



Revista Internacional de Investigación e Innovación
Tecnológica

Página principal: www.riit.com.mx

Algoritmo Híbrido para el cálculo fractal en Nano Estructuras porosas

Hybrid Algorithm for Calculating Fractal Porous Nanostructures

Calderón-Segura, Y.Y.¹, Burlak, G.¹, Hernández-Aguilar J.A.²

¹ Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas.
Universidad Autónoma del Estado de Morelos Avenida Universidad 1001. Col. Chamilpa. C.P. 62210. Cuernavaca,
Morelos. ycaderons@uaem.mx; gburlak@uaem.mx

² Facultad de Contaduría, Administración e Informática, UAEM.
jose_hernandez@uaem.mx

Innovación tecnológica: Con el estudio fractal de las Nano estructuras porosas podemos identificar la unidireccionalidad de la estructura considerando el comportamiento de un clúster de percolación, la innovación de este trabajo de investigación consiste en la optimización de la filtración de una estructura porosa de forma simulada.

Áreas de aplicación industrial: Filtros de partículas y, gas, dirección de haz de luz, purificación de aguas residuales (degradación de contaminantes), hasta la construcción de paneles para celdas sensibilizadas por colorantes (dye-sensitized solar cells, o DSSC o celdas Grätzel). El dióxido de titanio (TiO_2) es un semiconductor que actúa como foto catalizador en presencia de radiación ultravioleta. Se puede encontrar en la naturaleza en cualquiera de sus formas alotrópicas: brookita, rutilo o anatasa.

Recibido: 31 marzo 2016.

Aceptado: 13 agosto. 2016.

Resumen

En este trabajo se aplica el algoritmo de Metrópolis con la finalidad de construir una distribución aleatoria de poros cuyo objetivo es simular una estructura porosa real (clusters de percolación). La característica de los huecos en estos clusters es la de formar un filtro eficiente a través de un análisis estructural de tres dimensiones (3D). Por medio de la generación de datos aleatorios que conforman una trayectoria de percolación, se simula el comportamiento fractal tridimensional. A esta estructura porosa se le aplica el algoritmo de metrópolis para encontrar una temperatura crítica con el propósito de obtener resultados que mejoren la solución inicial. Los resultados de esta simulación indican que en una malla tridimensional de $130 \times 130 \times 130$ se obtiene una dimensión fractal (df) de 2.99 con una probabilidad crítica ($p_c = 0.355$), la cual es la que se acerca más al valor de la dimensión fractal de Hausdorff (δ) de 3.0.

Palabras clave: percolación, fractal 3D, algoritmo híbrido.

Abstract

In this paper the Metropolis algorithm is applied in order to build a random distribution of pores, which aims to simulate a real porous structure (percolation clusters). The characteristic of hollows in these clusters is to form an efficient filter through three-dimensional (3D) structural analysis. By generating random data that form a percolation path, the three-dimensional fractal behavior is simulated. To this porous structure is applied the metropolis algorithm for finding a critical temperature in order to obtain results that improve the initial solution. The results of this simulation show that in a three-dimensional grid $130 \times 130 \times 130$ a fractal dimension (df) of 2.99 is obtained with a critical probability ($p_c = 0.355$), which is the one that is closer to the value of the fractal dimension of Hausdorff (δ) of 3.0.

Key Words: percolation, fractal, hybrid algorithm.

1. Introducción

El fenómeno de la percolación se ha convertido en un tema atractivo para los investigadores interesados en ampliar el conocimiento científico y aprovechar sus propiedades en aplicaciones industriales por ejemplo: en el desarrollo de máscaras de gas, filtros de celdas solares, cuencas acuíferas y extracción de petróleo (Zulkamain, Mariatti y Azid, 2008; Kozlov y Lagus 2010; Wettstein et al., 2012), y científicas como la generación de modelos booleanos (Gouéré, 2010).

Percolación

La percolación se refiere a la circulación y filtración de fluidos a través de materiales porosos (N. Bastas, et al, 2014), (Calderon-Segura Yessica et al, 2013).

(Chelidze, 1982), (Robinson, 1983) y (Wike, 1985) fueron de los primeros en estudiar la teoría de percolación aplicada al flujo y medios porosos. Ellos consideraron una piedra porosa, cuando esta es sumergida en el agua; y se cuestionaron ¿cuál era la probabilidad de la piedra, para que su centro fuera penetrado por el agua?.

La dimensión fractal (df) es una herramienta utilizada para el análisis de estructuras porosas con aplicaciones en diversos campos

científicos, por ejemplo, Hunt (2004) planteó el problema de percolación continua para conductividad hidráulica en fractales sólidos que permiten encontrar la dimensión fractal con respecto a la probabilidad crítica de la percolación.

Burlak et al. (2009) analizaron el comportamiento de los nano emisores de radiación en un clúster de percolación.

Blavatska, et al., (2010) discuten el comportamiento lineal polimérico de los clúster de percolación mediante una simulación numérica, cuando dos fractales se encuentran.

La percolación fractal ha sido utilizada para resolver problemas de predicción de flujo y procesos de transporte así como también en distribución de potencia eléctrica, análisis de resistencias DC, problemas industriales y tecnológicos como depósitos de recuperación de petróleo, gas, agua subterránea entre otros (Orzechowsk, 1998), (Bird y Perrier, 2010), (Shigeki Matsutani et al 2012), (Hernán D., et al 2009), (Tai-Fa, 2000), (Viktoria, 2010), (Raúl H, 2003), (Igor, 2009), (M. Ferer, 2004).

El coste computacional de los algoritmos asociados al análisis de la dimensión fractal, principalmente en el campo de imagen, es

muy elevado (Shigeki Matsutani et al., 2012).

Pregunta de investigación

¿Es posible alcanzar el óptimo global de un clúster de percolación fractal mediante el algoritmo de metrópolis?

La importancia de este trabajo radica en la evaluación de una estructura fractal del clúster de percolación utilizando distintas probabilidades críticas (p_c), considerando la distancia de poro y el radio del poro en una red tridimensional con el menor esfuerzo computacional posible y la búsqueda de la mejor solución mediante la aplicación de un sistema simulado.

Esta investigación se divide en las siguientes secciones: la sección dos, presenta una introducción a la percolación fractal. La sección tres, detalla la metodología. La sección 4, muestra los resultados experimentales y las pruebas de eficiencia. Finalmente, se presentan las conclusiones y las referencias.

2. Percolación Fractal

Se define como una percolación fractal al concepto de auto similitud, se debe resaltar que la autosimilitud está fuertemente relacionada con las propiedades de normalización que utilizan los fenómenos críticos de acuerdo con las propiedades de la percolación. El estudio de la percolación se centra en el estudio de caminos a través de una probabilidad $p \in [0,1]$, cuando se tiene 0 se indica que el poro está cerrado en caso contrario si p es 1 el poro está abierto. Entonces se establece que Sí $p > p_c$ indica que el fluido puede penetrar en el material poroso y si $p_c < p$, indica que el fluido no puede penetrar en el material poroso simulado (N. Bastas, et al., 2014).

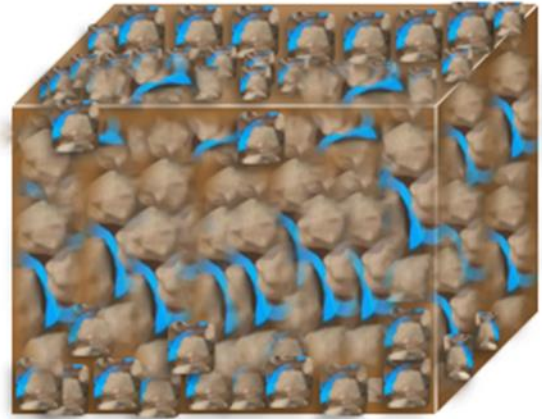


Figura 1. Fenómeno de Percolación.

De acuerdo a (Di Xiao, 2012) se establece que un fractal es un conjunto de dimensión de Hausdorff- Besicovitch. Éste, consta de fragmentos geométricos de orientación y tamaño variables, pero de aspecto similar. Los fractales a cierta escala son semejantes aunque no necesariamente idénticos a los de las estructuras visibles a escala mayor o menor. Se confirma que son estadísticamente iguales (esto significa que si se mide alguna propiedad como la irregularidad, entonces el valor promedio y la desviación estándar son iguales) (Alireza Jafari et al., 2013). La literatura (Vlasova, 2010), (V.I. 2000), (Hunt, et al., 2007), (Jinrong, et al., 2004), (Bethany S. et al., 2012), (Stauffer, 1985), (Bastas, 2014) indica que debido a la gran variedad de fractales como son: el triángulo de Sierpinski, la curva de Von Koch, la curva de Peano, la curva de Hilbert entre otras, son difíciles de caracterizar porque su comportamiento es distinto. Así que mediante un modelo matemático, se pueden desarrollar modelos fractales ideales por medio de un algoritmo iterativo o regla repetitiva que tiene una forma ya sea irregular, interrumpida o fragmentada a cualquier escala que se produzca. Los fractales matemáticos cumplen con las propiedades de auto similitud. En este trabajo se utiliza el algoritmo de dimensión Hausdorff. Para obtener el fractal, se

considera el clúster de percolación partiendo de un algoritmo heurístico.

En esta investigación se considera una estructura porosa de forma teórica, la cual es simulada computacionalmente en una red tridimensional, que representa la estructura porosa. El sistema identifica en qué momento se ha encontrado el clúster de percolación y utiliza una matriz de adyacencia en un grafo no dirigido que representa la estructura porosa.

Algoritmo de Metrópolis aplicado en el análisis de la dimensión fractal

El algoritmo propuesto utiliza como base el concepto de dimensión fractal de Hausdorff, la cual esta df está dada por la ecuación número (1).

$$\log_{10} 8 / \log_{10} (1/ 0.5) = 3 \quad (1)$$

Donde 0.5 es el factor de escala y 8 es el número de unidades auto similares generado después del escalamiento (Barnsley, 1998), (Hou et al., 2008).

Esta estructura por lo tanto es un cubo $2a \times 2a \times 2a$ con un número N de niveles que se aproxima al infinito. En este modelo se considera el clúster de percolación en una red tridimensional que simula el medio natural mediante nodos y aristas.

Para simular el clúster de percolación fractal, en esta investigación se propone el uso del algoritmo de Metrópolis con el objetivo de obtener un dato óptimo global (mejor solución). Este método produce un cambio aleatorio en la configuración y evalúa el cambio correspondiente en la energía (véase el algoritmo de la figura 2).

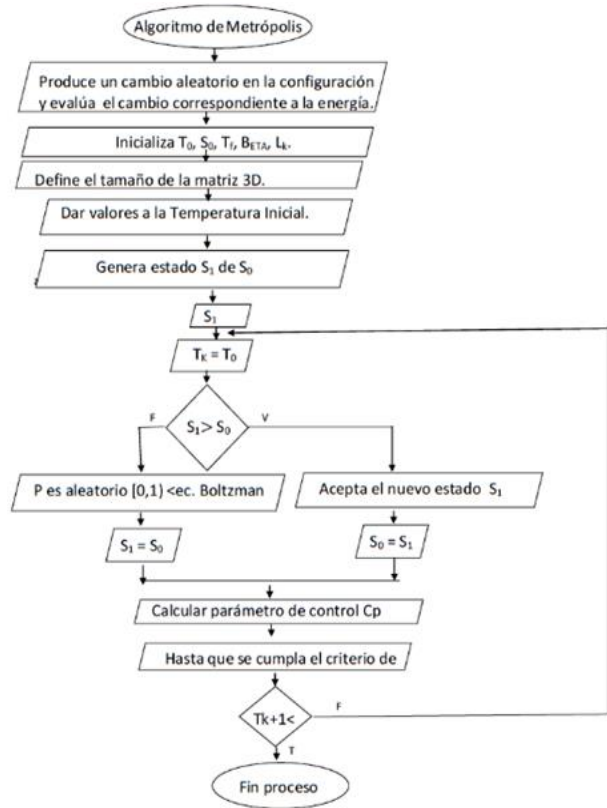


Figura 2. Algoritmo de Metrópolis.

En el anterior algoritmo, se utilizan las siguientes variables:

- T_0 = Temperatura inicial
- S_0 = Solución inicial
- S_1 = Segunda solución
- T_f = Temperatura final
- Beta = Constante de Boltzman
- L_k = Indicador del equilibrio térmico.

En este algoritmo en primer lugar se inicializan las variables, posteriormente se define el tamaño de la matriz 3d (malla) y se asignan valores a la temperatura inicial T_0 . El clúster se encuentra en un estado inicial so también llamado estado energético inicial, haciendo una pequeña perturbación se genera un segundo estado s_1 . Si $(s_1 > s_0)$ se evalúa la distancia de Hausdorff según (Franovic´ y Miljkovic, 2009) con respecto al primer clúster de percolación generado en forma fractal s_1 . Si la distancia de la solución

s_1 es mayor que la nueva solución generada s_0 , el algoritmo acepta la nueva solución s_0 y se considera el número de estructuras auto similares ε . Si no, se acepta y se incorpora una variación con la probabilidad de Boltzman, ver figura 1.

3. Metodología

1. El algoritmo mostrado en la figura 2 se implementó en lenguaje C#.
2. Para probar el funcionamiento del algoritmo de la figura 2, se generaron 30 pruebas con tres distintas probabilidades (p) en una malla de 50, 70, 100, y 130 vértices aleatorios.
3. Para las pruebas se utilizó una computadora portátil con procesador Intel i7-740QM quad Core processor (1.73GHz) con Turbo Boost hasta 2.93 Ghz con sistema operativo Genuine Windows 7 Home Premium de 64 bits. El compilador utilizado fue Visual C 2008.
4. Se obtuvieron resultados numéricos que fueron graficados en Matlab 2015.
5. Los resultados obtenidos para la df se compararon con los obtenidos por Hunt en 2004.

4. Resultados experimentales

Cabe mencionar que la porosidad generada por la simulación en las pruebas son similares a las encontradas por Hunt (2004). De acuerdo a los resultados obtenidos se demuestra que experimentalmente la eficacia de la simulación depende de la sintonización del tamaño de poro, la distancia de poro y el conjunto de componentes de partículas específicas N .

Desde el punto de vista experimental se alcanzó una percolación fractal de **2.99** porque el sistema permite calcular la dimensión fractal para cualquier $p > p_c$. El

sistema permite analizar también de forma visual la percolación fractal que representa el material poroso (ver figura 3).

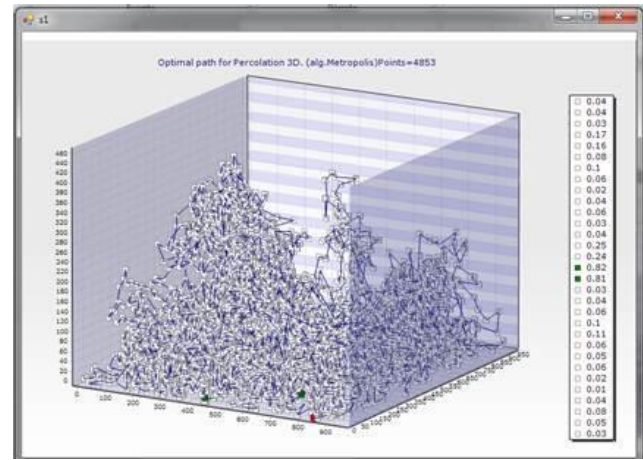


Figura 3. Estructura porosa en una malla 50x50x50.

La figura anterior muestra una estructura porosa con una probabilidad de $p=0.2$, en una malla tridimensional de 50x50x50. La estructura contiene pequeñas formaciones de clústeres que no atraviesan el sistema. Así que a partir de esta simulación se demuestra que si $p < p_c$ el material es ineficiente, ya que no se observa una penetración que atraviese la estructura tridimensional simulada.

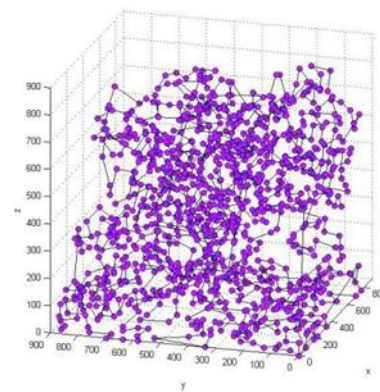


Figura 4. Estructura porosa en una malla 70x70x70.

La figura 4 muestra una estructura porosa con una probabilidad de $p=0.9$, en una malla tridimensional de 70x70x70. La estructura

contiene pequeñas formaciones de clústeres que atraviesan el sistema. Así que esta simulación permite inferir que si $p > p_c$ el material es eficiente.

4.1. Pruebas de eficiencia

Tabla 1. Resultados para distintas mallas.

Dimensión	P_c	(S)	(R)	df (Simulado)	df (Hunt, 2004)
50x50x50	0.325	0.1	0.6	2.88	2.888
70x70x70	0.308	0.6	0.3	2.2	2.555
130x130x130	0.322	0.3	0.6	2.96	2.9778
130x130x130	0.355	0.9	0.6	2.99	2.982
100x100x100	0.316	0.9	0.6	2.44	2.942

En la tabla 1, la primera columna representa el tamaño de la malla simulada. La segunda columna corresponde a la especificación del tamaño de poro aleatorio $\langle s \rangle$ en μm . La tercera columna representa la distancia entre poros $\langle r \rangle$ en μm . La cuarta columna muestra los resultados obtenidos por el sistema simulado, y finalmente, en la quinta columna se muestra la dimensión fractal de las pruebas experimentales realizadas por Hunt (2004) para cada estructura porosa.

En esta tabla se muestran las pruebas experimentales arrojadas por nuestra simulación utilizando el algoritmo de Metrópolis (df simulado), y se hace una comparación con las pruebas publicadas por Hunt (2004). Se puede observar que la estructura de vecindad con un tamaño de poro $s = 0.9 \mu\text{m}$ y distancia de poro $r = 0.6 \mu\text{m}$, genera una dimensión fractal de 2.99 mejorando la calidad fractal encontrada por Hunt. La segunda mejor estructura en eficiencia es la que se genera con una matriz tridimensional de 50x50x50 nodos con un tamaño de poro $s = 0.1 \mu\text{m}$, $r = 0.6 \mu\text{m}$ y con una probabilidad de $p = 0.32$. De esta manera, se demuestra que el fractal de percolación depende de la probabilidad crítica p_c , del tamaño y la distancia del poro,

se debe resaltar que el tamaño de la malla calculada influye también para cada dimensión fractal.

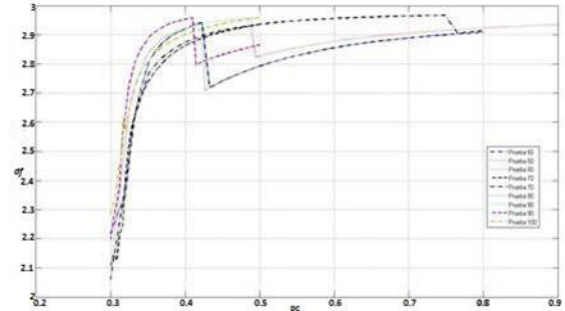


Figura 5. Resultados de df del clúster de percolación con distintos tamaños de malla.

En la figura 5 se observa la representación de la dimensión fractal para diversos tamaños de red, el comportamiento en los resultados nos indica que con una probabilidad $p=0.318$ la formación de los clúster de percolación obtienen mejores resultados alcanzando la mejor dimensión fractal con $df=2.99$, la cual es la más cercana al valor de 3.0 reportado para la fractales tridimensionales H-shaped por (Hou, Xie, Wen y Sheng 2008). A partir de un tamaño de poro $r=0.6 \mu\text{m}$ y distancia entre poros $s=0.9 \mu\text{m}$.

De acuerdo a lo reportado en (Calderon et al., 2013; Burlak et al. 2009; Cheng et al. 2004; Jafari y Babadagli, 2013; Franovic’ y Miljkovic’, 2009) se establece el valor de $p_c > p$, y es a partir de 0.3 donde se comienza el análisis para la generación de clústeres, mientras más grande sea este valor mayor cantidad de clústeres se encontrarán.

La peor dimensión fractal encontrada ($df=2.2$) fue en una malla de 70x70x70, con un tamaño de poro $r=0.6$ y una distancia $s=0.3$ con $N=80$.

En esta investigación se utilizó el método de Montecarlo, dado que se aplicó un algoritmo heurístico híbrido basado en el vecino más

cercano, el cual busca mejorar la eficiencia en la generación de los clusters de percolación, considerando una temperatura crítica, similar al comportamiento térmico del modelo ISING (Calderón-Segura, 2015). La simulación implementada arroja datos experimentales similares al autor (Jafari, 2013).

5. Conclusiones

Con el análisis y desarrollo del algoritmo presentado, se demuestra que se pueden alcanzar estructuras de percolación de buena calidad con respecto a un fractal, ya que son estructuras que se extienden a un comportamiento en tres dimensiones.

Experimentalmente la eficacia de la simulación depende de la sintonización del tamaño de poro, distancia de poro y el conjunto de componentes de partículas específicas N.

Desde el punto de vista experimental se alcanza una dimensión fractal muy cercana a la óptima de $df=2.99$ porque el sistema permite calcular la dimensión fractal a cualquier $p > p_c$.

6. Referencias

Bastas, N., Giazitzidis, P., Maragakis, M., and Kosmidis, K. 2014. “Explosive percolation: Unusual transitions of a simple model”. *Physical A: Statistical Mechanics and its Applications*. 407, 2014, 54-65.

Calderon-Segura, Y., Burlak G, Martinez-Rangel, M.G. 2013. “Percolation by links applied to the minimum spanning tree problem”. CONIELECOMP, 2013, 67-73.

Hunt A.G. 2004. “Continuum percolation theory for water retention and hydraulic conductivity of fractal soils: estimation of the critical volume fraction for percolation”.

Advances in Water Resources. 27, 2004, 175–183.

Burlak, G., Díaz-de-Anda, A., Karlovich, Y. and Klimov. A.B. 2009. “Critical behavior of nan emitter radiation in a percolation material”. *Physics Letters A*. **373** 2009, 1492–1499.

Blavatska, V., Von Ferber, C., and Holovatch, Y. 2010. “Universal features of polymer shapes in crowded environments”. *Physics Letters A* 374, 2010, 2861-2864.

Orzechowsk, E. 1998. “A lower bound on the box-counting dimension of crossings in fractal percolation”. *Stochastic Processes and their Applications*. **74**, 1998, 53-65.

Bird, N.R.A. and Perrier, E. 2010. “Multiscale percolation properties of a fractal pore network”. *Geoderma*. **160**, 2010, 105–110.

Matsutani, S., Shimosako, Y. and Wang, Y. 2012. “Fractal structure of equipotential curves on a continuum percolation model”. *Physical A*. **391**, 2012, 5802-5809.

Rozenfeld, H.D. and Makse, H.A. 2009. “Factuality and the percolation transition in complex network”. *Chemical Engineering Science*. 64, 2009, 4572-4575.

Blavatska, V, and Janke, W. 2010. “Fractals Meet Fractals: Self-Avoiding Random Walks on Percolation Clusters”. *Physics Procedia*. **3**, 2010, 1431–1435.

Matsutani, S., Shimosaka, Y. and Wang, Y. 2012 “Fractal structure of equipotential curves on a continuum percolation model”. *Physic A. Statistical Mechanics and its Applications*. 391, 2012, 5802-5809.

Di Xiao, J. W. 2012. “Modeling stock price dynamics by continuum percolation system

and relevant complex systems analysis”. *Physical A*. 391, 2012, 4827–4838.

Alireza J, and Tayfun B. 2013. “Relationship between percolation–fractal properties and permeability of 2-D fracture networks”. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 60, 2013, 353–362.

Burlak, G., Vlasova, M., Marquez-Aguilar, P.A., Kakazey, M. and Xixitla-Cheron, L. 2009. “Optical percolation in ceramics assisted by porous clusters”. *Optics Communications*. 282, 2850–2856.

López, R.H., Vidales, A.M., and Zgrablich, G. 2003. “Fractal properties of correlated invasion percolation patterns”. *Physical A*. 327, 2003, 76 – 81.

Franovic´, I. and Miljkovic´, V. 2009 “Fractal properties of percolation clusters in Euclidian neural networks”. *Chaos, Solutions and Fractals*. 39, 1418–1425.

Cheng, J., Zhao, M., Yuan, X., Zhao, L. Huang, D. and Zhou, S. 2004. “The percolation properties of fractal aggregation”. *Physical A* 343, 2004, 335–342.

Fralick, B.S., Gatzke, E.P. and Baxter, S.C. 2012. “Three- dimensional evolution of mechanical percolation in nan composites with random microstructures”. *Probabilistic Engineering Mechanics*. 30, 2012, 1–8.

Stauffer, D. 1985. “Introduction to Percolation Theory, Taylor and Francis”, Londres, (1985).

Ferer, M., Grant, S. and Bromhal, D.H. 2004. “Smith. Fractal dimension and avalanches of invasion percolation: the effect of aspect ratio”. *Physical A*. 334, 22 – 38.

Hou, B., Xie, H., Wen, W., & Sheng, P. (2008). Three-dimensional metallic fractals and their photonic crystal characteristics. *Physical Review B*, 77(12), 125113.

Gouéré, J.-B. (2010). *Percolation in a multiscale Boolean model*, 1-17. Retrieved from <http://arxiv.org/abs/1009.3719>.

Zulkamain, M., Mariatti, M., & Azid, I. A. (2008). *Prediction studies on percolation threshold behaviour of silver filled epoxycomposite for electrically conductive adhesives applications*. Proceedings of the IEEE/CPMT International Electronics Manufacturing Technology (IEMT) Symposium, c. <http://doi.org/10.1109/IEMT.2008.5507799>.

Kozlov, B., & Lagus, M. (2010). *Universality of 3D percolation exponents and first-order corrections to scaling for conductivity exponents*. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 389(23), 5339-5346. <http://doi.org/10.1016/j.physa.2010.08.002>.

Wettstein, S. J., Wittel, F. K., Arajo, N. A., M., Lanyon, B., & Herrmann, H. J. 2012. *From invasion percolation to flow in rock fracture networks*. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 391(1-2), 264-277. <http://doi.org/10.1016/j.physa.2011.07.029>.

Calderón-Segura, Y. (2015). *Algoritmos Heurísticos Aplicados a Fenómenos Electromagnéticos En Sistemas Tridimensionales Con Percolación*. Tesis de Doctorado, CIICAp-UAEM.

Bastas, N., Giazitidis, P., Maragakis, M., and Kosmidis, K. 2014. “Explosive percolation: Unusual transitions of a simple model”. *Physical A: Statistical Mechanics and its Applications*. 407, 2014, 54-65.