\tau_p}$ (con $\tau_p = 187/91 \simeq 2.05$, [254]) para valores pequeños de s . Estas desviaciones se observan también al comparar las densidades que se obtienen de las simulaciones numéricas, tal y como señalaron Hoshen

⁹El perímetro t de un *cluster* es el número de nodos vacíos que son vecinos próximos de algún nodo del *cluster*.

¹⁰*Lattice animals* en inglés.

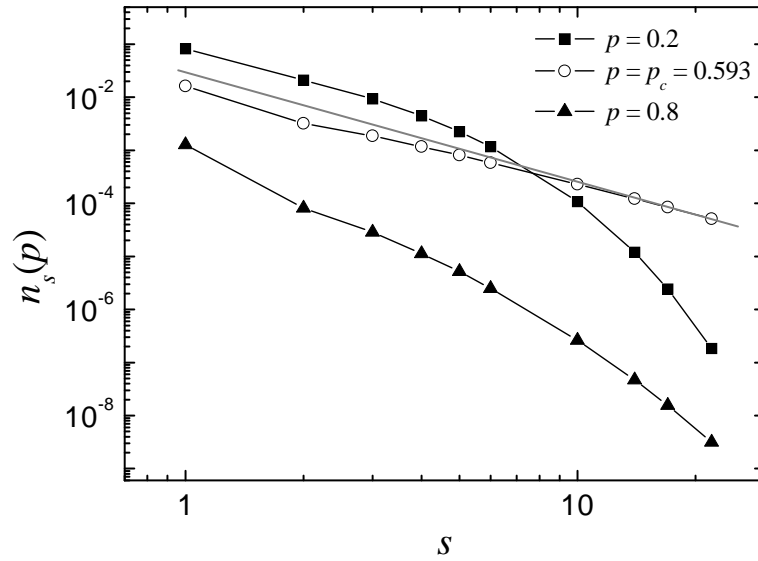


Figura B.1: Densidad de *clusters* finitos $n(s;p)$ en una red cuadrada en función de s para distintos valores de p (indicados en la leyenda). Los datos corresponden a la expansión (B.30) con los coeficientes g_{st} de la Ref. 396 para $s \leq 17$ y de la Ref. 397 para $17 < s \leq 22$. La línea continua gris corresponde a una ley de potencias $0.03 s^{-\tau_p}$ (con $\tau_p = 187/91$, [254]) que indica el comportamiento asintótico [290] de $n(s;p)$ en el umbral de percolación $p_c = 0.593$.

et al. [290] en el caso de una red triangular. Estos autores interpretaron tal desviación como una corrección a la hipótesis de escala (B.14). Sea cual sea la interpretación que se de a esta desviación, la expansión (B.30) muestra claramente que está íntimamente ligada a efectos geométricos que dependen de la topología de la red.