UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

Novas Formas de Percolação

Reginaldo Aparecido Zara

Tese apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para obtenção do Título de Doutor em Ciências: Física Básica

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody*

USP/IFSC/SBI
8-2-001333

SÃO CARLOS

2000

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

Zara, Reginaldo Aparecido
Novas Formas de Percolação/Reginaldo Aparecido Zara. - - São Carlos, 2000
124 p.

Tese (Doutorado) - - Instituto de Física de São Carlos, 2000.

Orientador: Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Mecânica Estatística. 2. Estruturas fractais.
I. Título.

UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (016) 273-9333
Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE REGINALDO APARECIDO ZARA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 05 DE JUNHO DE 2000.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody/IFSC-USP

Prof. Dr. José Fernando Fontanari/IFSC-USP

Prof. Dr. Liacir dos Santos Lucena/UFRN

Prof. Dr. Antonio Caliri/FCFRP-USP

Prof. Dr. Nestor Felipe Caticha Alfonso/IF-USP

Resumo

A teoria da percolação tem se revelado muito útil no tratamento de inúmeros fenômenos da natureza. Devido a sua grande versatilidade, esta teoria é objeto de intensa pesquisa. Aqui, propomos novas formas de percolação e as estudamos através de simulações numéricas.

Na primeira parte do nosso trabalho, investigamos a estrutura dos aglomerados gerados pelo modelo de percolação por invasão múltipla. Estimamos os valores das dimensões fractais do esqueleto, do esqueleto elástico, dos pontos de estrangulamento e dos menores caminhos, como função dos parâmetros do modelo. Por ter uma estrutura geométrica bastante estabilizada, o modelo chamado de otimizado pode vir a ser muito útil no tratamento de problemas com diluição da mecânica estatística.

O modelo de percolação atenuada foi concebido para permitir que, durante o processo de invasão, os poros grandes possam também ser ocupados. Esta ocupação ocorre com uma probabilidade que diminui quando o tamanho do poro aumenta. Estimamos cuidadosamente os limiares de percolação e construímos os diagramas de fase correspondentes. Verificamos que os limiares de percolação do nosso modelo não satisfazem a conjectura de Galam e Mauger.

Estudamos o efeito da inércia em fluidos escoando através de meios porosos incorporando uma caminhada de N passos ao modelo de percolação por invasão. A magnitude da inércia é proporcional ao parâmetro N, que representa o número de poros sequencialmente invadidos após a ruptura do perímetro, em cada etapa do processo. Investigamos este modelo em duas e três dimensões. Verificamos que no caso bidimensional, as caminhadas de N passos são facilmente bloqueadas, o que leva ao surgimento de um limite superior para o número de passos efetivamente realizados. Nossas estimativas das dimensões fractais dos aglomerados (como função do parâmetro N), indicam que este modelo pertence a uma classe de universalidade diferente daquela da percolação por invasão ordinária.

Propomos um modelo de percolação para tratar um processo de solidificação de dois fluidos imiscíveis na presença de impurezas móveis. O movimento das impurezas ocorre devido a uma interação repulsiva de curto alcance observada experimentalmente por Uhlmann, Chalmers e Jackson (UCJ). Dependendo das concentrações de fluidos e impurezas, pode haver a formação de uma fase sólida que percola todo o sistema. Construímos o diagrama de fases deste modelo no espaço das concentrações e calculamos seus

expoentes críticos. Nossos resultados indicam que o modelo pertence à mesma classe de universalidade que a percolação ordinária.

Finalmente, estudamos um processo de percolação por invasão na presença de impurezas que se movem segundo o mecanismo UCJ. Encontramos um valor crítico para a concentração de impurezas acima do qual não mais existe percolação. O perfil de aceitação aproxima-se de uma função de Heavyside, com o ponto de descontinuidade dependendo da concentração de impurezas.

Abstract

Percolation theory provides a quantitative and conceptual model for the understanding of many natural phenomena. Here, we present new kinds of percolation and study them using Monte Carlo simulation techniques.

We start studying the cluster, the backbone and the elastic backbone structures of the multiple invasion percolation for both the perimeter and the optimized versions. The behavior of the mass, the number of cutting sites and loops are investigated and their corresponding scaling exponents are estimated. By construction, the mass of the optimized model scales exactly with the gyration radius of the cluster - we verify that this also happens with the backbone. Our simulation shows that the red sites almost disappear, indicating that the cluster has achieved a high degree of connectivity.

We propose a new kind of invasion percolation which permits that, besides small pores, large pores being also occupied. In our model, the occupation probability of a pore diminishes with the pore's size. We estimate their corresponding percolation thresholds and show that they do not satisfy the Galam and Mauger conjecture.

In order to take into account the inertia of the invader fluid, a new kind of invasion percolation is introduced. In this model, which we named N-steps invasion percolation, the inertia forces are controlled by the number N of pores (or steps) invaded after the perimeter rupture. The new model belongs to a different class of universality and has its fractal dimension depending on N. A blocking phenomenon takes place in two dimensions. It imposes an upper bound value on N. For pores sizes larger than the critical threshold, the acceptance profile exhibits a permanent tail.

We also introduce a model for the solidification process of two immiscible fluids interacting repulsively with mobile impurities on a two dimensional square lattice. In the space of the fluids and impurities concentrations the phase diagram exhibits a critical curve separating a percolating from a non-percolating phase. Estimated values for the fractal dimension and the exponent β of the order parameter, reveal that the critical exponents do not vary along this curve, *i.e.*, they are independent of the impurities concentration. The universality class we find is that of the ordinary percolation.

Finally, based on the main ideas of the dynamic epidemic and invasion percolation models, we propose a model to describe the cleaning process of a dirty porous medium by fluid injection. An analysis of the acceptance profiles strongly indicates that this model

is a kind of self-organized system.

Aos meus pais, Gerson e Lucília.

Agradecimentos

Escrevê-los é sempre uma tarefa ingrata...

- Ao Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody pela orientação, discussões no decorrer deste trabalho e também pela dedicação, apoio e amizade.
- Aos amigos Nazareno, Ana Tereza, Paulo Roberto, Viviane, João Vitor, Henrique, Carlos Alberto e Cândido, que me ensinaram muitas coisas, algumas das quais eles nem desconfiam...
- A todos os colegas, pela amizade e agradável convivência, em especial, ao Roberto, Márcio, Salviano, Queite, Marcelo, Dione, Cristina, Vivaldo, Nilva, Fabricio, Fernando... pela amizade e apoio em todos os momentos

Este trabalho foi financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Conteúdo

1 Introdução **1**

2 Percolação: Conceitos Fundamentais **9**

2.1 O que é percolação ordinária? 9

2.2 Principais grandezas da percolação 11

2.3 Geração de aglomerados percolantes: o método de Leath 16

2.4 Percolação por invasão 17

2.5 A percolação por invasão múltipla 25

2.5.1 O modelo perimetral 25

2.5.2 O modelo otimizado 27

3 Caracterização dos aglomerados da percolação por invasão múltipla **31**

3.1 Estrutura interna dos aglomerados de percolação 31

3.2 O método das queimadas 37

3.3 O modelo perimétrico 39

3.3.1 O esqueleto e o esqueleto elástico 40

3.3.2 Os pontos de estrangulamento 41

3.3.3 Os ciclos 44

3.3.4 Os menores caminhos 45

3.4 O modelo otimizado 47

3.4.1 O esqueleto 49

3.4.2 Os pontos de estrangulamento 50

3.4.3 Os ciclos 50

3.4.4 Os menores caminhos 51

3.5 Conclusões 51

4 Percolação Atenuada **53**
4.1 Introdução 53
4.2 O modelo de percolação atenuada 54
4.3 Simulações numéricas 56
4.3.1 Diagramas de fases 56
4.3.2 A estrutura dos aglomerados 58
4.3.3 O perfil de aceitação 61
4.4 Fórmulas universais para os limiares de percolação 62
4.5 Conclusões 64

5 Percolação por invasão com caminhadas de N passos **67**
5.1 Introdução 67
5.2 O papel da inércia no escoamento de fluidos através de meios porosos . . . 69
5.3 A percolação por invasão com caminhadas de N passos 75
5.4 Simulações numéricas 77
5.4.1 A estrutura dos aglomerados 81
5.4.2 O perfil de aceitação 84
5.5 Conclusões 86

6 Percolação e percolação por invasão na presença de impurezas móveis **88**
6.1 Efeitos coletivos durante processos de solidificação na presença de impurezas 88
6.1.1 O modelo epidêmico dinâmico 92
6.2 O modelo de percolação dinâmica 96
6.2.1 Apresentação do modelo 96
6.2.2 Resultados da simulação 97
6.3 O modelo de percolação por invasão dinâmica 101
6.4 Conclusões 105

7 Conclusões e perspectivas **107**

Apêndice **112**

A Outros tipos de percolação **112**
A.1 Percolação direcionada 112
A.2 Percolação *bootstrap* 114

A.3 Percolação elástica 115
A.4 Percolação quântica 116
A.5 Percolação com aprisionamento 117

Bibliografia **119**

Lista de Figuras

2.1 Perfil de aceitação para a percolação por invasão de sítios na rede quadrada. 22

2.2 Aglomerado típico de um processo de invasão sem aprisionamento. O processo de invasão começa no centro da rede. 23

2.3 Dimensão fractal dos aglomerados do modelo de invasão múltipla para diferentes valores do parâmetro F. 26

2.4 Perfis de aceitação do modelo de invasão múltipla para diferentes valores do parâmetro F. 27

2.5 Comparação da evolução das massas dos aglomerados do modelo otimizado ($D = 1.89$) e da invasão ordinária. 30

3.1 Amostra das estruturas identificadas pelo método das queimadas. 39

3.2 Logaritmo da Massa do Esqueleto (M_B) *versus* o logaritmo de L. A inclinação da reta é uma estimativa da dimensão fractal do esqueleto 40

3.3 Gráfico de $P(M_i, L)$ contra M_i/L^{D_i} para (a) o aglomerado e (b) o esqueleto gerados através da percolação por invasão ordinária para diferentes tamanhos de rede L. 42

3.4 Aglomerado típico do modelo de invasão perimetral com $F = 0.40$ em uma rede $L = 401$. Podemos ver o surgimento de bifurcações que colaboram para o aumento do número de ciclos do esqueleto elástico. 46

3.5 Gráfico de $P(l_{min}, L)$ contra $l_{min}/L^{D_{min}}$ para a percolação por invasão ordinária. 47

3.6 Gráfico logarítmico da massa do aglomerado, número de ciclos do aglomerado e massa do esqueleto contra o raio de giração de suas respectivas estruturas. 49

4.1 Fração de aglomerados percolantes como função de p para diferentes tamanhos de rede e w fixo em $w = 0.93$. 57

4.2 Diagramas de fases da percolação atenuada para as redes quadrada e cúbica simples. 59
4.3 Gráfico em escala logaritmica da massa média dos aglomerados contra seu raio de giração. 60
4.4 Perfil de aceitação para a percolação atenuada definida sobre uma rede quadrada. 62
4.5 Limiares de percolação (sítios) como função de $(d-1)(q-1)$ em escala logarítmica. 64
4.6 Limiares de percolação (sítios) para a percolação atenuada como função de $(d-1)(q-1)$ em escala logarítmica. 65

5.1 Fator de atrito medido experimentalmente como função do número de Reynolds. 73
5.2 Fator de atrito (f) estimando através da solução numérica das equações de Navier-Stokes como função do número de Reynolds (Re). Os dados se referem a três diferentes porosidades: $p = 0.7, p = 0.8$ e $p = 0.9$ (rede quadrada). 74
5.3 Número de passo realmente executados $n(t)$ e o número de passos esperado como função das etapas de invasão t. 79
5.4 (a) Fração de caminhadas bloqueadas f_b como função de N para a rede quadrada. (b) Número médio de passos contra N. A linha pontilhada é a reta $\langle n \rangle = N$. 80
5.5 Dependência da massa média dos aglomerados com o raio de giração para as redes cúbica simples e quadrada. 82
5.6 Aglomerados típicos do modelo de percolação por invasão com caminhadas de N passos construídos na rede quadrada $L = 201$ para $\langle n \rangle = 1$ (figura superior) e $\langle n \rangle = 30$. 83
5.7 Dependência do perfil de aceitação com o número aleatório r variando (a) o tamanho da rede e (b) o número médio de passos. 86

6.1 Interfaces sólido-líquido no experimento de UCJ. As impurezas acumulam-se na interface, sendo empurradas por ela. Na figura à direita, o meio solidificante era *salol* e as impurezas, MnO, euquanto à esquerda, temos a solidificação de *timol* na presença de partículas de Zn. 91

6.2 Fração de aglomerados percolantes contra concentração impurezas para diferentes tamanhos de rede. 94
6.3 Aglomerados típicos do modelo epidêmico dinâmico para $x_I = 0.20$ (esquerda) e para o caso crítico $x_I = x_I^c = 0.56$ (direita). 95
6.4 Fração de aglomerados que percolam o sistema contra a concentração de fluido A para diferentes tamanhos de rede. 98
6.5 Diagrama de fases no espaço $x_A + x_B + x_I$ para o modelo de percolação dinâmica. A área hachurada do plano corresponde à fase percolante. . . . 99
6.6 Logaritmo da densidade média dos aglomerados percolantes na região crítica. A inclinação da reta fornece uma estimativa do expoente β. 100
6.7 Gráfico logarítmico da massa média do aglomerado contra seu raio de giração para um valor fixo de x_I. 101
6.8 Perfis de aceitação do modelo de percolação por invasão dinâmica para diferentes concentrações de impurezas. 103
6.9 Gráfico logarítmico de B_1 como função da massa dos aglomerados para uma concentração de impurezas fixa. A inclinação da reta estima o expoente Δ. 105

Lista de Tabelas

2.1 Limiares de percolação nas versões de sítios e ligações para redes bidimensionais. 11

2.2 Limiares de percolação nas versões de sítios e ligações para redes de dimensões $3 \leq d \leq 6$. 12

2.3 Expoentes críticos para a percolação ordinária. Os resultados para $d = 2$ e para a rede de Bethe são exatos. 16

3.1 Expoentes de escala para o modelo perimétrico. (1) - Aglomerado, (2) - Esqueleto, (3) - Esqueleto Elástico 43

3.2 Comparação entre número de ensaios nos modelos perimetral e otimizado necessários para obtenção do mesmo desvio relativo de massas dos aglomerados. Aqui, utilizamos $N_o(L = 51, 101) = 100$ e $N_o(201) = 15$. 48

3.3 Expoentes de escala para o modelo otimizado. (1) - Aglomerado, (2) - Esqueleto. 50

5.1 Dimensões fractais e números de coordenação médios para as redes quadrada e cúbica simples para diversos valores de $\langle n \rangle$. 84

Capítulo 1

Introdução

Desde sua proposição por Broadbent e Hammersley [1] e Domb [2], os modelos de percolação têm sido extensivamente estudados tanto na sua versão por ligações [1] quanto na versão por sítios [2]. Estes modelos utilizam argumentos probabilísticos clássicos e não possuem hamiltoniana de interação. Em geral, trabalham com aglomerados de partículas ou estados. Representam, hoje, um excelente laboratório para o estudo de fenômenos críticos e de transições de fase tanto pela sua simplicidade conceitual quanto pela facilidade de simulação nos computadores atuais.

Em um modelo de percolação, os sítios ou ligações de uma rede são ocupados com uma probabilidade p, formando aglomerados. Quando um aglomerado forma um caminho que conecta os lados opostos desta rede, diz-se que o sistema percolou. Se o valor da probabilidade de ocupação for mudado sistematicamente, o sistema exibirá uma mudança de comportamento, com a formação, no limite termodinâmico, de um aglomerado infinito. O valor da probabilidade de ocupação em que isto ocorre é muito bem definido e é denominado limiar de percolação ou probabilidade de ocupação crítica p_c. Assim, a percolação pode ser interpretada como uma transição de fase geométrica. Numa analogia aos sistemas de spins, a probabilidade de percolação seria a magnetização e o tamanho médio dos aglomerados corresponderia à suscetibilidade magnética.

No estudo dos modelos de percolação, diferentes técnicas têm sido adotadas:

expansões em séries [3], matriz de transferência [4], grupo de renormalização [5] e método de Monte Carlo [5, 6]. Os resultados encontrados mostram que os expoentes críticos associados à percolação obedecem ao princípio de universalidade. Para a percolação, o termo universalidade é bastante amplo, e significa não somente que os expoentes críticos dependem basicamente da dimensão e do alcance das interações (não sendo relevante o tipo de rede), mas também que os expoentes são os mesmos tanto para a percolação por sítios quanto por ligações.

Nas últimas décadas foram propostos novos modelos de percolação, o que ampliou sobremaneira a sua utilização como importante ferramenta teórica. A percolação no seu formato original passou a ser conhecida como percolação ordinária. Exemplos de variantes do modelo de percolação mais utilizadas atualmente são a percolação direcionada [7, 8], a percolação elástica [9, 10], a percolação quântica [11] e a percolação *bootstrap* [12]. Estes modelos são aplicados nos mais variados campos sendo úteis na investigação de sistemas que envolvem a cinética dos íons de cálcio no interior de organismos vivos [13], crescimento urbano [14], escoamento de fluidos através de meios porosos [15], a evolução temporal das galáxias [16], etc. Uma breve discussão destes modelos é apresentada no Apêndice A.

Um importante descendente da percolação ordinária é a percolação por invasão [17]. Este modelo foi introduzido por Wilkinson e Willemsen em 1983 para estudar o deslocamento de dois fluidos imiscíveis através de um meio poroso. Trata-se de um processo dinâmico onde a formação de um aglomerado se faz através da seleção de caminhos de menor resistência ao escoamento. Usualmente, um fluido de baixa viscosidade (que chamamos de invasor) é injetado em um meio poroso ocupado anteriormente por um fluido de alta viscosidade (defensor). Dependendo da taxa de injeção, o sistema pode ser encontrado em dois regimes distintos, nos quais as forças dominantes são de natureza viscosa ou capilar. A descrição teórica destes regimes baseia-se em dois modelos: o *DLA* (*Diffusion-Limited Aggregation*) [18] que descreve o deslocamento rápido quando as forças

viscosas são dominantes e a percolação por invasão, que se aplica quando o fluido escoa lentamente, com domínio das forças capilares. Originalmente, a percolação por invasão foi fundamentada na verificação experimental de que a água, ao expulsar o óleo das rochas, o faz primeiramente através dos poros de menor diâmetro. Associando-se o tamanho dos poros a números aleatórios distribuídos aos sítios de uma rede, temos a dinâmica da invasão: ocupamos, um a um, os sítios (poros) com o menor número aleatório (tamanho) associado.

À medida em que o fluido invasor avança, é possível que regiões de fluido defensor sejam totalmente circundadas formando aglomerados desconectados das bordas do sistema. Quando fluido defensor é incompressível, estas áreas *aprisionadas* não podem ser invadidas e temos o assim chamado modelo de percolação por invasão com aprisionamento. Acredita-se que este modelo pertença a uma classe de universalidade diferente da percolação ordinária. Por outro lado, na situação em que o fluido defensor é compressível, temos o modelo de percolação por invasão sem aprisionamento, que se encontra na mesma classe de universalidade que a percolação ordinária.

Com o passar do tempo, várias modificações do modelo de percolação por invasão (que passaremos a chamar de percolação por invasão ordinária) foram propostas. Estas modificações consideram, por exemplo, a ação de campos gravitacionais [19], o fluxo em alguma direção privilegiada [20], fenômenos de formação de dedos viscosos (*fingering*) em solos [21] e efeitos de temperatura [22, 23].

Embora muitas variações do modelo original de percolação estejam disponíveis na literatura, existem ainda diversos problemas que podem ser investigados sob a luz da teoria da percolação. Por isso, apresentamos neste trabalho, novas formas de percolação que podem ser aplicadas a diferentes sistemas. Estas novas formas de percolação ilustram a riqueza das idéias da percolação e tem como objetivo aproximar, cada vez mais, os modelos teóricos do mundo real. Neste sentido, o primeiro modelo apresentado é a nossa

percolação por invasão múltipla [24]. Este modelo, que será apresentado com detalhes nos capítulos 1 e 2, simula a invasão simultânea de vários sítios. Como dissemos anteriormente, nos modelos de percolação por invasão os sítios são invadidos *um a um*. Entretanto, não é razoável pensar que na natureza isto realmente ocorra. Uma hipótese mais plausível é que vários sítios sejam invadidos simultaneamente. Recentemente, propomos possíveis formas de invasão múltipla [24], lançando mão de alguns ingredientes físicos tais como o fluxo do fluido através da interface e as relações de escala entre a massa (número de sítios) e o raio de giração dos aglomerados.

Os modelos de percolação por invasão múltipla foram caracterizados através do cálculo das dimensões fractais dos aglomerados formados, e dos mecanismos de crescimento, analisados com base no perfil de aceitação dos sítios ao aglomerado. Mostramos que, em duas dimensões, dependendo do fluxo de fluido, nossos modelos geram estruturas fractais com dimensões que interpolam continuamente valores de $\frac{91}{48}$ (como na invasão ordinária) a 2 (aglomerados compactos). No entanto, o conhecimento das dimensões fractais dos aglomerados não é suficiente para caracterizar o sistema sob o ponto de vista de suas propriedades de transporte. Em geral, as propriedades de transporte em meios desordenados são determinadas por uma estrutura conhecida como esqueleto do aglomerado [5, 25]. O esqueleto do aglomerado é formado pela união de todos os caminhos auto-exclusivos que unem dois pontos do sistema que pertencem ao mesmo aglomerado. Enquanto as propriedades de condutividade elétrica e permeabilidade são diretamente determinadas pelo esqueleto [5], os processos que envolvem tempos de primeira visita estão relacionados com o comprimento dos menores caminhos entre dois pontos do aglomerado [26, 25].

Neste trabalho, apresentamos uma descrição detalhada da estrutura interna dos aglomerados da percolação por invasão múltipla [24, 27], calculando os expoentes de escala relacionados ao esqueleto do aglomerado, ao comprimento dos caminhos mínimos, ao número de ciclos e pontos de estrangulamento. Estes expoentes caracterizam total-

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

mente o modelo de invasão múltipla e podem ser utilizados no estudo das mais diferentes propriedades de transporte relacionadas a estes aglomerados.

O problema de escoamento de fluidos através meios porosos surge nos mais diversos campos científicos, envolvendo várias áreas como engenharia, ciência de solos, ciência de materiais entre outras [15]. Embora este seja um problema bastante antigo, vários pontos ainda não foram bem entendidos. A teoria da percolação é hoje reconhecida como uma linguagem natural para tratar problemas que envolvem o escoamento de fluidos através de meios porosos. Muitos modelos de percolação tem sido propostos com o intuito de esclarecer o fenômeno do deslocamento de fluidos em sistemas onde a conectividade dos poros exerce papel dominante.

A hipótese fundamental destes modelos é que a probabilidade de ocupação de um poro, p, seja proporcional à pressão capilar p_c. Com isso, pode-se estabelecer uma correspondência direta entre a probabilidade de ocupação dos sítios e a pressão capilar nos poros. Esta hipótese baseia-se na observação de que, durante o escoamento de um fluido através de um meio poroso, os poros menores são preferencialmente ocupados. Um dos primeiros modelos de percolação para o deslocamento de fluidos através de meios porosos foi sugerido por Larson *et al* [28, 29]. O meio poroso é representado por uma rede de sítios cujos tamanhos são aleatoriamente distribuídos. Este modelo assume que o processo de deslocamento do fluido é determinado somente pelas forças de capilaridade e que todas os sítios acessíveis ao fluido têm tamanhos mínimos associados, iguais a um certo valor r_{min}. Com isso, o fluido pode escoar somente através de um aglomerado conectado por estes sítios acessíveis ao fluido. No entanto, em sistemas reais, isto não é totalmente verdade. Têm sido apontado que, em muitos processos, o deslocamento dos fluidos depende também da pressão com a qual o fluido invasor é injetado [15, 30]. A combinação das pressões capilar e a pressão externa responsável pela injeção do fluido invasor também é importante e pode fazer com que poros grandes sejam ocupados.

Introduzimos um modelo de percolação para o escoamento de fluidos que permite a ocupação de poros de qualquer tamanho. Em nosso modelo, que chamamos de *percolação atenuada*, um aglomerado de fluido invasor é formado ocupando, preferencialmente, os poros de menor tamanho. O aglomerado de fluido invasor ocupa o meio poroso invadindo, um a um, os poros cujos tamanhos são menores do que um valor p pré-determinado. No entanto, se o tamanho associado ao poro (r) for maior do que p, o sítio correspondente pode ainda ser ocupado, mas com uma probabilidade que diminui com o aumento de r. A escolha da forma matemática que expressa a distribuição de probabilidades de ocupação é arbitrária, mas baseada na observação experimental de que, quanto maior o tamanho do poro, menor será sua probabilidade de ocupação. Através de simulações numéricas, mostramos que a introdução desta regra adicional não muda a classe de universalidade do sistema, que é a mesma da percolação ordinária. Estimamos numericamente os limiares de percolação do nosso modelo e verificamos que eles dependem não somente do tipo de rede e da dimensão do sistema, mas também de um parâmetro w introduzida na distribuição de probabilidade de ocupação. Estas probabilidades de ocupação críticas não obedecem a fórmula supostamente universal, proposta recentemente por Galam e Mauger [31].

Uma outra questão interessante relaciona-se com o papel das forças inerciais que agem no escoamento dos fluidos. Quando um fluido desloca-se livremente podemos, em geral, identificar dois regimes de escoamento. No caso de deslocamento lento, diz-se que o escoamento ocorre no regime estacionário ou laminar. Porém, quando a velocidade aumenta, o escoamento passa, abruptamente, ao regime turbulento [32, 33]. Em meios porosos, observa-se experimentalmente que a transição entre estes regimes de escoamento ocorre de forma gradual, com a existência de uma região de transição entre os regimes de escoamento laminar e turbulento. Têm sido apontado que, nesta fase intermediária, as forças de inércia exercem papel fundamental [32]. Este problema têm sido investigado através de modelos contínuos, resolvendo numericamente a equação de Navier-Stokes [34,

35, 36]. Por outro lado, nenhum modelo discreto que leva em conta a inércia do fluido foi proposto até hoje. Introduzimos aqui um modelo de percolação por invasão modificado, que busca considerar a inércia do fluido deslocado. Neste modelo, que chamamos de *Percolação por Invasão com Caminhadas de N passos* [37], o fluido invasor não pára instantaneamente após romper a diferença de pressão capilar, ao contrário, ele segue adiante, invadindo áreas próximas ao local de ruptura. Concretamente, isto aumenta a velocidade de deslocamento manifestando os efeitos das forças inerciais no escoamento dos fluidos. Atribuímos a magnitude destes efeitos a um parâmetro N, que é a quantidade de poros ocupados em cada etapa do processo de invasão. Caracterizamos nosso modelo em função deste parâmetro, analisando as possíveis dependências das dimensões fractais e números de coordenação dos aglomerados com N. A introdução do parâmetro N conduz nosso modelo a classes de universalidade diferentes daquela da percolação ordinária.

Grande parte dos estudos de processos físicos em sistemas desordenados considera o meio estático e inerte. Recentemente, Vandewalle e Ausloos [38] introduziram um modelo de solidificação que descreve o avanço de uma interface sólida através de um meio poroso e que interage repulsivamente com impurezas que podem mover-se pelo sistema. Neste modelo, as impurezas que estão em contato com a interface sólida são empurradas, levando à formação de agregados que agem como obstáculos ao avanço da interface. Existe uma concentração crítica de impurezas, x_I^c, acima da qual todos os aglomerados solidificados são finitos. A concentração de impurezas x_I^c é um ponto crítico deste modelo e sinaliza para a existência de uma transição de fases semelhante à percolação: para $x > x_I^c$ não existem aglomerados sólidos que atravessam o sistema. Embora o ponto crítico deste modelo, conhecido como modelo epidêmico dinâmico, seja diferente daquele da percolação ordinária ($x_c > p_c$), ambos os modelos estão na mesma classe de universalidade.

O modelo epidêmico dinâmico mimetiza uma observação experimental feita em 1964 por Uhlman, Chalmers e Jackson (UCJ)[39]. UCJ investigaram a interação en-

tre partículas de impurezas e uma interface sólido-líquido que avança através de uma fase líquida. Para cada tipo de partícula, eles encontraram uma "velocidade de avanço crítica", abaixo da qual as impurezas são totalmente rejeitadas pela interface e acima da qual a impurezas ficam aprisionadas na fase sólida. Comportamentos semelheantes tem sido observados em diferentes sistemas, incluindo a formação de compósitos supercondutores [40, 41], aprisionamento de bolhas de gás durante processos de solidificação [42] e comportamento de células biológicas na interface gelo-água [43, 44, 45]. Muitos destas observações tem sido teoricamente tratadas via modelo epidêmico dinâmico [38, 40, 42]

Neste trabalho generalizamos o modelo epidêmico dinâmico introduzindo, além das impurezas móveis, uma fase inerte. Assim, nosso sistema é composto por três "fases": uma fase solidificante A, uma fase inerte B e impurezas I, ligadas pelo vínculo $x_A + x_B + x_I = 1$, onde x_j é a concentração das partículas do tipo j. O modelo que chamamos de *percolação dinâmica* [46] apresenta um diagrama de fase no espaço das concentrações. Resultados das simulações mostram que nosso modelo está na mesma classe de universalidade que a percolação ordinária.

Implementamos, também, um modelo de percolação por invasão na presença de impurezas móveis. Ao contrário do modelo epidêmico dinâmico, onde o aglomerado resultante é fractal somente no ponto crítico, na percolação por invasão dinâmica os aglomerados são fractais em todo o intervalo $[0, x_I^c]$, onde é possível encontrar aglomerados que percolam o sistema.

Nos próximos capítulos, apresentamos nossos resultados detalhadamente, analisando os novos modelos sob o ponto de vista da teoria da percolação. Os novos modelos aqui apresentados ilustram a riqueza da teoria da percolação e como esta teoria pode ser utilizada para tratar processo físicos que acontecem no mundo real. Por fim, apresentamos também nossas conclusões e algumas perspectivas para futuras aplicações destes novos modelos de percolação.

Capítulo 2

Percolação: Conceitos Fundamentais

2.1 O que é percolação ordinária?

Considere uma rede finita formada por sítios que podem assumir dois estados: vazio ou ocupado. Cada sítio poder estar ocupado aleatóriamente com uma probabilidade p ou vazio com probabilidade $(1-p)$, independentemente do estado de seus vizinhos. Ao conjunto de sítios primeiros vizinhos ocupados chamamos de aglomerado. Obviamente, o alcance da formação dos aglomerados pode envolver segundos, terceiros vizinhos, etc. A teoria da percolação trabalha basicamente com o número e as propriedades destes aglomerados. Neste trabalho, estaremos envolvidos com a percolação de primeiros vizinhos.

Se o parâmetro p for mudado sistematicamente no intervalo $[0,1]$, o sistema apresenta uma mudança de comportamento, passando de um estado onde todos os aglomerados são finitos para outro, onde existe um aglomerado que conecta os lados opostos da rede. Quando isto acontece, dizemos que o sistema percolou. O fato mais notável dos modelos de percolação é a existência desta concentração ou parâmetro de ocupação abaixo do qual a fração de sítios ocupados está confinada a uma região finita da rede.

Uma rede infinita apresenta um ponto crítico bem definido em um parâmetro de ocupação $p = p_c$. No limite termodinâmico, p_c é conhecido como limiar de percolação ou probabilidade de ocupação crítica. Os aspectos mais interessantes dos modelos de percolação estão nas vizinhanças de p_c, que corresponde ao surgimento de um aglomerado

infinito. Assim, a percolação pode ser interpretada como uma transição de fase geométrica: acima de p_c existe um aglomerado infinito enquanto abaixo de p_c todos os aglomerados são finitos. Com isso, as ferramentas utilizadas no estudo das transições de fase induzidas pela temperatura podem ser aplicadas na investigação dos problemas de percolação.

Além da percolação por sítios, descrita acima, existe também a percolação por ligações. Nela, cada ligação pode ser ocupada com probabilidade p, ou permacecer vazia com probabilidade $(1-p)$. Neste caso, um aglomerado é um conjunto de sítios conectados por ligações ocupadas. Acredita-se que a percolação por sítios e a percolação por ligações pertençam à mesma classe de universalidade.

Apesar da simplicidade da definição, os problemas de percolação são muito difícieis de serem resolvidos analiticamente. Resultados exatos são conhecidos apenas para alguns casos particulares. No entanto, um grande número de técnicas tem sido usadas para aumentar nosso conhecimento sobre o fenômeno da percolação. Dentre estas técnicas podemos citar a matriz de transferência [47], expansões em séries [3], teoria de grupo de renormalização [5] e simulações de Monte Carlo [5, 6]. Neste trabalho estaremos sempre envolvidos com simulações e, por isso apresentamos os passos essenciais para a construção do aglomerado de percolação. Atribuímos a cada elemento de uma matriz (que representa a rede) um número aleatório r, distribuido uniformemente no intervalo $[0,1]$. Visitamos cada sítio da rede, percorrendo linhas e colunas da matriz, ocupando aqueles cujo número aleatório associado é menor do que o parâmetro de ocupação p fixo. Desta forma, vários aglomerados se formam na rede. Finalmente, checamos se algum destes aglomerados conecta as extremidades opostas do sistema.

A determinação dos valores dos limiares de percolação através de simulações é feita através de tentativas sucessivas de diferentes valores de p. Intuitivamente, esperamos que seja mais fácil construir aglomerados que percolam em sistemas pequenos. Durante as simulações isto realmente acontece. O limiar de percolação em redes finitas de tamanho

Rede	p_c (sítios)	p_c (ligações)
Quadrada	0.5727460	0.5
Triangular	0.5	0.347296
Honeycomb	0.6962	0.65271
Kagomé	0.652703	0.5244053
Pentagonal	0.6471	0.5800
Octagonal	0.5	0.3237
bowtie	0.547518	0.4045
Penrose	0.5837	0.4770
Octag-quim.	0.585	0.478
Octag-ferro.	0.543	0.402
dodec-quim.	0.628	0.538
dodec-ferr.	0.617	0.4950

Tabela 2.1: Limiares de percolação nas versões de sítios e ligações para redes bidimensionais.

L, (p_L), se desloca para valores menores do que o valor real, p_c. Como redes infinitas não podem ser simuladas, necessitamos de uma cuidadosa extrapolação de p_L para o limite termodinâmico. Além disso, os limiares de percolação em redes finitas devem ser calculados como valores médios, obtidos a partir de um número muito grande de ensaios de tal forma que o erro estatístico seja diminuido ao mínimo possível.

Reunimos, nas tabelas 2.1 e 2.2, os valores para os limiares de percolação para diferentes tipos de rede, para dimensões $2 \leq d \leq 6$, nas versões de percolação por sítios e ligações. Os valores tabelados forma retirados da Ref. [48].

2.2 Principais grandezas da percolação

A ocupação dos sítios durante a simulação da percolação é um processo aleatório. Depois da ocupação dos sítios, a rede contém muitos aglomerados de diferentes tamanhos (neste caso, tamanho refere-se ao número de sítios que compõe o aglomerado). Um

Rede	p_c (sítios)	p_c (ligações)
Cúbica	0.311604	0.2488126
bcc	0.2458	0.1802875
fcc	0.1994	0.1201635
hcp	0.1990	0.1199
$3d$ Kagomé	0.3899	0.2709
Diamante	0.3895	0.3893
$4d$ Cúbica	0.196901	0.1680
$4dbcc$	0.1037	0.074
$4d$ Kagomé	0.2715	0.177
$4d$ Diamante	0.2978	0.2715
$5d$ Cúbica	0.1407	0.1181
$5d$ *bcc*	0.0446	0.033
$5d$ Kagomé	0.2084	0.130
$5d$ Diamante	0.2252	0.2084
$6d$ Cúbica	0.1079	0.0943
$6d$ *bcc*	0.0199	------
$6d$ Kagomé	0.1677	------
$6d$ Diamante	0.1799	------

Tabela 2.2: Limiares de percolação nas versões de sítios e ligações para redes de dimensões $3 \leq d \leq 6$.

aglomerado contendo s sítios pode apresentar diferentes configurações geométricas (invariantes sob translação). Em geral, estas configurações são denominadas "animais" de rede. Cada animal de rede possui um perímetro t definido como o número de sítios vazios que são primeiros vizinhos do aglomerado. Se o número de animais g_{st} corresponde ao número de diferentes configurações de um aglomerado de s sítios com perímetro t, a quantidade

$$n_s(p) = \sum_t g_{st} p^s (1-p)^t \tag{2.1}$$

é o número médio de aglomerados de s sítios por sítio da rede. Aqui, a soma é feita sobre todos os possíveis perímetros t.

Quando os animais de rede são adequadamente contados, $n_s(p)$ representa a distribuição do número de aglomerados que contém s sítios por sítio da rede para o problema de percolação. Neste caso, existe uma hipótese, a qual tem sido verificada numericamente,

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

de que o comportamento assintótico da distribuição $n_s(p)$, é regido pela equação [5]

$$n_s(p) = \begin{cases} s^{-\tau} \ \ para\, p = p_c \\ \\ s^{-\tau} f(s^{\sigma}(p - p_c)) \ \ para\, p \neq p_c, \end{cases} \tag{2.2}$$

que define os expoentes críticos τ e σ.

A partir desta hipótese de escala, podemos calcular todos os momentos M_k da distribuição, o que permite caracterizar o sistema completamente. Estes momentos são calculados usando a relação

$$M_k(p) = \sum_s s^k n_s(p). \tag{2.3}$$

Frequentemente, os momentos M_k são relacionados às propriedades críticas do sistema. Por exemplo, o parâmetro de ordem do problema de percolação é a **probabilidade de percolação** $P(p)$, definida como a probabilidade de que um sítio, escolhido aleatoriamente, pertença ao aglomerado infinito. Já a probabilidade de que um sítio escolhido ao acaso seja ocupado e pertença a um aglomerado finito é

$$M_1(p) = \sum_s s n_s(p), \tag{2.4}$$

onde o aglomerado infinito deve ser excluído da soma.

Com isso, a probabilidade de percolação pode ser escrita como

$$P(p) = p - \sum_s s n_s(p). \tag{2.5}$$

Para $p < p_c$ a probabilidade de percolação é nula uma vez que todos os aglomerados são finitos. Porém, para valores de p maiores do que p_c, $P(p)$ aproxima-se rapidamente de 1. Na região crítica, a probabilidade de percolação aproxima-se de zero segundo uma lei de potência [5]

$$P(p) \sim (p - p_c)^{\beta} \tag{2.6}$$

onde β é o expoente crítico associado.

A fração $w_s = sn_s / \sum_s sn_s$ de sítios dos aglomerados finitos, que pertence aos aglomerados de s sítios, corresponde à probabilidade de que um aglomerado finito contenha exatamente s sítios. Isto permite escrever o **tamanho médio do aglomerado** S como

$$S = \sum_s w_s s = \frac{\sum_s n_s s^2}{\sum_s n_s s} \tag{2.7}$$

Novamente, o aglomerado infinito deve ser excluído da soma. Na região da criticalidade, o tamanho médio do aglomerado diverge de maneira análoga à suscetibilidade magnética, e assim, podemos definir um expoente crítico γ através da relação

$$S \sim (p - p_c)^{-\gamma}. \tag{2.8}$$

Outros momentos M_k também podem ser relacionados com as propriedades críticas do sistema. Em particular, considere o momento $M_0(p) = \sum_s n_s(p)$, que fornece o número total de aglomerados formados. Pode ser demonstrado [5] que, na região da criticalidade, M_0 possui um termo não analítico do tipo

$$M_0 \sim (p - p_c)^{2-\alpha} \tag{2.9}$$

onde α é um expoente crítico.

Próximo à transição de fase, o comportamento dos sistemas pode ser descrito pelos expoentes críticos α, β e γ. Estes expoentes não são independentes já que eles podem ser relacionados com σ e τ através das relações de escala

$$\beta = \frac{(\tau - 2)}{\sigma}, \qquad 2 - \alpha = \frac{(\tau - 1)}{\sigma} \quad e \quad \gamma = \frac{-(\tau - 3)}{\sigma}. \tag{2.10}$$

Com o aparecimento de um aglomerado infinito (que ocorre em $p = p_c$), a distância média entre dois sítios pertencentes ao mesmo aglomerado ou *comprimento de correlação* ξ apresenta uma divergência. Na região crítica, podemos associar um expoente crítico ν à divergência do comprimento de correlação

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}. \tag{2.11}$$

O aglomerado percolante é um objeto fractal [5, 49]. Sua massa média $\langle M \rangle$ escala com o tamanho da rede L, ou, de maneira equivalente, com seu raio de giração Rg através de uma potência não inteira

$$\langle M \rangle \sim Rg^{D_F}. \tag{2.12}$$

D_F é a dimensão fractal do aglomerado e está relacionada aos expoentes críticos através da relação de escala

$$D_F = d - \frac{\beta}{\nu}, \tag{2.13}$$

onde d é a dimensão Euclideana do sistema.

O conceito de universalidade se mantém nos problemas de percolação. A universalidade aqui significa não somente que os expontes críticos independem da estrutura da rede, mas também que eles são os mesmos tanto para a percolação por sítios quanto por ligações.

O modelo de percolação ordinária pode ser mapeado no modelo de Potts q − *estados*, no limite $q \to 1$, e pode então ser resolvido exatamente para o caso bidimensional [47]. Assim, em duas dimensões, os expoentes críticos são conhecidos exatamente. No entanto, para dimensões superiores ainda não há solução exata e os expoentes críticos

Expoente	$d=2$	$d=3$	$d=4$	$d=5$	$Bethe(d \geq 6)$
α	$-2/3$	-0.62	-0.72	-0.86	-1
β	$5/36$	0.41	0.64	0.84	1
γ	$43/18$	1.80	1.44	1.18	1
μ	$4/3$	0.88	0.68	0.57	$1/2$
σ	$36/91$	0.45	0.48	0.49	$1/2$
τ	$187/91$	2.18	2.31	2.41	$5/2$
D_F	$91/48$	2.53	3.06	3.54	4

Tabela 2.3: Expoentes críticos para a percolação ordinária. Os resultados para $d = 2$ e para a rede de Bethe são exatos.

são obtidos através de métodos numéricos. A Tab.2.3 reune alguns expoentes críticos do modelo de percolação.

Nos últimos anos novos modelos de percolação foram propostos, e o modelo original passou a ser conhecido como percolação ordinária. Além dela, existem hoje outras formas de percolação igualmente importantes: a percolação direcionada [50, 51], a percolação *bootstrap* [52, 53], a percolação elástica [9, 10] e a percolação quântica[11]. No Apêndice A apresentamos uma breve descrição dos modelos de percolação mais comuns. A percolação por invasão [17], usada com frequência no decorre deste trabalho, será discutida com detalhes nas próximas seções.

2.3 Geração de aglomerados percolantes: o método de Leath

Quando $p > p_c$, a ocupação aleatória de sítios ou ligações de uma rede pode gerar, além do aglomerado percolante, um grande número de aglomerados finitos. Em muitas aplicações, estamos interessados somente no aglomerado percolante. Hoshen e Kopelman [54, 55] desenvolveram um algoritmo eficiente para a identificação de todos os aglomerados, e que pode também ser usado para eliminar os aglomerados finitos da

rede. No entanto, o algoritmo requer uma segunda consulta a todos os sítios da rede, aumentando o tempo computacional necessário para a simulação.

Na prática, é mais conveniente construir um aglomerado percolante diretamente, ao invés de ocupar aleatoriamente os sítios de uma rede e então selecionar o aglomerado de interesse. A construção deste aglomerado pode ser feita facilmente utilizando o método desenvolvido por Leath [56] e Alexandrowicz [57]. Neste método, começamos a construção de aglomerado a partir de uma semente colocada no centro da rede. Os sítios primeiros vizinhos desta semente são promovidos a "sítios de crescimento". A cada passo, um sítio de crescimento é aleatoriamente escolhido e ocupado com uma probabilidade p, ou bloqueado com probabilidade $(1-p)$. A lista de sítios de crescimento é então atualizada, com a eliminação do sítio selecionado anteriormente e a inclusão de novos sítios que, eventualmente, tornam-se disponíveis para ocupação. Este processo é repetido por um número M de passos (ou de forma equivalente, até que o aglomerado atinja as fronteiras da rede). Para valores de p muito baixos, a lista de sítios de crescimento é totalmente exaurida, o processo é interrompido e o aglomerado fica finito. Porém, quando escolhemos $p = p_c$, a estrutura gerada tem características equivalentes aos aglomerados percolantes críticos. Outro caso interessante surge quando escolhemos $p = 1$. Neste caso, recuperamos o chamado Modelo de Eden [58], que sempre gera aglomerados infinitos e compactos.

2.4 Percolação por invasão

A percolação por invasão é um processo dinâmico, introduzido por Wilkinson e Willensem [17] motivado pelo estudo do escoamento de dois fluidos imiscíveis em um meio poroso. Muitos meios porosos podem ser representados convenientemente como uma rede de poros unidos por gargalos estreitos. Este meio idealizado pode ser visto como uma rede regular, na qual sítios e ligações correspondem a poros e gargalos respectivamente. Na percolação por invasão, um aglomerado de fluido invasor é construido através da seleção

de caminhos de menor resistência ao escoamento, ou seja, os fluidos deslocam-se devido somente à diferença de pressão capilar.

Considere o processo onde um fluido, de baixa viscosidade, é injetado em um meio poroso ocupado anteriormente por um fluido de alta viscosidade. Dependendo da taxa de injeção, as forças predominantes podem ser de natureza viscosa ou capilar. O *DLA (Diffusion-Limited Aggregation)* [18, 59] descreve o deslocamento rápido, quando as forças viscosas são dominantes. A percolação por invasão é indicada quando o fluido escoa lentamente, sob o domínio das forças de capilaridade. O movimento pode ser considerado como um conjunto de saltos discretos nos quais, a cada passo, o fluido injetado (invasor) expulsa o fluido mais viscoso (defensor) do menor poro disponível na interface. Associando-se o tamanho dos poros a números aleatórios distribuídos em uma rede temos a dinâmica da invasão: ocupamos, um a um, os sítios (poros) com o menor número aleatório (tamanho) associado. Uma realização experimental economicamente importante deste modelo é a recuperação de petróleo de rochas através da injeção de água [30, 60].

A simulação de um processo de percolação por invasão consiste em acompanhar o movimento da interface invasor-defensor enquanto ela se desloca através do meio, para uma distribuição de poros fixa. Quando o fluido invasor avança, é possível que ele circunde completamente algumas regiões do fluido defensor, formando regiões totalmente desconectadas das bordas do sistema. Se o fluido defensor for incompressível, esta região passa a ser proibida para o fluido invasor. Esta situação foi estudada por Wilkinson e Willensem, dando origem ao modelo de percolação por invasão **com aprisionamento**. No entanto, quando o fluido defensor é considerado completamente compressível, temos o modelo de percolação por invasão **sem aprisionamento**.

Descrevemos abaixo, os passos básicos de um algoritmo de percolação por invasão:

i - A cada sítio de uma rede, associamos um número aleatório r, distribuído

uniformemente no intervalo $[0, 1]$. Admitimos que esses números aleatórios sejam proporcionais ao diâmetro dos poros;

ii - Selecionamos sítios por onde o fluido invasor é injetado, ou seja, a semente do processo de invasão;

iii - Identificamos os "sítios de crescimento" (sítios que podem ser invadidos). Estes, estão ocupados por fluido defensor mas são primeiros vizinhos de sítios preenchidos com o fluido invasor, ou seja, pertencem ao perímetro do aglomerado de fluido invasor;

iv - Em cada etapa da invasão a interface avança para o sítio de crescimento que possui o menor número aleatório associado. A lista de sítios perimetrais é atualizada e o processo de invasão continua até que o aglomerado atinja as fronteiras da rede.

No caso da percolação por invasão com aprisionamento, temos uma regra adicional:

v - Sítios de crescimento no interior de regiões completamente circundadas pelo fluido invasor não podem ser ocupados.

Desta forma, quando consideramos a possibilidade de aprisionamento, nem todos os sítios vizinhos à interface são disponíveis para a invasão. Em geral, a questão do aprisionamento de uma região envolve uma pesquisa global do sistema [54, 55, 61] e requer um algoritmo que identifique tais regiões. Em geral, programas deste tipo são complexos e consumidores de grande tempo de computação.

Quando o fluido invasor forma um caminho conectando os lados opostos do sistema, dizemos que ele percolou. Neste ponto, é interessante comparar o processo de percolação por invasão com a percolação ordinária.

Na percolação ordinária, um aglomerado pode ser formado pela ocupação aleatória de sítios com uma certa probabilidade p. Dependendo do valor desta probabilidade de ocupação, pode ou não haver a formação de um caminho que atravessa a rede. Na percolação por invasão, não existe o parâmetro p. A interface sempre avança ocupando o

menor poro disponível em seu perímetro. Em geral, durante a construção do aglomerado, sítios com números aleatórios associados pequenos tornam-se disponíveis na interface. O processo de invasão é interrompido quando o invasor atinge a borda da rede. Este sistema exibe invariância de escala tanto no espaço quanto no tempo, evoluindo automaticamente para o seu ponto crítico [62, 63, 64], constituindo-se, assim, em um modelo crítico auto-organizado [65].

Simulações têm mostrado que o número de sítios invadidos, ou seja, a massa do aglomerado da percolação por invasão, aumenta com o tamanho L da rede da seguinte forma:

$$M(L) \sim L^{D_F}. \tag{2.14}$$

No limite assintótico, D_F é a dimensão fractal do aglomerado.

Quando a regra de aprisionamento não é levada em conta, a dimensão fractal dos aglomerados invasores coincidem com as dimensões fractais dos aglomerados percolantes críticos da percolação ordinária. Porém, quando a regra de aprisionamento é considerada, verifica-se a que a universalidade pode ser quebrada [66]. Os expoentes críticos calculados para para redes bidimensionais são bastante sensíveis ao fenômeno de aprisionamento. Isto pode ser entendido lembrando que, devido ao aprisionamento, o número de sítios invadidos quando o fluido invasor percola é menor do que no caso sem aprisionamento. Em geral, quando aumentamos o tamanho da rede, o número e o tamanho das regiões aprisionadas são maiores. Conceitualmente, isto diminui a dimensão fractal do aglomerado final, sendo seu valor estimado em $D_F = 1.82$ [17]. Em estudos experimentais da percolação por invasão com aprisionamento, Lenormand e Zarcone [67] mediram as dimensões fractais dos aglomerados encontrando valores no intervalo $1.80 \leq D_F \leq 1.83$.

O caso tridimensional é objeto de estudos ainda hoje. Aqui, a regra de aprisio-

namento tem efeito muito menor uma vez que para aprisionar regiões de fluido defensor, o invasor deve formar superfícies fechadas. Quando o fluido invasor percola, o número de sítios invadidos é praticamente indistinguível do caso sem aprisionamento uma vez que as regiões aprisionadas são pequenas [17]. Desta forma, não podemos detectar diferenças significativas entre dimensões fractais dos aglomerados da invasão com aprisionamento e da percolação ordinária. No entanto, outros expoentes críticos relacionados com a percolação por invasão com aprisionamento têm sido calculados e utilizados na identificação das classes de universalidade.

Os resultados mais recentes, apresentados por Sheppard *et al* [66] em 1999, apontam para o seguinte cenário. Em duas dimensões, a percolação por invasão é caracterizada por duas classes de universalidade: uma para a invasão com aprisionamento, e outra, coincidente com a percolação ordinária crítica, para o caso de invasão sem aprisionamento. O caso tridimensional revela uma situação diferente. A percolação por invasão de **sítios** com e sem aprisionamento pertence à mesma classe de universalidade que a percolação ordinária. Porém, surpreendentemente, a percolação por invasão de **ligações** com aprisionamento está em uma outra classe de universalidade, como já havia sido apontado recentemente por Porto *et al* [68].

O mecanismo de formação dos aglomerados na percolação por invasão, pode ser analisado através do **perfil de aceitação** $a_L(r)$ [17]. Introduzido por Wilkinson e Willensem, o perfil de aceitação é definido como a razão entre o número de números aleatórios no intervalo $[r, r+dr]$ aceitos no aglomerado e o total de números aleatórios que estão neste intervalo e que tornaram-se disponíveis para invasão.

Formalmente o perfil de aceitação pode ser escrito como

$$a_L(r) = \frac{\langle n^o \text{ de } n^{os} \text{ aleatorios } [r, r+dr] \text{ aceitos no aglomerado}\rangle_L}{\langle n^o \text{ de } n^{os} \text{ aleatorios disponiveis em } [r, r+dr]\rangle_L} \tag{2.15}$$

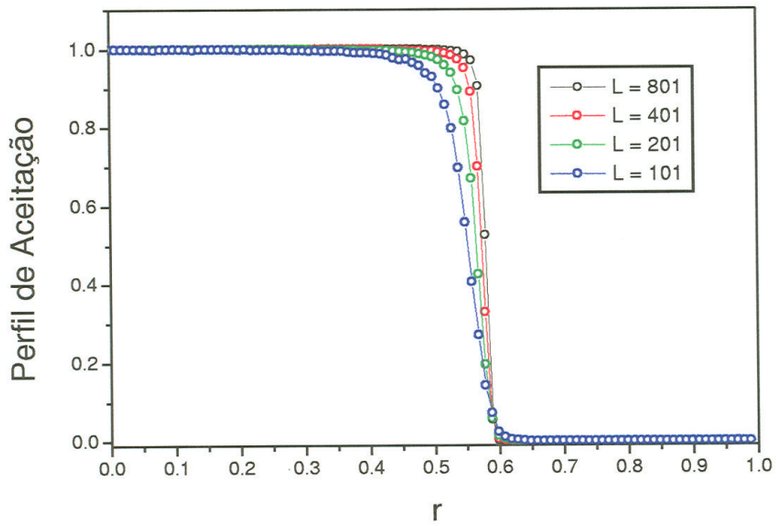

Figura 2.1: Perfil de aceitação para a percolação por invasão de sítios na rede quadrada.

onde o símbolo $\langle ... \rangle_L$ denota média de ensaios realizados sobre aglomerados construídos em redes de tamanho L.

Na Fig. 2.1, mostramos o perfil de aceitação para a percolação por invasão sem aprisionamento. Podemos ver que todos os números aleatórios pequenos que se tornam disponíveis para a invasão são aceitos no aglomerado, enquanto os números aleatórios grandes são rejeitados. A Fig.2.1 indica que, no limite de uma rede infinita, o perfil de aceitação tende a uma função degrau cuja descontinuidade está em um número aleatório r_c. Isto significa que todos os sítios com $r \leq r_c$ são invadidos. O valor de r_c coincide com o limiar da percolação ordinária, ou seja, $r_c = p_c$ [69]. Este fato, juntamente com a coincidência das dimensões fractais dos aglomerados construídos na percolação ordinária e na percolação por invasão (sem aprisionamento), leva a comunidade científica a acreditar que esses aglomerados sejam equivalentes. Não existe, porém, nenhuma prova direta desta conjectura. Um aglomerado típico construído através da percolação por invasão sem aprisionamento, simulada em uma rede quadrada de tamanho $L = 401$, pode ser

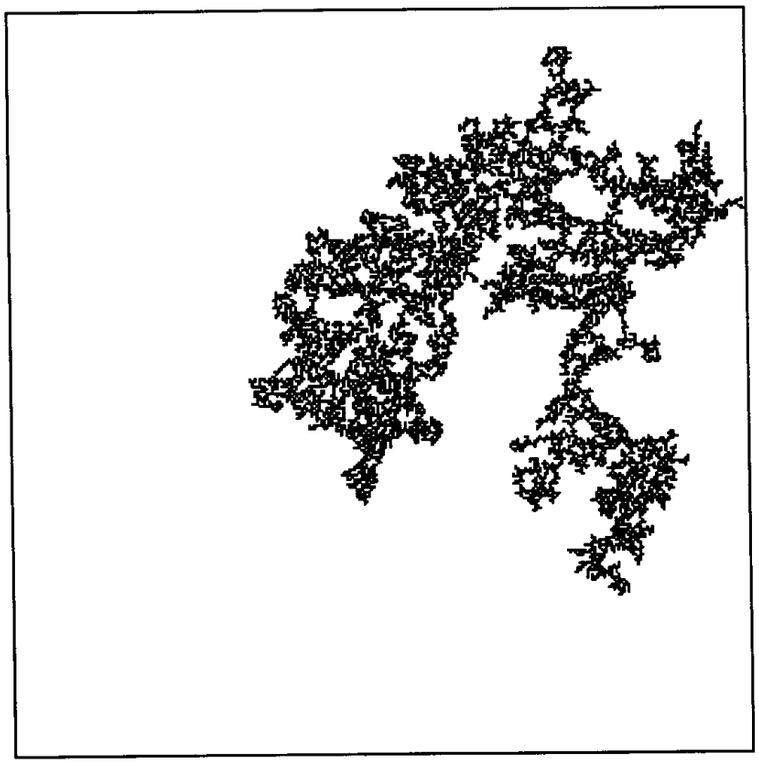

Figura 2.2: Aglomerado típico de um processo de invasão sem aprisionamento. O processo de invasão começa no centro da rede.

visto na Fig.2.2

A introdução da regra de aprisionamento produz mudanças drásticas nas características do sistema. O perfil de aceitação não se aproxima de uma função degrau, uma vez que muitos sítios que seriam invadidos ficam aprisionados. Assim, o perfil de aceitação não exibe descontinuidade, pelo contrário, passa continuamente de um valor finito para $a_\infty(r) = 0$, em algum ponto r_c. No entanto, a fração de ocupação total deve coincidir com o limiar da percolação ordinária. Esta coincidência acontece pois a regra do aprisionamento eventualmente impede que alguns sítios com números aleatórios associados $r < r_c$ sejam invadidos, mas não obriga que sítios com $r > r_c$ não sejam ocupados.

No caso tridimensional, o perfil de aceitação apresenta um ligeiro afastamento em relação a uma função degrau. Porém, neste caso, o desvio é pequeno comparado ao caso bidimensional. Este desvio pequeno acontece pois, como as regiões aprisionadas

são pequenas, restam dentro delas poucos sítios com números aleatórios pequenos e que foram proibidos de serem invadidos. Neste caso, o ponto onde o perfil de aceitação se anula coincide com o limiar da percolação ordinária [17, 70].

Por se tratar de um bom candidato a descrever o processo de deslocamento de fluidos através de meios porosos, os modelos de percolação por invasão têm recebido bastante atenção. Vários pesquisadores têm apontando evidências experimentais que corroboram as predições do modelos de invasão [67, 71]. Mesmo do ponto de vista teórico, muito trabalho tem sido dedicado à compreensão das propriedades fundamentais dos aglomerados gerados pelos processos de invasão. Furuberg *et al* [72] estudaram a probabilidade $Q(R,t)$ de que um sítio, a uma distância R do ponto de injeção, seja invadido no instante de tempo t. Eles concluiram que uma lei de escala dinâmica governa o comportamento de $Q(R,t)$. Esta lei pode ser escrita matematicamente na forma

$$Q(R,t) \sim r^{-1} f(\frac{R^{D_F}}{t}), \tag{2.16}$$

onde $f(u)$ é uma função de escala que comporta-se como $f(u) \sim u^{-a_1}$ para ($u << 1$ e $f(u) \sim u^{-a_2}$ para ($u >> 1$). Esta função de escala dinâmica implica que os sítios com maior probabilidade de invasão estão dentro de uma região de tamanho linear $R \sim t^{\frac{1}{D_F}}$. Através de uma análise do desenvolvimento temporal da percolação por invasão, Roux e Guyon [64] argumentam que os expoentes a_1 e a_2 são dados por $a_1 = 1$ e $a_2 = \tau + \sigma - 1 - \frac{(1+\frac{1}{\nu})}{D_F}$.

Devido a sua versatilidade, os modelos de invasão têm sido estendidos também para meios contínuos [73], desordenados [74, 75] e meios com desordem correlacionada [76]. Na próxima seção apresentamos o modelo de percolação por invasão múltipla [24], que permite a invasão simultânea de vários sítios.

2.5 A percolação por invasão múltipla

No modelo de percolação por invasão, em cada passo do processo apenas um sítio da rede é invadido. Porém, com o passar do tempo muitas modificações foram propostas. Através delas foram introduzidos o efeito do campo gravitacional [69, 19, 59], o fluxo em alguma direção privilegiada [20], fenômenos de formação de dedos viscosos (*fingering*) em solos [21] entre outras. Recentemente, estudamos o efeito da invasão simultânea de vários sítios da rede, o que torna o modelo mais realístico e próximo dos experimentos. Em particular propomos dois novos modelos de percolação por invasão múltipla [24], os quais batizamos de modelo perimetral e de modelo otimizado.

2.5.1 O modelo perimetral

A idéia mais simples e natural de introduzir a invasão simultânea de vários sítios é considerar que o fluxo de fluido invasor seja proporcional ao perímetro do aglomerado. Para isso, introduzimos um parâmetro F ($F \in [0,1]$) que representa a fração de sítios perimetrais a serem invadidos em cada passo da invasão. Assim, se o perímetro do aglomerado em alguma etapa t de crescimento for $M_p(t)$, o número de sítios a serem invadidos na próxima etapa será $NSI(t+1) = FM_p(t)$, ou seja, o fluxo de fluido através do perímetro é constante. A invasão destes NSI sítios obedece à regra de capilaridade, ou seja, são invadidos os sítios com os menores números aleatórios associados. Quando $F = 0$ (ou $NSI < 1$), nosso algoritmo obriga que um único sítio seja acrescentado ao aglomerado. Obviamente, o caso $F = 0$ corresponde à invasão ordinária.

Verificamos que, para todos os valores de $F \neq 0$, o ritmo da invasão é tão grande que todos os sítios disponíveis no perímetro são ocupados, resultando sempre em aglomerados compactos. Para a rede quadrada, estes aglomerados assumem a forma de um losango inscrito na rede.

Com o intuito de diminuir o ritmo da invasão, introduzimos o seguinte cálculo

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

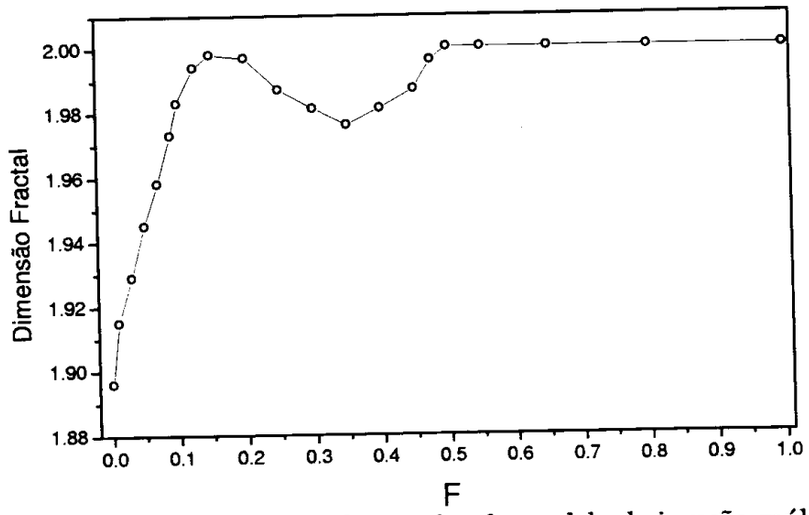

Figura 2.3: Dimensão fractal dos aglomerados do modelo de invasão múltipla para diferentes valores do parâmetro F.

para o número de sítios a serem invadidos: seja $N_r(t)$ o número de sítios que compõe o perímetro do menor retângulo que contém o aglomerado de invasão na etapa t do processo. No passo $(t+1)$ invadimos um número de sítios correspondente a uma certa fração F deste perímetro, ou seja, $NSI(t+1) = FN_r(t)$.

Variando o parâmetro F, os aglomerados evoluem de uma forma ramificada semelhante à da percolação ordinária para uma forma circular quando $F \sim 0.35$. Finalmente, tornam-se estruturas compactas com a forma de um losango inscrito na rede para $F \geq 0.5$. Do ponto de vista da dimensão fractal, este procedimento garante uma mudança contínua de D_F no intervalo $[\frac{91}{48}, 2]$.

O perfil de aceitação deste modelo aproxima-se de uma função degrau, mas neste caso, r_c mostra uma clara dependência com F, evoluindo continuamente de $r_c = p_c$ em $F = 0$ até $r_c = 1$ quando $F = 1$. Desta forma, nosso modelo perimétrico de invasão múltipla constitui uma interpolação contínua entre os aglomerados da percolação por

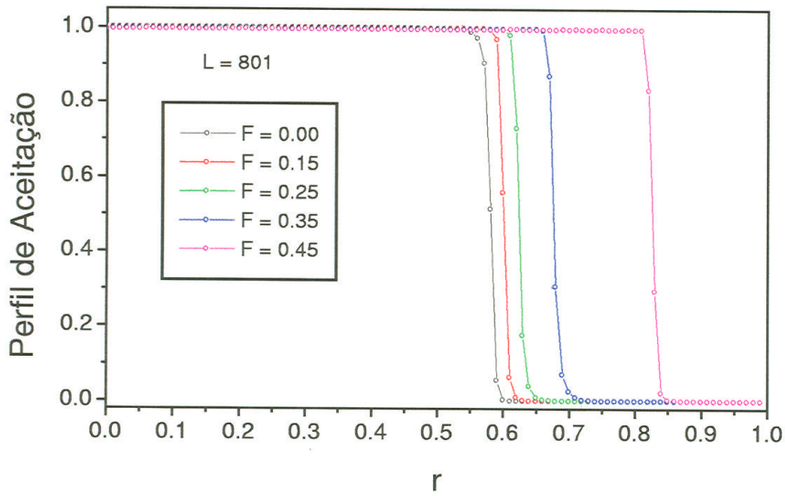

Figura 2.4: Perfis de aceitação do modelo de invasão múltipla para diferentes valores do parâmetro F.

invasão ordinária e o caso compacto.

2.5.2 O modelo otimizado

O modelo que denominamos otimizado [24], consiste em construir aglomerados cujas dimensões fractais possam ser controladas. A idéia é criar um modelo de crescimento que, em qualquer instante, obedeça a relação de escala $M \sim Rg^D$. Aqui, D é interpretado como um mero parâmetro que pode assumir qualquer valor real no intervalo $(0, \infty)$. Nosso algoritmo de otimização requer que D coincida com a dimensão fractal dos aglomerados.

Para construir o algoritmo de otimização da percolação por invasão, precisamos que, em uma etapa (t) do crescimento, sejam conhecidas algumas características do aglomerado, como a sua massa $M(t)$, o seu raio de giração $Rg(t)$ e a sua massa perimetral $M_p(t)$.

Organizamos os sítios de crescimento $M_p(t)$ em ordem crescente de seus números aleatórios associados. Assim, cada elemento situa-se em uma posição k $(1 \leq k \leq M_p(t))$

de uma lista que chamamos de lista de sítios de crescimento.

Para cada membro da lista, calculamos o raio de giração do passo posterior $(Rg(t+1))$ *se* todos os sítios até a posição k da lista fossem invadidos. Conhecendo este novo raio de giração, podemos calcular também a *massa que o aglomerado deveria* ter no passo $(t+1)$. Na prática, esta massa, que chamamos de *massa esperada* do aglomerado e denotamos por M_e, é obtida da seguinte forma. Em uma etapa de crescimento t, a massa e o raio de giração do aglomerado estão relacionados através da relação de escala

$$M(t) \propto (Rg(t))^D. \tag{2.17}$$

Na próxima etapa de crescimento esta relação deve ser mantida, ou seja

$$M(t+1) \propto (Rg(t+1))^D. \tag{2.18}$$

Assim, na etapa $t+1$, a massa esperada deve ser

$$M_e(t+1) = M(t)\left(\frac{Rg(t+1)}{Rg(t)}\right)^D \tag{2.19}$$

Em geral, esta quantidade é diferente da *massa realmente possível* $(M(t+1) = M(t)+k)$ uma vez que o aglomerado sempre cresce por um número inteiro enquanto a massa esperada pode assumir qualquer valor real.

O cálculo do número de sítios a serem invadidos é feito com uma pesquisa através de toda a lista de crescimento, onde procuramos o valor de k para o qual a massa esperada esteja mais próxima possível da massa real, ou seja, procuramos o valor de k que coincida com $\min|M_e(t+1) - M(t+1)|$.

A simulação deste modelo em um rede quadrada mostra que, variando o parâmetro D, podemos identificar três regimes de crescimento distintos:

i - Na região $0 \leq D \leq 1.89$, para que a lei de escala seja satisfeita, o valor ideal

do número de sítios a serem invadidos corresponde a menos de um sítio. Entretanto o algoritmo proíbe que isto ocorra e o crescimento se faz como na invasão ordinária. Neste sentido, dizemos que o sistema é frustrado e a dimensão fractal não pode ser controlada.

ii - Para D no intervalo $1.89 \leq D \leq 2$, o algoritmo de otimização é perfeitamente satisfeito. Nesta região as dimensões fractais dos aglomerados coincidem com o parâmetro D em toda etapa de crescimento e em qualquer escala, isto é, a dimensão fractal é um parâmetro estável durante todo o crescimento do aglomerado e não somente em um limite assintótico. A Fig.2.5 mostra a evolução da massa do aglomerado, como função de seu raio de giração, em um experimento típico da percolação por invasão ordinária e do modelo otimizado com $D = 1.89$. Em nosso modelo, a relação de escala é mantida durante todo o processo de crescimento, sem a necessidade de efetuar médias sobre muitos aglomerados.

iii - Quando $D > 2$ o sistema é novamente frustrado. No entanto esta frustração ocorre de maneira bastante diferente daquela da região $0 \leq D \leq 1.89$. O crescimento dos aglomerados, na maioria das etapas, acontece como na invasão ordinária. Entretanto, em algumas etapas, uma grande quantidade de massa é repentinamente acrescentada ao aglomerado (*bursts*).

Como as dimensões fractais dos aglomerados do modelo otimizado podem ser sintonizadas no valor do parâmetro D (região $0 \leq D \leq 1.89$) e mantém-se fixas durante todo o processo de crescimento, os aglomerados podem ser muito úteis no tratamento estatístico de problemas que envolvem sistemas diluídos. Por exemplo, um grande problema no estudo de sistemas de spins definidos sobre redes diluídas é que a determinação das propriedades físicas do sistema envolve, em geral, duas médias: uma média térmica para a obtenção das funções termodinâmicas e uma outra média geométrica, feita sobre as configurações de desordem, ou seja, sobre diferentes fractais [6]. As quantidades termodinâmicas avaliadas para apenas uma configuração geométrica não podem ser consideradas representativas, uma vez que ocorrem grandes flutuações de um fractal para

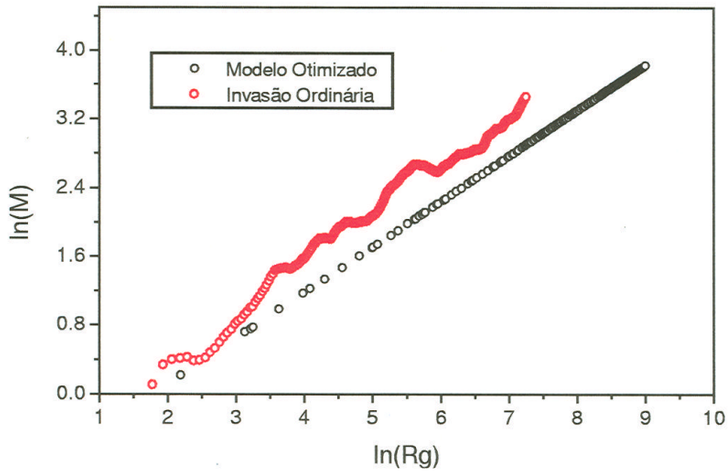

Figura 2.5: Comparação da evolução das massas dos aglomerados do modelo otimizado ($D = 1.89$) e da invasão ordinária.

outro. Nosso modelo pode gerar estruturas desordenadas com dimensões fractais pré-determinadas e cuja estrutura é completamente estabilizada. Isto significa que as relações de escala obedecidas pelas nossos aglomerados são válidas em qualquer instante, e não somente no limite assintótico. Assim, durante a simulação de algum modelo definido sobre estes fractais, a necessidade de média geométrica pode ser diminuida ou até mesmo eliminada [27, 77].

Embora os mecanismos de crescimento e a principais propriedades dos modelos de percolação por invasão múltipla já tenham sido investigadas, resta ainda caracterizar os aglomerados segundo suas propriedades estruturais [78]. Muitas das propriedades de transporte em meios desordenados dependem da estrutura interna dos aglomerados. A determinação e caracterização destas estruturas são os assuntos do nosso próximo capítulo.

Capítulo 3

Caracterização dos aglomerados da percolação por invasão múltipla

3.1 Estrutura interna dos aglomerados de percolação

Os aglomerados percolantes críticos são frequentemente usados como protótipos de meios desordenados para a simulação de uma variedade de fenômenos físicos. Os exemplos mais comuns incluem a propagação de epidemias [13], o escoamento de fluidos através de meios porosos [15] e a difusão de partículas em sistemas diluídos [79]. A morfologia complexa dos aglomerados exerce um papel fundamental nas principais propriedades de transporte de carga e massa e, muitas vezes, estas propriedades não podem ser descritas totalmente em função somente das características geométricas dos aglomerados. Em muitas circunstâncias, faz-se necessário o conhecimento detalhado da estrutura interna do aglomerado. Análises detalhadas da estrutura interna do aglomerados percolantes críticos mostraram que ele apresenta uma variedade de subestruturas auto similares [5], e que as propriedades físicas dos sistemas definidos sobre estes aglomerados relacionam-se diretamente com as propriedades geométricas destas subestruturas.

Provavelmente, a principal subestrutura do aglomerado seja o seu esqueleto [5]. O esqueleto do aglomerado é constituido pela união de todos os caminhos auto-exclusivos que conectam dois pontos P_1 e P_2 separados por uma distância R comparável ao compri-

mento de correlação ξ [25, 26]. Isto significa que se submetermos os pontos P_1 e P_2 a uma diferença de potencial, podemos identificar o esqueleto como o conjunto de todos os sítios do aglomerado que conduzem corrente. Os ramos que não contribuem para o transporte de carga são chamados pingentes e podem ser descartados (exceto no caso de escoamento de fluidos escoando com altas velocidades onde aparecem, nos pingentes, zonas de turbilhonamento, as quais possuem grande influencia no processo de deslocamento do fluido [34, 35]). Assim, o esqueleto, sozinho, determina a condutividade de toda a estrutura desordenada existente entre estes dois sítios.

Uma vez que é o responsável pelas propriedades de transporte em meios desordenados, o esqueleto dos aglomerados da percolação ordinária têm sido objeto de estudos extensivos. Vários modelos foram propostos para tentar descrever a estrutura do esqueleto dos aglomerados. Em particular, três modelos merecem destaque:

(a) O modelo de nós e ligações proposto por Skal e Shklovskii [80] e, independentemente, por de Gennes [81], é um modelo que vê o esqueleto como sendo formado por cadeias lineares de sítios ocupados (conexões). Os pontos onde as conexões se juntam formam nós. Neste modelo, os nós estariam separados por uma distância da ordem do comprimento de correlação. Em uma imagem pictórica, o esqueleto seria parecido com uma rede de pesca. O modelo de nós e conexões descreve muito bem os sistemas com dimensão $d > 6$, mas falha em sistemas de baixa dimensão ($2 \leq d \leq 6$).

(b) O carpete de Sierpinsky: Gefen *et al* [82] propuseram um modelo de esqueleto exatamente oposto ao modelo de nós e conexões . Aqui, o esqueleto é uma estrutura fractal onde somente sítios multiplamente conectados são permitidos, enquanto as cadeias lineares são desprezadas. Este modelo é exatamente solúvel, mas fornece bons resultados somente para sistemas de baixa dimensão.

(c) O modelo nós-conexões e bolhas: Através de simulações numéricas, Stanley [26, 83] observou que os sítios do backbone poderiam ser divididos em duas categorias:

conexões ou cadeias lineares de sítios ocupados e bolhas de sítios multiplamente conectados (bolhas). O modelo nós-conexões e bolhas é um modelo híbrido, no qual agregados de sítios multiplamente conectados (como proposto por Gefen) são mantidos juntos pelas cadeias praticamente unidimensionais de Skal,Shklovskii e de Gennes. Estudos recentes têm mostrado que este modelo apresenta resultados muito bons para diversos sistemas, constituindo-se no modelo de esqueleto aceito atualmente pela comunidade.

As propriedades geométricas dos esqueletos dos aglomerados percolantes críticos têm sido estudadas por diferentes métodos, incluindo expansões em séries e métodos de Monte Carlo [5]. Não existe, porém, nenhum cálculo analítico para os valores das dimensões fractais. As estimativas numéricas mais precisas apontam para os valores $D_B = 1.647(4)$ [84] para sistemas bidimensionais e $D_B = 1.74(2)$ [85] para o caso tridimensional.

Quando os dois pontos P_1 e P_2 do esqueleto são submetidos a uma diferença de potencial, é possível identificar alguns sítios pelos quais passa toda a corrente. Se algum destes sítios for removido, todo o escoamento de carga cessa. Do ponto de vista geométrico, o aglomerado separa-se em pelo menos dois aglomerados finitos totalmente desconectados. O número de tais sítios, conhecidos como pontos de estrangulamento ou *red points*, escala com o tamanho da rede com um expoente D_r ($N_r \sim L^{D_r}$) [83, 86, 87]. Utilizando o mapeamento existente entre o modelo de percolação por ligações e o modelo de Potts ($q = 1$), Coniglio [87] demonstrou que, para sistemas bidimensionais, $D_r = \frac{1}{\nu}$ onde ν é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação. Segundo o modelo nós-conexões e bolhas, os pontos de estrangulamento podem ser interpretados como bolhas formadas por apenas 1 sítio.

Enquanto os pontos de estrangulamento são sítios indispensáveis para o transporte de carga, nas regiões multiplamente conectadas existem muitas rotas paralelas ou ciclos por onde o escoamento pode ocorrer. Do ponto de vista estritamente geométrico, ciclos podem ocorrer em todo o aglomerado e não somente no esqueleto. Imagine que,

em um aglomerado cada par de sítios primeiros vizinhos ocupados estejam conectados por uma ligação. Como resultado, um aglomerado de M sítios forma um grafo conectado por N_b ligações. Muitas vezes, podemos facilmente identificar ciclos elementares (ou seja, ciclos que não contém outros ciclos) nestes grafos. O número de ciclos (ou número ciclomático), N_l, relaciona-se com o número de sítios dos aglomerado e com o número de ligações presentes através de uma equação conhecida como fórmula de Euler [47]: $N_l = N_b - M + 1$. Por exemplo, um aglomerado de quatro sítios ocupados embebidos em uma rede quadrada pode formar um ciclo se houverem quatro ligações conectando os pares de primeiros vizinhos. Já em um aglomerado de seis sítios e sete ligações, podem haver dois ciclos. Um aglomerado percolante crítico pode ser interpretado com um grande grafo conectado, onde é possível a existência de N_l ciclos. Na criticalidade, o número de ciclos escala com o tamanho da rede com um expoente D_l; ($N_l \simeq L^{D_l}$).

Podemos ainda identificar outra grandeza importante para o aglomerado e o esqueleto: o menor caminho ou "distância química " l_{min} [79] entre dois pontos. Esta grandeza, como o próprio nome sugere, é definida como o comprimento do menor caminho que conecta dois sítios P_1 e P_2 pertencentes ao aglomerado percolante e que estão separados distância Euclideana R. Geralmente a distância química é maior do que a distância Euclideana entre estes pontos uma vez que regiões que não pertencem ao aglomerado devem ser contornadas. Esta quantidade escala com o tamanho do sistema segundo uma lei de potências, sendo D_{min} seu expoente crítico. Uma série de relações de hiperscala tem sido propostas com o intuito de relacionar D_{min} a outros expoentes críticos da percolação, mas, até agora, sem sucesso. Embora não exista, ainda, um cálculo exato, estimativas numéricas muito precisas apontam para o valor $D_{min} = \frac{26}{23}$ para sistemas bidimensionais [84].

Uma outra subestrutura do aglomerado, chamada de esqueleto elástico [86], é definida como a união de todos os menores caminhos que conectam os dois sítios P_1 e P_2.

O esqueleto elástico é responsável pela transmissão de tensões mecânicas (elasticidade da rede) quando o sistema é submetido a forças externas [9].

Em geral, as propriedades elásticas do sistema dependem do tipo de tensão aplicada. Feng e Shen [9] encontraram que, quando o aglomerado é submetido a forças angulares, o módulo de Young apresenta um comportamento crítico idêntico ao da condutividade, isto é, anula-se com o mesmo expoente. Neste caso a existência do esqueleto elástico garante a elasticidade de toda a rede. Porém se as forças aplicadas forem puramente centrais, o módulo de Young da rede não exibe o comportamento crítico esperado. Neste caso, a transmissão das tensões mecânicas é descrita por um novo tipo de percolação, conhecida como *percolação de rigidez* (ver Apêndice) que leva, inclusive, ao surgimento de novas classes de universalidade [10, 88].

Assim como o esqueleto do aglomerado, o esqueleto elástico também possui pontos de estrangulamento, cujo número escala com o tamanho da rede segundo uma lei de potências. Seu expoente de escala é D_{re} ainda não foi determinado.

O conceito de dimensão fractal do aglomerado e suas subestruturas é hoje bem estabelecido. No entanto, nos últimos anos, distribuições de probabilidades para estas estruturas tem despertado bastante interesse da comunidade científica. Como exemplos destas distribuiçẽs podemos citar a probabilidade $P(M, R)$ de que exista um aglomerado de massa M em uma região cujo tamanho linear é R, ou ainda, a probabilidade $P(l_{min}, R)$ de que dois pontos P_1 e P_2, separados pela distância euclidana R sejam conectados por uma distância química l_{min} [79]. Por meio de simulações numéricas, Neumann e Havlin [78, 89] sugeriram que estas distribuições obedecem a funções de escala de um único parâmetro (no caso do aglomerado, $x = \frac{M}{R^{D_F}}$). Recentemente, Stanley *et al* [90] mostraram que o esqueleto e o esqueleto elástico também obedecem a funções de escala, com o parâmetro $x = \frac{M_B}{R^{D_B}}$ e $x = \frac{M_E}{R^{D_E}}$.

Existe um consenso de que as distribuições de probabilidades são escritas como

$$P(M_i, R) = M_i^{-1} f(\frac{M_i}{R^{D_i}}) \tag{3.1}$$

onde M_i é a massa da estrutura e D_i sua dimensão fractal. O termo M_i^{-1} surge da condição de normalização $\int P(M_i, R) dM_i = 1$. A função de escala, $f(x)$ tem a forma $f(x) \sim x^a exp(-cx^b)$.

Em resumo, o esqueleto e o esqueleto elástico são as estruturas mais importantes dos aglomerados percolantes críticos e a determinação de suas propriedades podem levar a um melhor entendimento de tais objetos. Os parâmetros relevantes a serem medidos são a massa, os menores caminhos, o número de pontos de estrangulamento e o número de ciclos. Na crititicalidade, estas quantidades escalam com o tamanho da rede segundo uma lei de potências. Desta forma, podem ser caracterizadas pelos seus correspondentes expoentes de escala [86], calculados através de um análise do comportamento assintótico das grandezas relevantes ou utilizando as distribuições de probabilidade.

Neste capítulo, apresentamos um estudo detalhado das estruturas do esqueleto e do esqueleto elástico dos aglomerados da percolação por invasão múltipla [24, 27, 77], tanto para modelo perimétrico quanto para o otimizado. As propriedades estruturais dos aglomerados da percolação por invasão ordinária, que surge como um caso particular de nosso modelo perimétrico ($F = 0$), são investigadas pela primeira vez. Nossos resultados corroboram a crença de que os modelos de invasão ordinária de percolação ordinária pertencem à mesma classe de universalidade. Neste trabalho, a identificação das subestruturas do aglomerado foram determinadas utilizando um algoritmo conhecido como o método das queimadas (*burning method)* introduzido por Herrmann *et al* [86], e que será discutido na próxima seção.

3.2 O método das queimadas

Existem, disponíveis na literatura, vários algoritmos eficientes que podem ser utilizados na identificação dos esqueletos dos aglomerados. Em geral, a escolha do algoritmo a ser utilizado depende das grandezas de interesse do usuário. Alguns algoritmos, baseados em métodos recursivos e inteligência artificial [91, 84], são muito eficientes na identificação do esqueleto e da distância química, mas que falham ou devem ser adaptados para o cálculo dos pontos de estrangulamento e identificação de ciclos nos aglomerados. No entanto, um algoritmo proposto por Herrmann *et al* [86], conhecido como método das queimadas ou *burning method*, permite a identificação praticamente simultânea de todas as estruturas do aglomerado. Este algoritmo é composto por três etapas ou queimadas, descritas abaixo.

a - **Primeira queimada**: Escolhemos dois pontos P_1 e P_2 separados por uma distância comparável ao comprimento de correlação. No passo t_1 o sítio P_1 é queimado adquirindo um índice 1; no passo t_2, todos os seus primeiros vizinhos ocupados são queimados e adquirem um índice de valor 2. No passo t_{i+1} todos os primeiros vizinhos ocupados de sítios queimados no passo t_i (e que ainda não foram queimados) recebem um rótulo $i+1$. O processo termina quando todos os sítios do aglomerado tiverem sido consultados. Tal procedimento nos permite obter o comprimento do menor caminho entre os pontos P_1 e P_2, l_{min}, correspondente ao número de passos necessários para queimar o sítio em P_2. Além disso, o número de ciclos do aglomerado pode ser avaliado simplesmente contando o número de vezes que um mesmo sítio é queimado no passo i.

b - **Segunda queimada**: A segunda queimada permite a identificação do esqueleto elástico do aglomerado e seus pontos de estrangulamento. Nesta etapa do algoritmo, partimos do ponto P_2 e queimamos todos os sítios cujos índices i são menores do que os dos sítios queimados no passo anterior. Com esta condição, somente os sítios do esqueleto

elástico são escolhidos. A massa do esqueleto elástico é o número total de sítios queimados durante este processo, enquanto o número de pontos de estrangulamento corresponde ao número de passos em que somente um sítio é queimado.

c - **Terceira queimada**: Nesta etapa do algoritmo construímos o esqueleto do aglomerado a partir do esqueleto elástico. A queimada é feita a partir dos sítios P_i onde ciclos foram fechados durante a primeira queimada (os sítios do esqueleto elástico devem ser excluídos). Nos ciclos, um sítio pode ser queimado no passo t_{i+1} se o seu índice for menor do aquele queimado no passo anterior. Este ciclo pode fazer parte do esqueleto somente se ele alcançar o esqueleto elástico por mais de um caminho, caso contrário ele é um pingente. Este procedimento de queima deve ser repetido até que nenhum sítio possa ser acrescentado ao esqueleto. Com isso, podemos obter o número de sítios (massa), o número de ciclos e o número de pontos de estrangulamento do esqueleto.

Uma amostra visual do resultado obtido pode ser vista na Fig.3.1. Nela os pingentes são assinalados em cinza enquanto o conjunto colorido representa o esqueleto. Os pontos de estrangulamento do aglomerado são mostrados em vermelho e cor-de-rosa. O conjunto de cores amarelo, vermelho e cor de rosa representa o esqueleto elástico, sendo que seus pontos de estragulamento estão assinalados em cor de rosa.

Geralmente, este processo de queimadas consome muito tempo de computação, principalmente durante a fase de construção do esqueleto. Normalmente, o tempo de computação requerido aumenta quadraticamente com o número de ciclos do aglomerado. Recentemente, Porto *et al* [90] introduziram melhorias no método das queimadas, eliminando algumas redundâncias existentes no processo de queima dos ciclos e sua inclusão no esqueleto. Com isso, o tempo de computação é reduzido, dependendo linearmente do número de ciclos.

Utilizando o método das queimadas original, estimamos todas as grandezas relacionadas aos aglomerados da percolação por invasão múltipla. Através das relações de

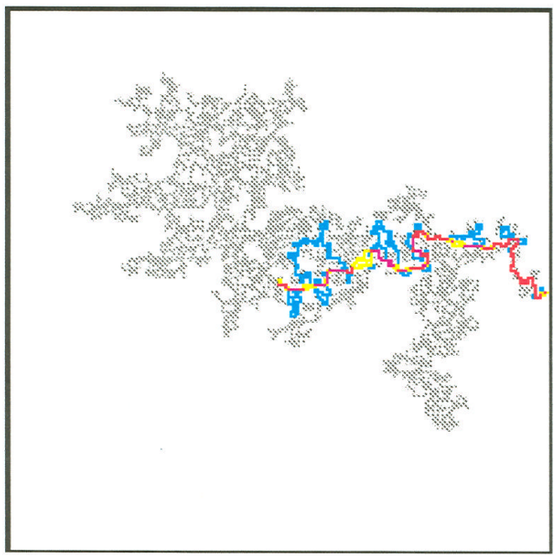

Figura 3.1: Amostra das estruturas identificadas pelo método das queimadas.

escala entre estas grandezas e o tamanho da rede, podemos calcular os expoentes de escala para diversos valores dos parâmetros F e D dos modelos perimétrico e otimizado. Particularmente, investigamos as mudanças das propriedades físicas das estruturas devido à variação dos parâmetros F e D.

3.3 O modelo perimétrico

No modelo perimétrico de percolação por invasão múltipla, a invasão é controlada pelo perímetro do retângulo no qual o aglomerado está inscrito: invadimos um número de sítios correspondente a uma fração F deste perímetro. Variando o parâmetro F, os aglomerados evoluem de uma forma ramificada ($F = 0$) para estruturas compactas quando $F \geq 0.5$. Com isso, a dimensão fractal (D_F) muda continuamente no intervalo $[\frac{91}{48}, 2]$ [24].

Aqui, estudamos o comportamento fractal esqueleto, esqueleto elástico, menores caminhos, pontos de estrangulamento e número de ciclos para aglomerados crescidos a

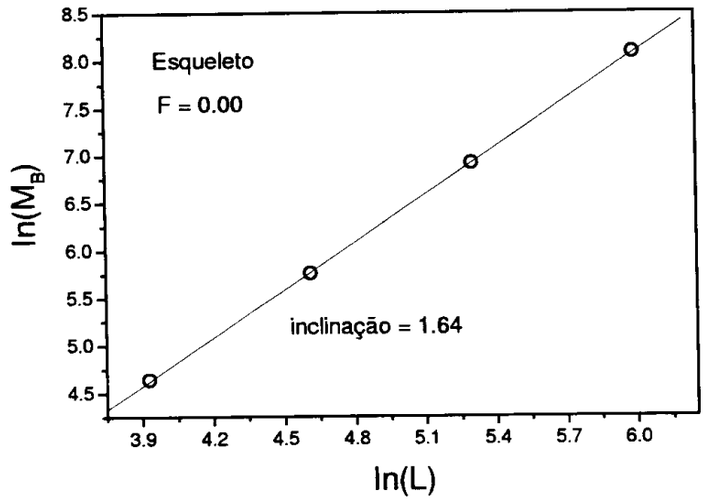

Figura 3.2: Logaritmo da Massa do Esqueleto (M_B) *versus* o logaritmo de L. A inclinação da reta é uma estimativa da dimensão fractal do esqueleto

partir do sítio central de uma rede quadrada.

3.3.1 O esqueleto e o esqueleto elástico

Atualmente, acredita-se que a percolação por invasão ordinária corresponda à percolação ordinária crítica [17, 70]. Porém, embora os pontos críticos e as dimensões fractais coincidam, os aglomerados não são necessariamente os mesmos. Estranhamente, nenhum cálculo dos expoentes críticos do esqueleto e esqueleto elástico dos aglomerados da percolação por invasão havia sido realizado. Desta forma, nosso primeiro passo consistiu em estudar as estruturas dos aglomerados da invasão ordinária e comparar seus expoentes com os da percolação ordinária.

Para o esqueleto, os dados são de boa qualidade e podemos facilmente obter o valor $D_B(F = 0) = 1.64(1)$ para a dimensão fractal. Este valor é totalmente compatível com aquele obtido por Grassberger para a percolação ordinária [84]. Porém, durante a análise dos dados referentes ao esqueleto elástico, constatamos a necessidade de introduzir

correções de escala devido a efeitos de tamanho finito. Para isso, adotamos o método da razão descrito por Herrmann e Stanley [92]. Neste método, para cada par de valores sucessivos de L, calculamos um expoente efetivo $D_{ef}(L)$ através da inclinação local de $\ln(M)$ x $\ln(L)$. Em seguida, extrapolamos o valor do expoente para o limite $L = \infty$ através do gráfico $D_{ef}(L)$ versus L^{-1}. Utilizando este procedimento, encontramos, para $F = 0$, o expoente $D_E = 1.17(4)$. Este valor que está em boa concordância com aquele obtido por Herrmann *et al* [86] para a percolação ordinária: $D_E = 1.10(5)$. Este procedimento também foi adotado no estudo dos aglomerados gerados para outros valores de F.

Na Tab.3.1 reunimos todos os expoentes para vários valores de F. Com o aumento de F, a dimensão fractal do esqueleto tende rapidamente a 2. Por outro lado, o esqueleto elástico tende a uma reta que une o centro da rede ao ponto onde o aglomerado toca a fronteira e, com isso, sua dimensão fractal tende rapidamente a 1. Os valores para as dimensões fractais tanto do esqueleto, quanto do esqueleto elástico foram confirmados através do cálculo das distribuições de probabilidade $P(M_i, R)$ [78]. O valor D_i para o qual todas as curvas, estimadas para diferentes tamanhos de rede, colapsam em uma só curva coincide com os valores dos expoentes calculados via comportamento assintótico. Uma amostra destas curvas pode ser vista na Fig.3.3 para $F = 0$.

3.3.2 Os pontos de estrangulamento

O número de pontos de estrangulamento, N_r escala com o tamanho da rede L como [83]

$$N_r \sim L^{D_r}. \tag{3.2}$$

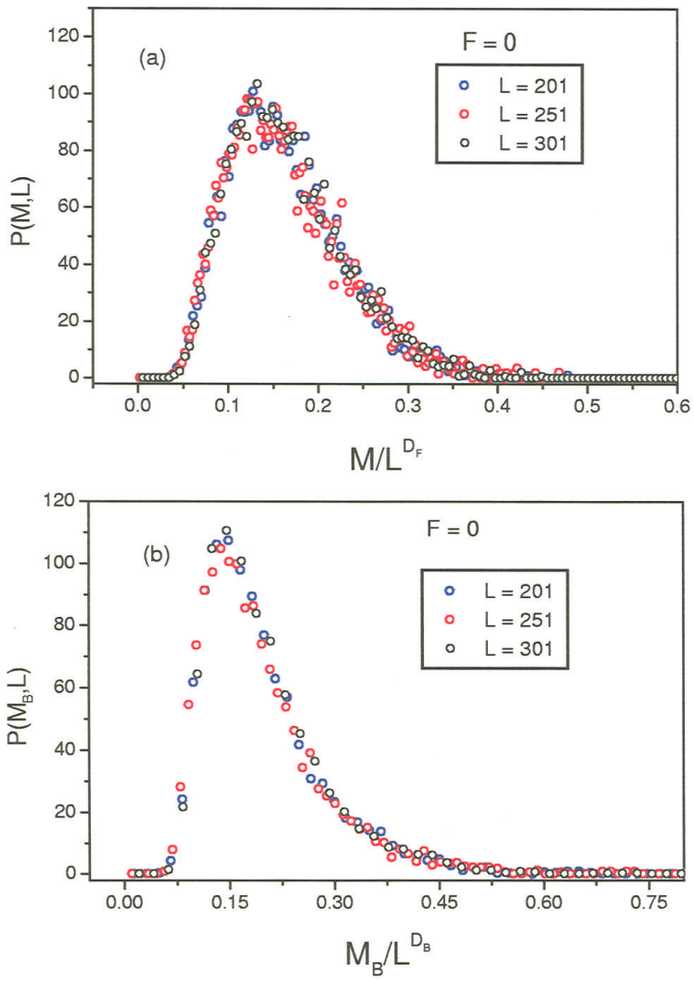

Figura 3.3: Gráfico de $P(M_i, L)$ contra M_i/L^{D_i} para (a) o aglomerado e (b) o esqueleto gerados através da percolação por invasão ordinária para diferentes tamanhos de rede L.

F	D_F	D_r	D_l	$D_{\min}$
$0.0^{(1)}$	1.88	0.77	1.98	1.14
$0.0^{(2)}$	1.64	0.77	1.72	1.14
$0.0^{(3)}$	1.17	1.08	1.19	1.14
$0.1^{(1)}$	1.98	0.38	1.99	1.05
$0.1^{(2)}$	1.89	0.38	1.92	1.05
$0.1^{(3)}$	1.05	1.10	1.17	1.05
$0.2^{(1)}$	1.99	0.29	1.99	1.05
$0.2^{(2)}$	2.00	0.29	2.00	1.05
$0.2^{(3)}$	1.02	1.08	1.11	1.05
$0.3^{(1)}$	1.98	0.07	1.95	1.04
$0.3^{(2)}$	2.00	0.07	1.94	1.04
$0.3^{(3)}$	1.03	1.03	1.12	1.04
$0.4^{(1)}$	1.99	0.05	1.97	1.02
$0.4^{(2)}$	2.00	0.05	1.97	1.02
$0.4^{(3)}$	1.01	1.01	1.00	1.02
$0.5^{(1)}$	2.00	0.00	2.00	1.00
$0.5^{(2)}$	2.00	0.00	2.00	1.00
$0.5^{(3)}$	1.00	1.00	0.00	1.00

Tabela 3.1: Expoentes de escala para o modelo perimétrico. (1) - Aglomerado, (2) - Esqueleto, (3) - Esqueleto Elástico

Para o caso da percolação ordinária, o expoente relacionado ao comportamento crítico de N_r foi calculado exatamente por Coniglio [87] ($D_r = \frac{1}{\nu} = \frac{3}{4}$).

A análise dos nossos dados indica que são necessárias correções de escala do mesmo tipo que aquelas feitas para o esqueleto elástico. Nosso resultado, obtido para a percolação por invasão, $D_r(F = 0) = 0.77(2)$ está em boa concordância com o valor exato do modelo de percolação ordinária. Quando aumentamos o valor de F, o expoente D_r diminui, e tende ao valor $D_r = 0$ quando $F = 0.50$. Isto indica que os pontos de estrangulamento desaparecem para estruturas compactas.

Para o esqueleto elástico obtivemos o valor $D_r = 1.08(5)$ para a invasão ordinária ($F = 0$). Porém, com o aumento de F o esqueleto elástico tende à distância euclideana entre o centro e a borda da rede. Assim, todos os sítios pertencentes a ele são pontos de estrangulamento e então $D_r \to 1$.

3.3.3 Os ciclos

Em redes regulares o número de ciclos é facilmente calculado. Considere uma rede regular bidimensional de tamanho L e número de coordenação q, com condições periódicas de contorno. Existem, então, $M = L^2$ sítios e $\frac{q}{2}L^2$ ligações. Utilizando a fórmula de Euler podemos concluir que o número de ciclos é da ordem de L^2. Porém, em aglomerado fractais, onde uma ligação só pode existir entre dois sítios primeiros vizinhos ocupados, o cálculo de N_l não pode ser feito diretamente. O algoritmo das queimadas permite que o número de ciclos seja avaliado durante a construção do esqueleto. Neste algoritmo, N_l corresponde ao número de vezes que tentamos queimar um mesmo sítio (já queimado) durante um dado passo i do algoritmo.

Verificamos que número de ciclos N_l escala com o tamanho da rede como

$$N_l \sim L^{D_l}. \tag{3.3}$$

Variando nosso parâmetro F no intervalo $[0,1]$, podemos investigar como D_l se comporta quando o aglomerado passa de percolante crítico ($D_F = 1.89$) a compacto ($D_F = 2$).

Avaliamos o número de ciclos aglomerado, do esqueleto e do esqueleto elástico. Para esta grandeza, os dados são de boa qualidade não havendo necessidade de correções de escala.

Tanto para o número de ciclos do aglomerado quanto do esqueleto, o expoente D_l aproxima-se rapidamente de 2 quando F aumenta, como era previsto pela fórmula de Euler.

Para o esqueleto elástico, este expoente aparentemente aproxima-se de 1 quando F aumenta. No entanto isto não é verdade: como o esqueleto elástico tende a uma reta quando F aumenta, o número de ciclos deve diminuir. Na Fig.3.4 mostramos um aglomerado típico para $F = 0.40$ e $L = 401$. Nesta figura vemos que o esqueleto elástico começa no centro da rede e segue aproximadamente como uma reta até encontrar um obstáculo. A partir deste obstáculo uma espécie de "bifurcação " aparece aumentando o número de ciclos. No limite termodinâmico isto só pode ser evitado tomando-se $F \geq 0.5$. Neste caso, o expoente D_l cai abruptamente a *zero* quando F atinge o valor $F = 0.5$.

3.3.4 Os menores caminhos

O comprimento do menor caminho l_{min} escala como

$$l_{\min} \sim L^{D}_{min}. \tag{3.4}$$

Naturalmente, o expoente D_{min} é o mesmo para o aglomerado, esqueleto e esqueleto elástico. Nossa estimativa, $D_{min}(F = 0) = 1.14(4)$, é muito próxima do valor mais preciso encontrado por Grassberger ($D_{min} = 1.1307(4)$) [84] e que sugere o valor $D_{min} = \frac{26}{23}$ para a percolação ordinária. Recentemente, Schwarzer *et al* [93] estudaram

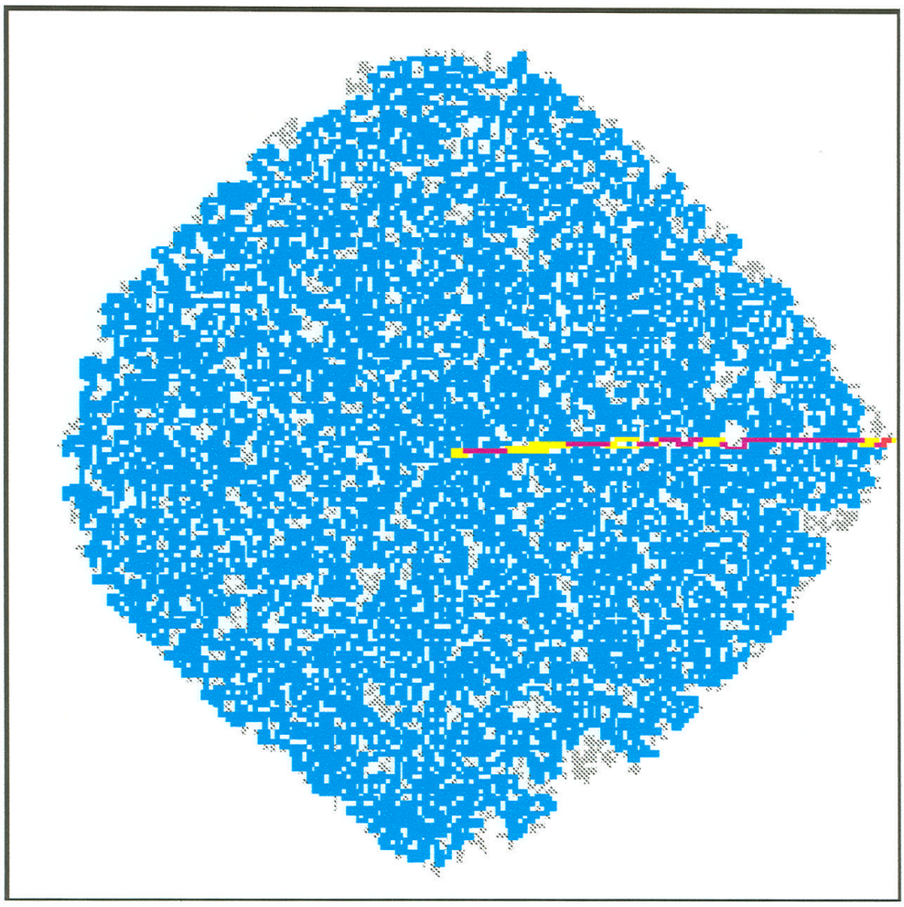

Figura 3.4: Aglomerado típico do modelo de invasão perimetral com $F = 0.40$ em uma rede $L = 401$. Podemos ver o surgimento de bifurcações que colaboram para o aumento do número de ciclos do esqueleto elástico.

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

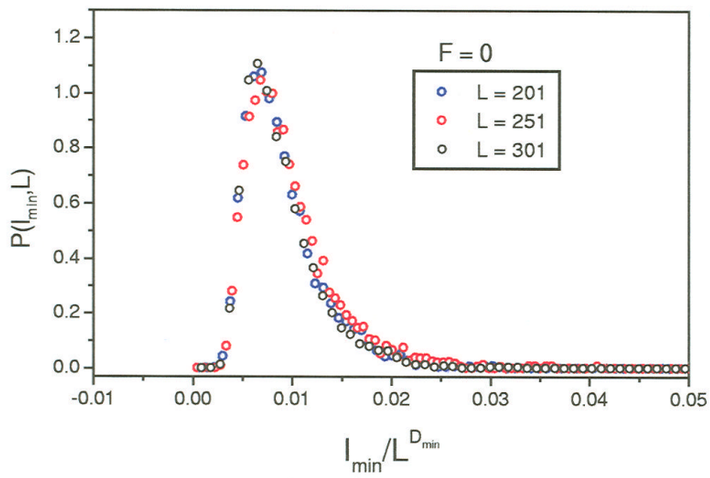

Figura 3.5: Gráfico de $P(l_{min}, L)$ contra $l_{min}/L^{D_{min}}$ para a percolação por invasão ordinária.

as propriedades estruturais dos aglomerados da percolação por invasão, encontrando os valores $D_{min} = 1.133(5)$ para o caso onde não ocorre aprisionamento e $D_{min} = 1.213(5)$ para o caso onde o aprisionamento é levado em conta.

Na Tab.3.1 mostramos os valores de D_{min} para diversos valores de F. Vemos claramente que D_{min} aproxima-se de 1 quando $F \to 0.5$. Isto significa que o comprimento do menor caminho coincide com distância euclideana entre P_1 e P_2.

3.4 O modelo otimizado

No modelo otimizado [27, 77] os aglomerados são construídos de tal forma que, durante todo o processo de crescimento a relação de escala entre massa e raio de giração ($M \sim Rg^D$) seja obedecida. Como dissemos anteriormente, quando $D \in \left[\frac{91}{48}, 2\right]$ a dimensão fractal do aglomerado coincide com o valor de D, enquanto que fora deste intervalo o sistema é frustrado.

L	$\Delta M/M$	N_p/N_o
51	0.09	21
101	0.009	24
201	0.017	36

Tabela 3.2: Comparação entre número de ensaios nos modelos perimetral e otimizado necessários para obtenção do mesmo desvio relativo de massas dos aglomerados. Aqui, utilizamos $N_o(L = 51, 101) = 100$ e $N_o(201) = 15$.

No intervalo $\left[\frac{91}{48}, 2\right]$ nossos aglomerados têm uma estrutura completamente estabilizada, isto é, possuem dispersão de massa muito pequena. Para se ter uma idéia da magnitude desta dispersão, fizemos um estudo comparativo entre o número de ensaios realizados no modelo perimetral N_p e o número de ensaios no modelo otimizado necessários para se obter o mesmo desvio padrão relativo nas massas do aglomerado. Um resumo dos resultados pode ser visto na Tab.3.2. A razão $\frac{N_p}{N_o}$ mede quantas vezes o número de experimentos realizados no modelo perimetral excede os ensaios realizados no modelo otimizado quando impomos um desvio padrão relativo nas massas igual a $\Delta M/M$.

Como modelo otimizado gera estruturas bastante estáveis, investigamos as propriedades das subestruturas de nossos fractais efetuando o crescimento de apenas um aglomerado. Em nossas simulações, o crescimento deste único aglomerado foi interrompido a cada 50 etapas, quando então medimos sua massa, seu esqueleto e raio de giração. Para medir estas grandezas, necessitamos de dois pontos: fixamos P_1 no centro da rede enquanto P_2 correponde a um sítio na fronteira do menor retângulo que contém o aglomerado. O menor caminho foi medido entre estes dois pontos. Note que quando mudamos o tamanho do retângulo, o ponto P_2 muda de lugar uma vez que o aglomerado cresce. Isto dificulta bastante a análise do comportamento de escala do caminho mínimo e do esqueleto elástico.

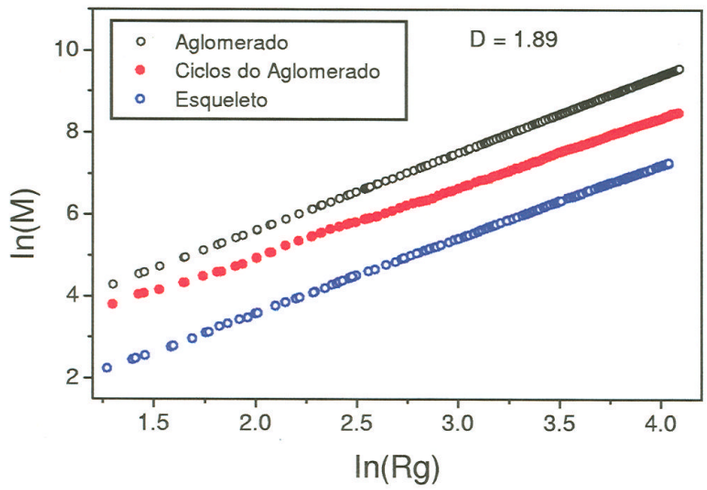

Figura 3.6: Gráfico logarítmico da massa do aglomerado, número de ciclos do aglomerado e massa do esqueleto contra o raio de giração de suas respectivas estruturas.

3.4.1 O esqueleto

Investigamos o modelo otimizado na região $D \in [\frac{91}{48}, 2]$. Aqui a dimensão fractal do aglomerado coincide com o parâmetro D. O esqueleto também obedece a relação de escala $M_B \sim Rg^{D_B}$, como pode ser visto na Fig.3.6 (lembre-se que esta relação foi imposta somente para o aglomerado). Na Tab.3.3 apresentamos as dimensões fractais do esqueleto (D_B) para vários valores de D. Observe que para $D = 1.89$, a dimensão fractal da invasão ordinária, obtivemos $D_B = 1.74(1)$ que é maior do que o valor deste expoente para a invasão ordinária. Isto significa que, embora as dimensões fractais dos dois modelos coincidam, os aglomerados são intrinsicamente diferentes uma vez que seus esqueletos são diferentes.

D	D_F	D_l	$D_{\min}$
$1.89^{(1)}$	1.89	1.74	1.17
$1.89^{(2)}$	1.74	1.63	1.17
$1.91^{(1)}$	1.91	1.78	1.05
$1.91^{(2)}$	1.82	1.72	1.05
$1.95^{(1)}$	1.95	1.83	1.00
$1.95^{(2)}$	1.93	1.82	1.00
$2.00^{(1)}$	2.00	2.00	1.00
$2.00^{(2)}$	1.99	1.99	1.00

Tabela 3.3: Expoentes de escala para o modelo otimizado. (1) - Aglomerado, (2) - Esqueleto.

3.4.2 Os pontos de estrangulamento

Para os aglomerados construídos através do modelo otimizado, o número de pontos de estrangulamento é muito pequeno. Ele não obedece a uma lei de potências. Por exemplo: quando construímos um aglomerado para redes de tamanho $L = 51$, 101, 151, 201, 251, 301 e 401 e contamos o número de pontos de estrangulamento obtivemos respectivamente $N_r = 1; 8; 8; 1; 6; 3; 7$. Efetuamos, também, médias sobre vários aglomerados. Para $D = 1.89$ e $L = 201$ encontramos que o número médio de pontos de estrangulamento, $\langle N_r \rangle \sim 9$, é insignificante comparado à massa média dos aglomerados ($\langle M \rangle \sim 15000$). O número de pontos de estrangulamento é tão pequeno que a probabilidade de desconectar totalmente um aglomerado removendo um sítio aleatoriamente, é praticamente nula. Quando aumentamos D, a razão $\frac{\langle N_r \rangle}{\langle M \rangle}$ diminui. Assim, o algoritmo otimizado destrói os pontos de estrangulamento aumentando a conectividade dos aglomerados. Este desaparecimento dos pontos de estrangulamento indica que o modelo de nós-conexões e bolhas não pode ser usado para descrever o esqueleto dos aglomerados do modelo otimizado.

3.4.3 Os ciclos

O número de ciclos escala com o raio de giração dos aglomerados segundo a lei de potências:

$$N_l \sim Rg^{D_l}. \tag{3.5}$$

O dados referentes ao número de ciclos tanto de aglomerado quanto do esqueleto são de muito boa qualidade. Os dados para o número de ciclos do aglomerado podem ser vistos na Fig.3.6. Podemos ver na Tab.3.3 que, como era esperado, ambos os expoentes tendem a 2 quando $D \rightarrow 2$.

3.4.4 Os menores caminhos

A determinação dos expoentes relacionados com os caminhos mínimos nos aglomerados do modelo otimizado é um pouco mais difícil, devido às grandes flutuações de l_{min}. Aqui, a relação de escala não é obedecida de forma estabilizada, e execução de médias sobre alguns experimentos são necessárias. Com isso, podemos determinar os expoente de escala D_{min} através da relação

$$l_{min} \sim Rg^{D_{min}}. \tag{3.6}$$

Na Tab.3.3 vemos que à medida em que o aglomerado torna-se compacto, o expoente diminui até atingir o valor $D_{min} = 1$. Isto já era esperado, uma vez que o caminho mínimo tende a uma reta que conecta o sítio central à fronteira da rede.

3.5 Conclusões

Utilizamos o método das queimadas para identificar e analisar o aglomerado, o esqueleto e o esqueleto elástico gerados pelos modelos de percolação por invasão múltipla. Determinamos os expoentes de escala da massa, pontos de estrangulamento, número de ciclos e menores caminhos destas estruturas tanto do modelo perimétrico quanto do otimizado. Investigamos o comportamento destes expoentes para diferentes valores de F e D. O modelo perimétrico, tem como caso particular a percolação por invasão ordinária.

Nossos resultados mostram que, neste caso, os expoentes críticos associados às subestruturas do aglomerado coincidem com os respectivos expoentes da percolação ordinária.

O modelo otimizado exibe propriedades importantes: a massa do esqueleto escala exatamente com o seu raio de giração e os pontos de estrangulamento desaparecem. O aglomerado e o esqueleto possuem estruturas cuja dispersão de massa e muito pequena, comparada ao modelo perimétrico. Isto permite que, outros sistemas físicos, como por exemplo, sistemas de spins, definidos sobre estes fractais possam ser simulados praticamente sem a necessidade das médias geométricas, feitas sobre um *ensemble* de aglomerados.

Capítulo 4

Percolação Atenuada

4.1 Introdução

Os problemas relacionados com o escoamento de fluidos através de meios porosos surgem nos mais diversos ramos da atividade humana [15]. Hoje, grande parte do nosso conhecimento sobre o escoamento de fluidos através de meios porosos está diretamente relacionado com a teoria da percolação. Este modelo teórico exerce um papel fundamental na caracterização das propriedades estatísticas do escoamento de fases fluidas.

A modelagem do escoamento de fluidos através de meios porosos utilizando as ferramentas da percolação está baseada na hipótese de que a probabilidade de ocupação de um poro, p, é proporcional à pressão capilar p_{cap}. Sem esta hipótese seria difícil estabelecer uma correspondência direta entre a probabilidade de ocupação dos sítios e a pressão capilar nos poros. Com isso, para modelar o processo de escoamento, consideramos a idéia de que os poros ocupados são aqueles que estão submetidos à maior pressão capilar e, além disso, assumimos que o processo de deslocamento do fluido através do meio poroso é totalmente determinado pelas pressões capilares. Como a pressão capilar é inversamente proporcional ao raio do poro, entre todos os poros acessíveis ao fluido em cada etapa do processo, aquele que possui o menor raio será ocupado. Porém, nas simulações dos modelos de percolação, permite-se a ocupação dos poros que não excedam um raio pré-determinado p (a probabilidade de ocupação). Neste caso, uma vez escolhido o valor da probabilidade

de ocupação, os poros cujos raios são maiores do que p são imediatamente considerados inacessíveis ao fluido. No entanto, em sistemas reais, isto não é totalmente verdade. Têm sido apontado que, em muitos processos, o deslocamento dos fluidos depende também da pressão com a qual o fluido invasor é injetado [15, 30]. Quando a pressão externa age em conjunto com as pressões capilares, a interface entre os fluidos move-se para os poros que minimizam a resistência ao escoamento. Entretanto, isto não significa que poros grandes sejam totalmente rejeitados: a combinação das pressões capilar e externa também é importante e pode fazer com que poros grandes também sejam invadidos.

Neste capítulo apresentamos um modelo dinâmico de percolação que permite a ocupação de poros de qualquer tamanho. Assim como ocorre na percolação por invasão, em nosso modelo um aglomerado de fluido invasor é formado ocupando, preferencialmente, os poros de menor tamanho. No algoritmo computacional, o aglomerado é construído ocupando, um a um, os sítios perimetrais cujos tamanhos r $(0 \leq r \leq 1)$ são menores do que um tamanho p pré-determinado. No entanto, se o número aleatório associado ao sítio for maior do que p, este sítio pode ainda ser ocupado, mas com uma probabilidade que diminui com o aumento de r. A escolha da forma matemática que expressa a distribuição de probabilidades de ocupação (para $r > p$) é arbitrária, mas baseada na observação experimental de que, quanto maior o tamanho do poro, menor será sua probabilidade de ocupação.

4.2 O modelo de percolação atenuada

A percolação por invasão é reconhecida com um dos melhores modelos para descrever o deslocamento lento de dois fluidos imiscíveis através de meios porosos. Sua principal vantagem sobre os modelos baseados na percolação ordinária é o seu caráter dinâmico. Existem ainda outros modelos bastante populares que podem ser usados para tratar o escoamento de fluidos e que se aplicam em condições de escoamento rápido e

viscoso. Entre eles, podemos citar o *DLA* [18] e o modelo de Eden [58]. Em particular, simulações baseadas no modelo de Eden não levam em conta os efeitos de capilaridade uma vez que qualquer sítio do perímetro do aglomerado pode ser ocupado. Em uma variante deste modelo, o método de crescimento de Leath, sítios com tamanhos associados maiores do que um certo valor pré-estabelecido são proibidos de serem invadidos, sendo permanentemente bloqueados. A escolha de uma probabilidade de ocupação em $p = p_c$, leva à formação de aglomerados equivalentes aos da percolação ordinária.

Apresentamos aqui um modelo dinâmico de percolação que, em sua simulação, utiliza o método de crescimento de Leath [56, 57] com um ingrediente adicional, baseado nas idéias do modelo de percolação por invasão [17]. Neste modelo, que chamamos de *percolação atenuada*, sítios com qualquer tamanho associado podem vir a ser ocupados, sendo que os maiores sítios tem menor probabilidade de ocupação. Na prática, relaxamos a regra de ocupação, onde um sítio escolhido é imediatamente ocupado ou bloqueado, dependendo do seu tamanho. Na percolação atenuada, se o sítio escolhido tiver um número aleatório associado r menor do que um valor pré-determindo p ele é ocupado. Porém, sítios cujos tamanhos associados são maiores do que p não são imediatamente rejeitados. Eles podem ainda vir a ser invadidos, mas com uma probabilidade de ocupação que diminui quando o tamanho do poro aumenta. Obviamente, existem muitas formas de relaxar a regra de ocupação e a escolha da melhor regra ainda não é clara. Assim, consideramos a forma mais simples relaxação da regra de ocupação: sítios cujos tamanhos r associados são maiores do que p são ocupados com uma probabilidade da forma $(1-r)^w$.

Em nossas simulações geramos aglomerados a partir de uma semente colocada no centro da rede. Em cada etapa do processo, escolhemos aleatoriamente um sítio do perímetro do aglomerado e o ocupamos segundo uma distribuição de probabilidades dada por

$$f(r) = \begin{cases} 1 & se \quad r \leq p \\ (1-r)^w & se \quad r > p \end{cases} \tag{4.1}$$

Aqui, p é uma probabilidade de ocupação fixa e w é um parâmetro externo que pode assumir qualquer valor no intervalo $[0, \infty]$. Se um sítio consultado não for ocupado, ele é então bloqueado, sendo eliminado da lista de sítios disponíveis para ocupação. Desta forma, os sítios são invadidos sequencialmente, como na invasão ordinária, mas, ao invés de consultar todo o perímetro, escolhemos um sítio aleatoriamente e o ocupamos segundo a distribuição de probabilidades dada pela Eq.4.1. Dependendo dos parâmetros p e w, pode não haver sítios disponíveis para invasão e o processo é interrompido, caso contrário, a ocupação continua até o que o aglomerado atinja as fronteiras da rede. Com isso, esperamos que exista uma transição de fases separando uma fase onde o fluido invasor percola de uma outra, não percolante.

4.3 Simulações numéricas

4.3.1 Diagramas de fases

Efetuamos simulações numéricas do modelo de percolação atenuada para redes em duas e três dimensões. Para sistemas bidimensionais, utilizamos redes de tamanho L = 101,201,401,801 e 1601, enquanto os sistemas tridimensionais foram simulados com L = 51,75,101,151 e 201. Em ambos os casos os desvios estatísticos nas massas dos aglomerados são menores do que 2%.

Para investigar o surgimento de transições de fase, estudamos a fração de aglomerados que atingem as fronteiras da rede $F(p)$. Avaliamos esta quantidade como função de p para valores fixos do parâmetro w e para diversos tamanhos de rede. Uma amostra de nossos resultados pode ser visto na Fig.4.1. Esta figura sugere a existência de uma transição de fases em um ponto p_c separando uma fase percolante de uma fase não per-

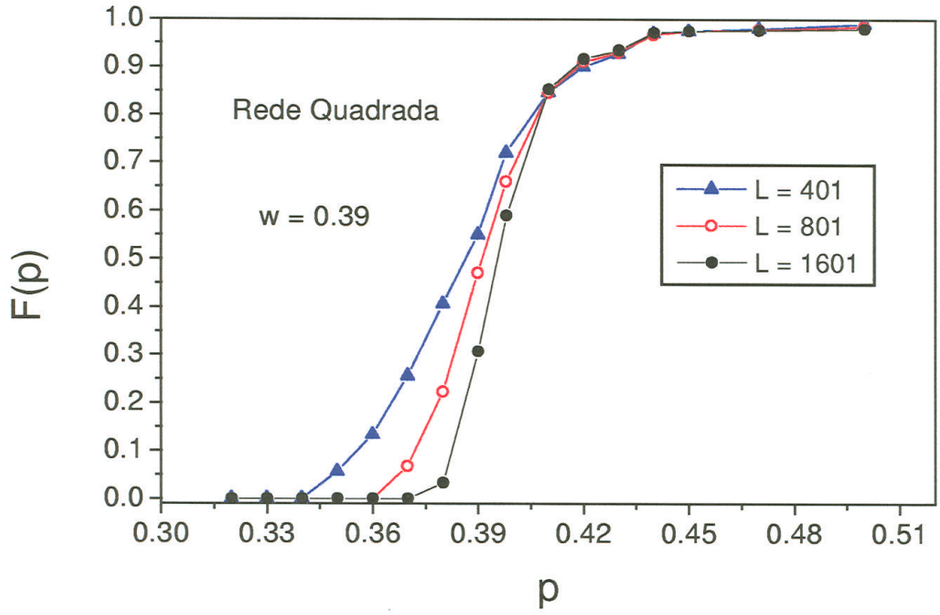

Figura 4.1: Fração de aglomerados percolantes como função de p para diferentes tamanhos de rede e w fixo em $w = 0.93$.

colante.

Os valores dos limiares de percolação podem ser estimados através de uma análise cuidadosa dos pontos de inflexão da curva $F(p)$ contra p. À medida em que aumentamos o tamanho da rede, estes pontos de inflexão aproximam-se do limiar de percolação. Em simulações, o tamanho de nossas redes são limitados e, por isso, devemos usar métodos de extrapolação que levem em conta os efeitos de tamanho finito para calcular corretamente parâmetros críticos do sistema [6]. Um algoritmo muito útil para tais extrapolações é o BST [94]. Este algoritmo nos permite extrapolar quantidades físicas que convergem obedecendo a uma lei de potências do tipo $G(L) = G(\infty) + AL^{-\theta}$, e funciona muito bem mesmo para sequências curtas (em nosso caso, dispomos de uma sequência com apenas 5 valores).

A determinação dos pontos críticos p_c para vários valores do parâmetro w nos permite construir o diagrama de fases no espaço $p_c - w$. Este diagrama pode ser visto na Fig.4.2 para as redes quadrada e cúbica simples. Nestes diagramas, vemos que existe

um valor mínimo para o parâmetro w (w_{min}) abaixo do qual o sistema está sempre na fase percolante, mesmo que $p = 0$. Acima de w_{min}, o limiar de percolação p_c aumenta, aproximando-se da probabilidade de ocupação crítica da percolação ordinária. Na verdade, p_c coincide com o limiar da percolação ordinária quando $w = \infty$.

4.3.2 A estrutura dos aglomerados

Os aglomerados gerados pelo modelo de percolação atenuada são objetos fractais. Para determinar a dimensão fractal associada, medimos a massa média dos aglomerados percolantes críticos ($\langle M \rangle$) e seus respectivos raios de giração (Rg) para valores fixos do parâmetro w. Uma amostra dos nossos dados pode ser vista na Fig.4.3 para as redes quadrada e cúbica simples. Os valores das dimensões fractais podem ser estimados calculando as inclinações dos gráficos $ln(\langle M \rangle)$ contra $ln(Rg)$. Os valores das dimensões fractais assim calculados mostram-se sempre os mesmos, independentemente do parâmetro w, sendo que seu valor coincide com aquele da percolação ordinária crítica ($D_F = \frac{91}{48}$ para sistemas bidimensionais e $D_F = 2.53$ no caso tridimensional). Este resultado sugere fortemente que o modelo de percolação atenuada pertence à mesma classe de universalidade que a percolação ordinária. No entanto, não podemos afirmar que isto seja realmente verdade, uma vez que determinamos apenas um expoente crítico do modelo.

Além da dimensão fractal, avaliamos também o número de coordenação médio dos aglomerados percolantes. Este número de coordenação ($\langle z \rangle$) corresponde ao número médio de sítios primeiros vizinhos ocupados de um sítio qualquer do aglomerado. Sabemos que esta quantidade foi investigada numericamente para as redes quadrada e cúbica simples para o caso da percolação ordinária por ligações. Na criticalidade, o número de coordenação médio dos aglomerados foram estimados em $\langle z \rangle = 2.239 \pm 0.012$ em duas dimensões e $\langle z \rangle = 2.079 \pm 0.016$ para $d = 3$ [95]. No caso da percolação por sítios, somente os aglomerados de invasão sem aprisionamento foram investigados, encontrando-se

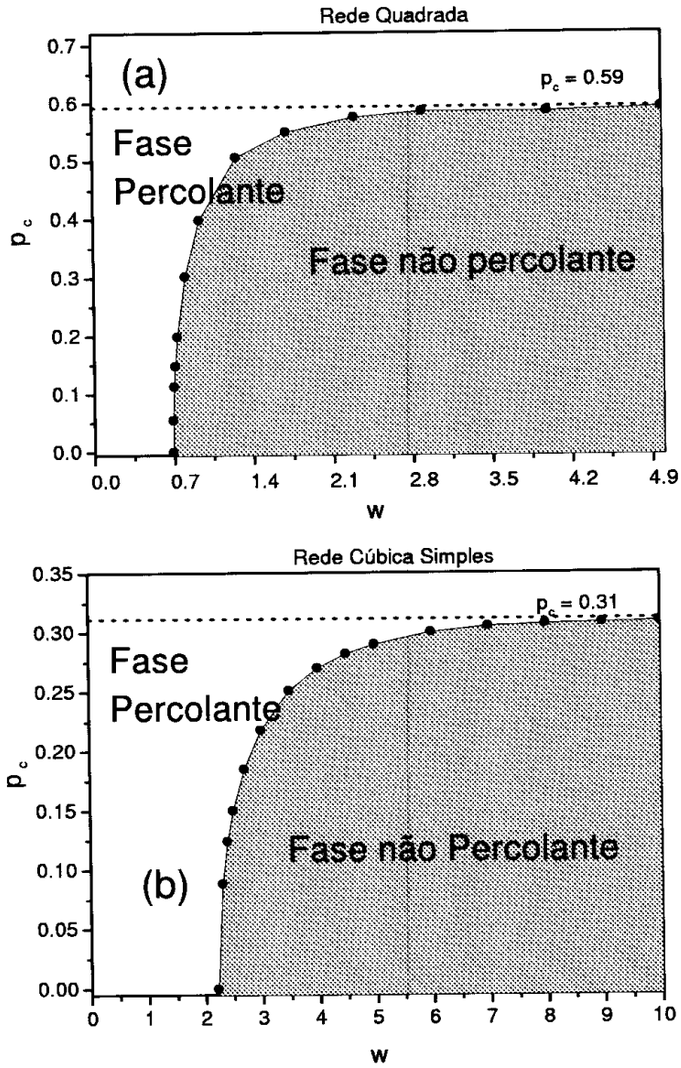

Figura 4.2: Diagramas de fases da percolação atenuada para as redes quadrada e cúbica simples.

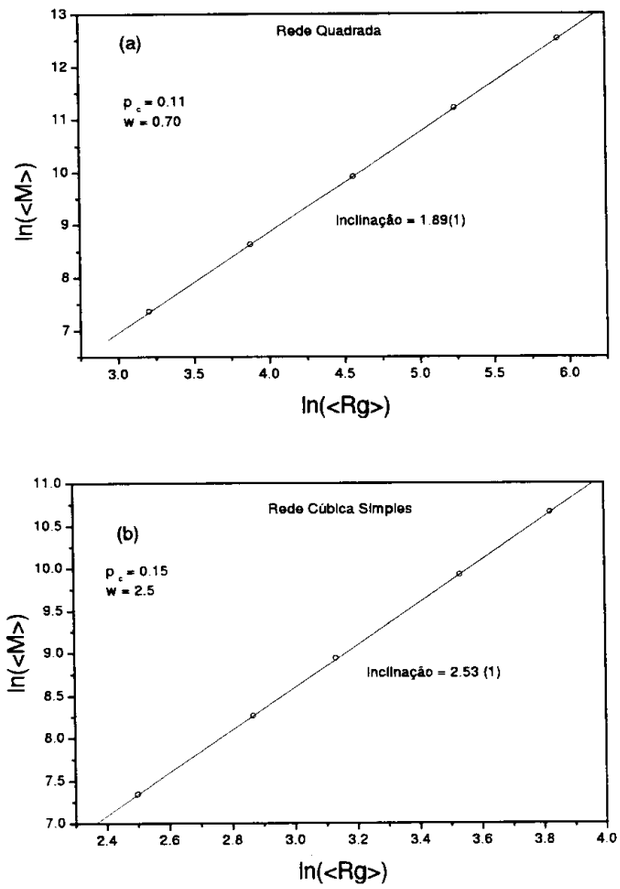

Figura 4.3: Gráfico em escala logaritmica da massa média dos aglomerados contra seu raio de giração.

o valor $\langle z \rangle = 2.51 \pm 0.01$ para aglomerados embebidos na rede quadrada [24]. Para efeito de comparação, apresentamos os valores encontrados para a percolação atenuada definida nas redes quadrada e cúbica. Estes valores são, respectivamente, $\langle z \rangle = 2.51 \pm 0.01$ e $\langle z \rangle = 2.31 \pm 0.01$, sendo independentes do valor do parâmetro w (na região $[w_{min}, \infty]$).

4.3.3 O perfil de aceitação

Uma maneira simples de analisar os modelos de percolação para o deslocamento de fluidos é avaliar seu perfil de aceitação. Definido por Wilkinson e Willemsem no contexto da percolação por invasão, o perfil de aceitação é a razão entre o número de números aleatórios no intervalo $[r, r + dr]$ aceitos no aglomerado e o número de números aleatórios nesta faixa que se tornaram disponíveis para ocupação. Esta grandeza nos fornece informações sobre o tamanho dos poros que são ocupados durante o processo de invasão. Na Fig.4.4 temos uma amostra do perfil de aceitação para nosso modelo. Nesta figura vemos que, embora os sítios sejam escolhidos aleatoriamente, todos os sítios cujos números aleatórios associados são menores do que p_c, e que tornaram-se disponíveis para ocupação, foram invadidos. Porém, quando $r > p_c$, o gráfico do perfil de aceitação exibe uma cauda, devido a presença do termo polinomial $(1-r)^w$ na probabilidade de ocupação dos sítios. Como era esperado, sítios com números aleatórios associados muito próximos de 1 são, na maioria, rejeitados. Para valores grandes do parâmetro w, o perfil de aceitação aproxima-se de uma função degrau, como a invasão ordinária, e o limiar de percolação p_c aproxima-se de p_c. Por outro lado, quando w dimimui, a largura do platô também diminui, desaparecendo completamente quando $w = w_c$. Comportamentos semelhantes são observados em todos os tipos de rede simulados.

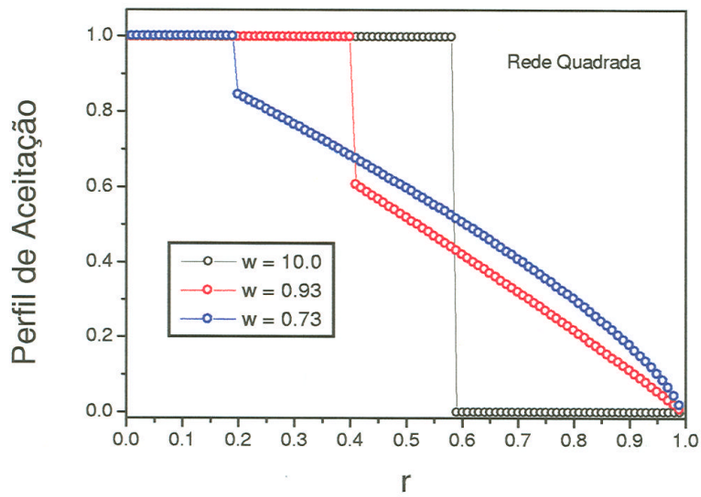

Figura 4.4: Perfil de aceitação para a percolação atenuada definida sobre uma rede quadrada.

4.4 Fórmulas universais para os limiares de percolação

Embora o comportamento crítico da transição de percolação seja hoje bem entendido, o cálculo das probabilidades críticas de ocupação ainda resiste a determinações exatas. Valores exatos para os limiares de percolação são disponíveis somente para algumas poucas redes bidimensionais. As redes quadrada, triangular e *honeycomb* [96] possuem pontos críticos calculados exatamente para a versão de percolação por ligações, enquanto as redes triangular e Kagomé são resolvidas exatamente para a percolação por sítios [96]. Em dimensões maiores do que 2, nenhum limiar de percolação é conhecido exatamente (exceto a árvore de Cayley).

Muitos dos resultados encontrados sugerem que os limiares de percolação dependem, basicamente, da dimensão d do sistema e do número de coordenação da rede (q). Com isso, várias fórmulas empíricas relacionando p_c, d e q tem sido propostas. Sahimi

et al [97] propuseram a fórmula $p_c = \frac{d}{[(d-1)(q-1)]}$ para a percolação por sítios, enquanto Vyssotsky *et al* [98] sugeriram $p_c = \frac{d}{(d-1)q}$ para a percolação por ligações. Porém, ambas as fórmulas não são satisfatórias para todas as redes, especialmente em baixas dimensões.

Recentemente, Galam e Mauger [31] postularam uma única fórmula que fornece os limiares de percolação tanto para a versão por sítios quanto por ligações, para todas as redes e em qualquer dimensão. Sua fórmula é uma lei de potências escrita como

$$p_c = p_0[(d-1)(q-1)]^{-a} d^b, \tag{4.2}$$

com $b = a$ para a percolação por ligações e $b = 0$ para a percolação por sítios. Os parâmetros $[p_0; a]$ classificam as redes em grandes classes. Na primeira classe, estão as redes regulares quadrada, triangular e *honeycomb*, caracterizadas pelos conjuntos de parâmetros $[p_0 = 0.8889; a = 0.3601]$ para a percolação por sítios e $[p_0 = 0.6558; a = 0.6897]$ para a percolação por ligações. A rede bidimensional Kagomé, juntamente com as redes hipercúbicas $3 \leq d < 6$, constitui a segunda classe com $[p_0 = 1.2868; a = 0.6160]$ e $[p_0 = 0.7541; a = 0.9346]$ para as versões por sítios e ligações respectivamente. Dimensões superiores, junto com a árvore de Cayley pertencem à terceira classe. Aqui, $[b = 2a - 1; p_0 = 2^{a-1}]$ tanto para a versão de percolação por sítios quanto por ligações.

A conjectura de Galam e Mauger foi estendida para redes aperiódicas e anisotrópicas [99, 100], fornecendo resultados satisfatórios para um grande número de redes. No entanto, tem sido argumentado que somente a dimensão e o número de coordenação da rede podem não ser suficientes para a determinação precisa dos limiares de percolação [101, 102]. A base da argumentação reside no fato de que existem redes diferentes, com a mesma dimensão e número de coordenação que apresentam diferentes limiares de percolação [99, 102].

Nosso modelo de percolação atenuada fornece uma maneira simples de testar a

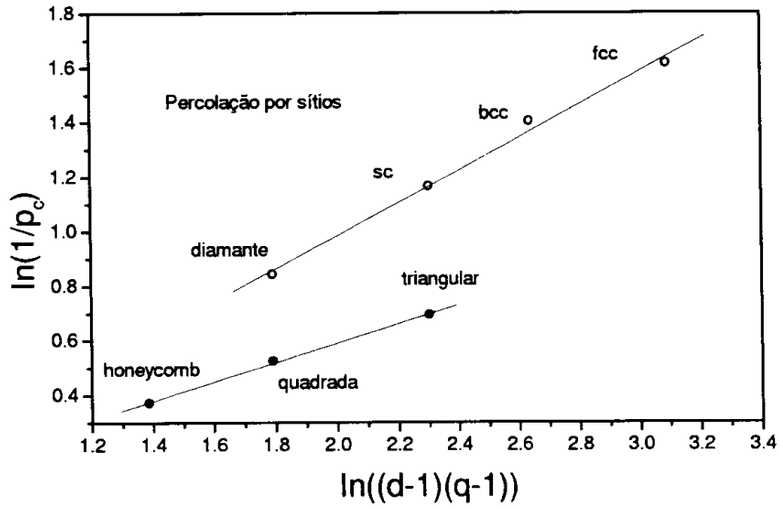

Figura 4.5: Limiares de percolação (sítios) como função de $(d-1)(q-1)$ em escala logarítmica.

fórmula de Galam e Mauger, pois dispomos de uma variedade de limiares de percolação que dependem não somente do tipo de rede e da dimensão do sistema, mas também de outros parâmetros do modelo. Assim, determinamos cuidadosamente os limiares da percolação atenuada como função do parâmetro w. Em seguida, testamos se estes limiares obedecem a equação de Galam e Mauger. Uma amostra dos nossos resultados pode ser visto na Fig.4.6. Embora os pontos críticos do nosso modelo tenham sido estimados apenas para alguns tipos de rede, vemos claramente a equação proposta por Galam e Mauger não é satisfeita. Desta forma, nosso modelo apresenta limiares de percolação em total desacordo com a conjectura de Galam e Mauger.

4.5 Conclusões

Introduzimos um modelo de percolação para escoamento de fluidos através de meios porosos que permite a ocupação de poros de qualquer tamanho, sendo que os poros

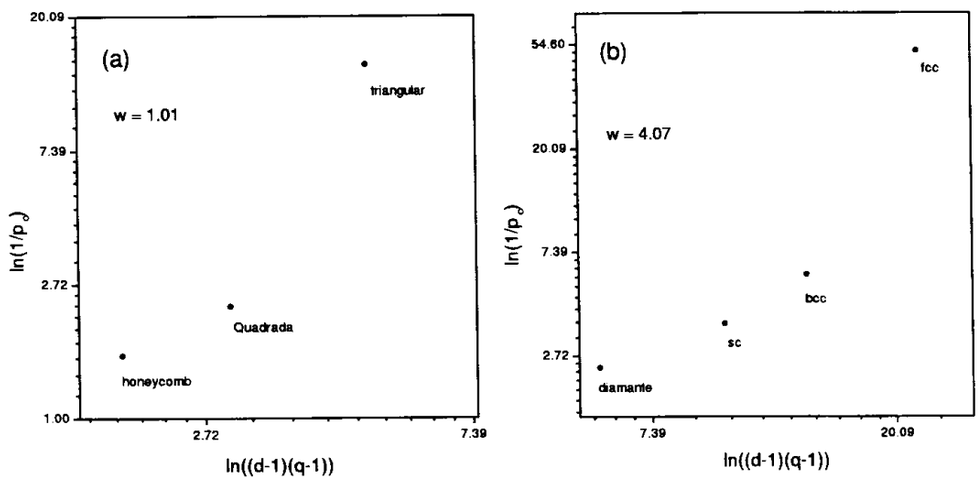

Figura 4.6: Limiares de percolação (sítios) para a percolação atenuada como função de $(d-1)(q-1)$ em escala logarítmica.

menores são preferencialmente escolhidos. Os ingredientes de nosso algoritmo computacional é o método de crescimento de Leath-Alexandrowicz acrescido de uma nova regra de ocupação. Escolhemos esta regra de tal forma que a probabilidade de ocupação diminua à medida em que o tamanho do poro aumenta, o que está de acordo com observações experimentais. Em nossa regra de ocupação, que tem uma forma matemática arbitrária, mas que leva em conta conceitos físicos ligados à pressão capilar e a pressão externa responsável pela injeção do fluido invasor, a probabilidade de ocupação cai algebricamente com o tamanho do poro. Verificamos que a introdução de um parâmetro adicional na probabilidade de ocupação não muda a classe de universalidade do sistema, que é a mesma da percolação ordinária.

Estimamos os limiares de percolação do nosso modelo e verificamos que eles dependem não somente do tipo de rede e da dimensão do sistema, mas também do parâmetro w introduzido na distribuição de probabilidade de ocupação. Estas probabilidades de ocu-

pação críticas não obedecem a fórmula proposta por Galam e Mauger.

Capítulo 5

Percolação por invasão com caminhadas de N passos

5.1 Introdução

O estudo teórico do escoamento de fluidos através de meios porosos utiliza, basicamente, dois tipos de modelos: contínuos e discretos [15]. Nos modelos contínuos, aplicamos as leis físicas para escrever as equações diferenciais que descrevem o transporte de massa, momento e energia. Quando resolvidas com as condições de contorno apropriadas, as soluções destas equações fornecem uma descrição detalhada do processo de escoamento. Neste caso, as propriedades macroscópicas do sistema, tais como a velocidade de escoamento, a queda de pressão e os coeficientes de transporte, são calculadas como médias das quantidades microscópicas correspondentes. Estas médias devem ser tomadas em um volume pequeno quando comparado ao volume total do sistema, mas grande o bastante para que as equações de movimento sejam válidas. Realizando médias em todos os pontos do espaço podemos obter as grandezas macroscópicas do sistema. Em geral, esta grandezas obedecem a lei empírica de Darcy [32]. No entanto, resolver as equações de movimento é um problema difícil, mesmo para os sistemas mais simples. Por outro lado, sistemas muito simplificados não são suficientemente precisos para a determinação dos parâmetros relevantes. Os modelos contínuos apresentam limitações, principalmente

quando existem correlações de longo alcance ou em sistemas onde a interconectividade do meio exerce papel dominante. Existe, hoje, uma vasta literatura sobre o escoamento de fluidos em meios porosos, enfocando os métodos de resolução das equações de movimento e sua validade, bem como os principais resultados experimentais observados [15, 32].

Os sistemas discretos, por sua vez, representam o meio poroso como uma rede de poros e gargalos, sendo muito úteis no tratamento de sistemas onde a interconectividade dos poros e as correlações são importantes. A idéia original de representar o meio poroso como uma rede é bastante antiga [1], mas somente nas últimas décadas procedimentos sistemáticos e rigorosos foram desenvolvidos para mapear, em princípio, qualquer meio poroso em uma rede equivalente de sítios (poros) e ligações (gargalos). Uma vez feito este mapeamento, o sistema pode ser estudado em detalhes. Em particular, os conceitos da Mecânica Estatística tem sido aplicados com sucesso a diversos sistemas, sendo que a teoria da percolação [5] tem sido apontada como a linguagem natural para a descrição dos efeitos de conectividade do meio poroso, escoamento e difusão de fluidos. As ferramentas que a teoria da percolação utiliza para descrever as propriedades macroscópicas efetivas dos sistemas envolvem, fundamentalmente, conceitos fractais e multifractais além de relações de escala. Porém, os modelos discretos também apresentam algumas limitações. A principal delas é o grande esforço computacional necessário para a simulação de sistemas realísticos.

Neste capítulo apresentamos uma discussão sobre um tema que vem ocupando um espaço considerável na literatura: o papel da inércia no deslocamento de fluidos através de meios porosos. Primeiramente, discutimos alguns resultados teóricos obtidos recentemente através dos modelos contínuos, comparando-os com observações experimentais. Em seguida, introduzimos um modelo discreto para o problema e apresentamos nossos resultados.

5.2 O papel da inércia no escoamento de fluidos através de meios porosos

O escoamento de um fluido Newtoniano, contínuo e incompressível pode ser microscopicamente descrito pela equação de Navier-Stokes [32]

$$\nabla p = \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \tag{5.1}$$

onde ρ é a densidade do fluido, é μ a viscosidade, $\mathbf{u}$ é o campo de velocidade e p é a pressão. Esta equação pode ser deduzida aplicando as leis de Newton ao movimento de um fluido, levando em conta que a velocidade de escoamento depende tanto do tempo quanto da posição. Na equação de Navier-Stokes, o termo $\mu \nabla^2 \mathbf{u}$ representa a força viscosa enquanto o termo $\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ é o responsável pelos efeitos inerciais, uma vez que ele descreve o *momentum* transportado no movimento do fluido.

Os papéis relativos desempenhados pelas forças viscosas e inerciais sobre o comportamento do sistema pode ser expresso em função de uma quantidade adimensional conhecida como número de Reynolds. Para o escoamento em tubos, cujo comprimento característico é o seu comprimento l, as forças viscosas são da ordem de μU (onde U é a velocidade média do escoamento), enquanto as forças inerciais são proporcionais a $\rho l U^2$. O número de Reynolds, $Re = \frac{\rho l U}{\mu}$, expressa a razão entre estas forças. Muitas vezes, Re é usado como critério para distinguir entre os regimes de escoamento laminar e turbulento [32]. Quando Re é pequeno, a viscosidade exerce um papel dominante, suavizando pequenas não homogeneidades que se desenvolvem durante o escoamento. O termo inercial pode ser desprezado e o fluido escoa no regime laminar. Neste caso, verifica-se que a velocidade média de escoamento (volume de fluido que escoa por unidade de área transversal do tubo, por unidade de tempo) relaciona-se com a queda de pressão no sistema através de uma relação linear, conhecida como equação de Hagen-Poiseuille. Porém, quando o número

de Reynolds é grande, as forças inerciais dominam o escoamento. Ocorre a formação de grandes instabilidades e o fluido escoa de forma turbulenta. Em geral, a transição entre os regimes de escoamento laminar e turbulento ocorre de forma abrupta. Existe um consenso de que esta transição ocorre quando $Re \simeq 2100$.

As equações de Navier-Stokes podem ser aplicadas para fluidos escoando através de meios porosos, fornecendo uma descrição completa do sistema. Entretanto, em muitas situações, a solução exata desta equação é impossível devido, principalmente, à presença dos termos não lineares. Além disso, na maioria dos casos, falta-nos o conhecimento detalhado da estrutura do meio poroso. Desta forma, temos que lançar mão de soluções numéricas, além de usar algumas aproximações. Em tais casos, é extremamente importante estimar as ordens de grandeza de cada termo da expressão, a fim de avaliar se algum deles pode ser desprezado, o que pode facilitar os cálculos. Quando o termo inercial é desprezado, ou seja, no regime de baixas velocidades, a velocidade média do escoamento de fluido através do meio poroso (U) relaciona-se com a queda de pressão (ΔP) no sistema através de uma relação conhecida como Lei de Darcy, expressa matematicamente como

$$-\frac{\Delta P}{L} = \frac{\mu U}{\kappa} \tag{5.2}$$

onde κ é a permeabilidade do meio e μ a viscosidade do fluido.

A lei de Darcy especifica uma relação linear entre a velocidade de escoamento e a queda de pressão no meio poroso. Entretanto, esta lei possui limitações e sua validade é frequentemente discutida. Desvios em relação a dependência linear entre U e ΔP são experimentalmente observados quando a velocidade de escoamento é alta [32, 33].

Muitos pesquisadores têm proposto correções matemáticas para a lei de Darcy, de tal forma que os dados experimentais sejam satisfatoriamente descritos. Provavelmente, Forchheimer [32] tenha sido o primeiro a sugerir uma relação não linear entre U e ΔP.

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

Para considerar o efeitos das forças inerciais, que dependem do quadrado da velocidade, Forchheimer adicionou um termo de segunda ordem na velocidade à equação de Darcy. Em geral, a equação de Forchheimer pode ser escrita na forma

$$-\frac{\Delta P}{L} = \frac{\mu U}{\kappa} + \beta \rho U^2 \tag{5.3}$$

onde β é o parâmetro inercial. Em geral, tanto a permeabilidade κ quanto o parâmetro inercial dependem da porosidade do meio. Quando a velocidade de escoamento é suficientemente baixa, o termo quadrático equação de Forchheimer pode ser desprezado, recuperando, assim, a equação de Darcy. Verifica-se que a equação proposta por Forchheimer ajusta-se muito bem aos dados experimentais [32, 33].

O conceito de número de Reynolds pode ser estendido para meios porosos. Aqui, o comprimento característico do sistema é tomado como o tamanho médio dos poros d_p. Desta forma, o número de Reynolds é escrito como

$$Re = \frac{\rho U d_p}{\mu}. \tag{5.4}$$

Frequentemente, durante a realização de experimentos, a queda de pressão no sistemas é relacionada a um fator de atrito f [32, 33]. Na verdade, existem várias maneiras de relacionar o fator de atrito com as características relevantes do sistema. Porém, a definição mais utilizada é a equação Darcy-Weisbach [33]

$$-\frac{\Delta P}{L} = \frac{f \rho U^2 d_p}{2}. \tag{5.5}$$

Comparando esta equação com a fórmula de Forchheimer, podemos escrever o fator de atrito como

$$f' = \frac{c}{Re} + 1 \tag{5.6}$$

onde $f' = \frac{2fd}{\beta}$ e $c = \frac{d}{\kappa\beta}$.

Quando o número de Reynolds cresce (aumentando U e mantendo d_p e μ constantes), observa-se um desvio em relação a equação linear. Porém, devemos ser cuidadosos ao relacionar tal desvio com a transição entre os regimes de escoamento laminar e turbulento. Enquanto que no escoamento em tubos, existe um número de Reynolds crítico marcando uma transição abrupta entre os regimes de escoamento laminar e turbulento, os experimentos de escoamento de fluidos através de meios porosos mostram uma a passagem gradual do regime linear, descrito pela lei de Darcy, para o regime não linear. Na Fig.5.1, onde mostramos alguns resultados experimentais (retirados da Ref.[32]), podemos identificar claramente três regiões:

a) Quando Re é pequeno (baixas velocidades) temos uma região de escoamento laminar, com predomínio das forças viscosas. Podemos ver que a lei de Darcy é válida para $1 < Re < 10$.

b) Quando o número de Reynolds aumenta, observamos uma zona de transição onde as forças inerciais são comparáveis às viscosas. No limite superior desta região, que alguns autores sugerem com sendo $Re \simeq 100$, o regime de escoamento passa a ser turbulento.

c) Para números de Reynolds muito grandes, $Re > 100$, o regime de escoamento é, definitivamente, turbulento.

A interpretação física da falha da lei de Darcy ainda gera alguma controvérsia. Enquanto alguns autores argumentam que esta falha pode ser atribuida a efeitos de turbulência [32, 33], tem sido demonstrado através de simulações numéricas, que o efeito das forças de inércia pode ser o único responsável pelos desvios observados na região de transição[34, 35].

As equações de Forchheimer e Darcy são modelos fenomenológicos que não consideram explicitamente a estrutura interna do meio poroso. Porém, sabemos que várias

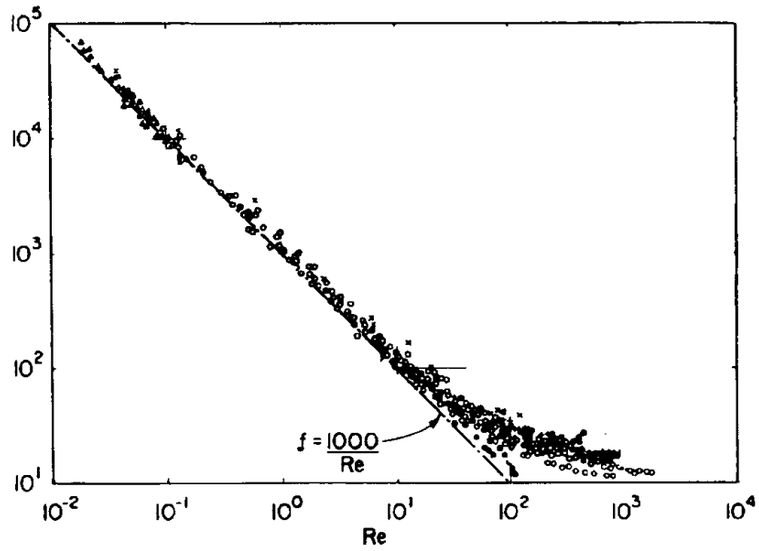

Figura 5.1: Fator de atrito medido experimentalmente como função do número de Reynolds.

grandezas relacionadas ao escoamento de fluidos, como por exemplo, a permeabilidade do meio, são dependentes da porosidade. Andrade *et al* [34, 35, 103] investigaram o efeito das forças inerciais resolvendo numericamente as equações de Navier-Stokes para fluidos escoando através de meios porosos. Os protótipos de meios desordenados adotados foram aglomerados percolantes. Associando a porosidade com a probabilidade de ocupação dos sítios, pode-se investigar meios com diferentes porosidades simplesmente variando-se o parâmetro de ocupação p.

Quando o fluido escoa através de um aglomerado percolante crítico ($p \approx p_c$), e com baixos números de Reynolds, a equação de Darcy é verificada. O fluido encontra todos os caminhos conectados do esqueleto do aglomerado, escoando por estes caminhos preferenciais. No entanto, para Re grande, o fluido não encontra tais caminhos facilmente. Ele acaba friccionado-se nas paredes do meio, criando zonas de turbilhonamento que

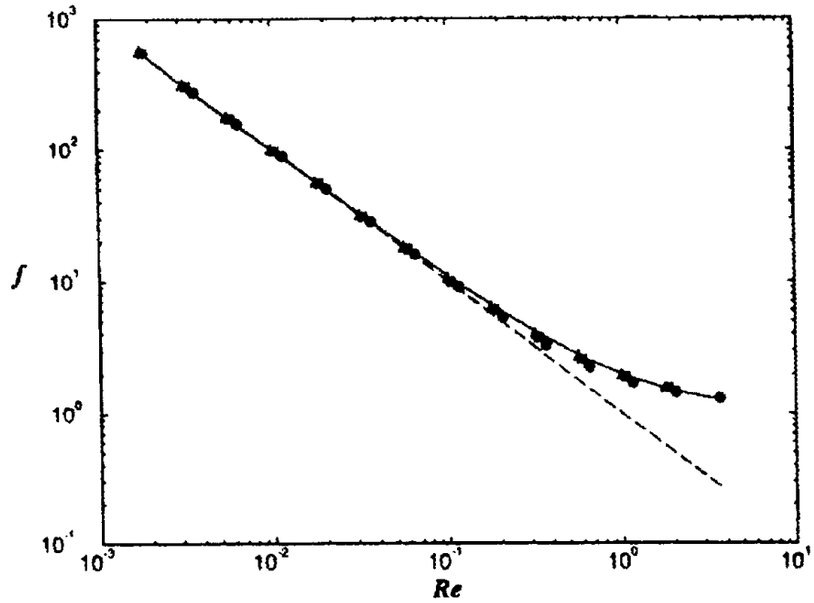

Figura 5.2: Fator de atrito (f) estimando através da solução numérica das equações de Navier-Stokes como função do número de Reynolds (Re). Os dados se referem a três diferentes porosidades: $p = 0.7, p = 0.8$ e $p = 0.9$ (rede quadrada).

dificultam o escoamento [36].

Recentemente, Andrade *et al* [34, 35] estenderam seus resultados para sistemas com alta porosidade ($p > p_c$). Resolvendo a equação de Navier-Stokes para diferentes campos de velocidade e pressão, pode-se calcular a velocidade média de escoamento e a queda de pressão entre as extremidades do sistema. O modelo fenomenológico adotado para analisar os dados foi a equação de Forchheimer. O resultado obtido por Andrade *et al* [34] é mostrado na Fig.5.2. Vemos que para baixas velocidades, a lei de Darcy é satisfeita. Porém, quando o número de Reynolds aumenta, observamos uma região de transição entre os regimes laminar e turbulento, tipicamente encontrada nos experimentos.

Desta forma, os resultados obtidos por Andrade *et al* [34, 35, 103] constituem fortes argumentos que relacionam a região de transição entre os regimes de escoamento a efeitos puramente inerciais. Tais efeitos tornam-se relevantes quando a velocidade de

escoamento é aumentada, mas ainda no regime de escoamento laminar.

5.3 A percolação por invasão com caminhadas de N passos

Embora seja um problema bastante antigo, a investigação do escoamento de fluidos através de meios porosos constitui-se um problema de grande importância no contexto atual, sendo relacionado com uma variedade de situações reais, que incluem as áreas de engenharia e ciência de solos [15, 60, 104, 105].

Do ponto de vista teórico, o escoamento dos fluidos tem sido estudado usando tanto os modelos contínuos (envolvendo a solução numérica das equações de Navier-Stokes), quanto os modelos discretos (baseados, principalmente, na teoria da percolação). Atualmente, os efeitos de forças inerciais tem sido investigado somente usando modelos contínuos. Nenhuma tentativa foi feita, até agora, de introduzir efeitos inerciais nos modelos discretos de escoamento. Por se tratar de um modelo dinâmico, a percolação por invasão [17] constitui-se no melhor candidato para esta tentativa. No entanto, esbarramos na dificuldade de definir e controlar a velocidade do escoamento, bem como a queda de pressão no sistema. Por isso, introduzimos um parâmetro N que, pode estar relacionado com um aumento da velocidade de escoamento e trabalhamos com um modelo de percolação por invasão modificado, baseado neste parâmetro.

Na simulação do modelo de percolação por invasão ordinária, os sítios são ocupados um a um, sempre escolhendo o sítio do perímetro do aglomerado com o menor número aleatório associado. Desta forma, a ocupação de *um sítio* corresponde a *uma etapa do processo de invasão* do aglomerado. Depois que um sítio é invadido, o perímetro do aglomerado deve ser atualizado. Do ponto de vista do escoamento de fluidos, isto significa que, uma vez que um poro é ocupado, o fluido estanca instantaneamente e o próximo poro a ser ocupado pode estar em qualquer parte do perímetro. Esta situação retrata

o que acontece em sistemas experimentais onde o fluido invasor é injetado lentamente e a velocidade de avanço do fluido através do meio poroso é baixa. Neste caso, as forças viscosas e inerciais podem ser desprezadas e o sistema evolui sob o domínio das forças capilares. Verifica-se, então, que a velocidade de escoamento do fluido relaciona-se com a queda de pressão no sistema através da lei da Darcy.

Sabemos que, com o aumento da velocidade de escoamento, as forças inerciais passam a ter papel relevante e desvios em relação à lei de Darcy são observados. A maneira mais natural de definir a velocidade do fluido na simulação de um modelo de invasão, é tomar o número de poros invadidos por etapa da invasão. Porém, na invasão ordinária, uma etapa do processo consiste da escolha do sítio a ser invadido, a invasão deste *único* sítio e a atualização do perímetro total do aglomerado. Com isso, a velocidade definida acima é fixa em *um poro por etapa de invasão.* Uma forma possível de aumentar a velocidade de escoamento é permitir que vários poros possam ser invadidos na mesma etapa. Para isso, introduzimos o conceito de inércia para o fluido da seguinte forma. Consideramos que depois da ruptura do perímetro, o fluido não estanque instantaneamente, mas exiba uma tendência em seguir adiante, invadindo $N-1$ poros adicionais na região onde a ruptura tenha ocorrido. Este procedimento deve aumentar a velocidade de escoamento do fluido. O controle da velocidade pode ser feito controlando o número de poros invadidos em cada etapa do processo de invasão. Daqui por diante, chamaremos este modelo de *Percolação por Invasão com Caminhadas de N passos*[37].

Em nosso modelo de percolação por invasão com caminhadas de N-passos, uma etapa de invasão t é composta pelo seguinte procedimento. Primeiro, o menor sítio disponível no perímetro do aglomerado é invadido (como na invasão ordinária). Em seguida, partindo *deste sítio*, $N-1$ sítios são sequencialmente ocupados. Em cada etapa desta ocupação suplementar a regra de capilaridade deve ser obedecida, ou seja, entre os poucos vizinhos que circundam o atual sítio invadido somente aquele com o menor tama-

nho é escolhido. Na linguagem de escoamento de fluidos, as $N-1$ invasões suplementares corresponderia à inércia do fluido, isto é, depois da ruptura do perímetro, o fluido não pode parar instantaneamente - ele segue seguir adiante, "caminhando" cerca de $N-1$ poros antes de parar completamente. Existem situações nas quais a ocupação de exatamente N sítios não é possível devido a restrições impostas pelo próprio aglomerado: o sítio escolhido para ocupação pode ser completamente envolvido por sítios já ocupados e os N passos não podem ser completados. Com isso, um número menor de sítios é invadido. De qualquer forma, a próxima coisa a fazer é determinar o novo perímetro do aglomerado. Isto completa o que chamamos de *uma etapa da invasão*. Este processo é repetido até que o aglomerado atinja as fronteiras da rede.

A seguir, descrevemos nosso modelo com detalhes, apresentado os resultados das simulações numéricas feitas para diferentes tipos de rede. Caracterizamos o modelo como função do número de sítios invadidos em cada etapa de crescimento. As principais grandezas investigadas são as dimensões fractais dos aglomerados, os números de coordenação médios destes aglomerados e o perfil de aceitação como função dos números aleatórios associados aos sítios.

5.4 Simulações numéricas

Nossas simulações numéricas mostraram que o modelo de percolação por invasão com caminhadas de N-passos exibe diferentes comportamentos em duas e três dimensões. Em sistemas bidimensionais e para grandes valores de N, as caminhadas podem ser facilmente bloqueadas por regiões previamente invadidas. Com isso, na maioria das vezes, as grandes caminhadas ficam incompletas e o número de passos realmente executados é sempre menor ou igual ao parâmetro externo N. Isto faz com que o número médio de passos executados seja muito diferente de N. Desta forma, dispomos de um parâmetro externo fixo totalmente desconectado do que realmente acontece no sistema. Para tentar

superar esta dificuldade e fazer o parâmetro externo N coincidir com o número médio de passos realmente executados, implementamos um mecanismo de compensação. Quando o número de passos executados em uma caminhada for menor que N, digamos N_1, um débito $D = N - N_1$ é estabelecido. Na próxima etapa da invasão, permitimos que o sistema pague este débito, executando um número de passos maior do que N, ou seja, $N + D$ passos. Assim, algumas vezes o número de passos poderá ser maior do que N, outras vezes, menor, de tal forma que o número médio de passos flutue em torno de N.

Na prática, adotamos o seguinte procedimento. Seja $n(t)$ o número de passos *realmente executados* na etapa t e $n_e(t)$ o número de passos *esperado*. Definimos o débito como $D(t) = n_e(t) - n(t)$, com $n_e(t = 1) = N$. O mecanismo de compensação permite que este débito possa ser pago na próxima etapa, através da invasão de um número de sítios maior do que N. Assim, na etapa de crescimento $t+1$, o número de passos esperado será $n_e(t + 1) = N + D(t)$. Nosso algoritmo de compensação assemelha-se ao mecanismos introduzidos por Andrade *et al* [106] no modelo de crescimento auto organizado de polímeros ramificados e no modelo de percolação auto organizada proposto por Alencar *et al* [107]. Na Fig.5.3, mostramos as quantidades $n(t)$ e $n_e(t)$ para um experimento realizado para $N = 15$, onde vemos o mecanismo de compensação em funcionamento. Do caráter flutuante de $n(t)$, concluímos que o parâmetro relevante a ser medido é o número médio de passos executados $\langle n \rangle$. Se, em um total de S experimentos, o número de etapas de invasão do $i - ésimo$ experimento for T_i, então

$$\langle n \rangle = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^{S} \frac{\sum_{t=1}^{T_i} n_i(t)}{T_i} \tag{5.7}$$

onde $n_i(t)$ é o número de passos realmente executados na etapa t da invasão do $i - ésimo$ experimento.

No entanto, em sistemas bidimensionais, nem mesmo o mecanismo de compen-

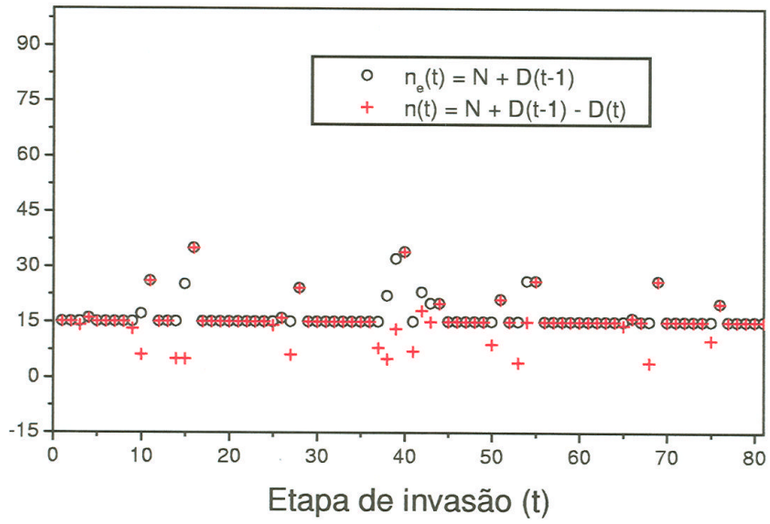

Figura 5.3: Número de passo realmente executados $n(t)$ e o número de passos esperado como função das etapas de invasão t.

sação é suficiente para manter $\langle n \rangle = N$ para qualquer valor de N. Caminhadas muito longas sempre acabam frustradas em um *cul de sac*. Para medir quão frequentes são estes bloqueios, calculamos a fração de caminhadas que são bloqueadas para cada valor de N fixo

$$f_b = \frac{1}{S}\sum_{i=1}^{S} \frac{\textit{número de aprisionamentos no } i - \textit{ésimo ensaio}}{T_i}. \tag{5.8}$$

Avaliamos a fração de bloqueios f_b para as redes bidimensionais quadrada e *honeycomb*, efetuando simulações para diversos tamanhos de sistema. Em particular, utilizamos redes de tamanhos $L = 201, 401, 801$ e 1601, variando o número de ensaios entre $400 - 2000$ experimentos. Isto foi o suficiente para reduzir o desvio estatístico na massa do aglomerado a cerca de 1%. Nossos experimentos, que sempre tiveram início no centro da rede, eram interrompidos quando o aglomerado do fluido invasor atingia uma das fronteiras da rede.

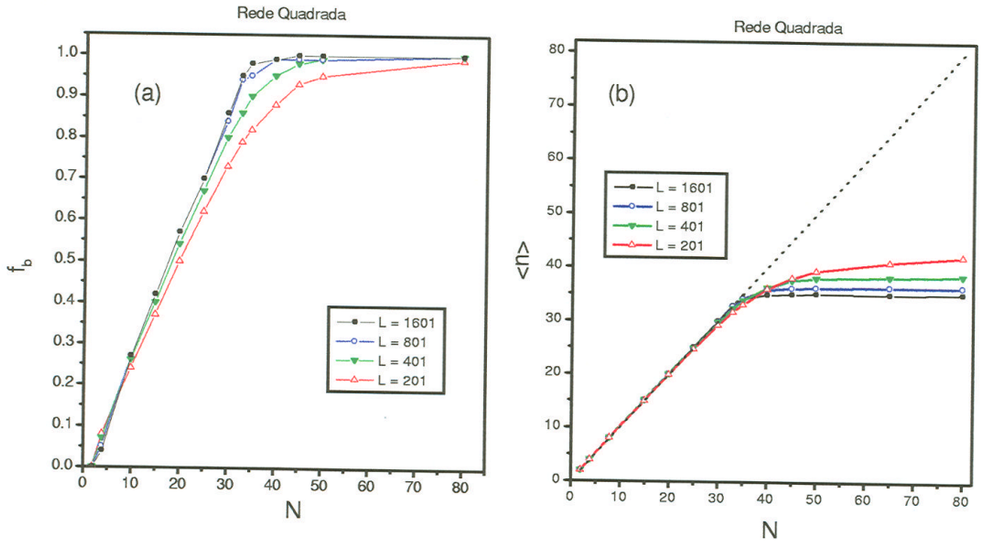

Figura 5.4: (a) Fração de caminhadas bloqueadas f_b como função de N para a rede quadrada. (b) Número médio de passos contra N. A linha pontilhada é a reta $\langle n \rangle = N$.

A Fig.5.4(a) mostra que, mesmo para pequenos valores de N a presença de bloqueios é facilmente observada. Além disso, f_b aumenta com N e atinge 100% para $N \simeq 35$ (para a rede quadrada). Nossa análise em redes de tamanho finito sugere que, quando o limite termodinâmico for atingido, a curva extrapola para uma cúspide. Como todas as caminhadas maiores do que 35 passos são bloqueadas, o número médio de passos executados fica limitado superiormente. A Fig.5.4(b) mostra a dependência do número médio de passos $\langle n \rangle$ com N. Estas quantidades coincidem somente até um certo limite superior $N_{máx} = 35$. Isto significa que, não importa o quanto N é maior do que 35, o sistema comporta-se como se N fosse 35. Concluímos então que, na rede quadrada, o modelo pode ser bem definido apenas no intervalo $1 \leq N \leq 35$ onde $\langle n \rangle$ e N coincidem.

O fenômeno do aprisionamento também ocorre na rede *honeycomb*. No entanto, sua frequência é maior do que aquela observada para a rede quadrada. Como consequência,

o limite superior para N é dado por $N_{máx} = 30$.

Individualmente, cada uma das caminhadas de nosso modelo assemelha-se às caminhadas auto exclusivas dos modelos de crescimento cinético. Sabemos, através de estudos de caminhadas cinéticas auto-exclusivas, que o fenômeno de aprisionamento é muito comum nos sistemas bidimensionais, mas irrelevante em dimensões maiores[108, 109]. Nosso modelo guarda esta característica. Simulamos o modelo de invasão em N-passos em redes cúbicas simples de tamanhos $L = 51, 75, 101, 151$ e 201 (200 a 400 experimentos). Neste caso o fenômeno do aprisionamento é muito raro e $\langle n \rangle$ coincide com N em todo o intervalo $1 \leq N \leq 100$. A investigação da ocorrência de bloqueios para valores de N maiores do que 100 requer a utilização de rede maiores.

5.4.1 A estrutura dos aglomerados

Os aglomerados da percolação por invasão são objetos fractais: suas massas médias $\langle M \rangle$ escalam com seus raios de giração Rg com um expoente não-inteiro. Este expoente é a dimensão fractal D_F ($\langle M \rangle \sim Rg^{D_F}$).

Nosso modelo também gera aglomerados cuja estrutura é fractal. Investigamos nossos aglomerados de invasão estudando uma possível dependência das suas dimensões fractais com o valor de $\langle n \rangle$. Uma amostra da qualidade de nossos dados pode ser vista na Fig.5.5. Os resultados obtidos para as dimensões fractais são mostrados na Tab.5.1 para diversos valores de $\langle n \rangle$. Para a rede quadrada, somente uma pequena dependência pode ser detectada. Por outro lado, para a rede cúbica simples, D_F varia de 2.52 a 2.77 mostrando que a universalidade é quebrada. Desta forma, nossos resultados sugerem fortemente que a percolação por invasão ordinária e a percolação por invasão com caminhadas de N passos pertencem a diferentes classes de universalidade.

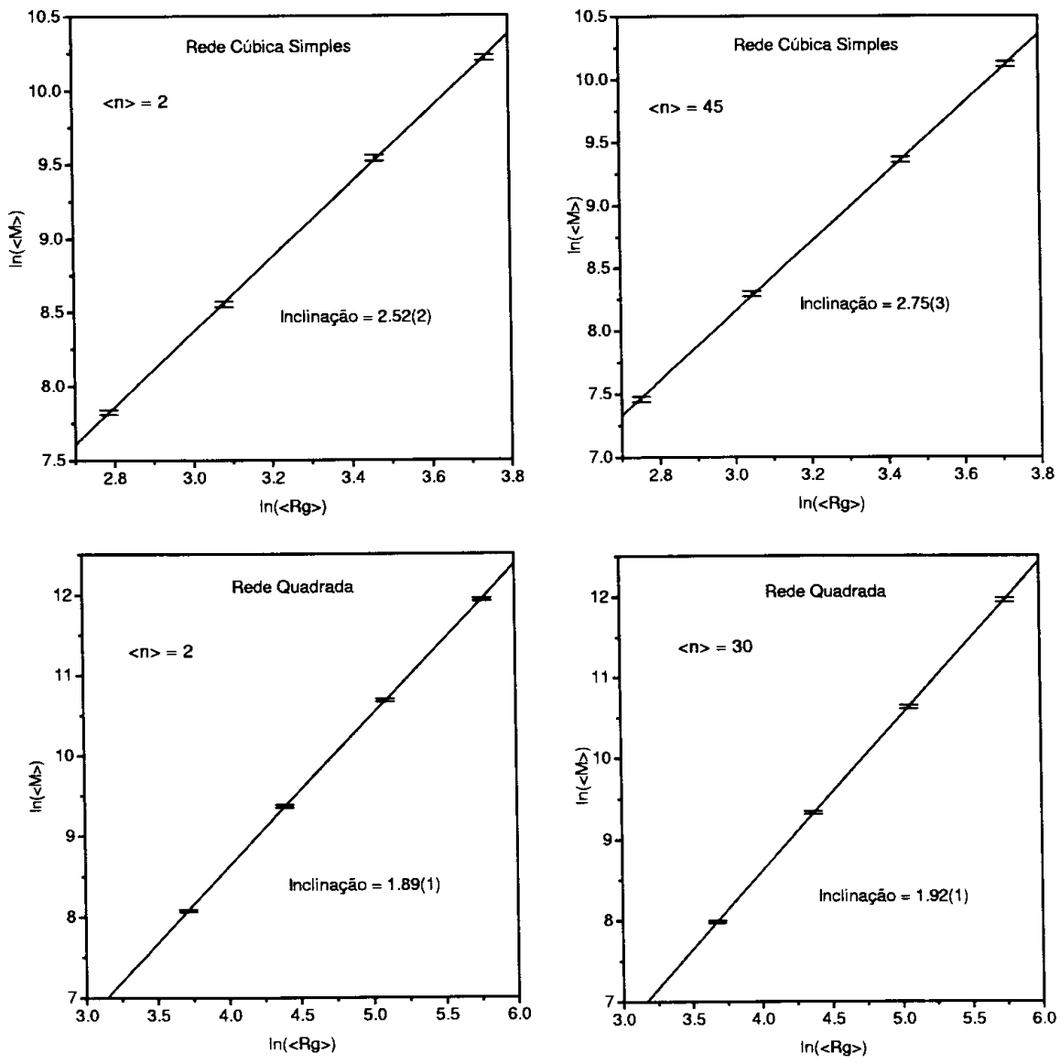

Figura 5.5: Dependência da massa média dos aglomerados com o raio de giração para as redes cúbica simples e quadrada.

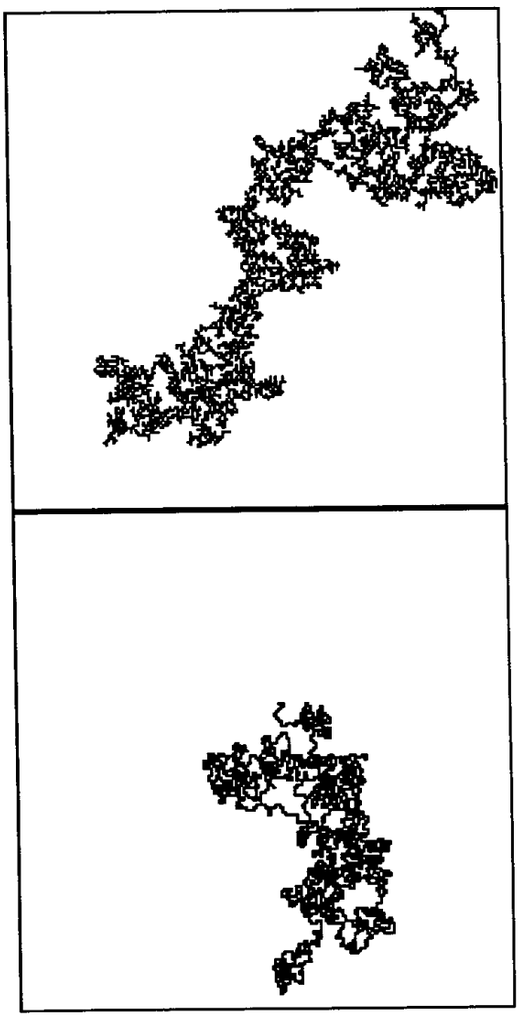

Figura 5.6: Aglomerados típicos do modelo de percolação por invasão com caminhadas de N passos construídos na rede quadrada $L = 201$ para $\langle n \rangle = 1$ (figura superior) e $\langle n \rangle = 30$.

Rede Quadrada			Rede Cúbica Simples		
N	D_F	$\langle z \rangle$	N	D_F	$\langle z \rangle$
1	1.89(1)	2.51(1)	1	2.52(2)	2.31(1)
2	1.89(1)	2.65(1)	2	2.52(2)	2.42(1)
4	1.90(1)	2.84(1)	8	2.58(2)	2.51(1)
15	1.91(1)	2.89(1)	15	2.64(3)	2.52(1)
30	1.92(1)	2.89(1)	30	2.69(3)	2.52(1)
35	1.92(1)	2.89(1)	45	2.75(3)	2.53(1)
40	1.92(1)	2.89(1)	60	2.77(3)	2.53(1)
60	1.92(1)	2.89(1)	100	2.77(3)	2.53(1)

Tabela 5.1: Dimensões fractais e números de coordenação médios para as redes quadrada e cúbica simples para diversos valores de $\langle n \rangle$.

O número de coordenação médio $\langle z \rangle$ dos aglomerados corresponde ao número médio de primeiros vizinhos ocupados de algum sítio ocupado. Os valores estimados para esta quantidade são mostrados na Tab.5.1. Podemos ver que o número de coordenação médio aumenta com $\langle n \rangle$ mas estabiliza-se rapidamente. Esta mudança dos números de coordenação indica que nossos aglomerados são morfologicamente diferentes daqueles obtidos na invasão ordinária. Estas diferenças podem ser facilmente vistas analisando-se as figuras dos aglomerados para diferentes valores de $\langle n \rangle$. Na Fig.5.6 dois aglomerados podem ser vistos. No caso $\langle n \rangle = 1$, temos um aglomerado típico do modelo de percolação por invasão. No entanto, com o aumento de $\langle n \rangle$, ocorre a formação de regiões de alta densidade constituindo pequenos glóbulos que se distribuem por todo o aglomerado, como pode ser visto em aglomerado típico correspondente ao valor $\langle n \rangle = 30$.

5.4.2 O perfil de aceitação

Além da estrutura dos aglomerados, avaliamos também o perfil de aceitação ($a(r)$) do modelo de percolação por invasão com caminhadas. Como já mencionamos anteriormente, $a(r)$ foi definido por Wilkinson e Willemsen [17] como a razão entre o número de números aleatórios no intervalo $[r, r + dr]$ incorporados ao aglomerado e o número de números aleatórios neste intervalo que se tornaram disponíveis para ocupação.

Na Fig.5.7(a) mostramos como o efeito de tamanho finito afeta $a(r)$. O perfil de aceitação desenvolve um platô, que no limite termodinâmico, se estende de $r = 0$ até um certo valor r_c. Isto indica que todos os números aleatórios menores que r_c que se tornaram disponíveis foram incorporados ao aglomerado. Entretanto, acima de r_c uma cauda aparece e permanece finita mesmo no limite termodinâmico. O aparecimento desta cauda está relacionada com o conceito de inércia introduzido no modelo. Assim que ocorre a ruptura do perímetro do aglomerado (partindo de um poro pequeno escolhido através de uma pesquisa sobre todo o perímetro), poros adicionais são sequencialmente invadidos. Embora a invasão adicional obedeça ao critério de capilaridade, o poro a ser invadido é escolhido entre aqueles que circundam o atual poro invadido. Muitas vezes, apenas poros grandes estão disponíveis nesta região e algum deles deve ser obrigatoriamente ocupado. Assim, a própria dinâmica do modelo obriga que alguns poros grandes sejam invadidos, refletindo diretamente na estimativa do perfil de aceitação. Obviamente, a largura do platô depende do número médio de passos executados, como pode ser visto na Fig.5.7(b), que mostra o perfil de aceitação para diferentes valores de $\langle n \rangle$ calculados para invasão de uma rede quadrada. O valor do limiar r_c claramente depende no número médio de passos, isto é, $r_c(\langle n \rangle)$. Para $\langle n \rangle = 1$, o perfil de aceitação tende a uma função degrau com $r_c(\langle n \rangle = 1) \simeq 0.59$ e o comportamento da invasão ordinária é recuperado. Porém, à medida em que $\langle n \rangle$ aumenta, r_c diminui até atingir um valor de saturação $r_c(\langle n \rangle = 35) \simeq 0.24$.

O caso tridimensional, calculado na rede cúbica simples, apresenta um comportamento semelhante, com o perfil de aceitação apresentando uma descontinuidade em pontos r_c dependentes de $\langle n \rangle$. A diferença, aqui, é a inexistência de um valor de saturação para r_c, uma vez que as caminhadas não sofrem bloqueios.

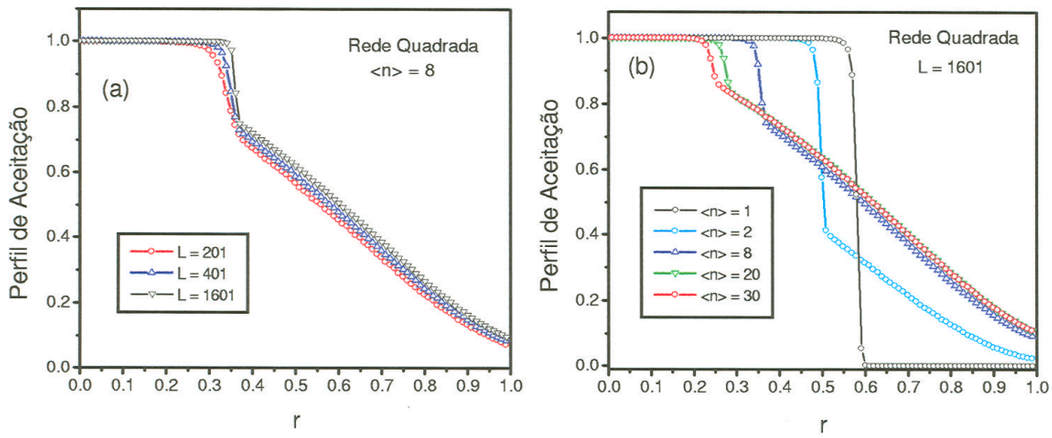

Figura 5.7: Dependência do perfil de aceitação com o número aleatório r variando (a) o tamanho da rede e (b) o número médio de passos.

5.5 Conclusões

Introduzimos, pela primeira vez, um modelo discreto para o escoamento de fluidos através de meios poroso que tenta levar em conta a influência da inércia do fluido invasor. Em nosso modelo de percolação por invasão, a inércia é responsável pela invasão de poros adicionais após a ruptura do perímetro, sendo que a magnitude da inércia é determinada pela quantidade N de poros invadidos em cada etapa da invasão.

Em duas dimensões, nossas simulações mostram um fenômeno de bloqueio, que impõe um limite superior para N. Com isso, o modelo pode ser definido apenas em um intervalo $1 \leq N \leq N_{máx}$. Nos sistemas tridimensionais tal fenômeno não é observado. Na região onde o modelo é bem definido, nossos resultados mostram que a percolação por invasão com caminhadas de N passos pertence a uma nova classe de universalidade, uma vez que as dimensões fractais dos aglomerados resultantes dependem de N.

Esperamos que nosso modelo possa contribuir para o melhor entendimento do

escoamento de fluidos através de meios porosos. Com ele, efeito do aumento da velocidade de escoamento, proporcionado pela introdução do parâmetro N, pode ser melhor investigado e, com isso, também o efeito das forças inercias. No entanto, para checar o modelo diretamente, temos que encontrar melhores formas de definir velocidades médias de escoamento e quedas de pressão válidas no contexto dos modelos de invasão.

Capítulo 6

Percolação e percolação por invasão na presença de impurezas móveis

6.1 Efeitos coletivos durante processos de solidificação na presença de impurezas

A solidificação de uma substância a partir de sua fase fundida, como por exemplo, a formação de gelo a partir da água pura, é um fenômeno bastante estudado [110]. Estes processos são controlados, essencialmente, por efeitos de difusão de calor e dependem basicamente da taxa de transmissão do calor latente de solidificação entre a interface sólida e a sua vizinhança líquida. Em geral, a morfologia da fase sólida resultante depende de uma série de fatores, como por exemplo, das variáveis que influenciam na energia livre na interface sólido/líquido (particularmente, a temperatura), das propriedades de equilíbrio mecânico da superfície, das superfícies externas, etc [110]. Além disso, a presença de impurezas dissolvidas na fase líquida pode afetar consideravelmente a dinâmica do processo de solidificação levando à formação de fases sólidas morfologicamente diferentes daquelas obtidas a partir de uma fase líquida pura [49]. Observa-se experimentalmente que, em baixas concentrações, as impurezas não são incorporadas à fase sólida crescente, ficando acumuladas na interface sólido/líquido enquanto a fase sólida avança através da fase líquida. Com isso, a interpretação física correta dos processos de solidificação de materiais impuros deve levar em conta não só transporte de calor, mas também tem que considerar

o efeito da difusão de matéria.

O estudo da solidificação de materiais impuros tem grande importância principalmente no campo de crescimento de cristais e ligas binárias [110]. Em muitos destes processos, uma fase líquida LQ reage com com um material sólido A para formar uma segunda fase sólida B. Normalmente, esta reação pode ser descrita como $LQ + A \rightarrow B$. Reações deste tipo, onde os reagentes são totalmente consumidos, são chamadas peritéticas. Porém, muitos compostos binários solidificam-se segundo uma reação eutética, onde um dos reagentes não é totalmente consumido. Frequentemente os restos da fase não consumida agem como impurezas presentes na reação.

Como exemplo, podemos citar o compósito supercondutor $YBa_2CuO_{7-\delta}$, conhecido como fase 123 [42]. Começamos com uma amostra líquida de $BaCu - O$, contendo partículas de Y_2BaCuO_5 (chamada de fase 211), a altas temperaturas. Quando o sistema é resfriado para uma temperatura menor do que 1040^oC, ocorre a recombinação

$$LQ + 211 \rightarrow 123. \tag{6.1}$$

Izumi *et al* [41] mostraram que esta reação é controlada pela difusão de átomos de Y presentes na fase líquida em direção à interface sólida e que a taxa de dissolução das partículas 211 é menor do que taxa de crescimento da interface sólida 123. Como resultado, a reação é incompleta, uma vez que nem todas as partículas da fase 211 são consumidas durante a formação do composto 123, ficando, então, aprisionadas na fase sólida.

A formação de uma amostra sólida a partir de um líquido impuro foi investigado pela primeira vez por Uhlman, Chalmers e Jackson em 1964 [39]. Estes autores estavam interessados no efeito da interação entre as impurezas e a interface sólida que avança através da fase líquida. Para isso, investigaram processos de solidificação de uma variedade

de materiais previamente contaminados com diferentes tipos de impurezas. Além de água, foram utilizados como meios solidificantes os compostos orgânicos timol, salol e ortoterfenil. As impurezas escolhidas foram partículas de grafite, óxido de magnésio, óxido de ferro, Zinco, Níquel, Silício e iodeto de prata, com tamanhos variando de 1 *micron* a centenas de *microns*.

O experimento consiste em congelar uma célula fina (300 a $500\mu m$) contendo o meio solidificante misturado às impurezas a partir de uma de suas bordas e acompanhar o movimento da interface sólida enquanto ela avança em direção à borda oposta. A velocidade de solidificação, controlada essencialmente pelo gradiente de temperatura entre a borda congelada a interface da amostra, é medida usando um microscópio graduado e um cronômetro.

UCJ observaram que, para velocidades de solidificação muito baixas, as impurezas de praticamente todos os materiais são rejeitadas pelo sólido, isto é, não são incorporadas à fase sólida sendo empurradas pela interface através da fase líquida. Muitas vezes as impurezas podem viajar por distâncias milhares de vezes maiores do que seus diâmetros, chegando a deslocar-se por comprimentos da ordem de centímetros. Durante este deslocamento, as impurezas eventualmente entram em contato com outras partículas e, com o passar do tempo, as impurezas acumuladas na região da interface formam agregados compostos por várias partículas. Observa-se que, para cada valor da velocidade de avanço da fase sólida, existe um tamanho máximo de agregados rejeitados. Acima deste tamanho máximo, as impurezas ficam aprisionadas no interior da fase sólida. Quando a velocidade de crescimento é aumentada, excedendo um certo valor crítico v_c, as impurezas não são empurradas e ficando aprisionadas pela interface. Em geral, o valor de v_c depende de vários parâmetros como a natureza do meio solidificante, o tamanho das partículas, viscosidade da fase líquida, etc.

A explicação apresentada por UCJ para tais observações baseia-se na hipótese

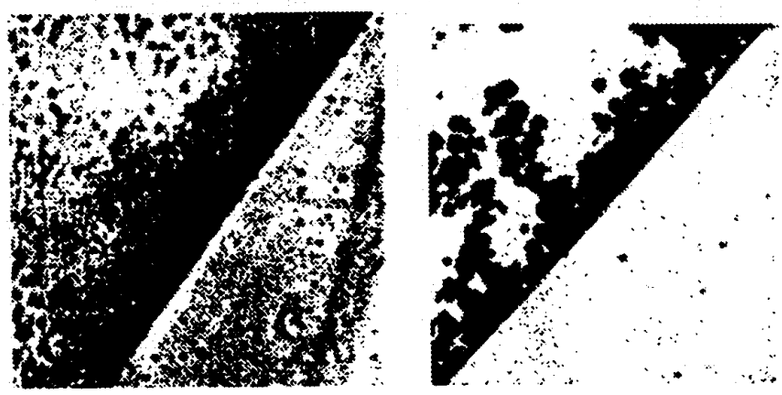

Figura 6.1: Interfaces sólido-líquido no experimento de UCJ. As impurezas acumulam-se na interface, sendo empurradas por ela. Na figura à direita, o meio solidificante era *salol* e as impurezas, MnO, euquanto à esquerda, temos a solidificação de *timol* na presença de partículas de Zn.

de que existe uma interação repulsiva de curto alcance entre o sólido e as impurezas. Segundo a teoria de UCJ, se a energia livre da superfície sólido-impureza for maior do que a soma das energias das superfícies líquido-impureza e líquido-sólido, as partículas são empurradas pela interface. No entanto, as impurezas podem ficar aprisionadas caso não haja uma rápida difusão de líquido para as regiões liberadas pelas impurezas deslocadas. As conclusões obtidas através desta teoria concordam com os resultados observados experimentalmente.

A teoria de UCJ têm sido usada com sucesso na descrição de uma variedade de sistemas que envolvem interação entre partículas e interfaces. Na verdade, muitos dos problemas atuais relacionados como comportamento de células biológicas na interface gelo/água [43], aprisionamento de bolhas durante processos de solidificação [111],

crescimento de compósitos supercondutores [42] e crescimento de cristais [110] têm sido investigados sob a luz do mecanismo de repulsão proposto por UCJ [39].

6.1.1 O modelo epidêmico dinâmico

A formação de aglomerados de partículas é um fenômeno muito comum na natureza. Com o intuito de compreender a dinâmica da formação de aglomerados em meios desordenados, bem como as suas formas morfológicas, vários modelos foram prospostos. Entre eles estão a percolação por invasão[17], *DLA*[18] e os chamados modelos epidêmicos [56, 57, 49]. A estrutura dos aglomerados resultantes destes modelos tem sido descrita com sucesso usando conceitos fractais e multifractais [49], com resultados compatíveis com várias observações experimentais. No entanto, estes modelos sempre consideram o meio desordenado estático, isto é, inerte e "congelado", que não muda durante todo o tempo de observação do fenômeno.

Recentemente Vandewalle e Auloos [38, 112] propuseram um modelo no qual um aglomerado interage com o seu meio enquanto é construído. Este modelo, chamado de modelo epidêmico dinâmico, descreve uma interface sólida S que avança através de um líquido LQ e que interage com impurezas I que podem se mover. Este modelo assume que o movimento das impurezas deve-se a uma interação repulsiva de curto alcance entre a interface sólida e as impurezas, descrita pelo mecanismo de UCJ.

O modelo epidêmico dinâmico pode ser definido em uma rede da seguinte forma. Cada sítio da rede pode assumir um dos três possíveis estados: líquido (LQ), sólido (S), ou impureza (I). Inicialmente, uma fração x_I de sítios, escolhidos aleatoriamente, recebem impurezas. Cada um dos sítios restantes recebe a fase líquida. A formação da fase sólida começa colocando uma unidade sólida S no centro da rede. Em cada etapa do processo um sítio líquido em contato com a fase sólida é aleatoriamente escolhido e transformado em sólido. O mecanismo de repulsão de UCJ entre a interface e as partículas de impureza é

introduzido da seguinte forma: quando a interface sólida atinge um sítio primeiro vizinho a uma impureza, fazendo, assim, contato com ela, a partícula move-se para algum de seus sítios primeiros vizinhos líquidos, de forma que este contato com a interface seja reduzido. Caso o contato com a interface não possa ser reduzido, a posição da partícula permanece inalterada e ela pode ficar aprisionada no aglomerado sólido. Na prática o aprisionamento de impurezas pode ocorrer em duas situações: quando ela não puder reduzir seu número de primeiros vizinhos sólidos movimentando-se apenas um sítio, ou quando o movimento for obstruído pela presença de outras impurezas. Se não houverem sítios líquidos disponíveis na interface, o processo de solidificação é interrompido, caso contrário, a fase sólida avança até que o aglomerado atinja as fronteiras da rede.

O mecanismo de formação dos aglomerados sólidos adotado no modelo epidêmico dinâmico possui alguns casos particulares conhecidos. Quando o mecanismo de repulsão é desprezado (caso em que as impurezas são fixas em suas posições), temos o modelo de crescimento de aglomerados proposto por Leath [56], e que é frequentemente chamado de modelo epidêmico. Por outro lado, na ausência de impurezas ($x_I = 0$), recuperamos o modelo de Eden [58], no qual o aglomerado cresce indefinidamente, gerando uma estrutura compacta.

Apresentamos abaixo alguns resultados da simulação do modelo epidêmico dinâmico definido em uma rede quadrada. Para investigar a existência de transições de fase, estimamos a fração de aglomerados que atingem a fronteira da rede ($F(p)$). A Fig.6.2 mostra como $F(p)$ varia com a concentração de impurezas x_I para diferentes tamanhos de rede L. No limite termodinâmico o sistema apresenta uma transição de fases no ponto $x_I^c \approx 0.56$. Para $x_I < x_I^c$ existem aglomerados que se estendem por toda a rede, enquanto que, para $x_I > x_I^c$ os aglomerados são sempre finitos. O valor crítico para a transição de fases é substancialmente maior do que aquele observado para o modelo epidêmico ordinário. Este valor pode ser interpretado como o resultando do fenômemo de

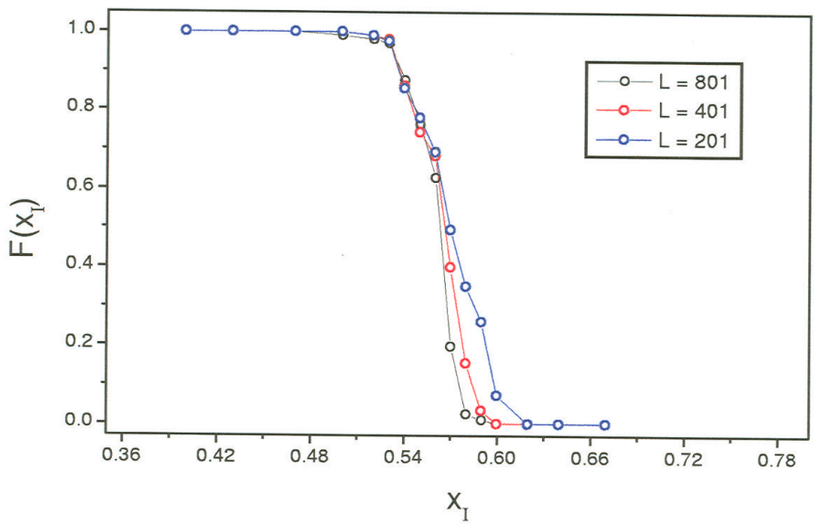

Figura 6.2: Fração de aglomerados percolantes contra concentração impurezas para diferentes tamanhos de rede.

acumulação das impurezas na interface sólida. Isto contrasta com a transição que ocorre no modelo epidêmico ordinário, cuja origem é a impossibilidade de encontrar um caminho infinito através da distribuição de impurezas estáticas. No modelo epidêmico dinâmico, a transição de fase acontece pois a interface não consegue empurrar os agregados de impurezas por longas distâncias. O caso tridimensional, definido em uma rede cúbica simples, foi estudado por Ivanova[113]. O limiar para a transição de fase, $x_I^c \approx 0.80$, também é maior do que o valor observado para o modelo de impurezas estáticas ($x_I^e \approx 0.69$).

Uma análise dos aglomerados críticos, construídos na rede quadrada, mostra que o valor de sua dimensão fractal coincide com o valor observado para os aglomerados da

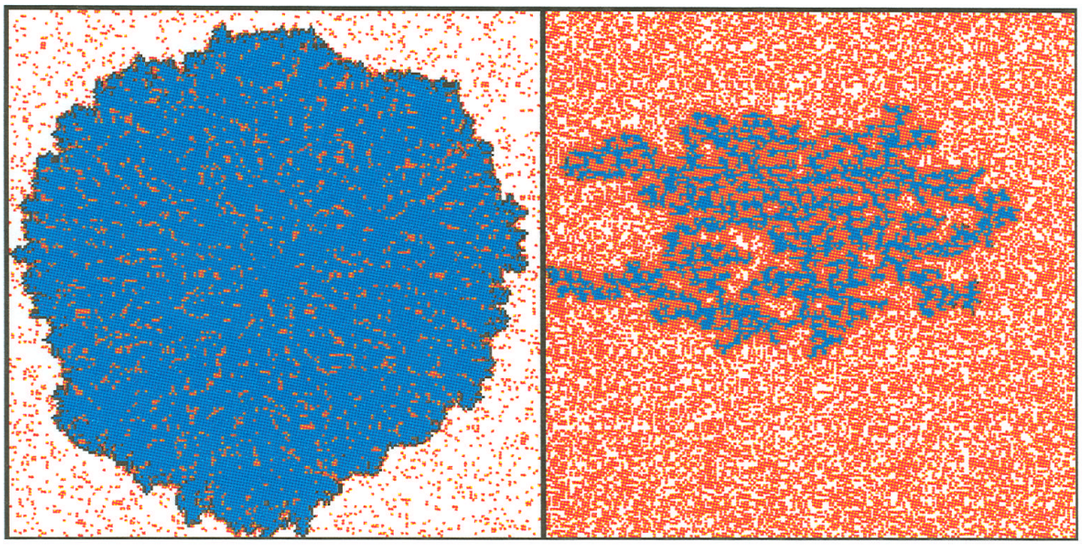

Figura 6.3: Aglomerados típicos do modelo epidêmico dinâmico para $x_I = 0.20$ (esquerda) e para o caso crítico $x_I = x_I^c = 0.56$ (direita).

percolação ordinária crítica ($D_F = 1.89$). Além disso, o comprimento de correlação do modelo, na região crítica, diverge segundo a lei de potências $\xi \propto |x_I - x_I^c|^{-\nu}$ com $\nu \simeq 1.33$. Estes expoentes colocam o modelo epidêmico dinâmico na mesma classe de universalidade que a percolação ordinária.

O modelo epidêmico dinâmico tem se mostrado muito útil na compreensão de efeitos coletivos envolvendo crescimento de cristais na presença de impurezas móveis não reativas e na segregação de fases durante a formação compósitos supercondutores [40]. Além disso, o modelo pode ser estendido para tratar a polidispersividade das impurezas e transporte de sais através meios porosos penetrados por fluidos [114, 115, 116]. Estes modelos apresentam sempre os mesmos ingredientes básicos: uma interface que avança interagindo repulsivamente com impurezas móveis. Neste trabalho, acrescentamos um outro ingrediente: uma fase líquida inerte, isto é, que não interage nem com as impurezas

e nem com o aglomerado sólido. O nosso modelo será discutido abaixo, usando a linguagem de movimento de interface sólido/líquido.

6.2 O modelo de percolação dinâmica

6.2.1 Apresentação do modelo

Neste trabalho, estendemos o modelo epidêmico dinâmico para tratar um processo de solidificação de dois fluidos imiscíveis A e B na presença de impurezas móveis. Na prática, nosso modelo considera dois tipos de impurezas. As impurezas que denotaremos com sendo do tipo I interagem repulsivamente com a interface sólida que avança através da fase líquida. Esta interação repulsiva entre as impurezas I e a interface é do mesmo tipo que a observada por UCJ [39]. Assim, as impurezas do tipo I podem mover-se através da fase líquida composta pelos fluidos A e B. O segundo tipo de impurezas é a própria fase líquida B, considerada não solidificante, e que não interage nem com a interface sólida e nem com a impurezas do tipo I. Uma fase sólida é formada através da solidificação do fluido do tipo A. A dinâmica escolhida para a simulação deste modelo, que chamamos de percolação dinâmica, é baseada nas regras do modelo de Eden [58].

A percolação dinâmica pode ser definida em uma rede da seguinte forma. Inicialmente, uma fração x_I de sítios, escolhidos aleatoriamente, é ocupada por impurezas I. Os sítios restantes são então ocupados por um fluido tipo A, com uma concentração x_A, ou do tipo B, com concentração x_B, satisfazendo o vínculo $x_I + x_A + x_B = 1$. Assumimos que os fluidos A e B são imiscíveis e que o sistema está em contato com um banho térmico o qual é mantido à temperatura de solidificação do fluido A (mais alta). O processo de solidificação começa colocando, no centro da rede, uma unidade sólida do tipo A. Em cada etapa do processo, um sítio líquido do tipo A, em contato com a fase sólida, é aleatoriamente escolhido e convertido em sólido. Eventualmente, pode não haver sítios líquidos do tipo A disponíveis na interface, e então o processo de formação do aglomerado sólido

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

é interrompido. O mecanismo de repulsão de UCJ entre a interface sólida e as impurezas móveis permanece inalterado, ou seja, quando uma impureza entra em contato com a interface sólida, ela move-se para algum de seus sítios primeiros vizinhos que contém a fase líquida (A ou B), se isto reduzir seu número de contatos com a interface. Caso o número de contatos não possa ser reduzido, a impureza permanece no mesmo lugar.

Além de empurrar as impurezas, nosso modelo possui também características peculiares aos problemas de percolação: dependendo das concentrações de impurezas e de fluido do tipo A, um aglomerado de fase sólida A pode ou não percolar a rede. Esperamos, então, que o sistema exiba uma curva crítica no plano $x_I + x_A + x_B = 1$ do espaço de concentrações. Na ausência de impurezas ($x_I = 0$), nosso modelo recupera o modelo crescimento de Leath, onde o fluido A (B) corresponde aos sítios ocupados (bloqueados). Um outro caso particular surge quando $x_B = 0$ onde o modelo epidêmico dinâmico é recuperado.

6.2.2 Resultados da simulação

Simulamos o processo de percolação dinâmica em redes quadradas de tamanhos $L = 201, 401, 801$ e 1601. Para cada concentração de impurezas (x_I), fizemos um número de ensaios suficientes para que o desvio estatístico da massa dos aglomerados fosse reduzido a menos de 1%.

A Fig.6.4 mostra como a fração de aglomerados que conectam as bordas opostas do sistema, $F(x_A)$, depende da concentração de fluido A para $x_I = 0.45$ e vários tamanhos de rede. Este gráfico sugere que, no limite termodinâmico, existe uma transição de fases em um ponto x_A^c, isto é, existe um ponto crítico que marca uma transição de fase contínua entre dois regimes: um onde existe um aglomerado sólido infinito e outro onde o aglomerado sólido sempre permanece finito.

Os pontos críticos, para cada valor fixo de concentração de impurezas, podem ser

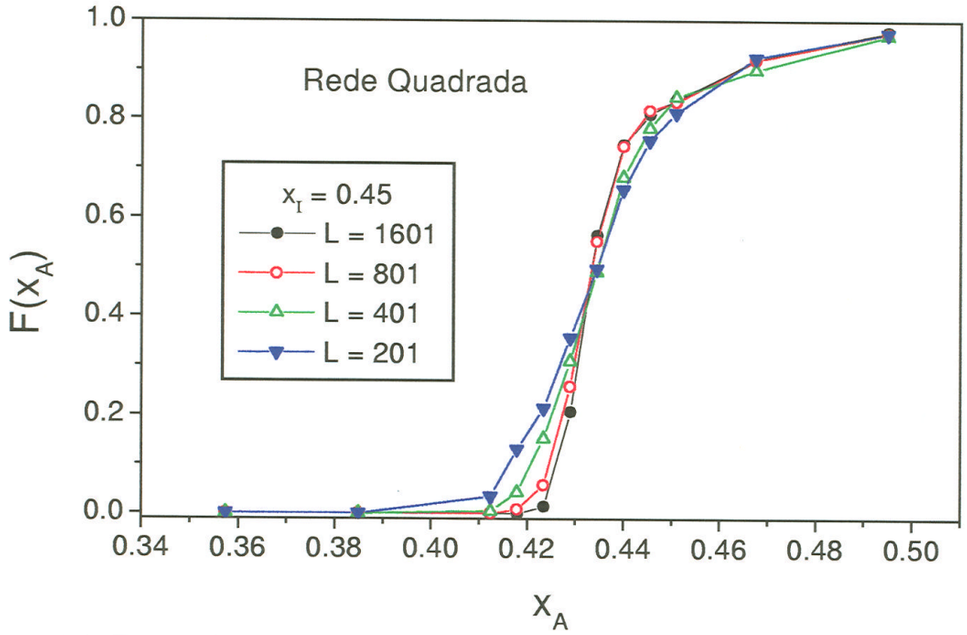

Figura 6.4: Fração de aglomerados que percolam o sistema contra a concentração de fluido A para diferentes tamanhos de rede.

determinados através da curva $F(x_A)$ versus x_A. Para redes muito grandes, o ponto de inflexão desta curva aproxima-se do ponto crítico x_A^c. Através de uma análise cuidadosa deste ponto de inflexão, determinamos os pontos críticos do sistema para várias concentrações de impurezas. Isto permite construir o diagrama de fases do modelo no espaço das concentrações. Este diagrama pode ser visto na Fig.6.5. Existe uma curva crítica no plano $x_I + x_A + x_B = 1$ separando uma fase percolante de uma não percolante. Como era esperado, quando $x_I = 0$ o limiar da percolação ordinária é obtido. Além disso, recuperamos o modelo original de Ausloos e Vandewalle para $x_B = 0$.

Conhecendo os pontos críticos podemos caracterizar o modelo avaliando seus expoentes críticos. O expoente crítico β pode ser determinado através da análise do comportamento crítico da densidade média dos aglomerados. Esta densidade pode ser descrita como a razão entre o número de sítios que compõe o aglomerado e o número total

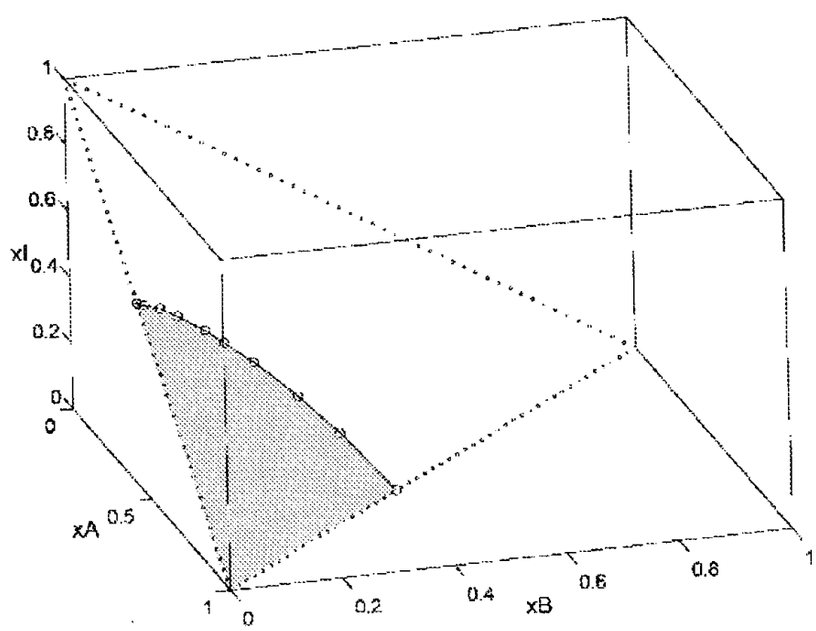

Figura 6.5: Diagrama de fases no espaço $x_A + x_B + x_I$ para o modelo de percolação dinâmica. A área hachurada do plano corresponde à fase percolante.

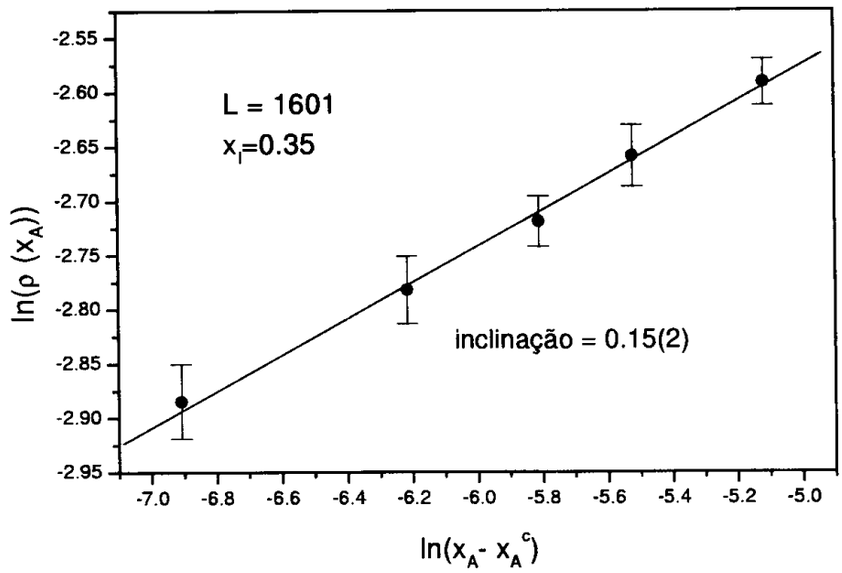

Figura 6.6: Logaritmo da densidade média dos aglomerados percolantes na região crítica. A inclinação da reta fornece uma estimativa do expoente β.

de sítios da rede. Na região crítica esta densidade obedece uma equação do tipo [5]

$$\rho(x_A) \sim |x_A - x_A^c|^\beta. \tag{6.2}$$

Assim, através de simulações para diferentes valores de x_A, próximos do ponto crítico x_A^c, podemos determinar o expoente β associado ao comportamento crítico da densidade do aglomerado percolante [5, 38]. Estimamos o valor de β e encontramos $\beta \simeq 0.16$, o qual está próximo do valor exato do expoente crítico associado ao parâmetro de ordem da percolação ordinária ($\beta = \frac{5}{36} \simeq 0.14$).

Um outro expoente crítico pode ser avaliado de forma independente, analisando os aglomerados críticos resultantes do processo de solidificação. Uma maneira simples de caracterizar estes aglomerados é avaliando sua dimensão fractal. Para isso, investigamos como a massa média dos aglomerados sólidos escala com seu raio de giração médio. Uma

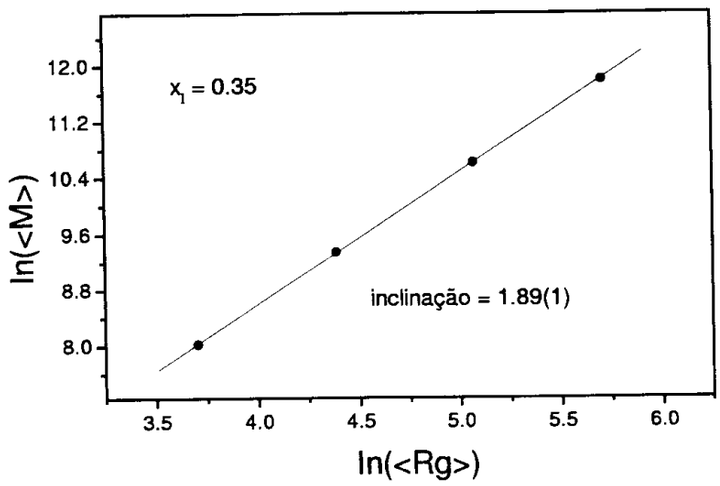

Figura 6.7: Gráfico logarítmico da massa média do aglomerado contra seu raio de giração para um valor fixo de x_I.

amostra da qualidade dos nossos dados pode ser vista na Fig.6.7, onde as barras de erro são menores do que os símbolos usados para os valores centrais. A inclinação da reta $ln\langle M\rangle$ contra $ln(Rg)$ estima o valor da dimensão fractal. Nossos valores estimados de D_F, para várias concentrações de impurezas, são únicos e iguais a 1.89, coincidindo com o valores calculados para o modelo de percolação ordinária. Na região percolante a dimensão fractal dos aglomerados é $D_F = 2.0$, como no modelo de Eden.

Os resultados obtidos para as dimensões fractais dos aglomerados percolantes críticos, junto com o expoente β sugerem que o modelo de percolação dinâmica está na mesma classe de universalidade que a percolação ordinária.

6.3 O modelo de percolação por invasão dinâmica

O escoamento de fluidos através de meios porosos é um fenômeno importante no estudo de solos, processos de infiltração e transporte de sais em materiais porosos como

o cimento [40, 116], e por isso, tem sido objeto de vários estudos, tanto teóricos quanto experimentais. Muitos experimentos mostraram que o transporte de fluidos através de meios porosos exibe comportamento fractal. Isto colaborou para a criação de vários modelos teóricos, tal como o *DLA* [18] que descreve o escoamento no regime viscoso, e a percolação por invasão, aplicada quando as forças capilares são as dominantes. Embora o processo de escoamento de fluidos seja hoje muito estudado, pouca atenção tem sido dada à capacidade do fluido em transportar partículas através do meio poroso.

Implementamos o modelo de percolação por invasão em um meio no qual uma certa fração dos poros (x_I) está ocupada por impurezas que podem mover-se para outros poros, empurradas pelo fluido invasor. Neste caso, consideramos que uma certa fração dos poros são ocupados por partículas ou impurezas. Não vamos considerar a polidispersividade das impurezas (distribuição de tamanhos), assumindo que as impurezas são menores do que o menor poro. Assim, quando estas partículas são tocadas pelo fluido invasor, podem mover-se para poros de qualquer tamanho. Porém, um poro não pode ser ocupado, simultâneamente, por mais de uma impureza. O tamanho dos poros, por sua vez, corresponde a números aleatórios $r \in [0, 1]$ sorteados de uma distribuição uniforme.

A percolação por invasão simula a injeção de um fluido a partir do centro da rede. A cada unidade de tempo (etapa da invasão) o menor poro disponível no perímetro do aglomerado de fluido invasor é selecionado e invadido. Este procedimento mimetiza o que acontece nas situações experimentais nas quais o fluxo de fluido injetado é muito baixo. Porém, quando o fluido encontra uma impureza, uma interação repulsiva do tipo descrita por UCJ aparece. Desta forma, as partículas de impurezas são empurradas para poros vazios.

Nossos resultados mostram que, ao contrário do que acontece na percolação por invasão ordinária, onde sempre existe um aglomerado que percola o sistema, o deslocamento de fluido invasor pode ser completamente bloqueado pela presença de impurezas.

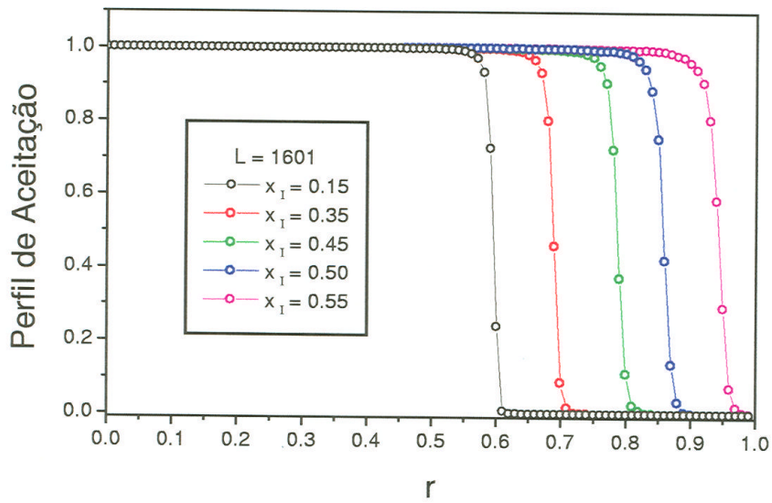

Figura 6.8: Perfis de aceitação do modelo de percolação por invasão dinâmica para diferentes concentrações de impurezas.

Para avaliar este efeito, estimamos a fração de aglomerados invasores que percolam a rede. Avaliando esta grandeza como função da concentração de impurezas, encontramos um valor crítico (x_I^c) acima do qual todos os aglomerados de fluido invasor são bloqueados. Este valor coincide com aquele obtido por Ausloos e Vandewalle para o modelo epidêmico dinâmico definido na rede quadrada ($x_I^c \simeq 0.56$). Porém, nosso modelo difere do modelo original no seguinte aspecto: nossos aglomerados são objetos fractais em todo o intervalo $x_I < x_I^c$ e não somente no ponto crítico x_I^c. Nossas estimativas mostram que, neste intervalo, as dimensões fractais dos aglomerados são iguais e coincidentes com aquelas da percolação ordinária. Neste caso, a formação de aglomerados de impurezas, semelheantes aos aglomerados de fluido aprisionado formados na percolação por invasão com aprisionamento, não é suficiente para mudar a classe de universalidade do sistema.

Além das dimensões fractais, avaliamos também os perfis de aceitação da percolação por invasão dinâmica ($a(r)$). Assim como na invasão ordinária, no limite de uma

rede infinita $a(r)$ tende a uma função degrau. No entanto, o ponto de descontinuidade mostra uma forte dependência com a concentração de impurezas, como pode ser visto na Fig.6.8. Este modelo não possui nenhum parâmetro de ajuste, mas o sistema evolui naturalmente para um ponto crítico, sugerindo que o modelo pertença à classe dos sistemas críticos auto-organizados.

O perfil de aceitação pode ser utilizado na determinação do expoente de *gap* ($\Delta = \beta + \gamma$) de nosso modelo. Para isto, utilizamos o método introduzido por Wilkinson e Barsony [70] para a determinação do expoente Δ para a percolação por invasão ordinária.

Na percolação por invasão sem aprisionamento, a quantidade

$$p = \int_0^1 a(r)dr \tag{6.3}$$

é a fração de ocupação total e corresponde à probabilidade de ocupação dos sítios. No limite termodinâmico, $a(r)$ é uma função degrau com um ponto de descontinuidade em $p = p_c$, onde p_c é a probabilidade de ocupação crítica. Em sistemas finitos, as quantidades

$$B_1 = \int_{r_c}^1 [1 - a(r)]dr \tag{6.4}$$

e

$$B_2 = \int_0^{r_c} a(r)dr \tag{6.5}$$

representam os desvios do perfil de aceitação em relação à função degrau e relacionam-se diretamente à quantidade $|p - p_c|$ [70]. Aplicando argumentos da teoria de escala para tamanhos finitos, pode ser demonstrado que

$$B_1 = B_2 \simeq (\langle M \rangle)^{\frac{-1}{\Delta}} \tag{6.6}$$

onde $\langle M \rangle$ é a massa média dos aglomerados.

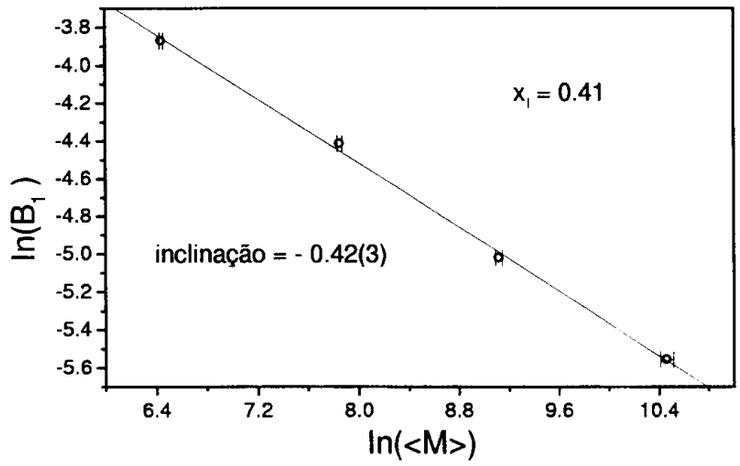

Figura 6.9: Gráfico logarítmico de B_1 como função da massa dos aglomerados para uma concentração de impurezas fixa. A inclinação da reta estima o expoente Δ.

Avaliamos estas quantidades para diversas concentrações de impurezas. Uma curva típica é mostrada na Fig.6.9, para $x_I = 0.41$. A inclinação da reta aproxima o valor do expoente Δ.

Para $x_I = 0.20, 0.35, 0.41$ encontramos, respectivamente, os expoentes $\frac{1}{\Delta} \simeq 0.43(3)$, $\frac{1}{\Delta} \simeq 0.41(3)$ e $\frac{1}{\Delta} \simeq 0.42(3)$. Estes valores concordam com os valores exatos do modelo de percolação ordinária ($\frac{1}{\Delta} = \frac{36}{91} \simeq 0.40$).

Juntamente com os valores das dimensões fractais, estes resultados colocam a percolação por invasão dinâmica na mesma classe de universalidade que a percolação ordinária.

6.4 Conclusões

A introdução dos modelos epidêmicos dinâmicos abre a perspectiva da realização de uma série de estudos teóricos em uma ampla classe de sistemas interagentes. Por

exemplo, nosso modelo de percolação por invasão dinâmica considera que as impurezas são sempre menores do que o menor poro do sistema, podendo assim, ocupar qualquer um deles. No entanto, a alternativa mais natural seria atribuir diferentes tamanhos às impurezas, impedindo-as de ocupar poros menores do que elas. Esta é uma observação importante que deve ser levada em conta nas simulações futuras. Possivelmente, o aglomerado de fluido invasor manterá sua estrutura inalterada, mas o processo de deslocamento das impurezas poderá ser bastante diferente.

Recentemente, Vandewalle *et al* [40] simularam um processo de infiltração de fluidos em meios porosos baseado no modelo epidêmico dinâmico. Esta simulação, foi feita em uma série de ciclos: para cada concentração de impurezas, um conjunto de n invasões consecutivas foram efetuadas. Segundo os autores, isto corresponde a submeter o sistema a diferentes condições de tempo [40, 116, 117]. Suas investigações são relevantes para o estudo do transporte de sais pela água escoando em meios porosos. No entanto, o processo de infiltração utilizado é baseado no modelo de Eden [58]. Hoje, sabemos que a percolação por invasão é um dos melhores modelos para representar processos de escoamento de fluidos através de meios porosos. Seria, assim, interessante simular ciclos consecutivos de infiltração na presença de impurezas, mas utilizando um modelo mais apropriado, a percolação por invasão. Além disso, a polidispersividade das partículas de impurezas também deve ser incluída no intuito de aproximar o modelo das condições reais. Acreditamos que processos de invasão na presença de impurezas de diferentes tamanhos possa levar à segregação das partículas, uma vez que as impurezas menores podem ser transportadas por distâncias maiores.

Este modelo também pode ser aplicado a meios porosos *não consolidados*[15], cuja morfologia pode mudar devido a reações químicas ou interações físico-químicas entre a superfície dos poros e o fluido e/ou as impurezas. Tais sistemas têm recebido pouca atenção, mas também possuem importantes aplicações, especialmente na área de engenharia.

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

Capítulo 7

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho, apresentamos uma caracterização completa dos aglomerados gerados pelo modelo de percolação por invasão múltipla. Investigamos suas duas principais variantes, o modelo perimétrico e o otimizado. Identificamos as subestruturas dos aglomerados utilizando o método das queimadas introduzido por Herrmann *et al* [86]. Os expoentes críticos relacionados a estas estruturas foram também estimados. Para o modelo perimétrico, analisamos a dependência destes expoentes com o parâmetro F que controla o fluxo de fluido através do perímetro do aglomerado. Já o modelo otimizado foi investigado como função de seu parâmetro de controle D. Os aglomerados gerados pelo modelo otimizado apresentam duas propriedades interessantes. A massa de seu esqueleto escala perfeitamente com seu raio de giração durante todo o crescimento, e não somente no limite assintótico (lembre-se que a obediência à escala foi imposta somente para o aglomerado). Além disso, os pontos de estragulamento desaparecem, indicando que o aglomerado possui grande conectividade. Como as flutuações da massa dos aglomerados e esqueletos são pequenas, o modelo otimizado pode ser muito útil no tratamento estatístico de sistemas de spins diluídos. Os modelos de invasão múltipla pertencem a classes de universalidade diferentes daquela da percolação por invasão ordinária.

Introduzimos um modelo de percolação para escoamento de fluidos através de meios porosos que permite a ocupação de poros de qualquer tamanho, sendo que os poros

menores são preferencialmente escolhidos. O ingrediente principal de nosso algoritmo computacional é o método de crescimento de Leath acrescido de uma nova regra de ocupação. Esta regra foi escolhida de tal forma que a probabilidade de ocupação diminua à medida em que o tamanho do poro aumenta, de acordo com as observações experimentais. Nossa regra de ocupação tem forma matemática arbitrária, mas que leva em conta conceitos físicos ligados à pressão capilar e a pressão externa responsável pela injeção de fluido invasor. A introdução de um parâmetro adicional na probabilidade de ocupação não muda a classe de universalidade do sistema, que é a mesma da percolação ordinária. Os limiares de percolação do nosso modelo dependem não somente do tipo de rede e da dimensão do sistema, mas também do parâmetro w introduzido na distribuição de probabilidade de ocupação. Demonstramos que estas probabilidades de ocupação críticas não obedecem a conjectura de Galam e Mauger.

Nosso algoritmo ainda guarda uma forte semelhança com o método de Leath: os sítios consultados e não ocupados são permanentemente bloqueados. Porém, em situações reais, os poros grandes permanecem na periferia do aglomerado, estando ainda disponíveis para futura ocupação. Seria interessante acrescentar este fato pode ao modelo, permitindo que um mesmo sítio possa ser consultado mais de uma vez. Isto pode ser feito introduzindo um "tempo de vida" aos poros consultados e não ocupados que estão no perímetro do aglomerado. Além disso, o modelo pode também ser estendido para sistemas com correlações de sítios e ligações, onde tanto os poros (sítios) quanto as ligações (gargalos) exercem papel importante.

Um outro aspecto de nosso trabalho é a introdução de um modelo discreto para o escoamento de fluidos através de meios porosos que considera a influência da inércia do fluido invasor. Neste modelo, a invasão de poros adicionais após a ruptura do perímetro está relacionada à inércia do fluido. A magnitude do termo inercial é determinada pela quantidade N de poros invadidos em cada etapa de invasão.

Em duas dimensões, nossas simulações mostram um fenômeno de bloqueio que impõe um limite superior para N. Com isso, o modelo pode ser definido apenas em um intervalo $1 \leq N \leq N_{máx}$. Nos sistemas tridimensionais tal fenômeno não é observado. Na região onde o modelo é bem definido, nossos resultados mostram que a percolação por invasão com caminhadas de N passos pertence a uma nova classe de universalidade, sendo que as dimensões fractais dos aglomerados resultados dependem de N. Desta forma, a universalidade é quebrada pela introdução do parâmetro N.

Acreditamos que nosso modelo possa contribuir para o entendimento do escoamento de fluidos através de meios porosos. O aumento da velocidade de escoamento, proporcionado pela introdução do parâmetro N, pode ser melhor investigado e, com isso, também o efeito das forças inercias. Entretanto, uma comparação do nosso modelo de percolação por invasão com caminhadas com os dados experimentais passa pela necessidade de definir melhor as velocidades médias de escoamento e quedas de pressão válidas no contexto dos modelos de invasão.

Além disso, generalizamos o modelo epidêmico dinâmico introduzido por Vandewalle e Ausloos incluindo, além das impurezas móveis, uma fase inerte. Assim, nosso sistema é composto por três "fases": uma fase solidificante A, uma fase inerte B e impurezas I móveis. Estas fases estão relacionadas através do vínculo $x_A + x_B + x_I = 1$. O modelo de percolação dinâmica apresenta um diagrama de fase no espaço das concentrações. Resultados das simulações mostram que nosso modelo está na mesma classe de universalidade que a percolação ordinária.

Implementamos, também, um modelo de percolação por invasão na presença de impurezas móveis. Ao contrário do modelo epidêmico dinâmico, onde o aglomerado resultante é fractal somente no ponto crítico, na percolação por invasão dinâmica os aglomerados são fractais em todo o intervalo $[0, x_I^c]$, onde é possível encontrar aglomerados que percolam o sistema.

Os modelo epidêmico dinâmico tem encontrado terreno fértil do ponto de vista de aplicações, principalmente na área de crescimento de cristais. Porém, existe ainda um um grande número de sistemas interagentes que podem ser investigados sob a luz deste modelo. Um exemplo é nosso modelo de percolação por invasão dinâmica. Ele considera que as impurezas são sempre menores do que o menor poro do sistema, podendo assim, ocupar qualquer um deles. No entanto, seria mais realístico atribuir diferentes tamanhos às impurezas, impedindo-as de ocupar poros menores do que elas. Esta é uma observação importante que devemos considerar em nossos estudos futuros.

A percolação por invasão é um dos melhores modelos para descrever processos de escoamento de fluidos através de meios porosos. Seria, assim, interessante simular ciclos consecutivos de invasão na presença de impurezas, o que pode modelar o comportamento de um material exposto a diferentes condições climáticas. Já tem sido apontado, através de simulação de processos de invasão [117], que materiais porosos expostos a ciclos de exposição a umidade, congelamento e aquecimento podem sofrer deterioração [116]. No entanto o efeito da dissolução de sais nestes materiais ainda não foi considerada. Além disso, a polidispersividade das partículas de impurezas dissolvidas também devem ser incluída no intuito de aproximar o modelo das condições reais. Alguns processos de invasão na presença de impurezas de diferentes tamanhos podem, inclusive, levar à segregação das partículas, uma vez que as impurezas menores podem ser transportadas por distâncias maiores.

Uma outra vertente que deve ser explorada é a aplicação destes modelos a meios porosos *não consolidados*, cuja morfologia pode mudar devido a reações químicas ou interações físico-químicas entre a superfície dos poros e o fluido e/ou as impurezas. Tais sistemas têm recebido pouca atenção, mas também possuem importantes aplicações [15, 116]

Em resumo, estudamos nessa tese 6 novas formas de percolação, utilizando técnicas de simulação de Monte Carlo. Obtivemos resultados interessantes e uma pletora de

possíveis aplicações, mostrando que a teoria da percolação continua sendo uma das mais perenes áreas da mecânica estatística.

Apêndice A

Outros tipos de percolação

A.1 Percolação direcionada

A percolação direcionada é uma variante anisotrópica da percolação ordinária. Nela, atribuímos direções às ligações, formando assim uma rede orientada. O objetivo deste modelo é descrever a conectividade em meios desordenados que possuem direcionamento, por exemplo, o escoamento de fluidos através meios porosos sujeitos ao campo gravitacional [5]. Em um meio poroso, os poros podem estar conectados por ligações abertas com uma certa probabilidade p. Dependendo desta probabilidade, o fluido pode ou não percolar através do sistema. Devido ao campo gravitacional, o deslocamento do fluido é estritamente unidirecional, isto é, o fluido só pode se deslocar "para baixo".

Se atribuirmos uma direção ao "tempo", podemos interpretar a percolação direcionada como um processo dinâmico e relacionar o crescimento de um aglomerado com o espalhamento de um certo agente. Em um certo instante t podemos interpretar os sítios visitados ou ativos como partículas A e os inativos como vazios $\emptyset$. No tempo $t+1$ as partículas podem se auto-destruir ou produzir uma "partícula-filha". Além disso, se duas partículas atingem o mesmo sítio elas podem coagular, formando uma só partícula. Portanto, a percolação direcionada pode ser relacionada com processos de reação-difusão do tipo

difusão: $\emptyset + A \rightarrow A + \emptyset$

auto-destruição: $A \rightarrow \emptyset$

produção de "filhos": $A \rightarrow A + A$

coagulação: $A + A \rightarrow A$.

Dependendo da razão entre as taxas de auto-destruição e produção de filhos, o processo pode permanecer ativo ou atingir um estado do qual ele não pode escapar, chamado de estado absorvedor do sistema. A transição entre a extinção e a sobrevivência do processo é contínua, com a densidade de sítios ativos anulando-se no ponto crítico segundo uma lei de potências

$$\rho_{ati} \sim |p - p_c|^{\beta}, \tag{A.1}$$

onde β é o expoente crítico associado ao parâmetro de ordem ρ_{ati}.

Ao invés de apenas um comprimento de correlação, a percolação direcionada apresenta dois comprimentos característicos $\xi_{\perp}$ e $\xi_{||}$ que, na região crítica, estão relacionados à fração de ocupação por

$$\xi_{\perp} \sim |p - p_c|^{\nu_{\perp}} \quad e \quad \xi_{||} \sim |p - p_c|^{\nu_{||}}. \tag{A.2}$$

Estes comprimentos de correlação são avaliados nas direções perpendicular ($\xi_{\perp}$) e paralela ($\xi_{||}$) à direção "preferencial".

A classe de universalidade da percolação direcionada pode ser totalmente especificada pelos expoentes independentes β, $\xi_{\perp}$ e $\xi_{||}$. Embora a solução exata já esteja disponível, os expoentes críticos da percolação direcionada ainda não foram confirmados experimentalmente. Porém, simulações numéricas têm demonstrado que uma variedade de sistemas pertencem à classe de universalidade da percolação direcionada [13, 118].

Entre as várias aplicações do modelo de percolação direcionada, podemos citar

o estudo da evolução de galáxias[16], propagação de epidemias [51], redes de resistores-diodos[50], transições de colapso em polímeros ramificados [119], reações catalíticas [13, 118] e o crescimento de interfaces [13, 118].

A.2 Percolação *bootstrap*

A percolação *bootstrap* [52, 12] tem sido empregada no estudo de sistemas em que um grupo de átomos, muito embora magnéticos, são coagidos pelos átomos vizinhos a não se manisfestarem magneticamente. Na percolação *bootstrap*, os sítios de uma rede são, inicialmente, ocupados com uma probabilidade p, assim como na percolação ordinária. Porém, uma nova regra é adicionada: o sistema é revisitado sucessivamente, removendo os sítios que tiverem menos do que um número m de primeiros vizinhos ocupados. Este processo de remoção continua até que mais nenhum sítio possa ser eliminado. O limiar de percolação p_c^b é definido como a concentração acima da qual existe um aglomerado infinito no sistema. Observa-se que este limiar é sempre maior ou igual do que o limiar da percolação ordinária. Variando o parâmetro m, temos a seguinte situação: para $m = 0$, recuperamos a percolação ordinária; para $m = 1$, os sítios isolados são removidos, enquanto que, para $m = 2$ os *dangling ends* são excluidos. Nestes casos, os limiares p_c^b coincidem com aqueles da percolação ordinária.

A percolação *bootstrap* com $m = 0$ e $m = 1$ pertence à mesma classe de universalidade que a percolação ordinária. O caso $m = 2$ ainda é objeto de vários estudos, não havendo, ainda, conhecimento preciso de sua classe de universalidade. Já para os casos $m \geq 3$ os limiares de percolação e os expoentes dependem fortemente do tipo de rede. Para valores de m suficientemente grandes, são observadas transições de fase de primeira ordem [12].

A.3 Percolação elástica

A percolação ordinária é um modelo que descreve a transmissão de quantidades escalares (como massa de fluidos, carga elétrica, etc...) através de sistemas desordenados. Entretanto, quando as quantidades transmitidas são grandezas vetorias (como, por exemplo, tensões mecânicas), a situação pode ser muito diferente. Originalmente, foi sugerido que o comportamento crítico do módulo elástico Y de um sistema desordenado fosse equivalente ao comportamento de sua condutividade elétrica Σ [120]. Porém, Feng e Sen [9] mostraram que, na região $p \simeq p_c$, os comportamentos de Y e Σ nem sempre são iguais.

Em geral, dependendo do tipo de força aplicada ao sistema, o problema de elasticidade pode ser dividido em duas grandes categorias. Observa-se que, quando forças angulares são importantes, um único caminho conectado garante que o módulo elástico seja não nulo, e desta forma, pode-se dizer que a rede é rígida. Neste caso, a geometria do esqueleto elástico é exatamente a mesma do que a do esqueleto elástico dos aglomerados da percolação ordinária. Com isso, a percolação de elasticidade, sob a ação de forças angulares, pode ser investigada através de seu modelo geométrico equivalente, a percolação ordinária. No entanto, se o sistema estiver sob a ação de forças centrais, a existência de um aglomerado percolante crítico não garante a sua rigidez, ou seja, o sistema não pode suportar tensões, uma vez que seu módulo elástico é nulo. Feng e Sen [9] mostraram que o limiar de rigidez p_r é substancialmente maior do que o limiar de conectividade p_c. Esta percolação elástica em sistemas sob a ação de forças centrais é conhecida na literatura como *percolação de rigidez*, e pode levar ao surgimento de novas classes de universalidade [10, 121, 122]. A percolação de rigidez também possui um modelo geométrico equivalente. Porém, determinar se uma estrutura é rígida, usando somente vínculos geométricos, é uma tarefa bastante difícil. Do ponto de vista estritamente geométrico, um aglomerado rígido

é um conjunto de sítios conectados por ligações que satisfazem a condição de Maxwell $f - c - 3 \leq 0$ [121], onde f é o número de graus de liberdade e c é o número de vínculos (não necessariamente o número de ligações). Por exemplo, vista sob a luz da condição de Maxwell, a estrutura bidimensinal rígida mais simples é o arranjo triangular.

A.4 Percolação quântica

Em um sólido perfeitamente cristalino, os estados eletrônicos são descritos por estados de Block que se estendem por todo o sistema. A introdução de impurezas pode produzir estados ligados cujas funções de onda caem exponencialmente com a distância da impureza. Teorias adequadas para sistemas desordenados são disponíveis apenas para sistemas fracamente desordenados (pouco diluídos), enquanto a maioria dos materiais de interesse são, geralmente, fortemente desordenados. Em 1958, Anderson [123] lançou a idéia de que, na presença de desordem suficientemente forte, todos os estados podem ficar localizados. Desde então, tem se tornado claro que a desordem pode levar a comportamentos eletrônicos inteiramente novos, dependendo da dimensão do sistema e da grau de desordem introduzido.

O modelo de percolação quântica [11] trabalha com os problemas de transmitância quântica em aglomerados percolantes. Nestes sistemas, alguns conceitos quânticos devem ser incorporados para explicar comportamentos anômalos nas propriedades de transporte de elétrons, fótons e até de fônons, através de meios desordenados. Considerando o caso específico do transporte eletrônico, a diferença essencial entre os problemas de transporte clássico e quântico, é a localização das funções de ondas eletrônicas.

A existência de um aglomerado percolante condutor é uma condição necessária e suficiente para que uma entidade clássica percole através do sistema. No entanto, a conectividade clássica não garante a transmitância quântica. Isto ocorre pois um aglomerado percolante é formado por um esqueleto e por pingentes. O transporte clássico

ocorre somente através do esqueleto e os pingentes podem ser descartados. Porém, no transporte quântico, a situação é diferente, uma vez que tanto o esqueleto quanto os pingentes participam do processo. Quando uma "partícula" quântica, transportada através do aglomerado encontra um sítio ou ligação não acessível (impureza), o que frequentemente ocorre nos pingentes, ela é espalhada. As ondas espalhadas são coerentes no tempo e podem produzir interferência construtiva e as "partículas" podem manter-se localizadas. Como consequência deste retro-espalhamento, o coeficiente de difusão clássico anula-se. Desta forma, mesmo em aglomerados percolantes pode não haver difusão, devido à localização dos estados eletrônicos. O limiar da percolação quântica é então definido como a probabilidade de ocupação acima da qual o coeficiente de difusão seja diferente de zero. Observa-se que este limiar, p_q, ocorre para valores maiores do que seu correspondente clássico ($p_q > p_c$).

A.5 Percolação com aprisionamento

A percolação com aprisionamento é uma variante da percolação ordinária, introduzida por Dias e Wilkinson [124], motivada pelo deslocamento e aprisionamento de fluidos em meios porosos. Ela segue as mesmas idéias da percolação por invasão com aprisionamento, porém, com uma dinâmica de ocupação diferente. Assim como na percolação por invasão com aprisionamento, na percolação com aprisionamento podemos identificar duas fases diferentes, as quais chamamos de fase defensora e invasora. A fase defensora, que no início do processo ocupa todo o sistema, é gradualmente deslocada por uma fase invasora. Enquanto a fase invasora avança através do meio, a fase defensora é deslocada de regiões que pertencem ao aglomerado percolante defensor, isto é, aglomerados defensores isolados não podem ser deslocados. O limiar de aprisionamento p_t ocorre quando a fase defensora não puder ser deslocada. Em geral, isto acontece quando a fase defensora está confinada a ilhas finitas, no interior da fase invasora.

Em uma simulação, atribuímos números aleatórios r, uniformemente distribuidos no intervalo $[0,1]$ a todos os sítios de uma rede. Consideramos que todos os sítios estejam ocupados com a fase defensora ($p = 1$). Em cada passo do processo de invasão, a fração de ocupação é diminuida por uma quantidade dp. Assim, todos os sítios com $r \in [p, p + dp]$, e que pertencem ao aglomerado percolante defensor, são simultaneamente ocupados. Eventualmente, aglomerados defensores isolados podem ser formados, ficando, então, aprisionados pela fase invasora. O processo de diminuição da fração de ocupação p continua até que o aglomerado defensor percolante deixe de existir. Quando isto acontece, o limiar de aprisionamento p_t é atingido. As estimativas mais recentes [125], feitas para sistemas em duas e três dimensões, apontam para um valor $p_t < 1 - p_c$. No entanto, os expoentes críticos são os mesmos que os da percolação ordinária, indicando que os modelos pertencem à mesma classe de universalidade.

Bibliografia

[1] S.R. Broadbent e J. M. Hammersley. *Proc.Camb.Soc.*, **53**, 629, 1957.

[2] C. Domb. *Nature*, **184**, 1959.

[3] A. Conway. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **28**, 335, 1995.

[4] B. Bideaux e L.S. Schulman D. Ben-Avraham. *Phys. Rev. A*, **4**, 7093, 1991.

[5] D. Stauffer e A. Aharony. Introduction to Percolation Theory. Taylor e Francis, London, 1992.

[6] K. Binder. The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics. Springer, New York, 1995.

[7] J. Blease. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **10**, 917, 1977.

[8] J. Blease. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **10**, 3461, 1977.

[9] S. Feng e P.N. Sen. *Phys. Rev Lett.*, **52**, 216, 1984.

[10] C. Mourkazel e P.M. Duxbury. *Phys. Rev. E*, **59**, 2614, 1999.

[11] I. Dasgupta e T. Saha A. Mookerjee. *Int. J. Mod. Phys. B*, **9**, 2989, 1995.

[12] J. Adler. *Physica A*, **171**, 453, 1991.

[13] H. Hinrichsen. *Cond-mat/9910284*, 1999.

[14] H.A. Makse; J.S. Andrade Jr; M. Batty; S. Havlin e H.E. Stanley. *Phys. Rev. E*, **58**, 7054, 1998.

[15] M. Sahimi. *Rev. Mod. Phys.*, **65**, 1393, 1993.

[16] L.S. Schulman e P.E. Seiden. *J. Stat. Phys*, **27**, 83, 1982.

[17] D. Wilkinson e J.F. Willemsem. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **16**, 3365, 1983.

[18] T. Witen e L.M. Sander. *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 1400, 1981.

[19] A. Birovljev; L. Furuberg; J.Feder; T.Jossang; K.J. Maloay e A. Aharony. *Phys.Rev.Lett.*, **67**, 584, 1991.

[20] R. N. Onody. *Int. J. Mod. Phys. C*, **6**, 77, 1995.

[21] R.N. Onody; A.N.D. Posadas e S. Crestana. *J. Appl. Phys*, **78**, 2970, 1995.

[22] A. Gabrielli; G. Caldarelli e L. Pietronero. *Cond-mat/9910425*, 1999.

[23] M. Vergeles. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 1969, 1995.

[24] R.N. Onody e R.A. Zara. *Physica A*, **231**, 375, 1996.

[25] A. Coniglio. *Phys. Rev. Lett*, **46**, 250, 1981.

[26] H.J. Herrmann e H.E. Stanley. *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 1121, 1985.

[27] R.N. Onody e R.A. Zara. *Phys. Rev. E*, **56**, 2548, 1997.

[28] R.G. Larson; L.E. Scriven e H.T. Davis. *Nature*, **268**, 409, 1977.

[29] R.G. Larson; H.T. Davis e L.E. Scriven. *Chem. Eng. Sci.*, **36**, 75, 1981.

[30] W.G. Laidlaw; G.R. Hamilton; R.B. Flewwelling e W.G. Wilson. *J. Stat. Phys*, **53**, 713, 1988.

[31] S. Galam e A. Mauger. *Phys. Rev. E*, **53**, 2177, 1996.

[32] J. Bear. Dynamics of Fluids in Porous Media. Dover, New York, 1988.

[33] L.E. Sissom e D. Pitts. Fenômenos de Transporte. Editora Guanabara, Rio de Janeiro, 1988.

[34] J.S. Andrade Jr; U.M.S. Costa; M.P. Almeida; H.A. Makse e H.E. Stanley. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 5249, 1999.

[35] U.M.S. Costa; J.S. Andrade Jr; H.A. Makse e H.E. Stanley. *Physica A*, **266**, 420, 1999.

[36] J.S. Andrade; M.P. Almeida; J.Mendes Filho; S. Havlin; B. Suki e H. E. Stanley. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 3901, 1997.

[37] R.A. Zara e R.N. Onody. *Physica A*, **277**, 1, 2000.

[38] N. Vandewalle e M. Ausloos. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **29**, 309, 1996.

[39] D.R. Ulhmann; B. Chalmers e K.A.Jackson. *J. Appl. Phys.*, **35**, 2986, 1964.

[40] N. Vandewalle; M. Ausloos e R. Cloots. *J. Crystal. Growth.*, **197**, 317, 1999.

[41] T. Izumi e Y. Shiohara. *J. Mat. Res.*, **7**, 16, 1992.

[42] M. Ausloos R. Cloots; N. Vandewalle. *J. Crystal. Growth.*, **166**, 816, 1996.

[43] C. Korber. *Quart. Rev. Biophys.*, **21**, 229, 1988.

[44] Y.A.Itkin e G.S. Ishikov V.L. Bronstein. *J. Crystal Growth*, **52**, 345, 1981.

[45] G. Lipp e C. Korber. *J. Crystal Growth*, **130**, 475, 1993.

[46] R.A. Zara e R.N. Onody. Percolation and Invasion Percolation in the presence of Mobile Impurities. *J.Phys. C:Condensed Matter*, Submetido para Publicação.

[47] R.J. Baxter. Exactly Solved Models in Statiscal Mechanics. Academic Press, London, 1987.

[48] S.C. van der Marck. *Int. J. Mod, Phys. C*, **9**, 529, 1994.

[49] P. Meakin. Fractals, scaling and growth far from equilibrium. Cambridge Press, Cambridge, 1998.

[50] S. Redner e A.C. Brown. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **14**, L285, 1977.

[51] P. Grassberger. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **18**, L215, 1985.

[52] N. S. Branco. *J. Stat. Phys*, **70**, 1035, 1993.

[53] P.M. Kogut e P.L. Leath. *J. Phys. C*, **15**, 4225, 1982.

[54] J. Hoshen e R. Kopelman. *Phys. Rev. B*, **14**, 3923, 1976.

[55] J. Hoshen; M.W. Berry a K.S. Minser. *Phys. Rev. E*, **56**, 1455, 1995.

[56] P.L. Leath. *Phys. Rev. B*, **14**, 5046, 1976.

[57] Z. Alexandrowicz. *Phys. Lett.*, **80A**, 284, 1980.

[58] M. Eden. Symp. on Information Theory in Biology. Pergamon, New York, 1958.

[59] P. Meakin. *Phys. Rev. A*, **78**, 2970, 1995.

[60] P.R. King; S. V. Buldyrev; N. V. Dokholyan; S. Havlin ; Y. Lee; G. Paul e H.E. Stanley. *Physica A*, **274**, 60, 1999.

[61] J. Martin-Herrero e J. Peon-Fernandez. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **33**, 1827, 2000.

[62] C.P. Stark. *Nature*, **352**, 423, 1991.

[63] P. Grassberger e S.S. Manna. *J. Physique*, **51**, 1077, 1990.

[64] S. Roux e E. Guyon. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **22**, 3693, 1989.

[65] P. Bak; C. Tang e K. Wiesenfeld. *Phys. Rev. A*, **38**, 364, 1988.

[66] A.P. Sheppard; M.A. Knackstedt; W.V Pinczewski e M. Sahimi. *J. Phys.A:Math. Gen.*, **32**, L521, 1999.

[67] R. Lenormand e D. Zarcone. *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 2226, 1985.

[68] M. Porto; S. Havlin; S. Schwarzer e A. Bunde. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 4060, 1997.

[69] D. Wilkinson. *Phys. Rev. B*, **30**, 520, 1984.

[70] D. Wilkinson e M. Barsony. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **17**, L129, 1984.

[71] R. Lenormand. *Physica A*, **104**, 114, 1986.

[72] L. Furuberg; J. Feder; A. Aharony e T. Jossang. *Phys. Rev. Lett*, **61**, 2117, 1988.

[73] M. Yanuka e I. Balberg. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **24**, 2565, 1991.

[74] R. Paredes V e M. Octavio. *Phys. Rev. A*, **46**, 994, 1992.

[75] A. Hasmy; R.F. Angulo; M. Octavio e R. Paredes V. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **26**, 3063, 1992.

[76] P. Meakin. *Physica A*, **173**, 305, 1991.

[77] R.A. Zara e R.N. Onody. *Int. J. Mod, Phys. C*, **10**, 227, 1999.

[78] A.V. Neumann e S. Havlin. *J. Stat. Phys.*, **52**, 203, 1988.

[79] S. Havlin e D. Ben-Avraham. *Adv. Phys.*, **36**, 695, 1987.

[80] A. Skal e B.I. Shklovskii. *Sov. Phys.-Semicond.*, **8**, 1029, 1975.

[81] P.G. de Gennes. *J. Physique Lett.*, **27**, L1, 1976.

[82] Y. Gefen; A. Aharony; B.B. Mandelbrot e S. Kirkpatrick. *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 1771, 1981.

[83] R. Pike e H.E. Stanley. *J. Phys. A*, **14**, L169, 1981.

[84] P. Grassberger. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **25**, 5475, 1992.

[85] M. Rintoul e H. Nakanishi. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **25**, L945, 1992.

[86] H.J. Herrmann; D.C. Hong e H. E. Stanley. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **17**, L261, 1984.

[87] A. Coniglio. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 3054, 1989.

[88] P.M. Duxbury; D. Jacobs; M.F. Thorpe e C. Mourkazel. *Phys. Rev. E*, **59**, 2084, 1999.

[89] N. V. Dokholyan; Y. Lee; S.V. Buldyrev; S. Havlin; P.R. King e H.E. Stanley. *J. Stat. Phys*, **93**, 603, 1998.

[90] M. Porto; A. Bunde; S. Havlin e H.E. Roman. *Phys. Rev. E*, **56**, 1667, 1997.

[91] G. MacKay e N. Jan D. Laidlaw. *J. Stat. Phys*, **46**, 507, 1987.

[92] H.J. Herrmann e H.E. Stanley. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **21**, L829, 1988.

[93] S. Schwarzer; S. Havlin e A. Bunde. *Phys. Rev. E*, **59**, 3262, 1999.

[94] R. Bulirsch e J. Stoer. *Numer. Math.*, **6**, 413, 1964.

[95] M.Z. Cieplak e M. Cieplak. *Phys. Lett.*, **104A**, 290, 1984.

[96] M.F. Sykes e J.W. Essam. *J. Math. Phys*, **5**, 1117, 1964.

[97] M. Sahimi; B.D. Hughes; L.E. Scriven e T. Davis. *J. Phys.A:Math. Gen.*, **16**, L67, 1983.

[98] V.A. Vyssotsky; S.B. Gordon; H.L. Frish e J.M. Hammersley. *Phys. Rev.*, **123**, 1566, 1966.

[99] S.C. van der Marck. *Phys. Rev. E*, **55**, 1228, 1997.

[100] S. Galam e A. Mauger. *Phys. Rev. E*, **55**, 1230, 1997.

[101] S. Galam e A. Mauger. *Phys. Rev. E*, **56**, 322, 1997.

[102] F. Babalievski. *Phys. Rev. E*, **59**, 1278, 1999.

[103] Y. Shibusa e Y. Arai J.S. Andrade, D.A. Street T. Shinohara. *Phys. Rev. E*, **51**, 5725, 1995.

[104] S. Havlin H.A. Makse e B. Suki H. E. Stanley, J.S. Andrade. *Physica A*, **166**, 5, 1999.

[105] J. Niemeyer e G. Machulla. *Physica A*, **266**, 203, 1999.

[106] J.S. Andrade Jr; L. S. Lucena; A.M. Alencar e J.E. Freitas. *Physica A*, **238**, 163, 1997.

[107] M. A. Alencar; J.S. Andrade Jr e L. S. Lucena. *Phys. Rev. E*, **56**, R2379, 1997.

[108] S. Hemmer e P.C. Hemmer. *J. Chem. Phys. A*, **1**, 584, 1984.

[109] A.A. Ovchinnikov e V.V. Atrazhev. *Physica A*, **247**, 331, 1997.

[110] M. C. Flemmings. Solidification Processing. McGraw Hill, New York, 1984.

[111] G.F. Bolling e J. Cissé. *J. Crystal Growth*, **10**, 56, 1971.

[112] N. Vandewalle e M. Ausloos. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 510, 1996.

[113] K.Ivanova. *Phys. Rev. B*, **58**, 1, 1998.

[114] N. Vandewalle; M. Ausloos e R. Cloots. *Phys. Rev. E.*, **56**, 4042, 1997.

[115] N. Vandewalle; M. Ausloos e R. Cloots. *Phys. Rev. E.*, **58**, 1152, 1998.

[116] M. Ausloos; E. Salmon e N. Vandewalle. *Cement and Concrete Research*, **29**, 209, 1999.

[117] E.Salmon; M. Ausloos e N. Vandewalle. *Phys. Rev. E*, **55**, R6348, 1997.

[118] H. Hinrichsen. *Cond-mat/0001070*, 2000.

[119] D. Dhar M.K. Phany B.M. Arora, M. Barma. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **16**, 2913, 1980.

[120] P.G. de Gennes. *J.Phys.(Paris)*, **37**, L1, 1976.

[121] A.R. Day; R.R. Tremblay e A.-M.S.Tremblay. *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 2501, 1986.

[122] C. Mourkazel; P.M. Duxbury e P.L. Leath. *Phys. Rev. E*, **55**, 5800, 1997.

[123] P.W. Anderson. *Phys. Rev.*, **109**, 1492, 1958.

[124] M.M. Dias e D. Wilkinson. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **19**, 3131, 1986.

[125] M. Pokorny; C.M. Newman e D. Meiron. *J. Phys. A:Math. Gen.*, **23**, 1431, 1990.