

KLAUKO PINHEIRO MOTA

SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO PARA A RELAXAÇÃO LENTA DE SUPERFÍCIES  
AMASSADAS

Tese apresentada ao Instituto de Física da  
Universidade Federal Fluminense como  
requisito parcial para a obtenção do Grau de  
Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Murilo Castro de Oliveira

Niterói  
2008

# Resumo

Neste trabalho estudamos a relaxação lenta de superfícies amassadas através de um modelo de spins simplificado. Superfícies amassadas são objetos com estrutura fractal que apresentam uma forma aproximadamente esférica e são obtidos na maioria das vezes através da simples compactação de folhas de papel ou alumínio. Em nosso modelo, a superfície amassada é representada por um aglomerado de spins apontando para cima. Os spins apontando para baixo representam o ar e estão tanto dentro quanto ao redor da superfície amassada. Estudamos a evolução temporal desta estrutura fractal e mostramos que ela apresenta um comportamento anômalo, com a relaxação da energia e da pressão seguindo uma exponencial estendida. Nossos resultados corroboram algumas observações experimentais e sugerem outras ainda não realizadas.

# Abstract

In this work we study the slow relaxation of crumpled surfaces through a simple spin model. Crumpled surfaces are fractal objects with an approximate spherical shape obtained from compaction of a single foil of aluminum or paper. In our model, the crumpled surface is represented by cluster of Ising spins pointing up. The spins pointing down represent the air around and inside the crumpled surface. We study the time evolution of such a fractal structure and we show that both energy and stress relaxation present an anomalous stretched exponential decay. Our results are in agreement with experimental studies.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Superfícies Amassadas</b>	<b>4</b>
2.1	Introdução . . . . .	4
2.2	Característica Fractal . . . . .	5
2.3	Resultados Experimentais . . . . .	8
2.4	Relaxação Anômala ou Não-exponencial . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Simulações de Monte Carlo de Superfícies Amassadas</b>	<b>12</b>
3.1	O Modelo . . . . .	12
3.2	Dinâmica de Kawasaki . . . . .	13
3.3	Técnica do Spin-Múltiplo . . . . .	14
3.4	Implementação Computacional . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>20</b>
4.1	Introdução . . . . .	20
4.2	Aglomerado Percolante . . . . .	23
4.3	Tapete de Sierpinski . . . . .	28
4.4	Triângulo de Sierpinski . . . . .	32
4.5	Superfície Compacta . . . . .	38
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>43</b>

Referências Bibliográficas

45

# Lista de Figuras

2.1	Bolas de papel de diferentes diâmetros criadas a partir de papel amassado manualmente. . . . .	6
2.2	Relação entre a massa e o diâmetro de 4 bolinhas de papel amassado. . . . .	7
2.3	Uma superfície amassada com diâmetro médio $\varphi$ sendo colocada numa prensa hidráulica. . . . .	8
2.4	Resultado experimental obtido por Gomes <i>et al</i> [1] para $\delta$ variando de 0.2 a 0.6. O gráfico principal mostra os dados experimentais (médias mais flutuações) com a variável $t/\tau$ dividida em <i>bins</i> . O gráfico menor mostra a distribuição dos dados sem <i>bins</i> . . . . .	9
3.1	Exemplo de uma superfície compacta de tamanho $32 \times 32$ armazenada em um vetor com 32 posições. . . . .	17
3.2	Superfície compacta numa rede de tamanho 64 criada a partir de um editor gráfico. . . . .	19
3.3	Periferia interna (em preto) e externa (em cinza) da superfície compacta obtidas a partir de nosso algoritmo. . . . .	19
4.1	Método para gerar um aglomerado percolante. Os sítios são ocupados com probabilidade $p = 0.592746$ . . . . .	24
4.2	Exemplo de aglomerado percolante gerado com $p = 0.592746$ e utilizado em nossas simulações como exemplo de uma superfície amassada. . . . .	24

---

4.3	$\log(M)$ versus $\log(R)$ para o aglomerado percolante gerado com $p = 0.592746$ em uma rede quadrada de tamanho $L = 1024$ . . . . .	25
4.4	Energia como função do tempo para um aglomerado percolante numa rede de tamanho $L = 1024$ . . . . .	27
4.5	Pressão em função do tempo para o aglomerado percolante numa rede de tamanho $L = 1024$ . . . . .	28
4.6	Evolução no tempo de um aglomerado percolante com massa $M = 114375$ (número de pontos pretos). . . . .	29
4.7	Geração do Tapete de Sierpinski. . . . .	30
4.8	Tapete de Sierpinski utilizado como configuração inicial em nossas simulações. . . . .	30
4.9	Relaxação da energia para a sexta geração do Tapete de Sierpinski. . . . .	31
4.10	Relaxação da pressão para a sexta geração do Tapete de Sierpinski. . . . .	32
4.11	Alguns momentos da evolução do Tapete de Sierpinski. . . . .	33
4.12	Triângulo de Sierpinski. Figura fractal obtida a partir de três cópias de si mesma, cada uma reduzida por um fator de $1/2$ indefinidamente. O triângulo pontilhado em (d) é uma cópia reduzida por um fator 2 do triângulo em (c). . . . .	34
4.13	Superfície fractal formada a partir de dois Triângulos de Sierpinski. A dimensão fractal é a mesma do Triângulo de Sierpinski, ou seja, $D_f = 1.5875$ . . . . .	35
4.14	Energia em função do tempo para a combinação de dois Triângulos de Sierpinski em uma rede quadrada de tamanho $L = 2048$ . . . . .	36
4.15	Pressão em função do tempo para a combinação de dois Triângulos de Sierpinski em uma rede quadrada de tamanho $L = 2048$ . . . . .	37
4.16	Evolução da combinação de dois Triângulos de Sierpinski numa rede quadrada de tamanho $L = 2048$ . . . . .	38
4.17	Superfície compacta criada a partir de um editor gráfico em uma rede retangular de tamanho $128 \times 256$ . . . . .	39

---

4.18	Relaxação da energia para a superfície compacta. Após um certo transiente, a relaxação é exponencial. A linha reta representa um ajuste linear feito com os dados obtidos das simulações. . . . .	40
4.19	Relaxação da pressão para a superfície compacta. Após um certo transiente, a relaxação é exponencial. A linha reta representa um ajuste linear feito com os dados obtidos das simulações. . . . .	41
4.20	Processo de evolução da superfície compacta. . . . .	42



# Lista de Tabelas

2.1	Massa e diâmetro de bolas de papel obtidos experimentalmente . . .	6
3.1	Operadores para manipulações de bits e suas representações na linguagem C. . . . .	16

# Capítulo 1

## Introdução

A Física, até pouco tempo atrás, seguia a mesma linha de investigação. Ora modelos teóricos eram propostos para se estudar determinados fenômenos, ora teorias eram criadas a partir de investigações experimentais. Com o surgimento do computador, um novo meio de investigação científica surgiu no cenário acadêmico - a investigação através de simulações computacionais.

As simulações desempenham um papel bastante importante na ciência, sendo que alguns cientistas até consideram que essas análises computacionais seriam um meio termo entre a teoria e o experimento. De qualquer forma, com o crescimento tanto da capacidade de armazenamento quanto da velocidade dos computadores aliados com o desenvolvimento de novos algoritmos, muitos problemas que não possuíam uma solução analítica trivial passaram a ser estudados profundamente, dando origem a novos resultados expressivos.

Talvez o exemplo mais notório de estudo completamente computacional seja o que hoje chamamos de sistemas complexos. Exemplos desses sistemas incluem o sistema nervoso central, o estudo da evolução das espécies, o funcionamento do sistema imunológico ou mesmo o comportamento da economia. Em todos esses exemplos, podemos notar que trata-se de sistemas compostos de partes interconectadas que, como um todo, exibem alguma propriedade macroscópica, que não seria trivialmente detectada a partir das propriedades das partes individuais.

Um tratamento analítico para esses sistemas ainda constitui um grande desafio

para os matemáticos. Devido ao grande número de sistemas interagentes, torna-se praticamente impossível desenvolver uma teoria fechada. Portanto, as simulações computacionais são uma fonte inestimável de investigação científica nesta nova área.

Nesta tese apresentaremos um modelo de spins bastante simples para estudar superfícies amassadas. Uma superfície amassada é um sistema desordenado, fora do equilíbrio, com forma aproximadamente esférica, obtida a partir da simples compactação de folhas de papel ou alumínio que tem como característica principal a estrutura fractal, geralmente com dimensão fractal em torno de 2.5. De acordo com Gomes [1], a fractalidade de uma superfície amassada pode levar a resultados mecânicos bastante intrigantes. Um desses resultados, que serve de motivação para este trabalho, é a relaxação lenta da pressão de uma superfície amassada quando disposta entre duas placas de uma prensa hidráulica, mantidas a uma distância constante.

O objetivo principal desta tese é tentar comprovar a partir do nosso modelo simplificado que existe uma relação entre a relaxação lenta do sistema e sua fractalidade. Para isso, vamos considerar como exemplos de superfícies amassadas alguns fractais já conhecidos na literatura como o Tapete de Sierpinski, o Triângulo de Sierpinski e um aglomerado percolante.

O modelo de spins utilizado para representar as superfícies amassadas é conhecido na literatura como modelo da gota e já foi satisfatoriamente aplicado a diversos outros sistemas que também estão fora do equilíbrio, como a dinâmica das séries temporais de torneiras gotejantes, a multifragmentação nuclear ou de gotas de mercúrio ou água após caírem no chão, a histerese magnética etc [2–10].

Nesta tese, faremos uso de algumas ferramentas computacionais para estudarmos a evolução das superfícies amassadas durante a relaxação. Em particular, simularemos estas superfícies através do método de Monte Carlo, em uma dinâmica com conservação de massa, utilizando a técnica do spin múltiplo.

A organização desta tese se dará da seguinte forma: no Capítulo 2 apresentaremos uma breve discussão sobre superfícies amassadas, estudos já realizados sobre este tema, suas principais características, bem como alguns resultados experimen-

tais, sendo um deles o grande motivador desta tese.

No Capítulo 3 definiremos o modelo computacional usado para simular as superfícies amassadas. Apresentaremos portanto todo o processo de construção desse modelo, como as superfícies amassadas serão representadas nesse modelo e como extrairemos as informações necessárias para a comparação com os resultados experimentais.

Finalmente, no Capítulo 4 apresentaremos os resultados obtidos através das nossas simulações para as superfícies amassadas e no Capítulo 5 apresentaremos nossas conclusões e perspectivas futuras.

# Capítulo 2

## Superfícies Amassadas

### 2.1 Introdução

A compactação de superfícies é um fenômeno físico bastante interessante e ainda pouco entendido, sobretudo porque trata-se de um fenômeno observado em diferentes escalas, desde o nível microscópico, como membranas comprimidas durante seu percurso através do corpo humano, até o nível macroscópico, como a energia dissipada durante a colisão de placas tectônicas.

Dentre as várias aplicações mais práticas e possíveis deste estudo, poderíamos destacar a forma como os materiais absorvem energia em uma compactação, bastante importante na indústria automobilística (a absorção do impacto feita pelo material que constitui o carro em uma eventual colisão) e no transporte de equipamentos frágeis, onde a presença de materiais compactados é fundamental para evitar possíveis danos aos equipamentos. Em todos os casos, há uma relação entre a energia envolvida no processo e sua eventual dissipação.

Estudar muitos dos fenômenos de compactação não é uma tarefa fácil. Em várias situações, praticamente infactível, como por exemplo a colisão de placas tectônicas na crosta terrestre. Torna-se fundamental, portanto, a busca de meios mais convenientes para tentar estudar os fenômenos de compactação.

Nessa linha de pensamento, o estudo experimental da compactação de materiais simples como folhas de alumínio [1], papel [11] ou poliéster [12] possibilitou grandes avanços no estudo da compactação de superfícies. Além de ser um meio bastante

econômico, é uma forma conveniente de se estudar em laboratório as diversas propriedades físicas envolvidas no processo. Há vários estudos na literatura sobre esse tema, como por exemplo a análise da emissão acústica durante o processo de compactação [13], leis de potências universais [14], propriedades de escala [15] e estudos mecânicos nesses materiais com foco nas suas propriedades fractais [1, 15].

A simulação computacional também tem um importante papel no estudo da compactação de materiais. Trabalhos recentes mostram que a compactação de superfícies por forças externas é caracterizada por padrões complexos, onde a relação força-compressão tem um comportamento seguindo uma lei de potência [16].

Nesta tese, tentaremos estudar computacionalmente uma possível relação entre o aspecto fractal da superfície amassada e a sua relaxação lenta, tal como analisado no trabalho experimental de Gomes [1]. Neste capítulo, faremos uma breve abordagem de algumas características das superfícies amassadas e apresentaremos o resultado experimental que serviu de motivação para este trabalho.

## 2.2 Característica Fractal

Na maioria das situações, as superfícies amassadas (SA) são sistemas que estão fora do equilíbrio com uma forma geométrica aproximadamente esférica, na maioria das vezes obtidas através da compactação de um determinado material. Uma simples folha de papel A4 quando amassada pelas próprias mãos seria um exemplo de SA. Um observador leigo, sem conhecimento prévio de geometria fractal, pensaria erroneamente que a bola de papel amassado é um objeto tridimensional, o que de fato, analisando à primeira vista, parece bem razoável.

Na Figura (2.1) temos 4 bolas de papel amassado com diferentes diâmetros produzidas pelas próprias mãos. Quando o papel é amassado, introduzimos vazios (ar) de diferentes tamanhos, uns pequenos, outros grandes, ou seja, temos na verdade uma hierarquia nos tamanhos dos buracos.

Na literatura há diversos estudos que mostram que esta hierarquia de buracos é responsável pela estrutura fractal das superfícies amassadas. Em particular, a dimensão fractal para superfícies amassadas a partir da compactação de folhas de



Figura 2.1: Bolas de papel de diferentes diâmetros criadas a partir de papel amassado manualmente.

papel ou alumínio, foi obtida experimentalmente, com um valor em torno de 2.5 [17]. Neste caso, esses objetos possuem uma forma arredondada e obedecem a uma relação de escala na forma de lei de potência entre a massa do objeto  $M$  e o comprimento (raio)  $R$  da bolinha formada, ou seja, do ponto de vista matemático, temos a seguinte lei de escala:

$$M \sim R^{D_f}, \quad (2.1)$$

onde  $D_f$  é aproximadamente 2.5 com um erro experimental da ordem de 10% [17].

A experiência para demonstrar essa relação de escala é bastante simples. Na verdade, a dimensão de uma bola de papel é medida indiretamente, feita através de medidas do diâmetro e da massa para bolinhas de papel de diversos tamanhos. Utilizando um paquímetro, medimos os diâmetros das 4 bolinhas de papel, amassadas pelas próprias mãos tal como mostrado na Figura (2.1), e obtivemos a seguinte tabela:

Massa (M)	Diâmetro (D)
1	1.5
4	2.4
16	4.6
64	7.3

Tabela 2.1: Massa e diâmetro de bolas de papel obtidos experimentalmente

Na primeira coluna da Tabela (2.2), consideramos que a massa da primeira bolinha seja igual a uma unidade de massa padrão. As massas das outras bolinhas de papel serão então proporcionais a esta unidade.

A partir desses dados temos o seguinte gráfico em escala logarítmica, Figura (2.2). A linha reta representa um ajuste linear para os dados experimentais, onde a inclinação da reta obtida foi  $2.55 \pm 0.12$ . Neste caso, essa inclinação corresponde à dimensão fractal da bola de papel. Naturalmente este procedimento de medida, do ponto de vista experimental, não considerou alguns fatores importantes, como por exemplo uma análise estatística mais elaborada. Em todo caso, mesmo sem todas essas considerações, o valor encontrado para a dimensão fractal é bem próximo do valor encontrado experimentalmente [17, 18].

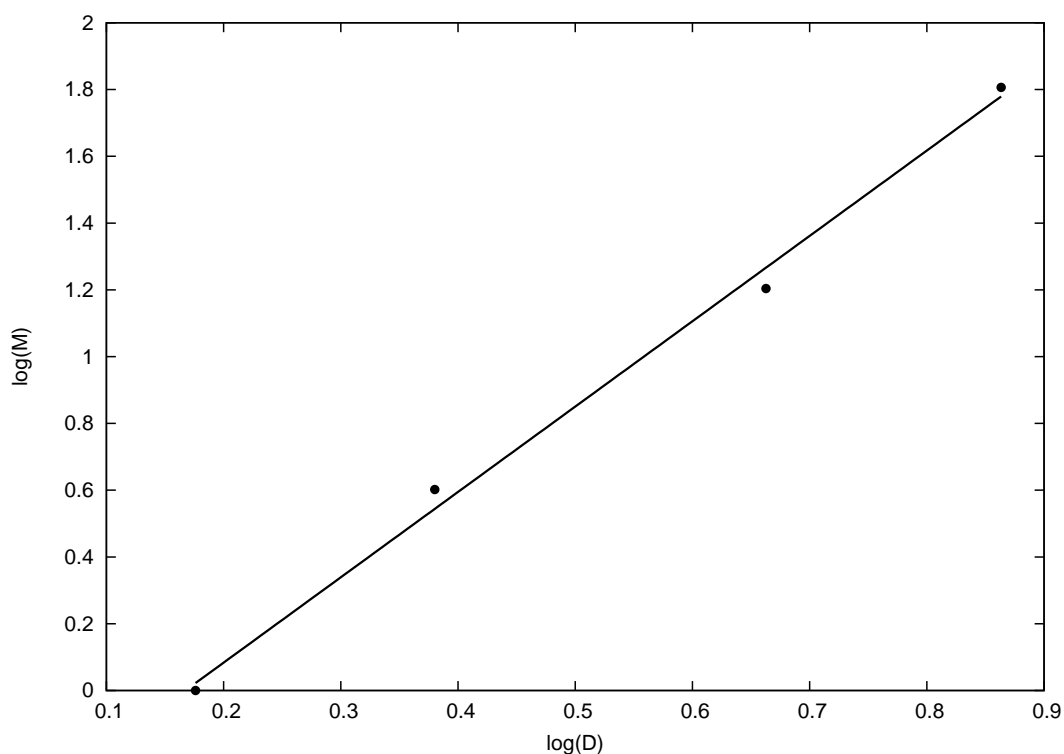


Figura 2.2: Relação entre a massa e o diâmetro de 4 bolinhas de papel amassado.



## 2.3 Resultados Experimentais

De acordo com alguns autores, a estrutura fractal das superfícies amassadas poderia levar a resultados extremamente interessantes do ponto de vista mecânico [1, 15]. Um desses resultados, que serve de motivação para esta tese, mostrou que uma folha de alumínio amassada pelas próprias mãos, mantida numa prensa, conforme mostra a Figura (2.3), apresenta uma relaxação anômala do tipo exponencial estendida [1], cuja forma matemática seria

$$P(t) = P_0 \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right), \quad (2.2)$$

onde  $P(t)$  é a pressão medida nas placas.

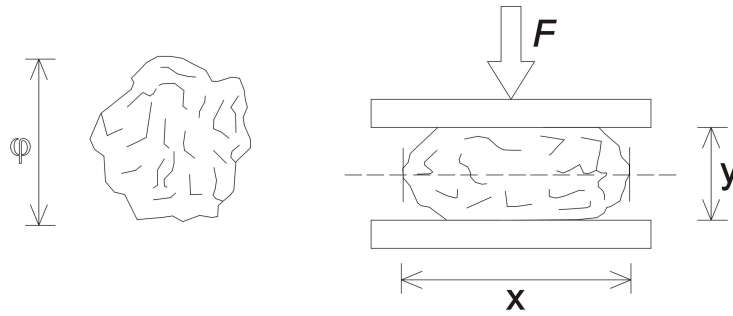


Figura 2.3: Uma superfície amassada com diâmetro médio  $\varphi$  sendo colocada numa prensa hidráulica.

As superfícies amassadas utilizadas nos experimentos de Gomes *et al* foram obtidas a partir de folhas de alumínio com área de  $50 \times 50 \text{cm}^2$  e espessura  $25 \mu\text{m}$  amassadas pelas próprias mãos resultando num objeto esférico com diâmetro médio de  $\varphi = 6 \text{cm}$ . Segundo os próprios autores, a forma não-linear de compactação do alumínio não interferiu nos resultados. Em seguida, a folha de alumínio amassada foi introduzida entre duas placas de uma prensa hidráulica, sendo submetida a uma força de compressão por 5 segundos. A partir desse momento, as placas da prensa são fixadas e, portanto, a pressão da superfície nas placas é medida como uma função do tempo. Na Figura (2.4) temos o resultado obtido experimentalmente por Gomes *et al* onde  $\beta$  foi medido experimentalmente com valor em torno de  $0.28 \pm 0.03$ . O

símbolo  $F$  representa a pressão e  $\delta$  mede o grau de deformação da folha de alumínio amassada, sendo definido como

$$\delta = \frac{\varphi - y}{\varphi}, \quad (2.3)$$

onde  $\varphi$  é o diâmetro médio da folha de alumínio amassada antes de ser colocada na prensa ( $F = 0$ ) e  $y$  é a distância entre as placas da prensa, Figura (2.3).

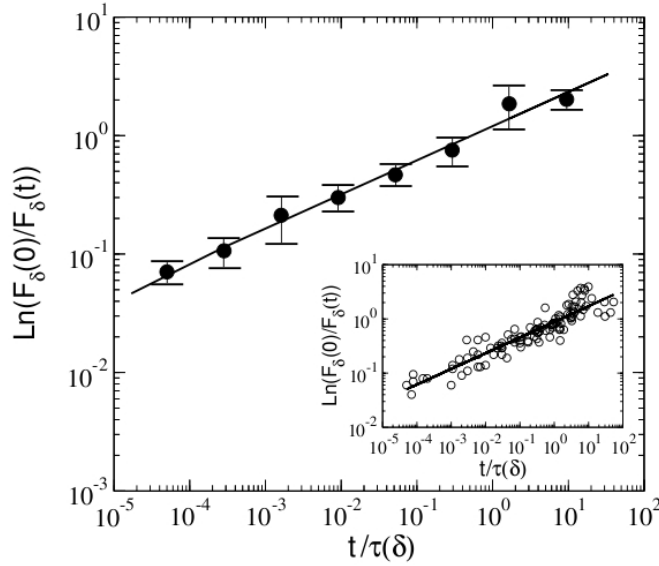


Figura 2.4: Resultado experimental obtido por Gomes *et al* [1] para  $\delta$  variando de 0.2 a 0.6. O gráfico principal mostra os dados experimentais (médias mais flutuações) com a variável  $t/\tau$  dividida em *bins*. O gráfico menor mostra a distribuição dos dados sem *bins*.

## 2.4 Relaxação Anômala ou Não-exponencial

Na maioria dos sistemas físicos, a relaxação de uma determinada medida física  $Q(t)$  em direção ao seu equilíbrio é descrita por uma função exponencial

$$f(t) = \frac{\Delta Q(t)}{\Delta Q(0)} = \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)\right), \quad (2.4)$$

onde  $t$  é o tempo e  $\Delta Q(t) = Q(t) - Q(\infty)$ . Fisicamente, a grandeza medida sofre pequenas variações em torno do seu valor de equilíbrio.

Por outro lado, quando o desvio de uma grandeza a partir do equilíbrio é grande, a relaxação pode ser não-exponencial ou anômala. Nesse caso, há portanto uma grande possibilidade de diferentes tipos de relaxação. A relaxação em forma de exponencial estendida é apenas um dos tipos de relaxação. Porém, estudos mostram a existência de uma relaxação logarítmica em superfícies amassadas construídas a partir de poliéster [12]

Há também diversos estudos na literatura que mostram que alguns sistemas físicos apresentam um comportamento anômalo com relaxação na forma de exponencial estendida. Podemos citar, por exemplo os vidros de spins, o modelo de Ising ferromagnético em duas dimensões, os fluidos complexos, polímeros e até mesmo em economia.

O decaimento tipo exponencial estendida, também conhecido como relaxação Kohlrausch-Williams-Watts [19, 20], é descrito pela equação

$$f(t) = f(0) \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right), \quad (2.5)$$

onde o expoente  $\beta$  é menor do que 1. Não é difícil perceber que esta função pode ser deduzida a partir da equação

$$\frac{df(t)}{dt} = -\lambda(t)f(t), \quad (2.6)$$

onde o coeficiente de relaxação é dado por

$$\lambda(t) = \frac{\beta}{\tau} \left(\frac{t}{\tau}\right)^{\beta-1} \quad (2.7)$$

No caso da relaxação exponencial, correspondendo a  $\beta = 1$  na equação (2.5), o coeficiente de relaxação  $\lambda$  é constante e igual a  $\lambda = 1/\tau$ . Por outro lado, na exponencial estendida, o coeficiente de relaxação  $\lambda(t)$  diminui com o tempo e portanto a relaxação torna-se mais e mais lenta à medida que o tempo passa.

Apesar dessa gama de modelos apresentar comportamento anômalo, até o momento não se sabe a real origem da exponencial estendida. Alguns autores sugerem que a origem da exponencial estendida em muitos sistemas estaria ligada ao processo competitivo entre duas exponenciais. Outros, por outro lado, consideram

sistemas que possuem muitos mínimos de energia, tal como acontece nos vidros de spin, como candidatos a também apresentar comportamento anômalo.

Nesta tese, tentaremos mostrar que a fractalidade do sistema pode levar o sistema a ter uma relaxação anômala. Para isso, a superfície amassada será representada por spins distribuídos de forma fractal em uma rede quadrada. Por simplicidade, adotaremos dois fractais regulares, o Tapete de Sierpinski e o Triângulo de Sierpinski, e um fractal estatístico, o aglomerado percolante, para representar uma superfície amassada em nossas simulações. Esses fractais possuem dimensão fractal bem definida e são amplamente estudados sob vários aspectos na literatura corrente.

Obviamente, não é difícil imaginar que, se estamos tentando relacionar a relaxação lenta de um sistema à sua fractalidade, é de se esperar que se o sistema não apresentar fractalidade, sua relaxação tenha um comportamento exponencial. No próximo capítulo, apresentaremos o modelo que utilizaremos para simular as superfícies fractais e não-fractais.

# Capítulo 3

## Simulações de Monte Carlo de Superfícies Amassadas

### 3.1 O Modelo

As superfícies amassadas são simuladas através de um modelo de spins já bastante difundido na literatura e conhecido como modelo de Ising [21]. A idéia é bastante simples: as superfícies amassadas em nossas simulações são representadas por um aglomerado de spins de Ising apontando para cima ( $S_i = +1$ ) em uma rede retangular. Os spins apontando para baixo ( $S_i = -1$ ) representam o ar, que pode estar tanto ao redor quanto no interior da superfície. Nesta tese, com o intuito de facilitar a visualização, representaremos os spins para cima por pontos pretos e os spins para baixo por pontos brancos.

A característica fractal, intrínseca às superfícies amassadas, pode ser levada em conta em nossas simulações de uma maneira simples, bastando apenas implementar uma regra dinâmica que distribua os spins na rede de forma fractal. Nesta tese vamos considerar algumas formas fractais em nossas simulações.

Como vimos no capítulo anterior, a superfície amassada nos experimentos de Gomes *et al* está localizada entre as placas de uma prensa hidráulica, sendo que a distância entre as placas, após um curto período de compressão, é mantida fixa durante toda a relaxação da superfície. Para incluir esse detalhe nas nossas simulações, consideraremos duas linhas paralelas de spins para baixo, representando as

placas da prensa, ou seja, uma linha acima e outra abaixo da superfície. Esses spins serão mantidos fixos durante todo o tempo de evolução.

Para evitar a fragmentação da superfície, os spins possuem uma interação ferromagnética entre primeiros e segundos vizinhos, de acordo com a seguinte hamiltoniana

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \quad (3.1)$$

onde a somatória é sobre todos os pares de spins que são primeiros ou segundos vizinhos na rede.

Essa interação pode ser entendida de outra forma. Considere nula a energia atrativa armazenada em cada par de spins que são paralelos entre si. A energia total é então armazenada na interface formada por spins para cima e para baixo, portanto distribuída ao longo da fronteira da superfície. De fato, somente na vizinhança da superfície podemos encontrar dois spins  $S_i$  e  $S_j$ , um apontando para cima e outro apontando para baixo, que contribuem para o cálculo da energia. Longe dessa fronteira, por outro lado, temos  $S_i = S_j$  (ambos apontando na mesma direção, ou para cima, ou para baixo), não contribuindo para o cálculo da energia. Sendo assim, a menos de uma constante aditiva irrelevante, a hamiltoniana, equação (3.1), poderia ser reescrita como

$$H = \sum (1 - \delta_{S_i S_j}), \quad (3.2)$$

## 3.2 Dinâmica de Kawasaki

Apesar de nos servirmos de um modelo de spins como o de Ising, não podemos, naturalmente, utilizar qualquer dinâmica de atualização desses spins. Por exemplo, uma dinâmica que mude apenas um spin, ou mesmo um conjunto deles apontando na mesma direção, não seria adequada para simular as superfícies amassadas, uma vez que a superfície é representada por um número invariante de spins apontando para cima na rede.

No nosso caso, portanto, seria necessária uma dinâmica que mantivesse a superfície amassada com a mesma massa, que neste problema seria o número de spins

apontando para cima. Em termos dos modelos tradicionais de spins, seria equivalente a manter a magnetização do sistema constante.

A dinâmica mais simples para este propósito seria a dinâmica de Kawasaki [22]. Nessa dinâmica, dois spins são escolhidos aleatoriamente, um apontando para cima e outro apontando para baixo. O passo básico de Monte Carlo seria invertê-los simultaneamente se o movimento diminuir a energia total do sistema dada pela hamiltoniana na equação (3.1). Desta forma, a massa da superfície seria preservada e a sua forma geométrica seria equilibrada ao longo do processo de relaxação.

Para decidir se um determinado par de spins deve ter seus spins invertidos, calculamos a diferença de energia  $\Delta E = E_\nu - E_\mu$  entre os estados  $\mu$  e  $\nu$  do sistema antes e depois, e aceitamos ou rejeitamos o movimento de acordo com o algoritmo de Metrópolis.

Entretanto, nossas simulações são realizadas em  $T = 0$ , ou seja, a aleatoriedade intrínseca na escolha do par de spins que será invertido é suficiente para equilibrar o sistema. Além disso, em  $T = 0$  há a possibilidade do aparecimento de estados meta-estáveis durante a evolução, característica comumente encontrada em muitos sistemas físicos durante a relaxação. Portanto, nas nossas simulações temos a seguinte regra de aceitação da inversão dos spins:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} 1 & \text{se } \Delta E < 0 \\ \frac{1}{2} & \text{se } \Delta E = 0 \\ 0 & \text{se } \Delta E > 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

### 3.3 Técnica do Spin-Múltiplo

O estudo computacional de muitos sistemas físicos tornou-se factível com as grandes inovações tanto na capacidade de armazenamento quanto no poder de processamento dos computadores modernos. Entretanto, da mesma forma que os computadores evoluem, novos problemas surgem, novas situações são criadas, exigindo-se portanto a quebra de novos paradigmas.

Seguindo esta linha de pensamento, nos últimos anos, uma nova técnica de simulação surgiu nos cenários acadêmicos. Esta técnica, conhecida na literatura como técnica do spin-múltiplo, tem sido satisfatoriamente aplicada em vários problemas

físicos, como sistemas magnéticos, autômatos celulares, modelo da gota, dinâmica populacional, redes neurais etc.

A principal característica da técnica do spin-múltiplo é o armazenamento dos estados dos spins nos bits de uma palavra de computador. Atualmente, a maioria dos computadores possui palavras com 32 ou 64 bits. Do ponto de vista computacional, uma palavra de computador representa o número de bits de informação que a CPU de um computador pode processar de uma única vez.

O tempo gasto em algumas simulações de Monte Carlo poderia ser reduzido por um fator significativo com a aplicação dessa técnica fazendo-se uso de operações de baixo nível, conhecidas como operações lógicas ou booleanas, presentes em qualquer processador. As operações mais comuns nos processadores e que são amplamente utilizadas nas simulações de modelos de spins são as operações lógicas **E**, **OU** e **OU-Exclusivo**, além da operação de negação **NÃO** e das operações de deslocamentos de bits.

### 3.4 Implementação Computacional

Nesta tese, utilizamos como linguagem padrão para as nossas simulações a Linguagem C. É possível implementar em outras linguagens, tais como FORTRAN ou PASCAL, pois ambas oferecem operadores para manipulação de bits, mas a implementação de operações booleanas nessas linguagens é um pouco mais trabalhosa do que na linguagem C e suas extensões. Na Tabela (3.1) temos os operadores para operações com bits usados nas nossas implementações e suas respectivas representações na linguagem C.

Como vimos na seção anterior (3.3), podemos diminuir bastante o tempo computacional e o uso de memória de nossas simulações usando a técnica do spin múltiplo [23]. Para isso, basta que cada spin seja agora uma variável booleana com valores 0 e 1. Dessa forma, a hamiltoniana dada pela equação (3.1) pode ser reescrita como:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \oplus \sigma_j \quad (3.4)$$

onde  $\sigma_i$  é uma variável booleana representando o estado de um determinado átomo



Operação	Símbolo	em C
E	$\wedge$	<code>&amp;</code>
OU	$\vee$	<code> </code>
OU-Exclusivo	$\oplus$	<code>^</code>
NÃO	$\neg$	<code>~</code>
Deslocamento à esquerda	$\ll$	<code>&lt;&lt;</code>
Deslocamento à direita	$\gg$	<code>&gt;&gt;</code>

Tabela 3.1: Operadores para manipulações de bits e suas representações na linguagem C.

*i.* Agora,  $\sigma_i = 1$  representa um spin para cima e  $\sigma_i = 0$  corresponde a um spin para baixo. No nosso caso, o bit 1 representaria um pixel da superfície amassada e o bit 0 um do ar no seu interior e ao seu redor.

A Figura (3.1) mostra um exemplo de uma superfície compacta que pode ser armazenada na memória do computador utilizando-se apenas um vetor  $L$  com 32 posições, ou seja, apenas 32 números inteiros para uma rede  $32 \times 32$ . Nas colunas, temos as posições de cada elemento do vetor, ou seja,  $L[0], L[1], L[2], \dots, L[31]$ , como indicado na figura. Nas linhas horizontais, por outro lado, temos representados na figura os 32 bits de cada elemento do vetor. Cada pixel branco na figura representa um bit zero, que por sua vez representaria o ar presente tanto no interior quanto em torno da superfície amassada. Cada pixel preto representa um bit 1, que nesse caso representaria a superfície amassada.

No exemplo apresentado na Figura (3.1) representamos uma superfície amassada com tamanho  $32 \times 32$ . A extensão para tamanhos maiores pode ser feita através de concatenações de palavras de computador de 32 ou 64 bits. Por exemplo, para uma superfície de tamanho 256 devemos concatenar 8 palavras em um computador de 32 bits ou 4 em um computador de 64 bits. Naturalmente, outras considerações precisam ser feitas. Devemos tomar alguns cuidados com certas operações booleanas, como por exemplo o deslocamento de bits nas palavras concatenadas.

Podemos tornar ainda mais rápidas as nossas simulações se evitarmos a escolha de spins que não pertencem à interface 0-1 (periferia da superfície amassada). Tais escolhas, de acordo com a expressão da energia na equação (3.2), não contribuiriam

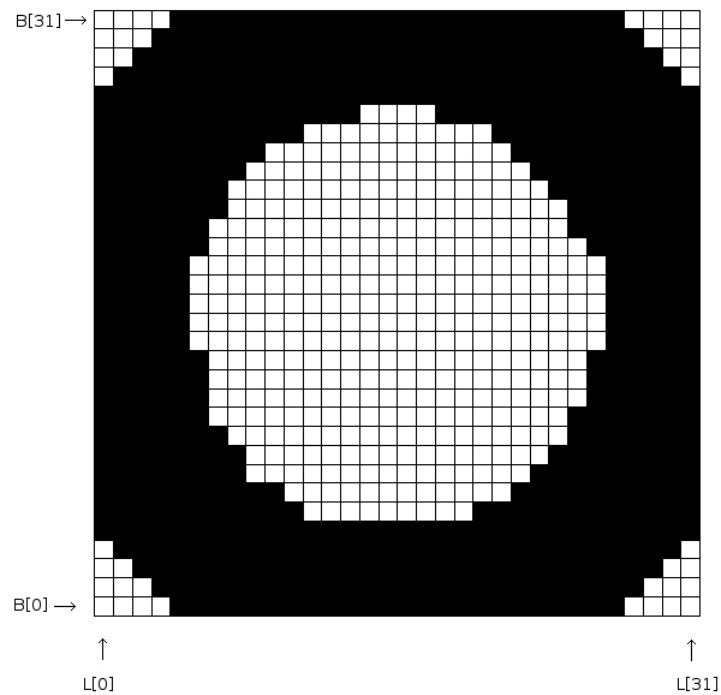


Figura 3.1: Exemplo de uma superfície compacta de tamanho  $32 \times 32$  armazenada em um vetor com 32 posições.

para a relaxação da energia. Uma estratégia computacional para esse problema seria criar duas listas, uma com todos os spins 0 que pertencem à periferia externa e outra com os spins 1 que pertencem à periferia interna. Em seguida, o passo básico de Monte Carlo seria escolher um spin de cada lista, invertendo-os caso houvesse uma diminuição na energia total do sistema.

As periferias interna e externa são definidas em nossas simulações da seguinte forma: todo spin apontando para cima (ou seja, um pixel preto) que tenha pelo menos um spin apontando para baixo (pixel branco) como seu vizinho pertence à periferia interna da superfície. Além disso, incluímos nessa periferia aqueles spins que estão em contato com a prensa. Por outro lado, todo spin apontando para baixo que tenha pelo menos um spin apontando para cima como seu vizinho pertence à periferia externa.

Para efeito prático, vamos imaginar uma superfície amassada numa rede qua-

drada de tamanho  $64 \times 64$ . Para armazenar essa superfície, utilizamos um vetor  $L$  com 64 posições. Cada posição do vetor é uma palavra com 64 bits <sup>1</sup>. A partir de operações booleanas, conforme a Tabela (3.1), podemos descobrir em cada tempo da simulação a periferia interna e externa da superfície. O código na linguagem C para realizar essa tarefa é:

```
for(c = 1; c < 64; c++) {
    Outer[c] = (L[c]>>1) | (L[c]<<1) | L[c-1] | L[c+1];
    Outer[c] = Outer[c] & (~L[c]);
    Inner[c] = (~L[c]>>1) | (~L[c]<<1) | (~L[c-1]) | (~L[c+1]);
    Inner[c] = Inner[c] & L[c];
}
```

Para efeito de visualização criamos, com a ajuda de um editor gráfico, uma superfície compacta numa rede de tamanho 64. A Figura (3.2) representa a superfície compacta. Essa figura foi desenhada com um editor gráfico e em seguida transformada em bits 0 e 1, para servir de entrada nas nossas simulações.

Na Figura (3.3) temos as periferias da superfície (3.2) definidas em nossas simulações para um determinado instante  $t$  da evolução da superfície. A parte cinza representa a periferia externa, e a parte em preto a periferia interna da superfície. Toda vez que há uma troca de spins, temos que definir novamente essas periferias através do código estabelecido antes.

---

<sup>1</sup>Nossas simulações foram feitas em computadores de 64 bits. Para redes maiores, a generalização é muito simples, por meio de concatenações de palavras.

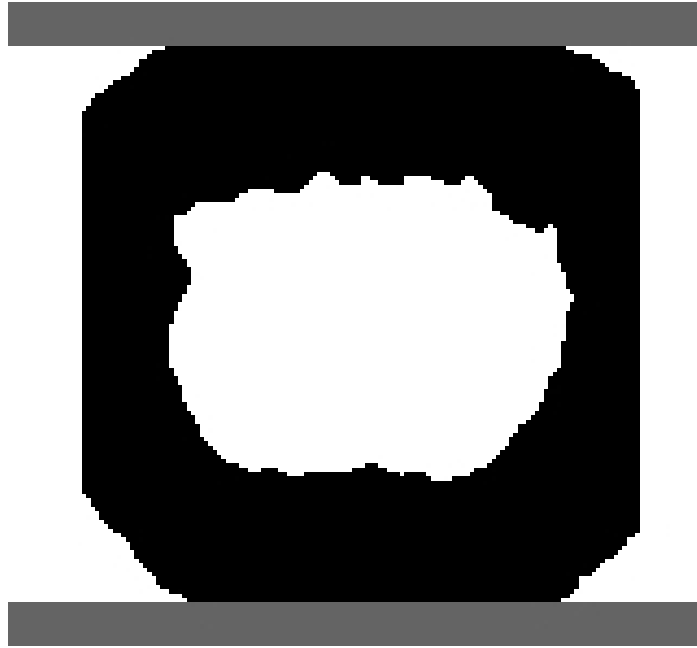


Figura 3.2: Superfície compacta numa rede de tamanho 64 criada a partir de um editor gráfico.

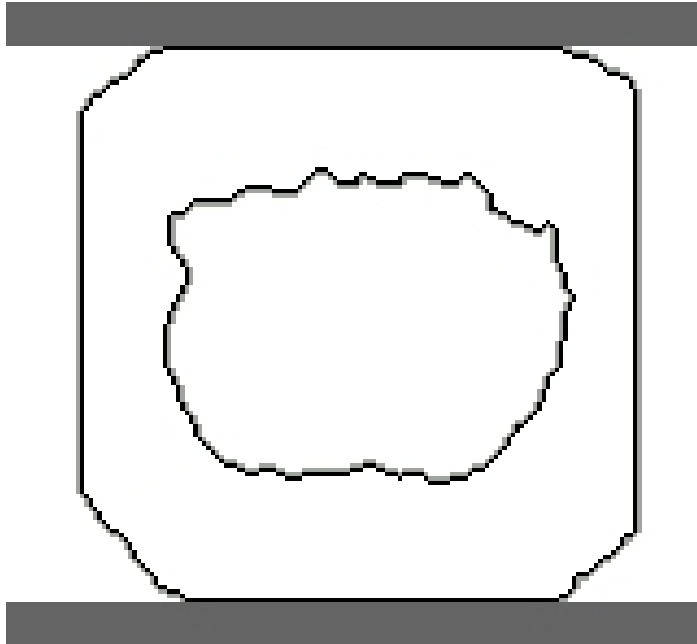


Figura 3.3: Periferia interna (em preto) e externa (em cinza) da superfície compacta obtidas a partir de nosso algoritmo.

# Capítulo 4

## Resultados

### 4.1 Introdução

Nesta parte da tese apresentaremos os resultados obtidos das simulações de Monte Carlo para algumas superfícies fractais consideradas, bem como para uma superfície que não tem característica fractal. Para nossas análises, simularemos o comportamento da pressão exercida nas placas pela superfície amassada e a sua energia total em função do tempo.

De uma forma bastante simples, a pressão exercida pela superfície nas placas pode ser definida em nosso modelo como o número de spins em contato com as placas, isto é, as linhas externas horizontais de spins. Por exemplo, uma superfície em forma de um quadrado de lado  $L$  teria inicialmente pressão igual a  $2L$ , uma vez que a base e o topo da superfície estão em contato com as placas. Como estamos usando a técnica do spin múltiplo, com uma simples instrução booleana, podemos facilmente computar esta pressão em cada tempo.

No caso da relaxação da energia total da superfície, por outro lado, podemos utilizar um truque bastante aplicado nas simulações de Monte Carlo. Como o processo de relaxação sempre tende a diminuir a energia da superfície, podemos inicialmente guardar na memória do computador o valor da energia total inicial da superfície e, sempre que tivermos uma troca de spins sendo aceita pela regra utilizada, atualizamos a energia subtraindo-se dela o valor da variação de energia envolvida no processo de troca, ou seja

$$E(t + 1) = E(t) - \Delta E. \quad (4.1)$$

Nas seções a seguir mostraremos os resultados da relaxação da energia e da pressão para três superfícies fractais: um fractal construído a partir de dois Triângulos de Sierpinski, o Tapete de Sierpinski e o aglomerado percolante, bem como para uma superfície não-fractal definida de forma arbitrária.

Para a análise dos dados, utilizaremos uma pacote de código livre chamado Gnuplot. Este pacote utiliza internamente um método de mínimos quadrados não-linear baseado no algoritmo de Marquardt-Levenberg para os ajustes de curva. A grande vantagem de usar o Gnuplot é a facilidade de implementar os ajustes de curva através dos chamados *scripts*, nos quais diversos comandos podem ser acrescentados e naturalmente editados de forma bastante simples e rápida.

Com relação à qualidade dos ajustes após cada iteração, o pacote Gnuplot mostra informações que podem ser usadas para analisar a evolução do ajuste. Por exemplo, a cada passo de iteração o pacote calcula o valor de  $\chi^2$ . A função  $\chi^2$  é formalmente definida por

$$\chi^2 = \sum_i^N \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\sigma_i^2}, \quad (4.2)$$

onde a soma é executada sobre o número de pontos  $N$ ,  $f$  seria a função utilizada para o ajuste,  $x_i$  os valores da variável independente (no nosso caso, a variável independente é o tempo),  $y_i$  seriam os valores da variável dependente (no nosso caso, a energia ou a pressão) e  $\sigma_i$  os erros associados a  $y_i$ .

Apesar dessa forma não muito amigável, o significado desta função é bastante simples. Como podemos notar, esta função é uma soma de quantidades não-negativas, ou seja, o menor valor que poderíamos ter seria zero. Nesta situação, cada ponto da curva passa exatamente por cada ponto dos dados experimentais. Entretanto, tal situação é bastante improvável, uma vez que dados reais possuem ruídos em algum nível.

A incerteza de um dado ponto experimental é uma estimativa da provável discrepância entre esse ponto e o seu verdadeiro valor. Em outras palavras, um ponto

experimental típico deve estar dentro de uma barra de erro a partir de seu valor real. Isso significa que cada ponto contribui com cerca de uma unidade para soma e portanto a soma deve estar em torno de  $N$ .

Neste sentido, o pacote Gnuplot calcula o valor de qui-quadrado reduzido, que nada mais é do que o valor de qui-quadrado dividido pelo número de graus de liberdade, que seria o número de pontos  $N$  menos o número  $m$  de parâmetros usados para o ajuste, ou seja  $N - m$ . Se o número de pontos fornecidos é suficientemente grande e o modelo usado para ajuste está correto, então o valor do qui-quadrado reduzido deve ser de cerca de uma unidade. Por outro lado, se o qui-quadrado reduzido for muito maior do que 1, ou o modelo usado não descreve muito bem os dados ou há uma estimativa incorreta dos erros. Similarmente, se qui-quadrado reduzido é muito menor do que 1, ou as estimativas dos erros são muito grandes ou o modelo é muito geral e, neste caso, uma função mais simples seria adequada.

A função de ajuste utilizada na análise dos dados é, naturalmente, a exponencial estendida

$$f(t) = f_1 \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right) + f_2, \quad (4.3)$$

onde  $f$  seria a energia ou a pressão e  $f_1$ ,  $f_2$ ,  $\tau$  e  $\beta$  são os parâmetros que serão encontrados durante o processo de ajuste de  $f(t)$  aos dados das simulações computacionais. O decaimento exponencial usual corresponde a mesma expressão de  $f(t)$  com  $\beta = 1$ .

Nossos resultados, que serão apresentados posteriormente, foram obtidos após a simulação de centenas de experimentos do mesmo sistema, para que tenhamos barras de erros relativamente pequenas. Esse processo evidentemente exige um grande esforço computacional, mas nos permite, por outro lado, obter o expoente  $\beta$  com uma certa precisão.

Na apresentação dos resultados, justificaremos nossos ajustes a partir das análises feitas pelo pacote Gnuplot. Mostraremos então que os dados obtidos através das nossas simulações para as superfícies consideradas apresentam relaxação lenta ( $\beta < 1$ ), sendo bem ajustados por uma exponencial estendida quando a rede é fractal e relaxação rápida ( $\beta = 1$ ) sem fractalidade.

## 4.2 Aglomerado Percolante

Um exemplo de fractal estatístico utilizado nas nossas simulações é o aglomerado percolante. Podemos gerar este fractal dinamicamente a partir de uma origem através do Algoritmo de Leath [24]. Basicamente, este algoritmo pode ser implementado a partir dos seguintes passos:

1. Ocupe um sítio na rede. Os primeiros vizinhos (4 em uma rede quadrada) deste sítio representam o seu perímetro, e são colocados numa lista.
2. Para cada sítio pertencente ao perímetro, gere um número aleatório no intervalo  $[0, 1]$ . Se  $r \leq p$  o sítio é ocupado e adicionado ao aglomerado; caso contrário, o sítio não é ocupado. Para que os sítios sejam desocupados com probabilidade  $1 - p$ , estes sítios não são testados novamente, sendo retirados da lista.
3. Para cada sítio recém ocupado, determine se há novos sítios vizinhos ainda não testados. Adicione estes novos sítios à lista de sítios do perímetro.
4. Continue os passos 2 e 3 até a extinção da lista.

Naturalmente, o processo descrito acima continua até o aglomerado parar de crescer ou quando uma condição de contorno externa é alcançada. Em nossas simulações, esta condição de contorno seria a linha de spins fixos que foram definidas para representar as placas da prensa hidráulica. A Figura (4.1) mostra sucessivamente os passos descritos acima.

No nosso caso, como queremos que o aglomerado tenha características fractais, os sítios são ocupados com a probabilidade crítica de percolação  $p_c$ . A grande vantagem do Algoritmo de Leath é que podemos gerar apenas o aglomerado percolante, que é um fractal. A Figura (4.2) mostra um exemplo de aglomerado percolante que será utilizado como superfície amassada em nossas simulações. A parte cinza representa a condição externa de contorno que contém o aglomerado entre as placas. À direita e à esquerda, o aglomerado também é contido por linhas verticais.

A dimensão fractal do aglomerado percolante em uma rede quadrada é aproximadamente  $D_f = 1.896$ . Utilizando o Algoritmo de Leath, calculamos a relação



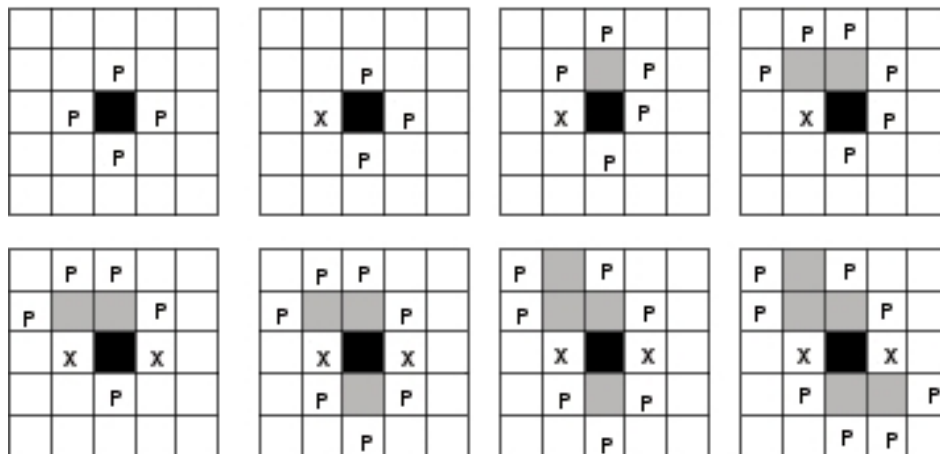


Figura 4.1: Método para gerar um aglomerado percolante. Os sítios são ocupados com probabilidade  $p = 0.592746$ . Sítios são representados por quadrados preenchidos por cinza; sítios pertencentes ao perímetro são representados pela letra **P** e sítios testados e não ocupados são representados pela letra **X**. Uma vez que o sítio central está ocupado mas não foi testado, o representamos por um quadrado preenchido com preto. Os sítios do perímetro foram escolhidos aleatoriamente.

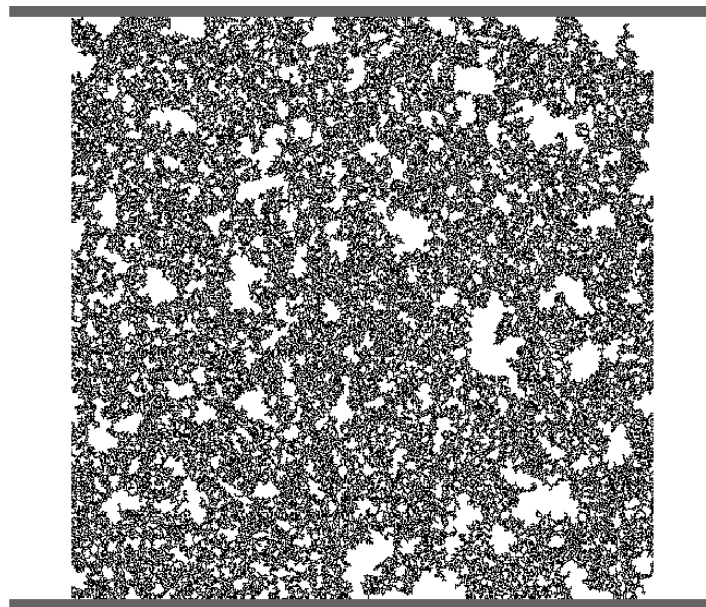


Figura 4.2: Exemplo de aglomerado percolante gerado com  $p = 0.592746$  e utilizado em nossas simulações como exemplo de uma superfície amassada.

entre a massa  $M$  (número de pixels pretos) e o raio (ou comprimento característico)  $R$  para o aglomerado percolante, Figura (4.2). Sabemos que essa relação de escala segue uma lei de potência que tem a forma

$$M \sim R^{D_f}. \quad (4.4)$$

onde  $D_f$  é a dimensão fractal da superfície.

A Figura (4.3) mostra um gráfico de  $\log(M)$  versus  $\log(R)$  para o aglomerado percolante gerado com  $p = 0.592746$  em uma rede quadrada de tamanho  $L = 1024$ . A linha reta é um ajuste retilíneo para os dados. A inclinação da curva é 1.886 e é uma estimativa para a dimensão fractal  $D_f$ . O valor exato para o aglomerado percolante é  $91/48 \approx 1.896$  [25].

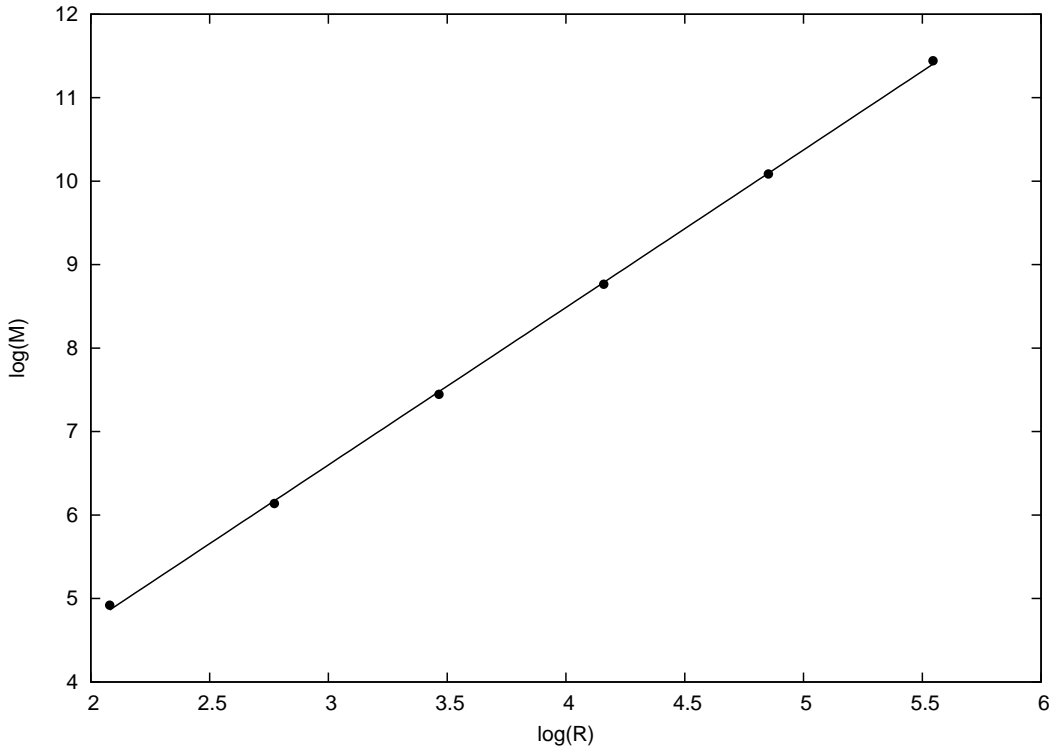


Figura 4.3:  $\log(M)$  versus  $\log(R)$  para o aglomerado percolante gerado com  $p = 0.592746$  em uma rede quadrada de tamanho  $L = 1024$ .

A definição da equação (4.4) tem sua origem na própria geometria euclidiana. Por exemplo, considere um objeto de massa  $M$  e raio  $R$ . Se o raio do objeto for

aumentado, digamos para  $3R$ , a massa do objeto é aumentada por um fator  $3^2$  se o objeto é circular ou por um fator  $3^3$  se o objeto é esférico. Em outras palavras, a equação (4.4) nos diz que se a dimensão linear de um objeto é aumentada por um fator  $b$ , sem alterar sua forma, a massa do objeto então será aumentada por um fator  $b^D$ . A relação entre a massa e o comprimento está intimamente ligada à noção intuitiva de dimensão espacial  $D$ .

No caso de uma superfície com características fractais, como o aglomerado percolante, o expoente  $D_f$  da relação entre a massa e o comprimento é menor que a dimensão espacial  $D$ .

Na Figura (4.4) temos os resultados de nossas simulações para a relaxação da energia em função do tempo para um aglomerado percolante numa rede de tamanho  $L = 1024$ . O eixo  $t$  está em escala logarítmica para facilitar a visualização dos ajustes de curva e normalizado pela massa  $M$  do aglomerado. No mesmo gráfico esboçamos os ajustes feitos com uma exponencial estendida (linha cheia) e com uma exponencial (linha pontilhada). Podemos notar claramente que o melhor ajuste é o feito pela exponencial estendida com expoente  $\beta = 0.874 \pm 0.001$ . Isso pode ser melhor observado no gráfico interno. Para o ajuste de curva obtido com a exponencial estendida, o valor do qui-quadrado reduzido encontrado foi  $\chi^2 = 1.16$ , enquanto o valor encontrado para o ajuste exponencial foi  $\chi^2 = 704.70$ . Como foi visto anteriormente, o ajuste tende a ser melhor se o valor do qui-quadrado reduzido estiver em torno de uma unidade.

Na Figura (4.5) temos agora os resultados numéricos para a relaxação da pressão nas placas para a mesma rede. Novamente o melhor ajuste obtido foi o ajuste com a exponencial estendida (linha cheia), com expoente de relaxação  $\beta = 0.893 \pm 0.001$ . Para este ajuste, o valor encontrado do qui-quadrado reduzido foi  $\chi^2 = 0.99$ . Para o ajuste exponencial, encontramos  $\chi^2 = 23.02$ .

Algumas observações sobre os resultados da relaxação da pressão devem ser listadas. Em primeiro lugar, os resultados numéricos para a pressão possuem muito mais ruído do que para a energia. Isso é bastante natural, porque as mudanças na rede são melhor representadas pela energia total do sistema, uma vez que a mesma

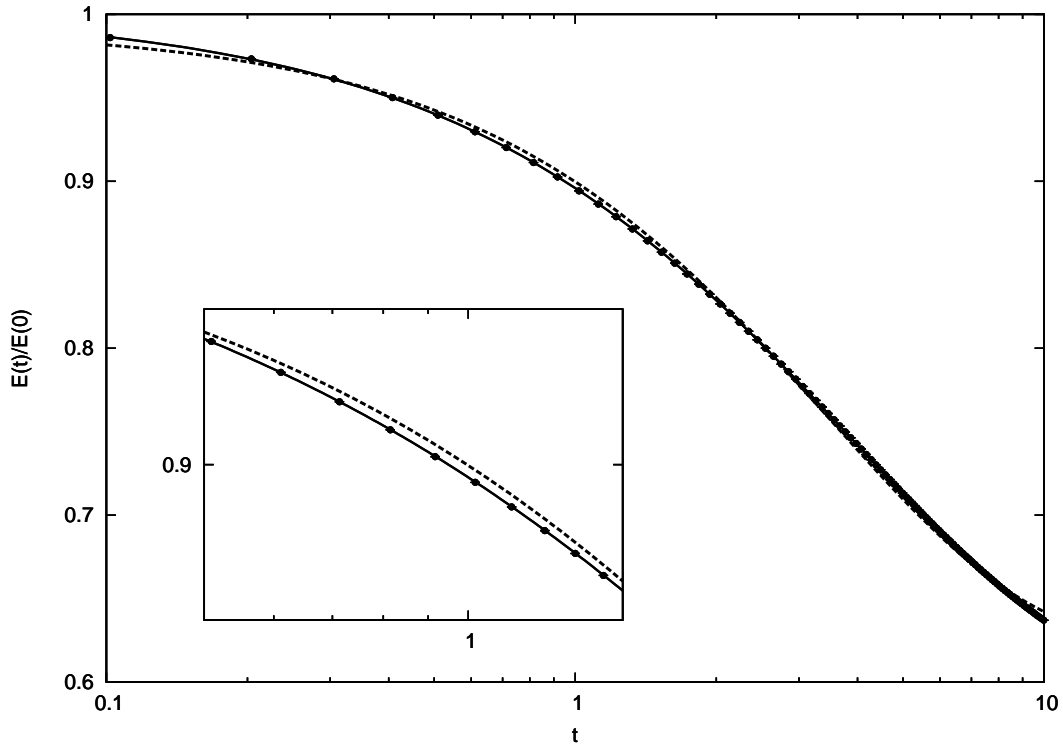


Figura 4.4: Energia como função do tempo para um aglomerado percolante numa rede de tamanho  $L = 1024$ .

leva em consideração toda a interface da rede, ao contrário da pressão nas placas que leva em consideração apenas a interface entre os spins da base e do topo (as placas).

Prosseguindo a lista de observações, a Figura (4.6) mostra a evolução temporal do aglomerado percolante. Em (a) temos a rede inicial gerada a partir do Algoritmo de Leath, com massa  $M = 114375$ . Em (b) temos a configuração da rede após  $2M$  passos de Monte Carlo, (c) após  $4M$  passos de Monte Carlo e em (d) após  $8M$  passos de Monte Carlo. A dinâmica ocorre de acordo com a hierarquia dos buracos, como segue: primeiro, os buracos menores (pontos brancos isolados) desaparecem. Em seguida, os buracos um pouco maiores que um pixel também desaparecem. Logo após, os buracos maiores desaparecem e assim por diante.

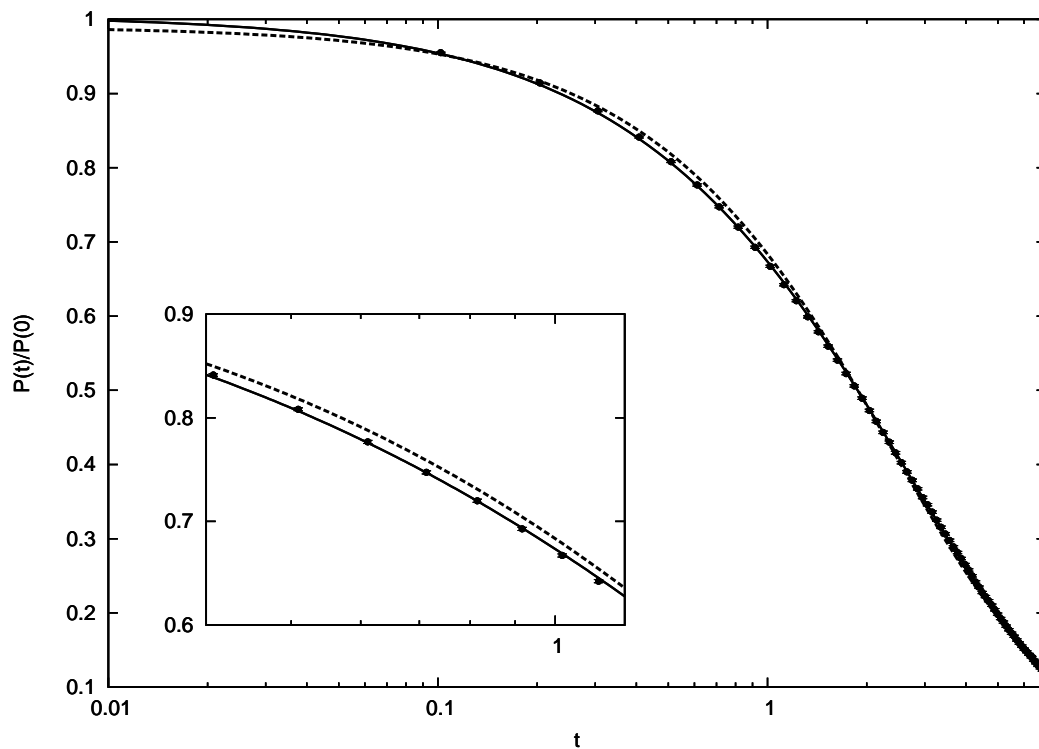


Figura 4.5: Pressão em função do tempo para o aglomerado percolante numa rede de tamanho  $L = 1024$ .

### 4.3 Tapete de Sierpinski

O Tapete de Sierpinski é um fractal regular bem conhecido na literatura, que será utilizado em nossas simulações como uma superfície amassada. A construção desse fractal pode ser feita a partir do seguinte algoritmo:

1. Comece com um quadrado inteiramente preenchido.
2. Divida-o em 9 quadrados menores e congruentes e remova o quadrado central.
3. Aplique o procedimento anterior recursivamente para os 8 quadrados restantes, *ad infinitum*.

A auto-similaridade deste fractal pode ser observada da seguinte forma: na Figura (4.7a) o quadrado tem lado igual a uma unidade. O nível  $k$  da formação

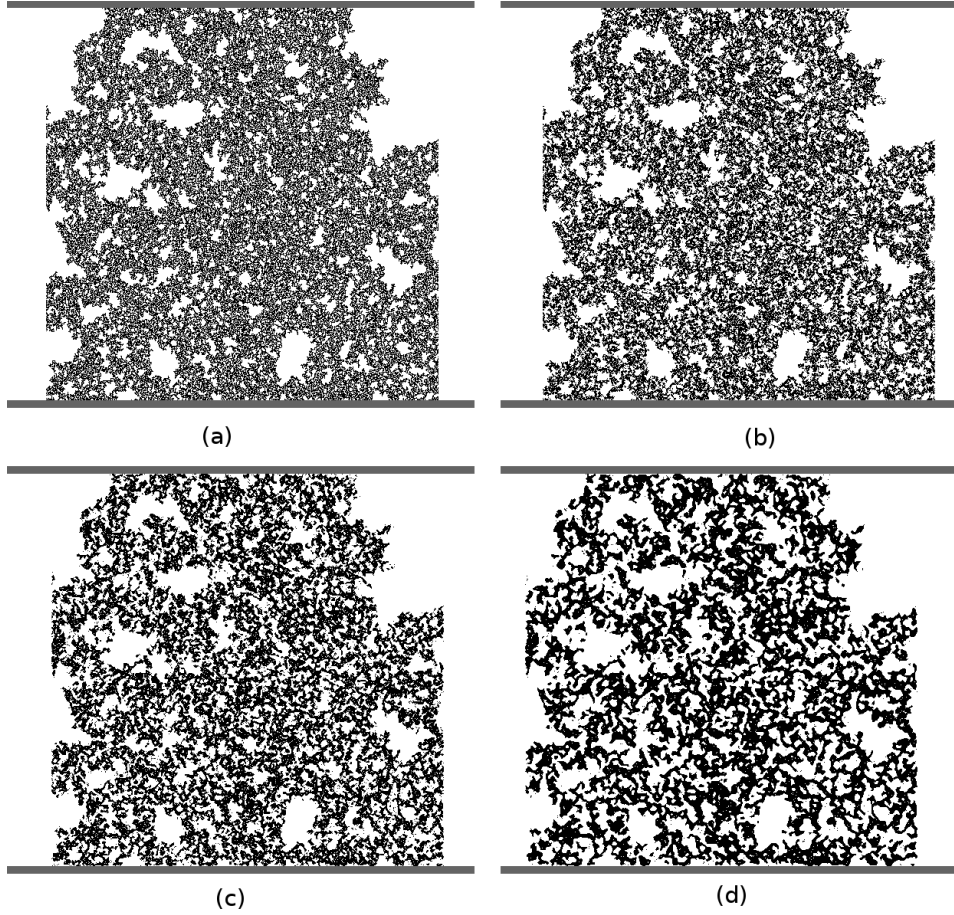


Figura 4.6: Evolução no tempo de um aglomerado percolante com massa  $M = 114375$  (número de pontos pretos).

do Tapete de Sierpinski é construído com  $N(\ell) = 8^k$  quadrados pretos de lado (comprimento linear) igual a  $\ell = (1/3)^k$ . Por exemplo, o nível  $k = 1$  (4.7b) é formado por 8 quadrados pretos de tamanho  $1/3$ . A dimensão de similaridade, que para fractais regulares é a própria dimensão fractal [26, 27], é definida por:

$$D_f = \lim_{\ell \rightarrow 0} \frac{\ln(N(\ell))}{\ln((1/\ell))}. \quad (4.5)$$

Sendo assim, a dimensão fractal do tapete de Sierpinski é

$$D_f = \lim_{\ell \rightarrow 0} \frac{\ln(8^k)}{\ln(3^k)} = \frac{\ln(8)}{\ln(3)} = 1.8927\dots, \quad (4.6)$$

que é menor que o espaço onde o tapete está embebido  $D = 2$ .

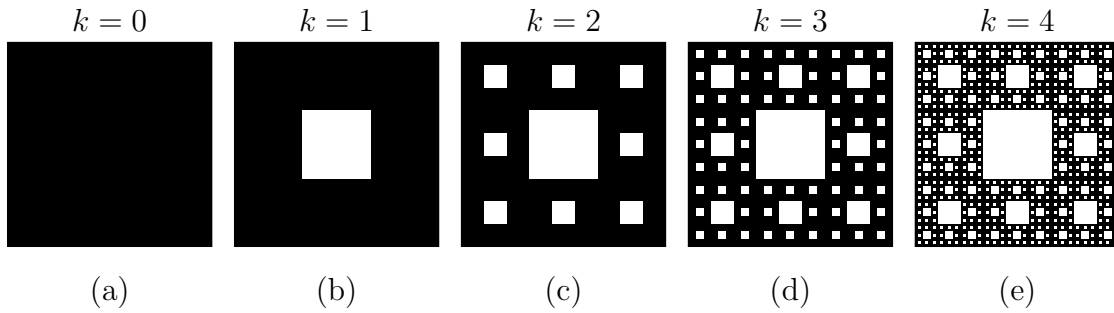


Figura 4.7: Geração do Tapete de Sierpinski.

Nas nossas simulações consideramos a sexta geração do Tapete de Sierpinski em uma rede de tamanho  $L = 736$ , figura (4.8). A parte em cinza representa as placas da prensa.

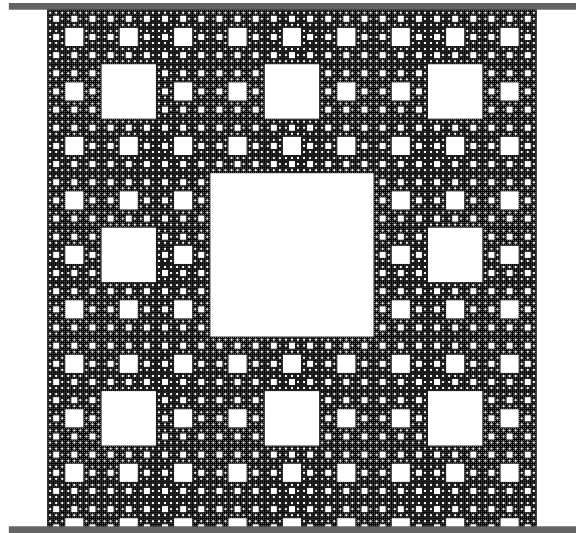


Figura 4.8: Tapete de Sierpinski utilizado como configuração inicial em nossas simulações.

Novamente, observamos uma relaxação lenta do tipo exponencial estendida, tanto na energia quanto na pressão. Além disso, notamos que os expoentes ( $\beta$ ) obtidos nos ajustes são bem próximos daqueles obtidos para o aglomerado percolante. Acreditamos que tal fato não seja uma mera coincidência, mas sim uma possível relação entre o expoente  $\beta$  e a dimensão fractal dos sistemas, uma vez que

o aglomerado percolante e o tapete de Sierpinski possuem dimensões fractais bem próximas umas das outras. Este resultado está de acordo com o objetivo principal desta tese.

De acordo com nossas simulações, ilustradas na Figura (4.9), a relaxação da energia foi bem ajustada com uma exponencial estendida (linha cheia) com  $\beta = 0.886 \pm 0.004$ . Para esse ajuste, o valor do qui-quadrado reduzido foi de  $\chi^2 = 1.07$ . Para os mesmos dados da simulação, fizemos um ajuste com uma exponencial (linha pontilhada) e obtivemos o valor para o qui-quadrado reduzido igual a  $\chi^2 = 7.05$ . Na Figura (4.9) mostramos os dois ajustes feitos, podendo-se notar no gráfico interno a diferença entre os ajustes. No caso da relaxação da pressão, demonstrada na Figura

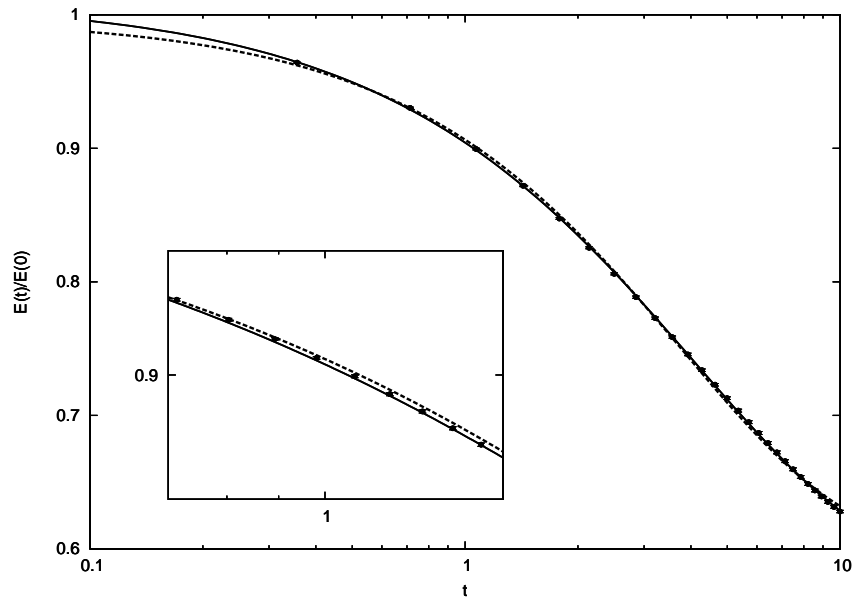


Figura 4.9: Relaxação da energia para a sexta geração do Tapete de Sierpinski.

(4.10), o melhor ajuste também foi obtido com uma exponencial estendida, agora com expoente  $\beta = 0.911 \pm 0.006$  e  $\chi^2 = 1.10$ . Para o ajuste exponencial encontramos  $\chi^2 = 3.35$ . A Figura (4.11) mostra alguns instantes da evolução do Tapete de Sierpinski. À medida que o tempo passa, os buracos vão sendo preenchidos, primeiros os menores, e em seguida os maiores. Se a evolução tomar muito tempo, a figura obtida é uma superfície compacta.



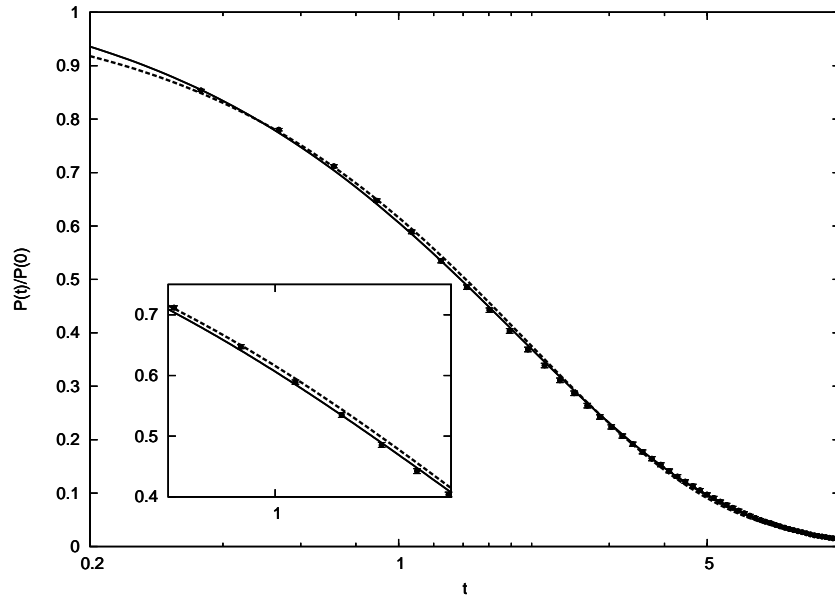


Figura 4.10: Relaxação da pressão para a sexta geração do Tapete de Sierpinski.

## 4.4 Triângulo de Sierpinski

Uma das superfícies fractais utilizadas nas simulações é construída a partir de dois Triângulos de Sierpinski. O Triângulo de Sierpinski, exibido na Figura (4.12), é uma figura fractal bastante comum na literatura especializada em fractais e pode ser obtido de várias formas. Uma das formas mais simples de obtê-lo segue o algoritmo abaixo:

1. Comece o processo a partir de qualquer triângulo no plano.
2. Remova do centro um triângulo cuja área é um quarto da área total.
3. Repita o processo anterior para os três triângulos restantes.
4. Este processo é repetido indefinidamente.

A auto-similaridade do triângulo de Sierpinski pode ser observada da mesma forma que fizemos para o tapete de Sierpinski: o nível  $k$  deste fractal é formado com  $N(\ell) = 3^k$  triângulos de comprimento linear  $\ell = (1/2)^k$ . A dimensão fractal é

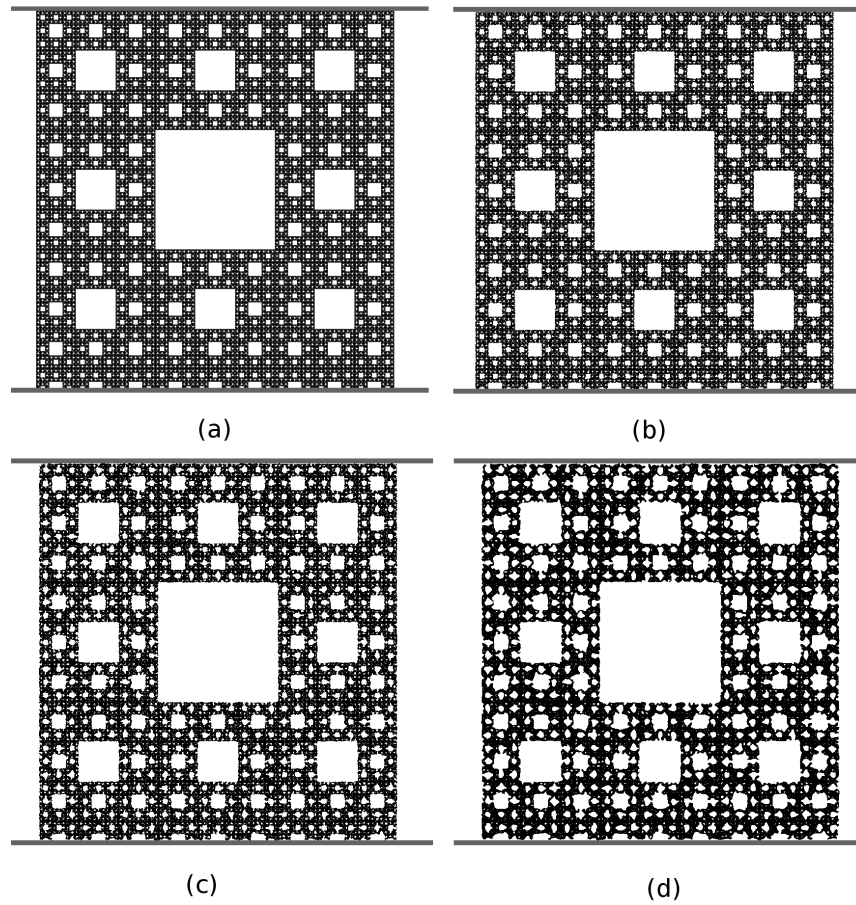


Figura 4.11: Alguns momentos da evolução do Tapete de Sierpinski.

portanto ,

$$D_f = \lim_{\ell \rightarrow 0} \frac{\ln(3^\ell)}{\ln(2^\ell)} = \frac{\ln(3)}{\ln(2)} = 1.5875\dots, \quad (4.7)$$

que é menor do que o espaço onde o triângulo está embebido  $D = 2$ .

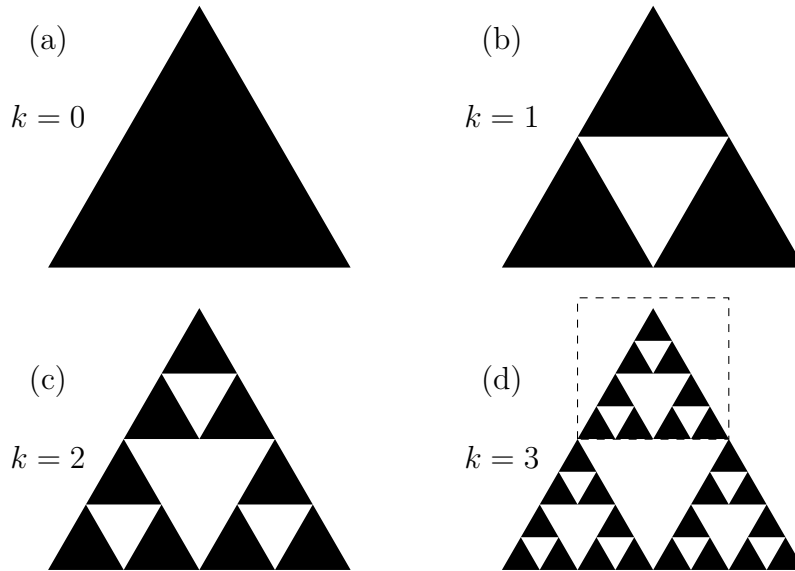


Figura 4.12: Triângulo de Sierpinski. Figura fractal obtida a partir de três cópias de si mesma, cada uma reduzida por um fator de  $1/2$  indefinidamente. O triângulo pontilhado em (d) é uma cópia reduzida por um fator 2 do triângulo em (c).

Em nossas simulações consideramos uma construção diferente para o Triângulo de Sierpinski. Em vez de iniciarmos o processo de construção do fractal com um triângulo equilátero, iniciamos com um triângulo retângulo com dois de seus lados de tamanho  $L$ . O resto da construção segue o processo descrito anteriormente. Além disso, nas nossas simulações utilizaremos uma combinação de dois Triângulos de Sierpinski em uma rede quadrada, conforme a Figura (4.13).

A dimensão fractal da união de dois fractais  $A$  e  $B$  é o valor máximo das dimensões fractais, ou seja

$$D_f(A \cup B) = \max(D_f(A), D_f(B)). \quad (4.8)$$

No nosso caso, como temos a união de dois fractais idênticos, ou seja, o primeiro sendo o Tapete de Sierpinski definido num triângulo retângulo e o segundo sendo o

mesmo fractal rebatido, temos portanto a mesma dimensão fractal.

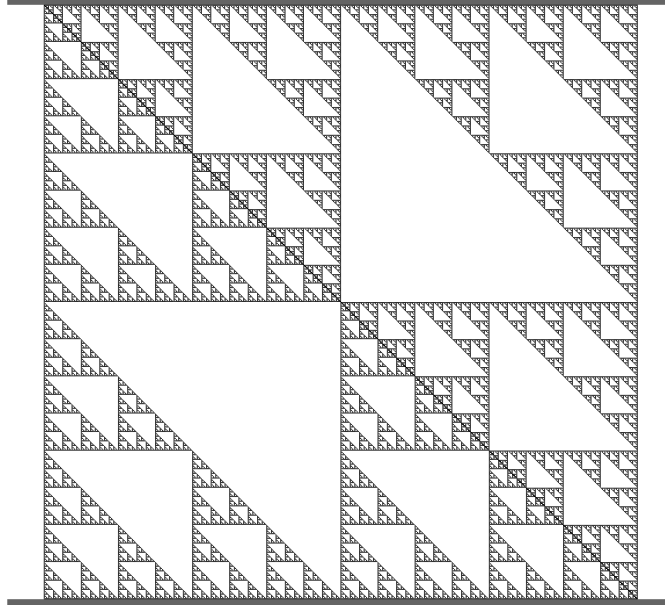


Figura 4.13: Superfície fractal formada a partir de dois Triângulos de Sierpinski. A dimensão fractal é a mesma do Triângulo de Sierpinski, ou seja,  $D_f = 1.5875$ .

Os resultados numéricos para esta superfície também mostraram que a superfície possui uma relaxação mais lenta do que uma exponencial. Para a relaxação da energia, exibida na Figura (4.14), os dados foram bem ajustados por uma exponencial estendida (linha cheia) com o expoente  $\beta = 0.758 \pm 0.003$ , onde o qui-quadrado reduzido encontrado foi  $\chi^2 = 1.06$ . Por outro lado, o ajuste exponencial (linha pontilhada) não descreve bem o comportamento da relaxação, tanto visualmente quanto numericamente, uma vez que encontramos o valor  $\chi^2 = 102.122$ . Na Figura (4.14) mostramos os dois ajustes para os dados obtidos para a energia, em escala semilogarítmica. No gráfico menor, temos uma ampliação de parte do gráfico.

Para a relaxação da pressão, o melhor ajuste também foi obtido por uma exponencial estendida, com o expoente de relaxação  $\beta = 0.794 \pm 0.008$ . O qui-quadrado reduzido para este ajuste foi  $\chi^2 = 1.063$ . Novamente, o decaimento exponencial não ajusta bem os dados numéricos da pressão. Neste caso o qui-quadrado reduzido foi  $\chi^2 = 10.478$ . Na Figura (4.15) apresentamos os dois ajustes feitos para os dados da

pressão.

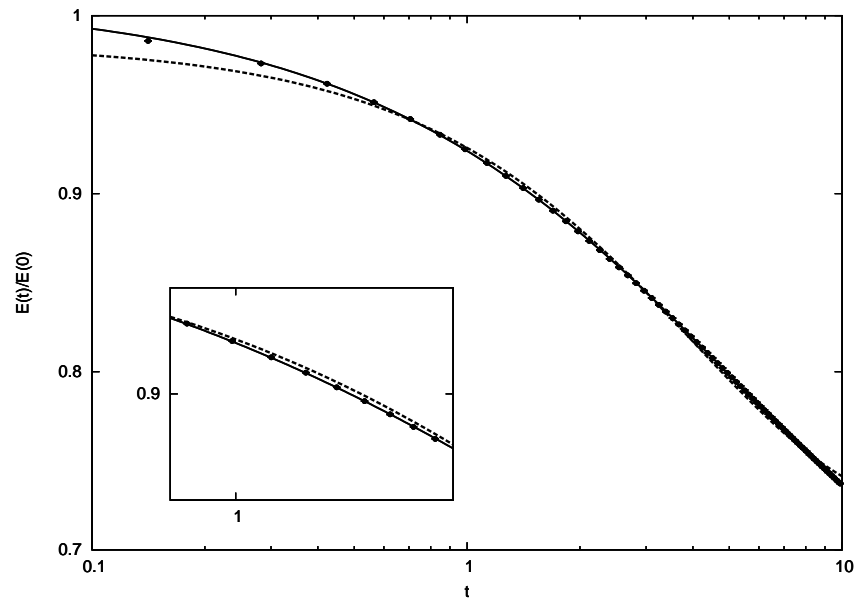


Figura 4.14: Energia em função do tempo para a combinação de dois Triângulos de Sierpinski em uma rede quadrada de tamanho  $L = 2048$ .

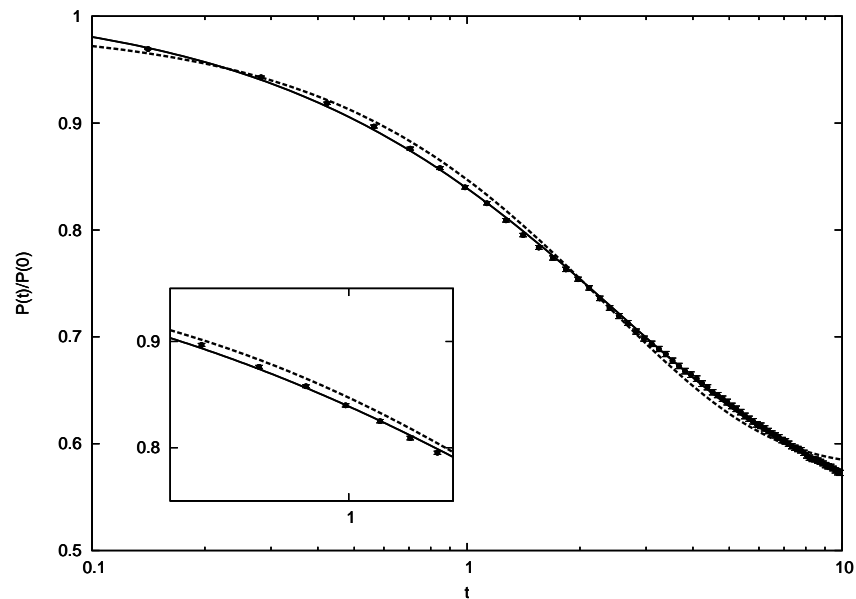


Figura 4.15: Pressão em função do tempo para a combinação de dois Triângulos de Sierpinski em uma rede quadrada de tamanho  $L = 2048$ .

A Figura (4.16) mostra alguns momentos da evolução do fractal construído a partir de dois Triângulos de Sierpinski. Com o passar do tempo, a superfície tende a ficar mais compacta, à medida que os buracos são preenchidos, novamente de forma hierárquica, primeiro os menores, depois os maiores.

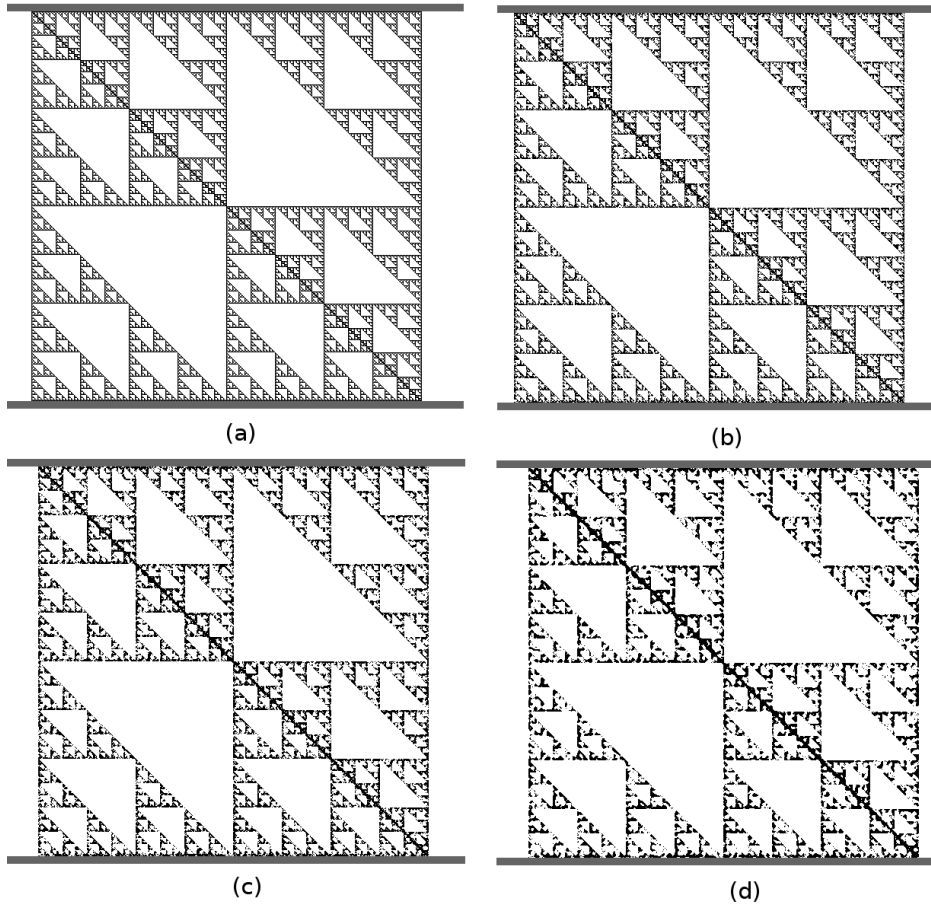


Figura 4.16: Evolução da combinação de dois Triângulos de Sierpinski numa rede quadrada de tamanho  $L = 2048$ .

## 4.5 Superfície Compacta

Nas seções anteriores vimos que os três fractais simulados, dois regulares e um estatístico, apresentam relaxação lenta, tanto na energia total do sistema quanto na pressão exercida pela superfície nas placas. Nosso principal objetivo era mostrar que esta relaxação lenta estaria associada com o caráter fractal das superfícies. Neste sentido, temos que excluir a possibilidade de que uma superfície que não tenha características fractais também apresente relaxação lenta. Para isso, em nossas simulações consideramos também uma superfície totalmente compacta.

A superfície compacta poderia ser criada de muitas formas: por exemplo, pode-

ríamos simular uma superfície compacta na forma de um quadrado de lado  $L$ , ou mesmo uma superfície na forma de uma bola ligeiramente amassada. Entretanto, a troca de dois spins (um apontando para cima e outro para baixo) levaria um tempo bastante grande para ocorrer, sendo portanto impraticável a simulação em nossas máquinas.

Para contornar essa situação, desenhamos em um editor de imagens uma superfície com um pouco mais de periferia, mas ainda assim compacta. Por apresentar mais possibilidades de trocas entre spins, a superfície mostrada na Figura (4.17) pode ser simulada em um tempo factível.

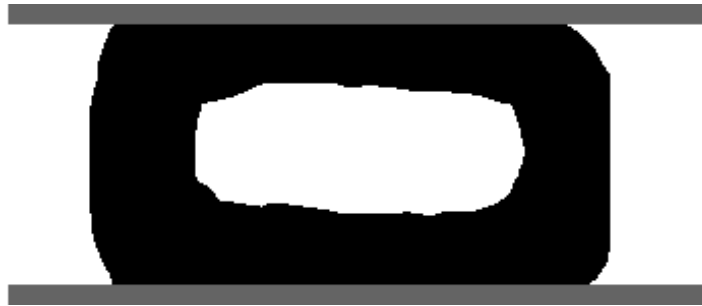


Figura 4.17: Superfície compacta criada a partir de um editor gráfico em uma rede retangular de tamanho  $128 \times 256$ .

Nossos experimentos computacionais mostram que a relaxação tanto da energia quanto da pressão são bem definidas por um comportamento exponencial. Após um certo transiente, a relaxação da energia do sistema é bem ajustada por uma reta em um gráfico com escala semi-logarítmica durante um longo intervalo, como mostra a Figura (4.18).

O mesmo comportamento exponencial também é observado para a pressão nas placas, como vemos na Figura (4.19). De fato, uma vez que a energia do sistema muda muito lentamente neste tipo de rede, precisamos de um longo período de tempo para visualizarmos qualquer diferença na evolução.



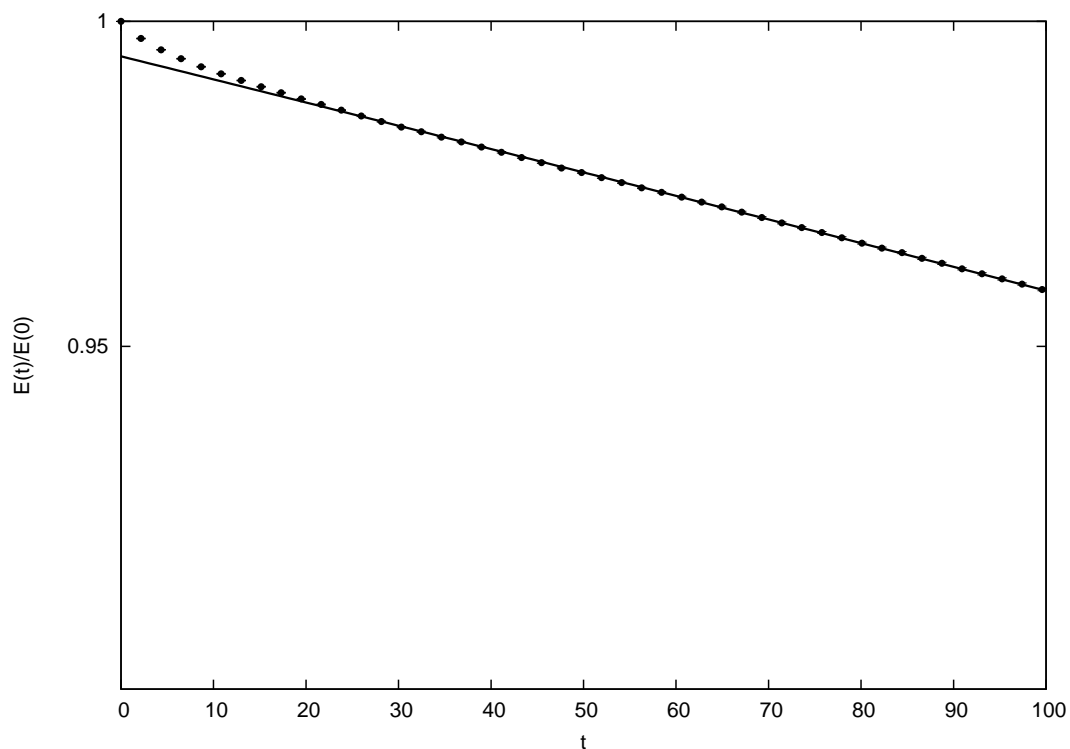


Figura 4.18: Relaxação da energia para a superfície compacta. Após um certo transiente, a relaxação é exponencial. A linha reta representa um ajuste linear feito com os dados obtidos das simulações.

A Figura (4.20) mostra alguns momentos da evolução da superfície compacta. À medida que o tempo passa, o processo de relaxação minimiza o perímetro da superfície compacta, tornando-a cada vez mais arredondada, isto é, sua forma geométrica é equilibrada pelo processo de relaxação. A presença das placas (condição externa de contorno) serve como limitador geométrico, impedindo portanto que a superfície fique completamente arredondada.

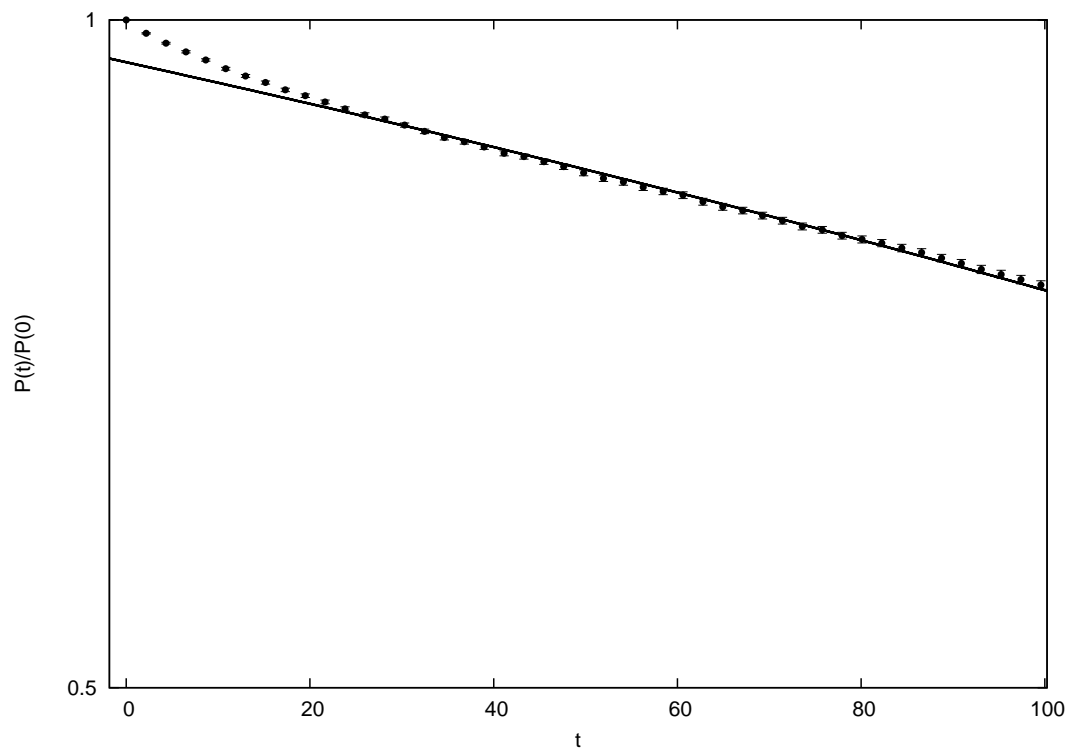


Figura 4.19: Relaxação da pressão para a superfície compacta. Após um certo transiente, a relaxação é exponencial. A linha reta representa um ajuste linear feito com os dados obtidos das simulações.

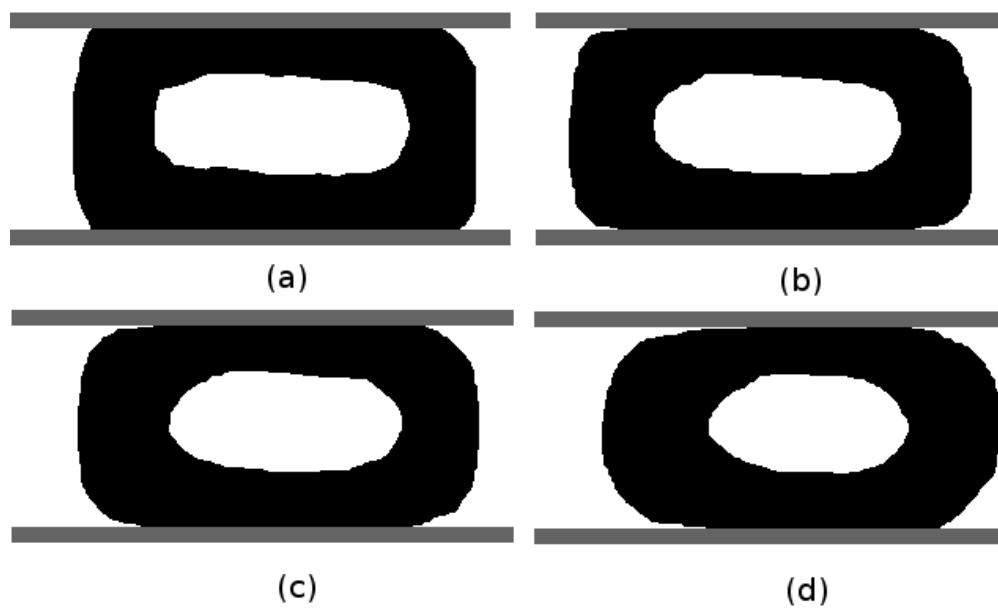


Figura 4.20: Processo de evolução da superfície compacta.

# Capítulo 5

## Conclusões

Nesta tese, usamos um modelo dinâmico de spins bastante simples para estudar a relaxação de superfícies amassadas. Nosso principal objetivo era comparar os resultados obtidos através de nossas simulações com os resultados experimentais para as superfícies amassadas.

De acordo com os resultados obtidos por Gomes *et al* para superfícies amassadas construídas a partir de folhas de alumínio, a relaxação da pressão exercida pela superfície na prensa hidráulica é bastante lenta, não-exponencial, com os dados experimentais sendo bem ajustados por uma função exponencial estendida da forma

$$F(t) = F_0 \exp(-(t/\tau)^\beta), \quad (5.1)$$

onde o expoente de relaxação  $\beta$  é aproximadamente  $0.28 \pm 0.03$ .

Segundo Gomes, este comportamento anômalo estaria possivelmente relacionado com a característica fractal das superfícies amassadas, uma vez que tais estruturas, assim como vidros ou polímeros, possuem muitos mínimos de energia. No nosso modelo, nos preocupamos essencialmente em tentar capturar essa possível relação entre a fractalidade de uma rede e sua relaxação em direção ao equilíbrio. Nesse sentido, consideramos algumas redes fractais em nossas simulações, tais como o aglomerado percolante, o Tapete de Sierpinski e uma combinação de dois Triângulos de Sierpinski, todos criados em uma rede retangular.

Nossos resultados mostraram que, em todas as redes fractais, a relaxação da

energia total do sistema e a pressão definida no nosso modelo é lenta e os dados numéricos são bem ajustados por uma exponencial estendida [28].

De acordo com nossos resultados, os expoentes de relaxação  $\beta$  obtidos para o Tapete de Sierpinski e para o aglomerado percolante são bem próximos numericamente. Tal resultado é importante, uma vez que esses fractais possuem dimensões fractais bem próximas. Outro resultado interessante está relacionado ao expoente  $\beta$  do Triângulo de Sierpinski, que é menor que os expoentes  $\beta$  do Tapete de Sierpinski e do aglomerado percolante. Uma vez que o Triângulo de Sierpinski tem dimensão fractal menor, tal resultado sugere uma possível relação entre o expoente  $\beta$  e a dimensão fractal do sistema. Este resultado, até o momento, não possui constatação experimental nem explicação teórica.

De acordo com a evolução das superfícies apresentadas em nossas simulações, o preenchimento dos buracos é hierárquico, ou seja, primeiro os menores são preenchidos, depois os maiores, e assim por diante. A realidade possivelmente apresenta o mesmo comportamento.

Mostramos também que para uma rede compacta, isto é, que não apresente características fractais, a relaxação é exponencial, tanto para a energia total do sistema quanto para a pressão definida no nosso modelo. Este resultado reforça ainda que a forma fractal em que os spins são distribuídos na rede contribui para a relaxação lenta das medidas feitas.

Certamente outros estudos, tanto experimentais quanto teóricos, devem ser feitos para consolidar estas hipóteses. Por exemplo, a simulação computacional de outros fractais, possivelmente embebidos em uma dimensão maior do que a considerada em nossas simulações, ou mesmo um estudo analítico dessas superfícies.

## Referências Bibliográficas

- [1] R. F. Albuquerque and M. A. F. Gomes, “Stress relaxation in crumpled surfaces,” *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 310, pp. 377–383, 2002.
- [2] P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Penna, A. R. Lima, J. S. S. Martins, C. Moukarzel, and C. A. F. Leite, “Dynamic drop models,” *Trends in Statistical Physics*, vol. 3, p. 137, 2000.
- [3] P. M. C. de Oliveira and T. J. P. Penna, “Simulating the complex behavior of a leaky faucet,” *J. Stat. Phys.*, vol. 73, p. 789, 1993.
- [4] P. M. C. de Oliveira and T. J. P. Penna, “Lattice simulation of leaky faucet dynamics,” *Int. J. Mod. Phys. C*, vol. 5, p. 997, 1994.
- [5] T. J. P. Penna, P. M. C. de Oliveira, J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves, and R. D. Pinto, “Long range anticorrelations and non gaussian behavior of a leaky faucet,” *Phys. Rev. E*, vol. 52, p. R2168, 1995.
- [6] P. M. C. de Oliveira, J. S. S. Martins, and A. S. de Toledo, “Stochastic behavior of cooling processes in hot nuclei,” *Phys. Rev. C*, vol. 55, p. 3174, 1997.
- [7] A. R. Lima, T. J. P. Penna, and P. M. C. de Oliveira, “Monte carlo simulation of some dynamical aspects of drop formation,” *Int. J. Mod. Phys. C*, vol. 8, p. 1073, 1997.

- 
- [8] J. S. S. Martins and P. M. C. de Oliveira, “Lattice simulation of nuclear multifragmentation,” *Int. J. Mod. Phys. C*, vol. 9, p. 867, 1998.
- [9] P. M. C. de Oliveira, C. A. F. Leite, C. V. Chianca, J. S. S. Martins, and C. F. Moukarzel, “Fragmentation experiment and model for falling mercury drops,” *Physica A*, vol. 375, p. 375, 2007.
- [10] J. S. S. Martins and P. M. C. de Oliveira, “Critical exponents for nuclear multifragmentation: Dynamic lattice model,” *Nucl. Phys.*, vol. A643, p. 433, 1998.
- [11] D. L. Blair and A. Kudrolli, “Geometry of crumpled paper,” *Physical Review Letters*, vol. 94, no. 16, 2005.
- [12] T. W. K. Matan, R. Williams and S. R. Nagel, “Crumpling a thin sheet,” *Phys. Rev. Lett*, vol. 88, p. 076101, 2002.
- [13] P. A. Houle and J. P. Sethna, “Acoustic emission from crumpling paper,” *Phys. Rev. E*, vol. 54, p. 278, 1996.
- [14] E. M. Kramer and A. E. Lobkovsky, “Universal power law in the noise from crumpled elastic sheet,” *Phys. Rev. E*, vol. 53, p. 1465, 1995.
- [15] M. A. F. Gomes, T. I. Jyh, T. I. Ren, I. M. Rodrigues, and C. B. S. Furtado, “Mechanically deformed crumpled surfaces,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 22, no. 8, pp. 1217–1221, 1989.
- [16] G. A. Vliegenthart and G. Gompper, “Forced crumpling of self-avoiding elastic sheets,” *Nature Materials*, vol. 5, p. 216, 2006.
- [17] M. A. F. Gomes *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 20, pp. L283–L284, 1987.
- [18] M. A. F. Gomes, “Fractal geometry in crumpled paper balls,” *American Journal of Physics*, vol. 55, pp. 649–650, 1987.
- [19] R. Kohlrausch *Ann. Phys.*, vol. 12, p. 393, 1847.

- 
- [20] G. Williamns and D. C. Watts *Trans. Faraday Soc.*, vol. 66, p. 80, 1970.
- [21] S. G. Brush, “History of the Lenz-Ising model,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 39, pp. 883–893, 1967.
- [22] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1999.
- [23] P. M. C. de Oliveira, *Computing Boolean Statistical Models*. World Scientific Publishing, 1991.
- [24] P. L. Leath, “Cluster size and boundary distribution near percolation threshold,” *Phys. Rev. B*, vol. 14, p. 5046, 1976.
- [25] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*. Taylor and Francis, 1994.
- [26] A.-L. Barabási and H. E. Stanley, *Fractal Concepts In Surface Growth*. Cambridge University Press, 1995.
- [27] J. Feder, *Fractals*. Plenum Publishing Corporation, 1988.
- [28] K. Mota and P. M. C. de Oliveira, “Monte carlo simulations for the slow relaxation of crumpled surfaces,” *Physica A*, 2008.