

Física Estatística Computacional - Projeto 3

Jorge Augusto Salgado Salhani

September 2018

1 Introdução

A evolução de sistemas que dependam da sua situação prévia não possui fácil modelagem. Sistemas como este, denominados dinâmicos, podem ser utilizados na descrição de inúmeros fenômenos reais. Vagando da economia [1] à biologia [2], modelos que possuem caráter cíclico onde sua situação anterior atualiza o sistema para a próxima iteração temporal é denominado autômato.

Autômatos celulares [3] são sistemas em um espaço discreto onde cada compartimento (ou célula) pode assumir estados distintos de acordo com o estado das células mais próximas. Para um sistema binário, por exemplo, compartimentos podem apresentar estados ligado (1) ou desligado (0), de acordo com seus arredores, sendo que esta mudança pode ocorrer de modo estocástico ou determinístico.

Para autômatos estocásticos (que aqui serão utilizados), é possível observar a formação de padrões emergentes [3] que modelam a natureza física, química, biológica e social. Neste trabalho, o fenômeno de crescimento de aglomerados de partículas será estudado através dos modelos de Eden e de agregação por difusão (DLA - *Diffusion-Limited Aggregation*) com fenômenos emergentes com potencial uso para estudo do crescimento de células cancerígenas [4] e da dinâmica de fluido [5], respectivamente.

2 Objetivos

Este projeto tem por objetivo o estudo de modelos de crescimento de sistemas agregantes de partículas, englobando expansões devido à interação de um agente físico inicialmente colocado em uma posição fixa espacial e temporalmente. Tais modelos podem ser tomados de 'dentro para fora', como o modelo de Eden, quanto 'de fora para dentro', como o modelo DLA. A agregação discreta é responsável por gerar padrões emergentes que podem ser estudados qualitativamente ou através de suas distribuições quebradiças por meio de dimensionamento fractal de forma quantitativa.

3 Metodologia

Dispondo de uma matriz bidimensional como representativo do espaço físico em análise, sobre ela serão colocados entes físicos em uma dada coordenada discreta (i, j) . Como este ente inicial encontra-se em contato com uma vizinhança dada pelas coordenadas $(i + \delta, j)$, $(i - \delta, j)$, $(i, j + \delta)$ e $(i, j - \delta)$ e supondo que o mesmo é capaz de modificá-la com uma dada probabilidade $p_{i,j}$ após um salto temporal τ , pode-se analisar a evolução do sistema após um tempo t .

Como espaço e tempo são discretos, pode-se tomar $\delta = \tau = 1$ a fim de tornar a evolução destas grandezas de modo adimensional.

A dimensão de sistemas cuja dispersão é descontínua pode ser quantizada através do conceito de *dimensão fractal*. Supondo, por exemplo, que o sistema seja composto de estados binários que fisicamente pode ser descrito como a presença (1) ou ausência (0) de 'massa', sua dimensão relaciona-se com a densidade de 'massa' na qual o sistema pode ser igualmente fracionado.

Tratando o problema por indução, para dimensões $d = 1$, $d = 2$ e $d = 3$, tem-se que a densidade de massa de figuras geométricas pertencentes a tais dimensões pode ser fracionada igualmente em $1/2$, $1/4$ e $1/8$, respectivamente. Nota-se que estas frações podem ser representadas na forma $(1/2)^1$, $(1/2)^2$ e $(1/2)^3$. Assim, caso uma figura de dimensão $d = 2$ for ampliada por um fator 2, sua massa tem crécimo de fator multiplicativo 4 ou 2^2 .

Desta forma, pode-se generalizar o conceito de dimensão através da relação

$$\frac{M_i}{M} = \left[\frac{r_i}{r} \right]^d \quad (1)$$

onde M_i representa a massa de uma fração da figura considerada interna a uma área ou volume d -dimensional com raio r_i e M , a massa de uma nova fração da figura, agora interna à medida de raio r .

Pode-se, por fim, calcular a dimensão do sistema através da equação

$$\ln \frac{M_i}{M} = d \ln \frac{r_i}{r} \quad (2)$$

3.1 Modelo de Eden

Em primeira abordagem, será tratado modelos de crescimento de grupos (também chamados *clusters*) formados a partir de um agente fixo na coordenada central da matriz representando o sistema físico acessível. Para cada variação temporal, são considerados todos os vizinhos próximos a coordenadas que contenham um agente (inicialmente apenas na origem) e aleatoriamente uma delas será alterada de um estado desligado (*sem agente*, ou 0) para ligado (*com agente*, ou 1).

Para que não haja preferências de escolha de coordenada, a probabilidade de escolha de uma dada coordenada (i', j') é tal que $P(i', j') = 1/V$, com V definido como o número total de vizinhos do *cluster* em estado *desligado*. Impondo que a cada tempo um agente será colocado, o número de agentes no sistema é igual ao tempo transcorrido.

3.2 Modelo DLA

Neste caso será estudado o crescimento do *cluster* através da deposição de partículas sobre um ponto de nucleação, ou seja, diferentemente dos agentes sobre o sistema causarem a mudança de estado de agentes da vizinhança próxima (caso do modelo anterior), um ente físico, a chamar *semente*, será inicialmente colocada na matriz definida e outras partículas serão soltas de extremidades deste espaço limitado.

As posições das fontes de partículas podem ser tomadas de formas indefinidamente distintas. Para os resultados mostrados na seção subsequente, suas coordenadas serão dadas sobre uma circunferência de raio R constante. Tais posições são armazenadas e imutáveis ao longo de todo o processamento para que seja possível a escolha de uma delas aleatoriamente para cada partícula solta.

Por difusão (computacionalmente descrita através de caminhos aleatórios) essas partículas soltas percorrerão o sistema e, caso em contato com o ponto de nucleação, esta é aderida e uma nova partícula é liberada. Tal processo é denominado *Agragação Limitada por Difusão*, alcunhado por *DLA* pela sigla inglesa.

Propriedades do sistema podem ser calculadas através da sua dimensão por contabilização similar à descrita na sessão 3.1.

Tendo por base esta metodologia, dois modelos distintos são apresentados em sequência, os quais apresentam modificações sutis, porém com resultados bastante distintos.

3.3 Modelo DLA modificado 1 - Modelo balístico

No modelo denominado "balístico", o sorvedouro de partículas móveis é definido como todas as posições pertencentes às coordenadas (N, i) ; $0 \leq i \leq N$ - todos os pontos da linha N - e os pontos de nucleação, nas posições $(j, 0)$; $0 \leq j \leq N$ - todos os pontos da linha 0 .

Como as partículas "caem" (ou sobem, caso haja mudança de referencial) até encontrar pontos de nucleação, Em uma única iteração sobre a matriz é possível deslocá-la, em movimento aleatório, até o aglomerado. A vizinhança da posição (x, y) é definida como $\{(x + 1, y - 1), (x + 1, y), (x + 1, y + 1)\}$, com deslocamento necessariamente para a linha abaixo de sua posição corrente. Como condições de fronteira reflexivas, a vizinhança é definida como $\{(x + 1, y), (x + 1, y + 1)\}$, se $y = 0$, e $\{(x + 1, y - 1), (x + 1, y)\}$ se $y = N$. Esta implementação utiliza de atualização assíncrona para otimização. Os outros modelos aqui apresentados são síncronos, isto é, a cada

passo temporal, todas as partículas movem-se simultaneamente.

No momento em que a partícula móvel está em posição adjacente ao aglomerado, seu estado é modificado de -1 para 1 e uma nova partícula é solta.

3.4 Modelo DLA modificado 2 - *Cluster* móvel

Neste último modelo, todos os compartimentos do sistema físico aleatoriamente podem ou não estarem ocupados por uma partícula (marcadas com índice -1) imóvel. Ao posicionar uma semente no centro da matriz, esta possui movimento aleatório para regiões vizinhas.

Para cada salto temporal, caso as partículas móveis (índice 1) encontrem entes imóveis em sua vizinhança, os mesmos são englobados e têm seu estado alterado de -1 para 1. Após esta transformação, uma direção é escolhida e todas as partículas móveis pertencentes ao *cluster* são deslocadas.

Como o crescimento é disforme, condições de contorno periódicas (bordas toroidais) são consideradas, com mobilidade sobre todo o espaço físico N-dimensional, fazendo com que a vizinhança de uma coordenada (x, y) seja dada pelo conjunto $\{((x+1) \bmod N, (y) \bmod N); ((x-1) \bmod N, (y) \bmod N); ((x) \bmod N, (y+1) \bmod N); ((x) \bmod N, (y-1) \bmod N)\}$, onde o operador $h \bmod N$ representa o 'resto da divisão entre h e N , responsável por manter um ciclo fechado entre as extremidades diametralmente opostas da matriz sobre a qual o sistema se encontra.

4 Resultados

Para cada modelo de crescimento supracitado são apresentados resultados visuais de sua evolução temporal sobre um sistema físico (matriz) de dimensão fixa. A princípio todos eles poderiam apresentar condições de contorno periódicas, mas para que o trabalho seja mais abrangente para as distintas formas de simulações, foram utilizadas condições livre (Modelo de Eden e Modelo DLA), reflexivas (Modelo DLA balístico) e condições periódicas (Modelo DLA com *cluster* móvel). Os resultados são apresentados em sequência.

4.1 Modelo de Eden

Ao utilizar uma semente (ponto inicial) na coordenada (100, 100) da matriz, a probabilidade de preenchimento do espaço periférico desta posição é igualmente distribuída, fazendo com que o *cluster* cresça homogeneamente, como pode ser visto na figura 1 através da evolução temporal. O agregado formado possui poucos espaços não preenchidos, e é responsável por se dimensionar próximo a um círculo completamente preenchido, corroborando o resultado numérico para $d = 1.99$ com erro associado de 0.5%, que aproxima-se de $d = 2$ para o caso de

circunferência bem definida.

Retomando a definição de dimensionalidade, o valor de d próximo a um número inteiro indica que a figura resultante possui limites em curvas suaves, pouco serrilhadas.

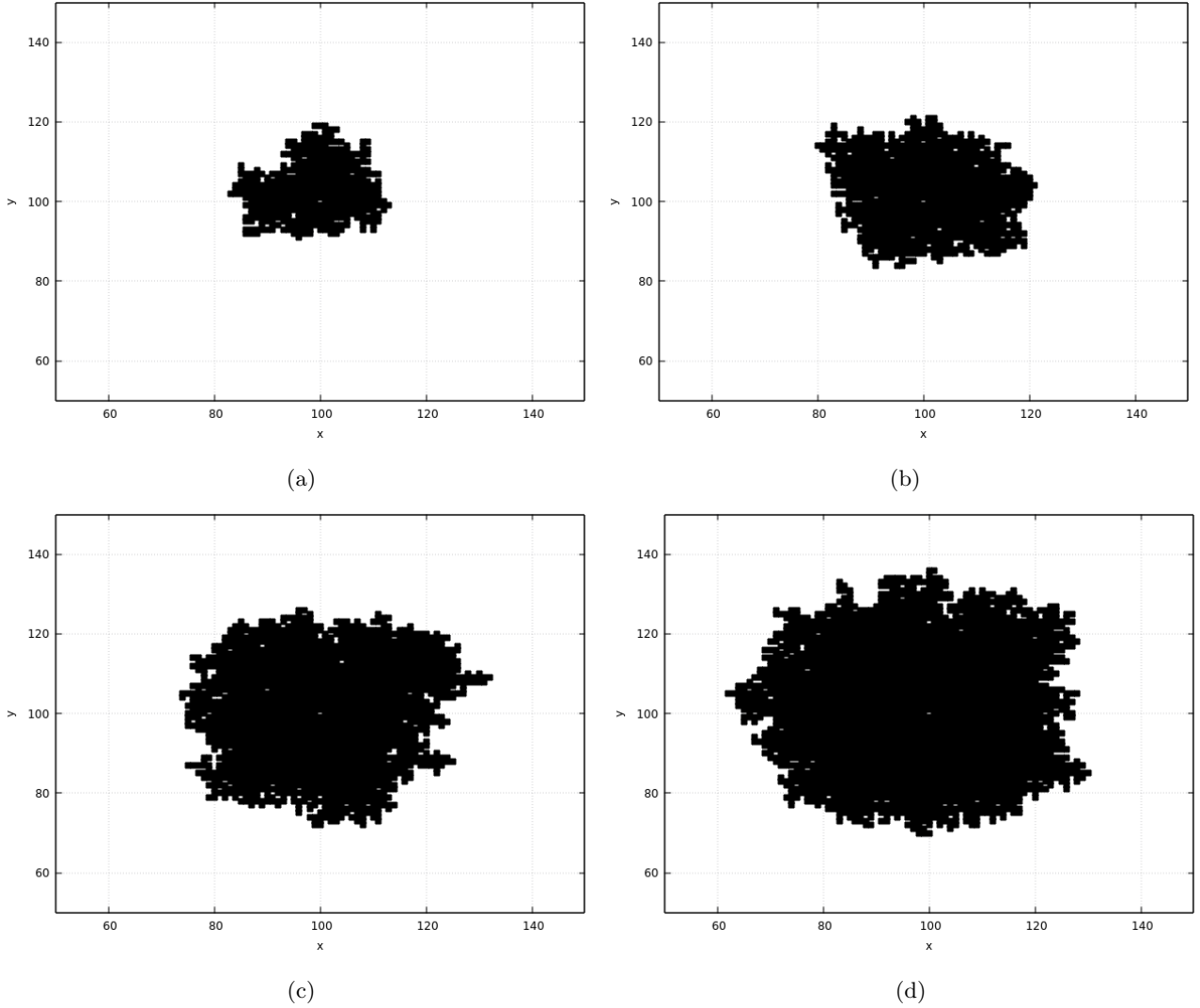


Figure 1: Modelo de crescimento de Eden com uma semente inicial posicionada em $(100, 100)$. O crescimento do aglomerado é observado para os tempos (a) $t = 500$, (b) $t = 1000$, (c) $t = 2000$ e (d) $t = 3000$, onde a cada tempo, necessariamente um compartimento é preenchido, com um *cluster* final constituído de $M = 3000$ partículas.

4.2 Modelo DLA

Agora estando uma semente presente na coordenada $(50, 50)$ e dispondo de 'fontes' de partículas em posições sobre um círculo de raio $R = 20$ centrado em $(50, 50)$, como mostrado na figura 3, para cada partícula analisada, um dos sorvedouros é escolhido aleatoriamente e, dele, uma partícula é solta sobre o espaço com movimento

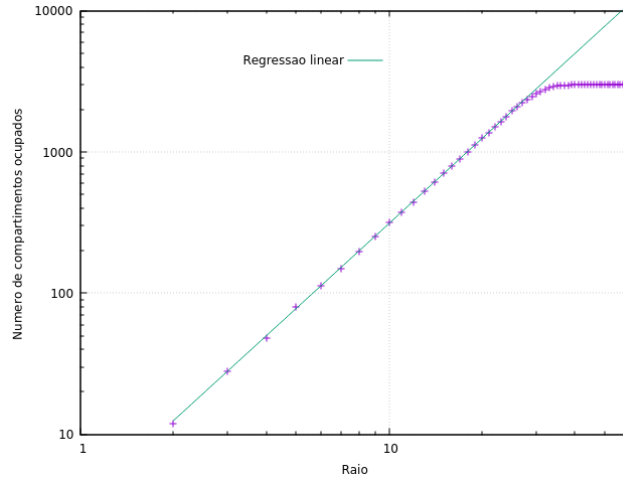


Figure 2: Número total da 'massa' do aglomerado representado por cada uma das 3000 partículas com o aumento do raio, centrado em (100, 100), dentro do qual as partículas são contabilizadas. A reta na cor verde representa a regressão linear em escala logarítmica dada pela função $f(x) = ax + b$ com coeficiente angular $a = 1.998 \pm 0.005$.

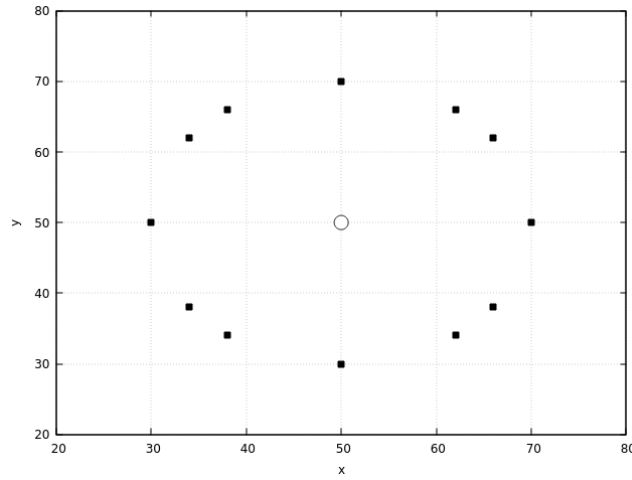


Figure 3: Fontes de partículas dispersivas sobre um círculo de raio $R = 20$ (quadrados preenchidos com cor preta) centrado na posição (50, 50) sobre a qual encontra-se a semente (círculo em linha sólida preta). Cada nova partícula solta tem como ponto de partida um dos sorvedouros possíveis escolhido aleatoriamente.

dispersivo simples - cada nova posição que ocupará é escolhida por probabilidade uniformemente distribuída por seus 4 vizinhos próximos. Seu movimento é limitado por 30 passos temporais e delimitado espacialmente por um quadrado de lado $2R$, centrado na semente. Estes parâmetros foram escolhidos para que fosse otimizado o tempo necessário para o fim desta simulação. Quando a partícula dispersa encontra o aglomerado (no caso inicial, a semente) em uma dos espaços contíguos à sua posição corrente, ela acopla-se a ele e uma nova partícula é solta de um dos sorvedouros.

O aglomerado formado (figura 4) possui ramificações expressivamente maiores que o modelo de crescimento

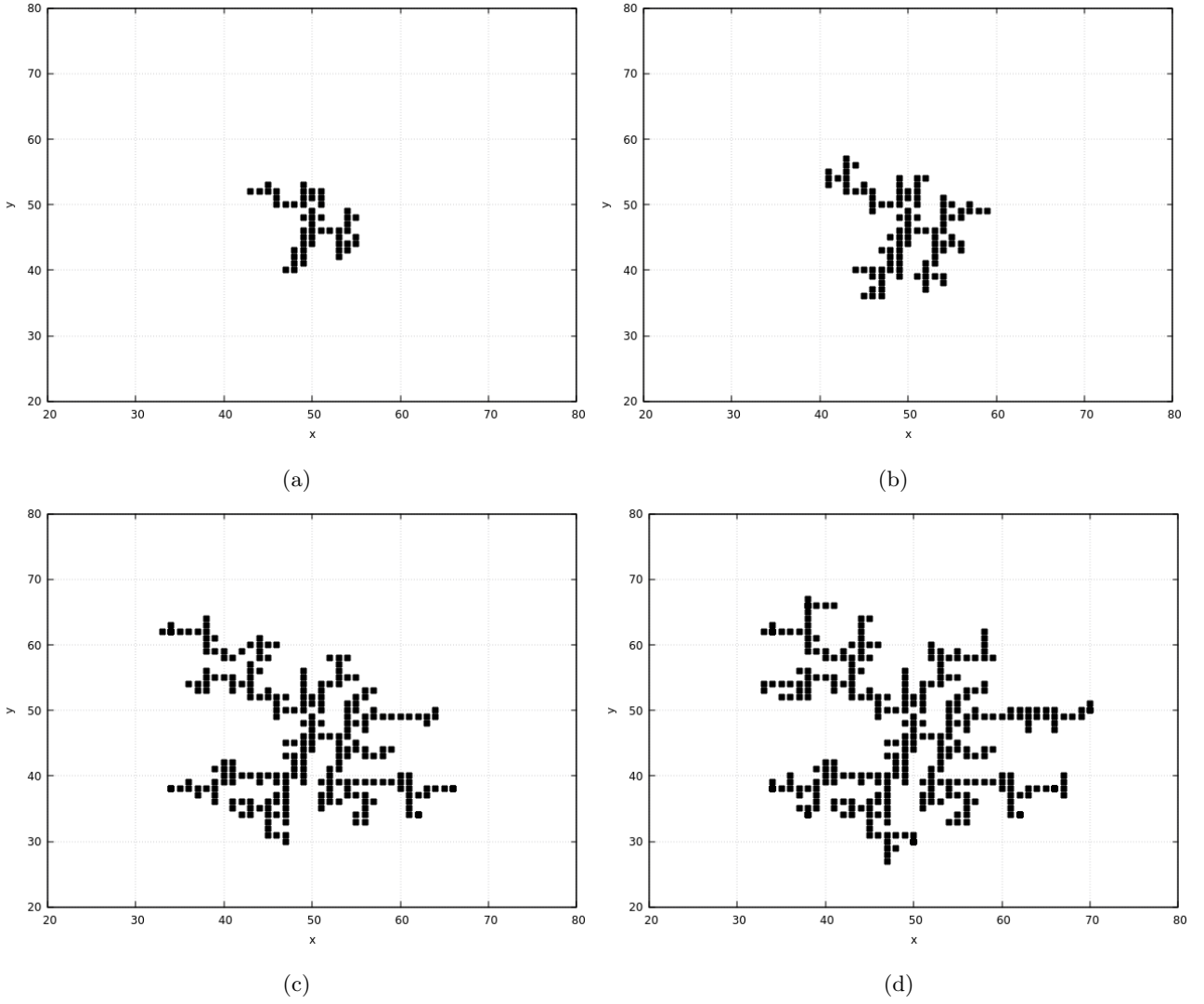


Figure 4: Evolução temporal do crescimento do *cluster* para o modelo DLA após o número de partículas p dispersas ser dado por (a) $p = 300$, (b) $p = 500$, (c) $p = 800$ e (d) $p = 1000$. Diferentemente do modelo de Eden, nem todas as partículas são efetivamente agregadas ao aglomerado.

de Eden, com muitos espaços não ocupados, já que a crescimento do aglomerado leva a agregação de novas partículas sobre sua superfície.

Com mesmo artifício utilizado na seção anterior para análise da dimensionalidade do aglomerado formado (contagem de número de partículas dentro de uma circunferência de raio variável), a curva na figura 5 do número de pontos com o aumento do raio centrado em (50,50) após toda evolução temporal do crescimento do *cluster* mostra que a dimensão encontrada possui valor $d = 1.56$ com erro associado de 2%. Este resultado apresenta precisão menor que o modelo de Eden, uma vez que o número de compartimentos ocupados cresce descontinuadamente com o raio, tendo maiores flutuações que o modelo anterior.

Assim como esperado, a dimensionalidade deste modelo é menor que o apresentado para o modelo de Eden, que

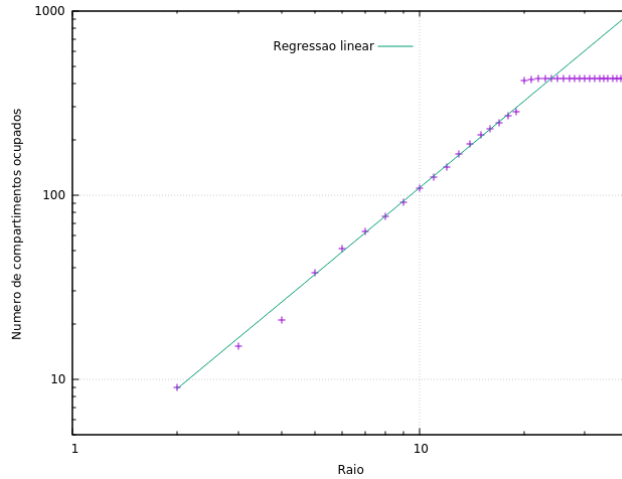


Figure 5: Número total da 'massa' do aglomerado representado por cada uma das 1000 partículas iniciais (com 418 efetivas) com o aumento do raio da circunferência, centrada em $(50, 50)$, dentro da qual as partículas são contabilizadas. A reta na cor verde representa a regressão linear em escala logarítmica dada pela função $f(x) = ax + b$ com coeficiente angular $a = 1.56 \pm 0.02$.

quantifica a presença de bordas mais serrilhadas.

Além disso a figura (5 também apresenta o número total de partículas que efetivamente passaram a fazer parte do aglomerado. Das 1000 partículas dispersas sobre o espaço, apenas 418 delas juntaram-se ao grupo, revelando que um dos motivos da escolha de fatores delimitantes para otimização da simulação deve-se ao elevado número de iterações não proveitosas.

4.3 Modelo DLA modificado 1 - Modelo balístico

Agora considerando a matriz $(100, 100)$ como espaço físico, as fontes são estabelecidas em todas as células presentes na primeira linha $(0, i)$ e os pontos de nucleação, em todas as células na última linha $(j, 0)$, onde $i, j \in \mathbf{N}$. Cada partícula apresenta movimento de dispersão simples até ser agregada ao aglomerado crescente.

Como apresentado na figura 6, as estruturas formadas apresentam ramificações similares às do modelo DLA anterior (seção 4.2), no entanto suas divisões possuem crescimento vertical e sua dimensionalidade apresenta distinção ao crescimento radial.

Contabilizando a 'massa' do *cluster* com o incremento da altura (eixo y na figura 6) após sua construção completa, a diferença entre a aglomeração vertical e radial podem ser comparadas quantitativamente.

Analisando a figura 7, sua dimensão a princípio mostra descontinuidade próximo à altura $y = 40$, mas quando visto no aglomerado formado, notamos que para $y \leq 40$ há poucas partículas por representar o início do *cluster*, sendo portanto amostragem não representativa do todo. Dessa forma, apesar de haver duas possíveis dimensões

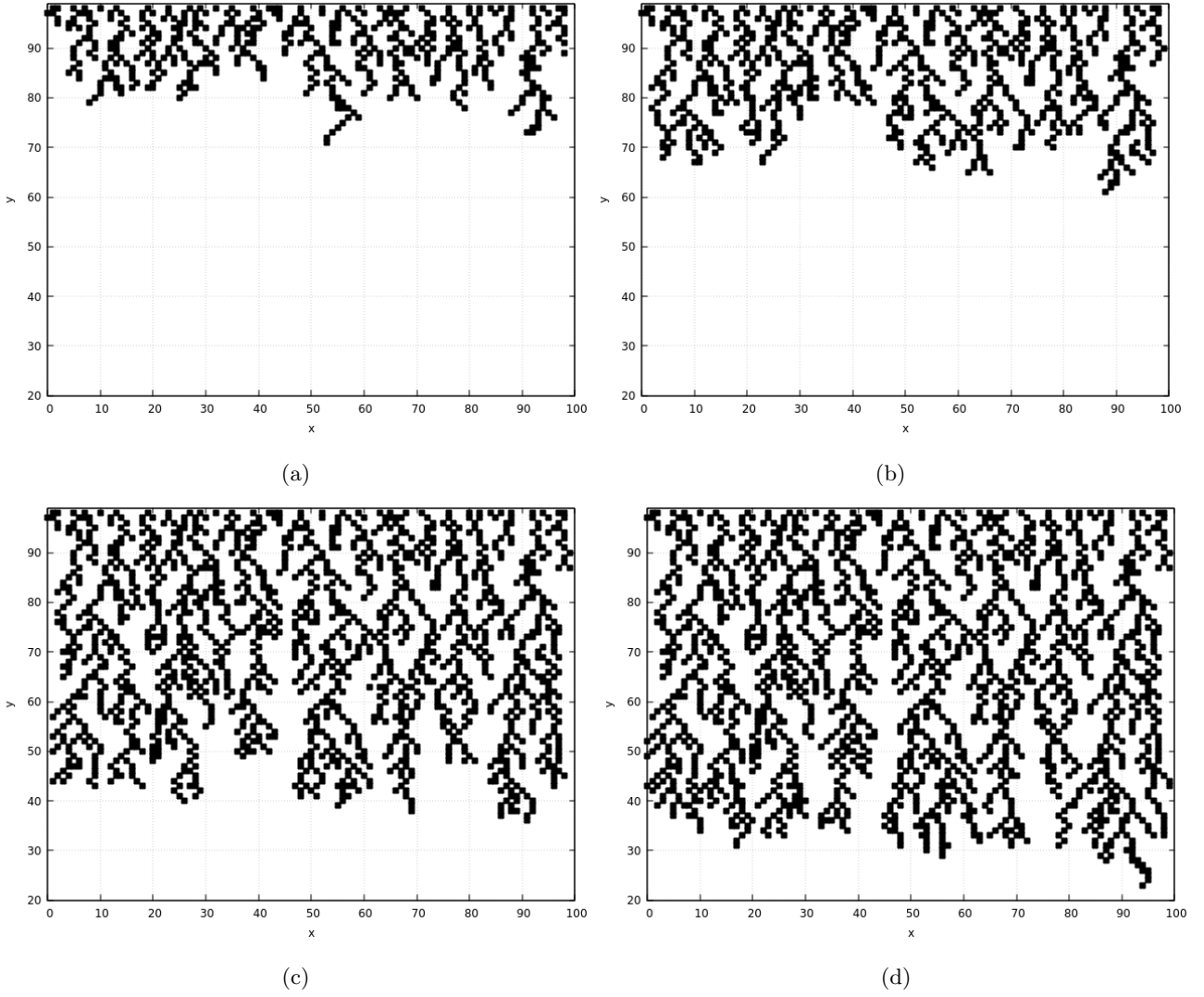


Figure 6: Evolução temporal do crescimento do *cluster* para o modelo DLA modificado após o número de partículas p dispersas ser dado por (a) $p = 500$, (b) $p = 800$, (c) $p = 1500$ e (d) $p = 1800$. Por apresentar um espaço disponível para agregação mais reduzido que o modelo DLA radial (seção 4.2), mais células são preenchidas com crescimento vertical.

para este modelo, aquela que efetivamente o representa é dada pelo valor $d = 1.85$, com erro de 2%.

A dimensão encontrada, apesar de menor que 2 (como o modelo de Eden, seção 4.1), é maior que 1.56 (para o modelo DLA radial, seção 4.2). Este fenômeno pode ser explicado ao compreender que o espaço disponível para o crescimento é maior quando radial, já que suas células de deposição são os 4 vizinhos próximos da semente distribuídos angularmente, comparado a 3 vizinhos para o modelo balístico, distribuídos horizontalmente. Esta distinção torna a figura deste modelo mais preenchida e, portanto, com dimensão mais próxima a 2 que o modelo DLA anteriormente descrito.

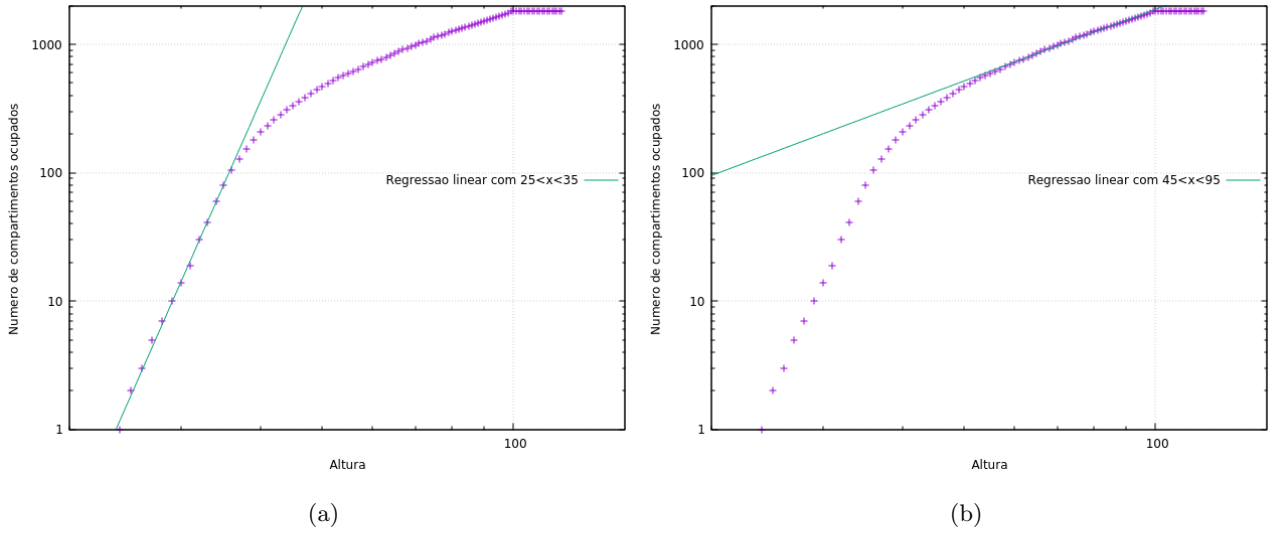


Figure 7: Número total da 'massa' do aglomerado representado por cada uma das 1800 partículas iniciais com o aumento da altura y abaixo da qual as partículas são contabilizadas. As retas representam a regressão linear em escala logarítmica dada pela função $f(x) = ax + b$ com coeficientes angulares $a = 11.2 \pm 0.2$ (a) e $a = 1.85 \pm 0.02$ (b).

4.4 Modelo DLA modificado 2 - *Cluster* móvel

Em última análise, este modelo dispõe de apenas uma semente móvel capaz de aglutinar partículas em repouso dispostas aleatoriamente sobre o sistema físico disponível para seu movimento.

Seu crescimento, como pode ser visto na figura 8, apresenta estrutura similar ao modelo DLA radial com semente em repouso (seção 4.2) porém sua construção é mais rápida, já que conforme o *cluster* cresce, mais partículas são capazes de ser agregadas com pouca movimentação. Isto, no entanto, depende da quantidade de partículas imóveis passíveis de serem adicionadas ao aglomerado.

Caso a chance de haver uma partícula imóvel para uma dada célula seja baixa, há pouca probabilidade de haver crescimento efetivo do *cluster*. Já para um sistema repleto destes entes, pouca movimentação da semente é suficiente para colapsar todo o sistema em um único corpo. Há, portanto, probabilidades que melhor demonstram este crescimento. Esta comparação pode ser feita, qualitativamente, para as figuras 8 e 9.

Na figura 8 há 20% de chance de haver uma partícula imóvel para cada célula do sistema, já para a figura 9, há 30% de chance. Logo, notamos que a sensibilidade do sistema é grande, onde pequenas alterações da condição de preenchimento do espaço são responsáveis por colapsá-lo em um único corpo móvel, como é intuitivamente esperado.

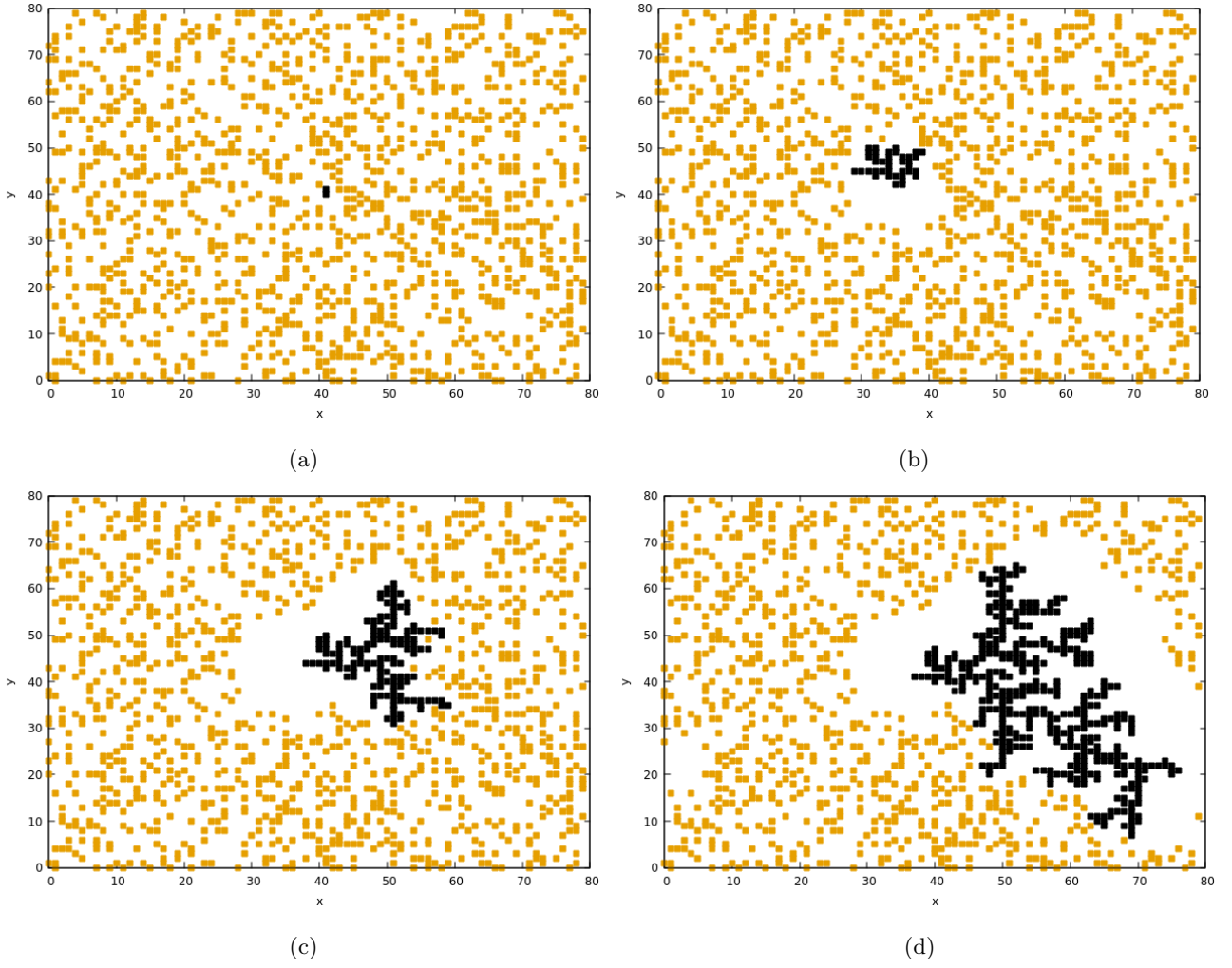


Figure 8: Evolução temporal do crescimento do *cluster* para o modelo DLA modificado dada uma condição inicial de $p = 0.2$ para a probabilidade existência de partícula móvel para uma dada coordenada (x, y) para intervalos de tempo (a) $t = 1$, (b) $t = 50$, (c) $t = 100$ e (d) $t = 200$

5 Conclusão

Os modelos de crescimento mostram-se métodos interessantes de simulação de comportamentos de sistemas físicos reais, uma vez que são dotados de características quantitativas bem determinadas (dimensões fractais são bastante estáveis apesar do caráter aleatório de sua formação) e características qualitativas visualmente fáceis de analisar.

Além disso, ao possuírem regras simples de formação, sistemas complexos podem ser modelados utilizando formulações aqui propostas sem muitas complicações de processamento e com parâmetros físicos que podem ser facilmente visualizados em evoluções temporais do sistema considerado.

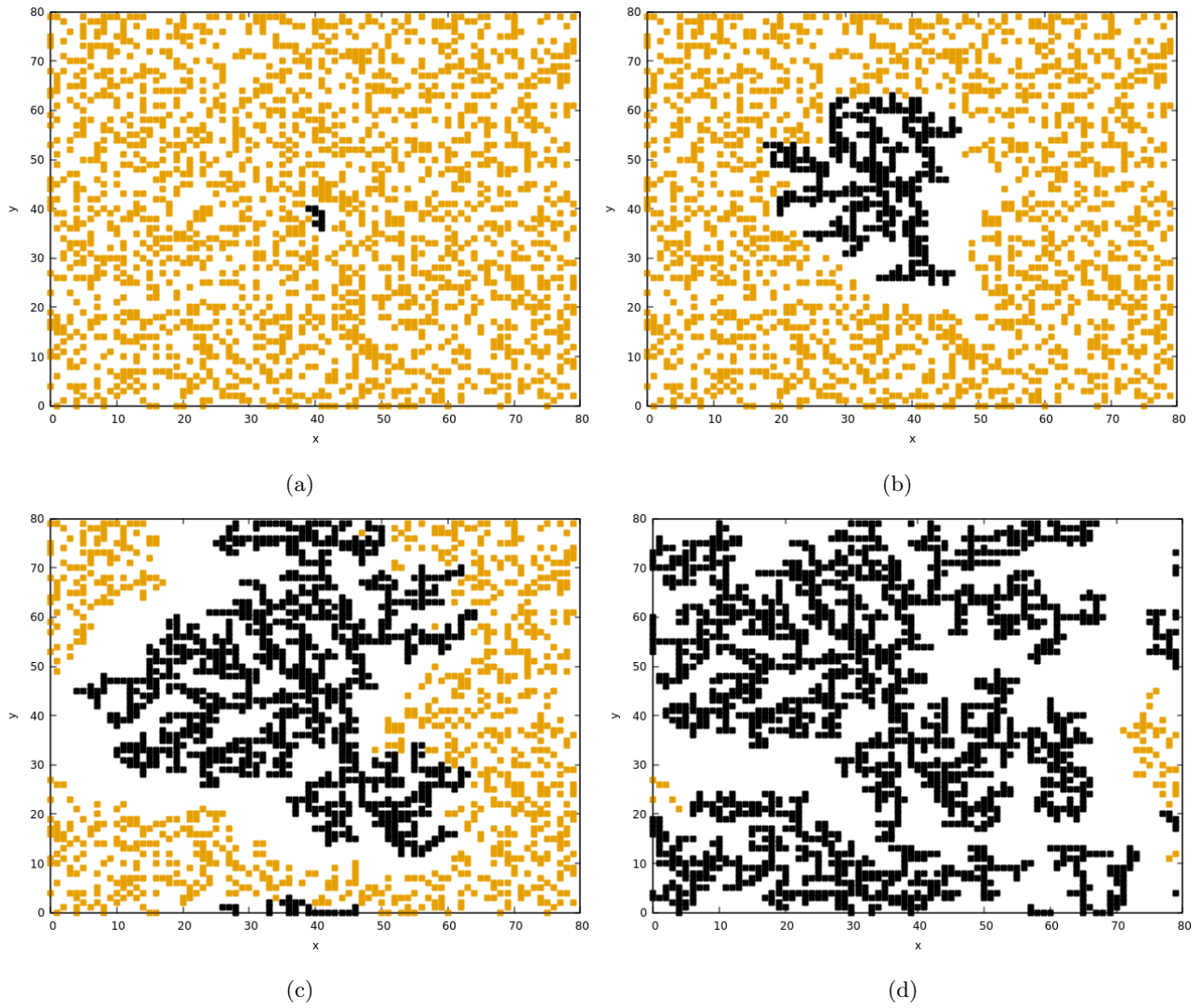


Figure 9: Evolução temporal do crescimento do *cluster* para o modelo DLA modificado dada uma condição inicial de $p = 0.3$ para a probabilidade existência de partícula móvel para uma dada coordenada (x, y) para intervalos de tempo (a) $t = 1$, (b) $t = 50$, (c) $t = 100$ e (d) $t = 200$.

6 Referências

- [1] - Lopez-Ruiz, R., González-Estevez, J. et al. An Economic Model of Coupled Exponential Maps. IEEE Workshop on Nonlinear Maps and Applications, pp 13-14, 2007.
- [2] - Mossong, J. Hens, N. et al. Social Contacts and Mixing Patterns Relevant to the Spread of Infectious Diseases. PLOS Medicine, v. 5, pp. 381-390, 2008.
- [3] - Wolfram, S. A New Kind of Science, ch. 2, pp. 23-26, 2002.
- [4] - Lahiri, T. Analysis of Cancer Growth using Modified EDEN Model. International Journal of New Innova-

tions in Engineering and Technology, v. 3, issue 2, pp. 18-23, 2015.

[5] - Persson, M., Yasuda, H. et al. Modeling plot scale dye penetration by a diffusion limited aggregation (DLA) model. Journal of Hydrology, v. 250, pp. 98-105, 2001.

7 Códigos

A seguir são disponibilizados os códigos de cada um dos modelos de crescimento apresentados neste trabalho. Para cada um há uma breve descrição de seu funcionamento.

7.1 Modelo de Eden

Para cada interação temporal, um vizinho do *cluster* deve ser ligado aleatoriamente. Assim, em cada tempo, é necessário guardar a posição de células com ao menos um vizinho ativado para que uma delas seja escolhida aleatoriamente, ligada e salva na matriz principal, para que a próxima iteração a contabilize como ativada.

```
L=200
M1=np.zeros((L,L)) #Matriz L,L como espaco fisico
T=3000 #Tempo transcorrido

M1[int(L/2),int(L/2)]=1 #Posicionamento de semente
arq=open('edenT%s.dat' %(T), 'w')

t=0 #Contagem de espaco temporal
while t<T:
    nearTot=0 #Numero total de posicoes vizinhas de uma celula em estado ligado
    nearCoord=[] #Lista de coordenadas das posicoes desligadas que possui ao menos um vizinho ligado
    i=0
    while i<L-1:
        j=0
        while j <L-1:
            if M1[i+1,j] == 1 or M1[i-1,j] == 1 or M1[i,j+1] == 1 or M1[i,j-1] == 1:
                if M1[i,j] != 1: #Caso a coordenada (i,j) esteja desligada e possua ao menos um
                    vizinho ativo
                    nearTot+=1
                    nearCoord.append((i,j))
            else:
                pass
        j+=1
    i+=1
    t+=1
```

```

        j+=1
    i+=1

    r=int(np.random.random()*nearTot) #Escolha de um numero inteiro no intervalo [0, nearTot]
    M1[nearCoord[r]]=1 #Ativacao de estado em coordenada aleatoriamente escolhida
    arq.writelines([str(nearCoord[r][0]), '\t', str(nearCoord[r][1]), '\n'])

print(t)
t+=1

```

7.2 Modelo DLA

Neste modelo, os sorvedouros de partículas devem ter suas posições bem definidas para que um deles seja escolhido aleatoriamente para criar uma partícula. As partículas devem ter sua posição armazenada (aqui, um marcador -1 é atribuído à sua posição corrente) para que, a cada salto temporal, sua posição seja movida para um de seus vizinhos próximos. Caso sua coordenada possua ao menos uma partícula pertencente ao cluster (cujas posições são marcadas pelo índice 1), a mesma é agregada e seu estado modifica-se para 1.

Por otimização computacional, caso a partícula errante encontre o cluster, o ciclo de movimentação é forçado a parar e uma nova partícula é criada de um novo sorvedouro escolhido.

```

N=100
M=np.zeros((N,N)) #Matriz N,N como espaco fisico
M[int(N/2), int(N/2)] = 1 #Posicionamento de semente ao centro do espaco
R=20 #Raio da circunferencia sobre a qual particulas serao desovadas
arq4=open('dlaP300.dat', 'w')

radius=[] #Lista com as posicoes de sorvedouro de particulas
radTot=0 #Numero de posicoes de desova
x=0
while x<N:
    y=0
    while y<N:
        if np.sqrt((x-int(N/2))**2 + (y - int(N/2))**2) == R: #Caso o elemento (x,y) esteja sobre a
            circunferencia
            radius.append((x,y))
            radTot+=1
        y+=1
    x+=1

```

```

P=1000 #Numero de particulas a serem desovadas
p=0
while p<P:
    M[radius[int(np.random.random()*radTot)]] = -1 #Marcacao de uma particula aleatoriamente
        escolhido de um sorvedouro com o indice -1
    T=20 #Tempo de caminhada por particula (numero de passos)
    t=0
    while t<T: #Para cada tempo, a area delimitada em um quadrado com lado 2*R sera percorrida
        i=int(N/2)-2*R
        while i<int(N/2)+2*R:
            j=int(N/2)-2*R
            while j<int(N/2)+2*R:
                if M[i,j] == -1: #Caso haja uma particula na posicao (i,j)
                    nearCor=[(i+1,j),(i-1,j),(i,j+1),(i,j-1)]
                    if M[(i+1,j)] == 1 or M[(i-1,j)] == 1 or M[(i,j+1)] == 1 or M[(i,j-1)] == 1: #Caso
                        a particula -1 encontre particulas pertencentes ao cluster, seu estado passa a
                        1 e uma nova particula e solta
                        M[i, j] = 1

                    arq4.writelines([str(i), '\t', str(j), '\n'])
                    break

                else:
                    M[nearCor[int(np.random.random()*4)]]=-1 #Caso nao encontre uma particula na
                        vizinhanca, a particula -1 se move para uma posicao em sua vizinhanca
                    M[i,j] = 0

                j+=1
            if M[(i + 1, j)] == 1 or M[(i - 1, j)] == 1 or M[(i, j + 1)] == 1 or M[(i, j - 1)] == 1:
                break
            i+=1
        t+=1
    print(p)
    p+=1

arq4.close()

```

7.3 Modelo DLA modificado 1

Na deposição de partículas sobre um eixo fixo, o mesmo deve ter sua posição guardada (aqui, marcada com o estado 1), assim como do eixo oposto. Para cada partícula, uma posição do eixo sorvedouro é escolhida aleatoriamente e marcada com a presença de partícula (índice -1).

Para otimização de execução, como as partículas devem se mover de um eixo ao outro, uma única iteração sequencial sobre a matriz N,N é capaz de agregá-la ao *cluster*, pois as posições da vizinhança possíveis de movimentação pertencem à linha seguinte de iteração. Quando uma das coordenadas vizinhas à sua posição corrente, seu estado se altera de -1 para 1 e uma nova partícula é desovada.

```
N=100
M=np.zeros((N,N)) #Matriz N,N de espaco fisico
M_coords=[] #Coordenadas do eixo sorvedouro de particulas (oposto ao de deposicao)
M_tot=0

arq10=open('dlaMod1_d500.dat', 'w')

n=0
while n<N:
    M[N-1,n]=1 #Marcacao das posicoes pertencentes ao eixo de deposicao com o indice 1
    M_coords.append((0,n))
    M_tot+=1
    n+=1

D=1800 #Numero de particulas soltas
d=0
while d<D:
    drop=M_coords[int(np.random.random()*M_tot)]
    M[drop]=-1 #Marcacao de uma posicao aleatoria do eixo oposto ao de deposicao com o indice -1
    x=0
    while x<N-1:
        y=0
        while y<N:
            if y!=0 and y!=N-1: #Vizinhanca daas posicoes de borda com condicao de contorno reflexiva
                neigh=[(x+1,y-1),(x+1,y),(x+1,y+1)]
            elif y==N-1:
                neigh=[(x+1,y-1),(x+1,y)]
            else:
                neigh=[(x+1,y),(x+1,y+1)]
```



```

if M[x,y]==-1:
    r=neigh[int(np.random.random()*len(neigh))] #Escolha de uma posicao vizinha de (i,j)
        onde ha uma particula
    if len(neigh)==3: #Movimento em ausencia de bordas
        if M[neigh[0]]==1 or M[neigh[1]]==1 or M[neigh[2]]==1:
            M[x,y]=1
            arq10.writelines([str(x), '\t', str(y), '\n'])
            break
        else:
            M[x, y] = 0
            M[r] = -1
    else: #Movimento na presenca de bordas
        if M[neigh[0]]==1 or M[neigh[1]]==1: #Quando a particula -1 encontrar posicoes de
            deposicao, marcadas com indice 1, seu estado e alterado para 1
            M[x,y]=1
            arq10.writelines([str(x), '\t', str(y), '\n'])
            break
        else:
            M[x, y] = 0
            M[r] = -1

y+=1

if y!=N and M[x,y]==-1:
    if len(neigh) == 3:
        if M[neigh[0]] == 1 or M[neigh[1]] == 1 or M[neigh[2]] == 1:
            break
    else:
        if M[neigh[0]] == 1 or M[neigh[1]] == 1:
            break

x+=1
print(d)
d+=1

arq10.close()

```

7.4 Modelo DLA Modificado 2

Para que o *cluster* mova-se como um todo, a posição das partículas imóveis (aqui, atribuídas em índice -1) e de todo o aglomerado (índice 1) deve ser guardada para cada passo temporal.

Para cada passo temporal, primeiramente as posições do aglomerado são reconhecidas e partículas imóveis próximas têm seu estado alterado de -1 para 1. Em seguida, para uma direção de movimento escolhida aleatoriamente, todas as partículas do *cluster* são movidas. No tempo seguinte, o processo é repetido.

Para que não houvessem problemas com condições de contorno, o agregado é mantido livre através de bordas toroidais, i.e., bordas periódicas, fazendo com que não haja restrição do espaço de movimento.

```
N=80
M=np.zeros((N,N)) #Matriz N,N do espaco fisico
i=0
while i<N:
    j=0
    while j<N:
        if np.random.random()<=0.2: #Aleatoriamente uma coordenada da matriz e marcada com o indice
            -1, indicando presenca de particula em repouso
            M[i,j]=-1
        else:
            pass

        j+=1
    i+=1

M[int(N/2),int(N/2)]=1 #Posicionamento de semente movel de agregacao ao centro do sistema

arq11=open('dlaMod2t50.dat', 'w')

T=202 #Tempo de movimento (numero de passos dados pela particula/cluster em movimento)
t=0
while t<T:
    r = np.random.random() #Escolha de um numero aleatorio para expressar o movimento do sistema todo
        para a direita, esquerda, cima ou baixo
    occup=[] #Lista com posicoes ocupadas por particulas clusterizadas
    x=0
    while x<N:
        y=0
        while y<N:
```

```

    neighs=[((x+1)%N,y%N), ((x-1)%N,y%N), ((x)%N,(y+1)%N), ((x)%N,(y-1)%N)] #Vizinhanca com
        contorno toroidal (periodico)
    if M[x,y]==1 and (x,y) not in occup:
        occup.append((x,y))
        for u in neighs:
            if M[u] ==-1 and u not in occup:
                M[u]=1
                occup.append(u) #Marcacao de nova partícula móvel clusterizada com índice 1,
                    evitando contagem múltipla

        y+=1
    x+=1

m=0
while m<len(occup): #Iteracao sobre posicoes ocupadas pelo cluster
    neighbs=[((occup[m][0]+1) % N, (occup[m][1]) % N), ((occup[m][0]-1) % N, (occup[m][1]) % N),
        ((occup[m][0]) % N, (occup[m][1]+1) % N), ((occup[m][0]) % N, (occup[m][1]-1) % N)]
    for v in neighbs:

        if M[v]==-1 and v not in occup:
            M[v]=1
            occup.append(v) #Caso o aglomerado possua uma partícula imóvel em sua vizinhanca
                próxima, a mesma tem seu estado alterado de -1 para 1, e passa a fazer parte do
                cluster

        m+=1

p=0
while p<len(occup): #Para todas as posicoes ocupadas pelo cluster, todas as posicoes serao
    movidas para uma das vizinhanças próximas, aleatoriamente
    if r<0.25:
        M[(occup[p][0]+1) % N, (occup[p][1]) % N] += 1
    elif r>0.25 and r<0.5:
        M[(occup[p][0]-1) % N, (occup[p][1]) % N] += 1
    elif r>0.5 and r<0.75:
        M[(occup[p][0]) % N, (occup[p][1]+1) % N] += 1
    else:
        M[(occup[p][0]) % N, (occup[p][1]-1) % N] += 1

    M[occup[p]]=-1

    if t==50:
        arq11.writelines([str(occup[p][0]), '\t', str(occup[p][1]), '\n'])

```

```

else:
    pass
p+=1

if t==50: #Arquivo de posicoes com particulas ainda paradas (fim visual)
    arq101=open('dlaMod2fim%s.dat' %(t), 'w')
    f=0
    while f<N:
        g=0
        while g<N:
            if M[f,g]==-1:
                arq101.writelines([str(f), '\t', str(g), '\n'])

            g+=1
        f+=1
    arq101.close()
    t+=1

arq11.close()

```
