

PROJETO 4 - Física Estatística Computacional - IFSC - USP - 2024

MODELOS DE CRESCIMENTO

Dinâmicas interessantes acontecem em sistemas que exibem a propriedade de crescimento, tais como superfícies de cristais (crescimento de cristais), sistemas biológicos, econômicos, sociais, etc. Tais crescimentos podem ser *determinísticos* (totalmente causais) ou *aleatórios*. Vamos no presente projeto trabalhar com modelos de crescimento contidos em ambas as classes.

Autômatos Celulares Determinísticos (ACD)

Estes são exemplos de crescimento totalmente determinístico (é análogo à uma equação diferencial parcial de primeira ordem no tempo). Tais modelos, se apropriadamente escolhidos, modelam razoavelmente, por exemplo, o crescimento de tecidos epiteliais em répteis ("couro de cobra").

O autômato produz a configuração C_{t+1} , no tempo $t + 1$, a partir da configuração C_t , no tempo t , e a **regra de evolução $f_A(C_t)$** , i. e.,

$$C_{t+1} = f_A(C_t). \quad (1)$$

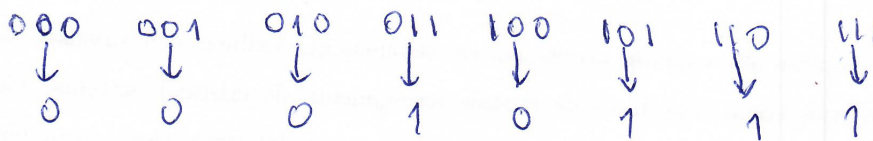
Para simplificarmos o entendimento dos autômatos restringir-nos-emos aos caso unidimensional (obviamente o crescimento de peles ou de "boatos" entre humanos deverá ser em duas dimensões, entre os anjos seria talvez em três dimensões ?! (sic)).

Consideremos uma cadeia de L sítios (tipicamente $L \sim 100 - 200$) e supomos que em cada sítio da rede tenhamos uma variável binária $\{b_i, i = 1, \dots, L\}$ que assume valores 0 (vazio) ou 1 (ocupado). Assim a configuração no instante t será $C_t = \{b_1^t, b_2^t, \dots, b_L^t\}$ ($b_i^t = 0, 1$). Utilizaremos regras de evolução do autômato que envolvam apenas três vizinhos próximos, isto é:

$$b_i^{t+1} = \mathbf{f_A}(b_{i-1}^t, b_i^t, b_{i+1}^t), \quad i = 1, \dots, L. \quad (2)$$

Como existem 8 configurações possíveis para a trinca (b_{i-1}, b_i, b_{i+1}) podemos ter $2^8 = 256$ regras possíveis. Exemplos de tais regras dão:

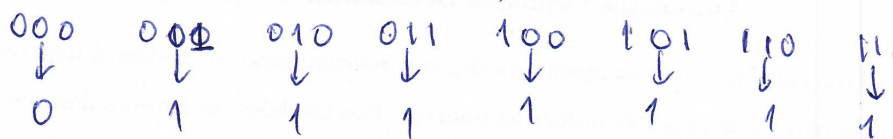
a) Regra da maioria



que chamamos de regra **232** pois,

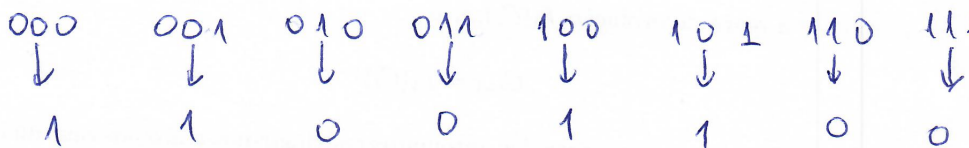
$$0 \times 2^0 + 0 \times 2^1 + 0 \times 2^2 + 1 \times 2^3 + 0 \times 2^4 + 1 \times 2^5 + 1 \times 2^6 + 1 \times 2^7 = 232 \quad (3)$$

b) Regra da epidemia (0 = são, 1 = doente)



que nada mais é que a regra **254** = $2 + 4 + 8 + 16 + 32 + 64 + 128$

c) Regra do "contra".



regra **51** = $1 + 2 + 16 + 32$

TAREFA 1: Faça um programa que calcula a evolução temporal de um autômato celular binário determinístico de L sítios, com uma regra geral envolvendo apenas o sítio em questão e os vizinhos próximos, a partir de uma dada configuração inicial $C_0 = \{b_1^0, b_2^0, \dots, b_L^0\}$. Considere condições periódicas de contorno e o sistema unidimensional.

Para teste do programa utilize as configurações iniciais:

$$C_0^{(1)} = \{0, \dots, 0\}, C_0^{(2)} = \{1, \dots, 1\}, C_0^{(3)} = \{b_1, \dots, b_L\} \text{ com } b_i \text{ aleatório.} \quad (4)$$

Calcule a superfície resultante utilizando-se as regras (a), (b) e (c) acima e refaça o crescimento para três outras regras de sua escolha. Mostre graficamente o resultado obtido.

MODELOS DE CRESCIMENTO COM ALEATORIEDADE

A grande maioria dos fenômenos de crescimento, ao contrário dos autômatos determinísticos, envolvem um certo grau de aleatoriedade como no caso de crescimento de cristais, tumores, flocos de neve, partidos políticos, urbanização em grandes centros. O ingrediente essencial para estabelecermos um modelo de crescimento é a definição da superfície a ser crescida, bem como a regra de crescimento. Um modelo muito aplicado no caso de crescimento de tumores é o modelo de Eden. Neste modelo, uma vez definida a superfície de crescimento, um sítio na vizinhança deste é escolhido aleatoriamente e adicionado ao sistema modificando a sua superfície. Se considerarmos este modelo numa rede bidimensional e começarmos com um sítio localizado nas coordenadas $(x, y) = (0, 0)$, temos após uma certa evolução temporal tipicamente o perfil da Fig. 1 abaixo. Temos

nesta figura, a grosso modo uma figura circular
a menos de pequenos buracos internos (que
desaparecerão com a evolução posterior,
já que também são sítios da periferia).



Modelo de Eden
Figura 1

Contudo outras superfícies crescem de formas distintas (menos lisas) como é o caso do

crescimento de flocos de neve, fuligem, descargas elétricas (efeito corona), colônia de corais, incêndio em florestas, etc. Um modelo que descreve razoavelmente tais crescimentos é o modelo DLA ("diffusion limited aggregation" - agregação limitada por difusão). Neste modelo uma partícula inicia um movimento aleatório ("Browniano") a uma certa distância do agregado. Quando atinge o agregado a mesma é adicionada ao agregado, de forma que se tem uma figura do tipo daquela exibida na Fig. 2 abaixo, que é bem distinta da figura obtida no caso de crescimento pela dinâmica de Eden (Fig. 1). Na realidade

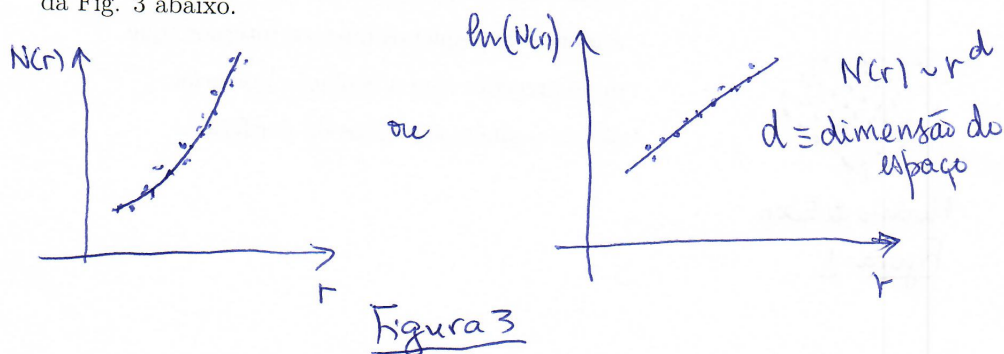


Modelo DLA

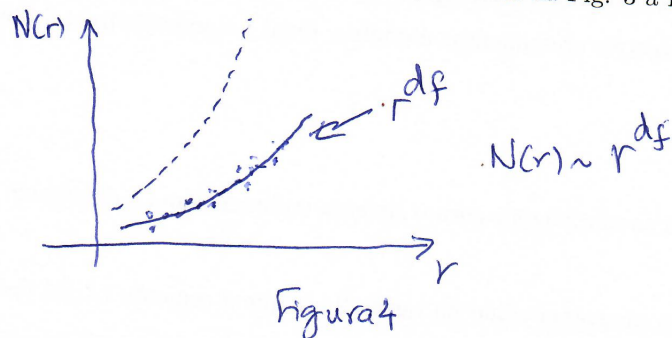
Figura 2

a figura ao lado tem a forma de um *fractal*, conforme veremos a seguir.

Fractais. Consideremos uma dada forma e a discretizamos subdividindo-la num reticulado, de forma que a mesma seja composta por um número grande de pequenos blocos (a malha escolhida na nossa discretização). Mais ainda, suponhamos que a partir do centro de massa da forma discretizada, traçamos círculos de raio r , variável e medimos o número $N(r)$ de blocos inseridos nos círculos. Se tivermos figuras normais (Euclidianas) que preencham praticamente todo o espaço, como é o caso das formas sólidas normais, ou a figura obtida no caso de crescimento pelo modelo de Eden, obteremos o gráfico do tipo da Fig. 3 abaixo.



Contudo figuras fractais, embora inseridas num espaço Eclideano de dimensão d não conseguem preencher todo o espaço e temos, ao invés da Fig. 3 a Fig. 4 abaixo,



sendo a potência de r denominada por *dimensão fractal* $d_f \leq d$. Exemplos de fractais são: a linha costeira brasileira ($d_f > 1$), a superfície de montanhas ($d_f > 2$), conjunto de Cantor ($d_f > 0$), superfícies de esculturas barrocas ($d_f > 2$). A superfície mostrada na Fig. 2, obtida por crescimento DLA também é um caso de fractal com $1 < d_f < 2$ ($d_f \sim 1.65$).

Tarefa 2: Faça um programa que simule o crescimento segundo a dinâmica do DLA, em duas dimensões. Na confecção de seu programa sugerimos os seguintes pontos:

- Considere a semente original da origem do sistema de coordenadas $(x, y) = (0, 0)$.
- Inicie as partículas que difundirão num raio R_{inic} , que seja maior, por pelo menos 5 unidades do reticulado, em relação à partícula pertencente ao agregado e mais distante da origem. Toda vez que se agregar uma nova partícula verifique qual será a partícula mais distante na nova forma do agregado, para atualizar R_{inic} .
- Se a partícula se afastar de uma distância $R_{\text{fin}} = 1.5R_{\text{inic}}$, esqueça a mesma e solte outra partícula em R_{inic} .

2.1 - Desenhe para um número razoável de partículas (determine o mesmo levando em

contas as suas facilidades de processamento) o diagrama obtido.

2.2 - Faça um gráfico similar ao da Fig. 4 e determine a dimensão fractal do agregado DLA para pelo menos três crescimentos distintos. Qual a dimensão fractal obtida?

Tarefa 3: Refaça a tarefa 2 agora para o sistema tridimensional e determine a dimensão fractal d_f .

Tarefa 4: Faça um programa como na tarefa 2 em que a semente inicial de crescimento sejam todas as partículas (sítios localizadas no eixo x $\{(x, y) | y = 0, x, y \in Z\}$. Inicie as partículas a uma certa distância do eixo x . Mostre (observe) que o gráfico obtido é semelhante aos das descargas por faíscas elétricas em fios condutores (efeito corona).

Tarefa 5: Modelo de crescimento de revoluções populares ?!.

Considere agora o modelo de crescimento em que no instante inicial além da semente localizada na origem $(x, y) = (0, 0)$, sorteamos todos os sítios do reticulado colocando partículas nos mesmos com probabilidade p . Após a inicialização da rede, da forma acima, o agregado inicialmente em $(0, 0)$ passa a mover-se aleatoriamente como um todo. Contudo à medida que alcança as partículas, no seu movimento, passa a agregá-las ao aglomerado.

Faça um programa para um sistema bidimensional que cresça da forma acima descrita. Mostre o diagrama obtido para alguns valores de p (para $p \sim 0.1$ deve-se obter $d_f \sim 1.7$, análogo ao agregado do caso DLA, estudado anteriormente) e calcule a dimensão fractal da forma crescida. Repare que esta dimensão dependerá de p , i. e., $d_f = d_f(p)$ e que $d_f(0) = 0$ e $d_f(1) = 2$.