

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ CENTRO DE CIÊNCIAS DEPARTAMENTO DE FÍSICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

JORGE ROBERTO PEREIRA DA SILVA

INVASÕES MÚLTIPLAS EM MEIOS POROSOS DESORDENADOS

FORTALEZA 2013

JORGE ROBERTO PEREIRA DA SILVA

INVASÕES MÚLTIPLAS EM MEIOS POROSOS DESORDENADOS

Dissertação submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Ascânio Dias Araújo

FORTALEZA

2013

JORGE ROBERTO PEREIRA DA SILVA

INVASÕES MÚLTIPLAS EM MEIOS POROSOS DESORDENADOS

Dissertação submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física

Aprovada em 07/02/2013

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Ascânio Dias Araújo (Orientador) Universidade Federal do Ceará

Dr. Erneson Alves de Oliveira

Prof. Dr. Francisco Wellington de Sousa Lima Universidade Federal do Piauí

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação Universidade Federal do Ceará Biblioteca Setorial de Física

S58i	SILVA, Jorge Roberto Pereira da.
	Invasões Múltiplas em Meios Porosos Desordenados /
	Jorge Roberto Pereira da Silva. – 2013.
	73 p.; il. algumas color., enc.; 30cm.
	Dissertação - Universidade Federal do Ceará, Departa-
	mento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física,
	Centro de Ciências, Fortaleza, 2013.
	Área de Concentração: Física da Matéria Condensada
	Orientação: Prof. Dr. Ascânio Dias Araújo
	1. Física Estatística. 2. Percolação. 3. Fluidos. 4. Invasão.
	I. Título.
	CDD:530.13

Aos Meus Pais, Francisco Chagas da Silva e Maria Liduina Pereira da Silva, e meus irmãos, que me apoiaram e incentivaram em todos os momentos.

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais e irmãos, que me apoiaram durante toda minha vida.

Agradeço ao professor Ascânio D. Araújo, por sua orientação atenciosa durante a elaboração desse trabalho.

Aos meus tios e primos, por me darem apoio e moradia durante toda minha trajetória acadêmica.

Aos colegas de grupo Janete, Pablo, Rilder e Roberto, pela amizade e discussões.

A todos os demais colegas da pós-graduação, pelas horas de convivência.

Aos funcionários e demais professores do Departamento de Física, sem os quais não teria conseguido concluir o curso.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta dissertação, investigamos por meio de simulação computacional propriedades geométricas e de transportes relacionadas ao fenômeno de invasão em meios porosos desordenados no regime de invasão muito lento em sistemas bidimensionais e tridimensionais. O meio poroso considerado aqui é representado por meio de uma estrutura desordenada onde a cada poro que compõe este meio se associa um número aleatório obtido a partir de uma distribuição uniforme. Considerando o regime lento de invasão, onde as forças capilares dominam o escoamento em relação as forças viscosas, utilizando para a dinâmica de invasão o modelo de percolação invasiva sem aprisionamento. Introduzimos um variante no modelo de percolação invasiva, assumindo o aspecto de múltiplas invasões, onde a cada nova invasão apenas parte do substrato utilizado na invasão anterior pode ser invadido novamente. Em uma primeira parte, estudamos como o processo de múltipla invasão altera as características do agregado invadido. Valores estimados para a dimensão fractal da região invadida revelam que os expoentes críticos variam em função do número de geração G, isto é, o número de vezes que o processo de invasão foi repetido. Com base em dados numéricos, mostramos que a massa média do agregado invadido decresce na forma de uma lei de potência como função de $G, M \sim G^{-\beta}$, onde o expoente $\beta \approx 0.59 \ (2D)$ e $\beta \approx 0.73 \ (3D)$. Investigamos como a dimensão fractal do agregado invadido varia em função dos repetitivos processo de invasão, mostrando que as mesmas variam de $d_f = 1.89 \pm 0.02$ até $d_s = 1.22 \pm 0.02$ para o caso (2D) e $d_f = 2.52 \pm 0.02$ até $d_s = 1.46 \pm 0.02$ para o caso (3D). Os resultados confirmam que o processo de múltiplas invasões segue uma transição continua entre as classes de universalidade do modelo de percolação invasiva sem aprisionamento e caminho ótimo, sendo este comportamento observado em duas e três dimensões. Um outro aspecto investigado nessa dissertação, foi o fenômeno de avalanche que ocorre durante o processo de invasão. Investigamos como a distribuição de tamanhos de avalanche, que se comporta na forma de uma lei de potência $P(S,L) \sim S^{-\tau}$, se altera em função das múltiplas invasões. Mais precisamente, calculamos como o expoente τ que governa o comportamento das avalanches se altera em função do número de geração G. Verificamos que este comportamento do expoente τ em função de G é semelhantes para duas e três dimensões, apresentando uma região de mudança suave seguida por uma mudança mais acentuada até atingir um limite de saturação, onde o sistema se comporta de maneira parecida com o caso unidimensional.

Abstract

In this dissertation, we investigate by means of numerical simulations geometrical and transport properties related with the invasion phenomena through disordered porous media in a very slow invasion regime, using two and three dimensions porous medias. Here, the porous media is modeling by means of a random structure, where each pore is represented by a random number comes from a uniform distribution. We assume that the invasion process occurs in the limit of very low viscous force, which means that the invasion process is controlled by capillary force. In this limit the invasion percolation model without trap is suitable. The new aspect incorporated here, consists basically of a multiple invasion process, where after the first invasion takes place only part of the structure of the porous, that was invaded previous, can be invaded again. We study, how the multiple invasion changes the fractal dimension of the invaded cluster. Estimated values for the fractal dimension of the invaded region reveal that the critical exponents vary as a function of the generation number G, i.e., where the number of times the invasion takes place. On base in numerical datas, we show the averaged mass M of the invaded region decreases with a power law as a function of G, $M \sim G^{-\beta}$, where the exponents $\beta \approx 0.59$ (2D) and $\beta \approx 0.73$ (3D). We also investigated, how the fractal dimension changes as a function of G, find that the fractal dimension of the invaded cluster changes from $d_f = 1.89 \pm 0.02$ to $d_s = 1.22 \pm 0.02$ and $d_f = 2.52 \pm 0.02$ to $d_s = 1.46 \pm 0.02$ for (2D) and (3D), respectively. These results confirm that the multiple invasion process follows a continuous transition from one universality class (nontrapping invasion percolation) to another (optimal path), furthermore these change are continuos for both dimensionality. Another aspect investigated, was the avalanche distribution in the invasion process. We analyzed how the distribution of avalanche changes as function of G, more precisely, how the multiple invasion process changes the exponent τ of the power law distribution. Regardless the values, we find that the behaviour of the exponents τ looks like the same for both dimensions studied. The exponents τ , initially change in a very slow way until reach a region, of certain value of G which depend on the dimension, they start to decrease in a deep way until reach the saturation value. The saturation value is close, for (2D), to one-dimension case.

Sumário

p. 10

INTRODUÇÃO

1	DE	FINIÇ	ÕES E CONCEITOS TEÓRICOS	p. 14
	1.1	Fracta	uis	p. 15
		1.1.1	Fractais Determinísticos e Dimensão Fractal	p. 15
		1.1.2	Fractais Estatísticos	p. 18
		1.1.3	Métodos Aproximativos para o Cálculo da Dimensão Fractal $\ .$.	p. 19
	1.2	Teoria	a da Percolação	p. 21
		1.2.1	O Modelo de Percolação	p. 21
		1.2.2	O Modelo do Fogo na Floresta	p. 27
	1.3	Parân	netros do Modelo de Percolação	p. 29
		1.3.1	Agregados em Percolação	p. 29
		1.3.2	Comprimento de Correlação	p. 33
		1.3.3	Sub-estruturas do Agregado Incipiente	p. 35
2	PE	RCOL	AÇÃO INVASIVA	p. 39
	2.1	Introd	lução	p. 39
	2.2	O Mo	delo de Percolação Invasiva	p. 40
	2.3	Avala	nches	p. 48
3	PE	RCOL	AÇÃO INVASIVA MÚLTIPLA	p. 51
	3.1	Introd	lução	p. 51
	3.2	Result	ados e Discussões	p. 55

3.2.1 Massa do Agregado Invadido		p. 55
3.2.2	Avalanches	p. 63
4 CONCLU	SÃO	p. 69
Referências		p. 71

INTRODUÇÃO

Atualmente, o estudo de fenômenos de transporte em meios irregulares, naturais ou artificiais, é de grande relevância tendo em vista suas inúmeras aplicações tecnológicas e industriais.O desenvolvimento de técnicas de modelagem para descrição de fenômenos de transporte que ocorrem em meios irregulares representa hoje um verdadeiro desafio científico. Quando tratamos com transporte de fluidos, a interação entre a estrutura desordenada do espaço poroso e a dinâmica do movimento do fluido oferece um aumento significativo na variedade de fenômenos que ocorrem simultaneamente durante o escoamento. As leis de transporte clássico, nesses casos, não serão mais válidas, sendo necessário, além do conhecimento do processo físico envolvido, o detalhamento da morfologia do sistema. Sistemas cuja morfologia pode influenciar na descrição do processo de transporte incluem, por exemplo, geometrias associadas a sistemas desordenados e sistemas que apresentam invariância de escala. Para se detalhar essa morfologia foi definida uma nova classe geométrica cujos objetos de estudo não podiam ser descritos pela Geometria Euclidiana, denominada de Geometria Fractal, e que propõe novos conceitos quanto as definições de sua morfologia.

Sistemas desordenados vêm sendo investigados há muito tempo por meio de diversos modelos tanto do ponto de vista analítico como computacional. Entre esses, encontrase a teoria da percolação. Desde sua proposição por Broadbent e Hammersley [1], em 1957, os modelos de percolação têm sido extensivamente estudados tanto na sua versão por ligações quanto na versão por sítios. Percolação é um modelo que trata do estudo da desordem binária dos seus elementos (sítio ou ligação) quando estes são alocados em uma rede seguindo uma probabilidade de ocupação previamente estabelecida. Basicamente, este modelo apresenta uma transição de fase estrutural de segunda ordem, quando a fração de ocupação p de seus elementos constituintes atinge um valor limite, denominado de percolação crítica p_c . A partir desse valor crítico de ocupação, o sistema apresenta uma transição de fase estrutural passando de localmente conectado a globalmente conectado. Nesse valor de ocupação, existe uma estrutura que se estende por toda rede conectando lados opostos da mesma. Em percolação, utiliza-se o conceito de aglomerado, que pode se estabelecer na forma de sítios, ligações ou estados coincidentes (spins) e estes são em-

11

pregados no estudo de sistemas que apresentam desordem estrutural e auto-similaridade estatística na sua composição. O modelo de percolação é bastante utilizado no estudo de fenômenos de transporte, para representar os meios porosos desordenados. Nesse contexto, a teoria de percolação apresenta-se também como uma ferramenta adequada, tanto pela sua simplicidade conceitual quanto pela facilidade de sua implementação por meio de ferramentas computacionais.

Uma outra variante do modelo de percolação ordinária é a percolação invasiva. Este modelo foi introduzido por Wilkinson e Willemsen [2], em 1983, para estudar o comportamento de dois fluidos imiscíveis em um meio poroso. Trata-se de um modelo dinâmico, onde o crescimento do agregado invadido ocorre por meio da seleção de caminhos que oferecem a menor resistência ao deslocamento da interface de separação entre os fluidos através do meio. A percolação invasiva é um tipo de modelo criticamente autoorganizado, ou seja, que evolui naturalmente para o estado crítico e exibe um comportamento invariante de escala. Um outro aspecto inerente ao modelo de percolação invasiva é a presença de *avalanches* durante o processo de invasão. Credita-se a ocorrência de tal fenômeno, a criticalidade em sistemas dinâmicos, isto é, avalanches ocorrem quando sistemas se encontram na fronteira entre estabilidade e instabilidade. Nesse modelo a interface de crescimento do agregado invadido, representa a interface de separação entre os dois fluidos que se movimenta no interior do meio poroso. Em termos práticos, quando um fluido invasor é injetado em um meio poroso, preenchido anteriormente por um fluido defensor, a dinâmica de invasão pode ser controlada por dois regimes distintos, nos quais as forças dominantes podem ser de natureza viscosa ou capilar. Tais regimes dependem da taxa de injeção do fluido invasor e suas descrições teóricas se baseiam basicamente em dois modelos distintos: o DLA (Diffusion-Limited Aggregation) [3], que ocorre para altas velocidades de deslocamento e é dominado por forças viscosas; e a percolação invasiva, que surge quando o fluido escoa lentamente, sendo dominado por forças capilares.

Muitas modificações foram propostas ao modelo de percolação invasiva tradicional na tentativa de incorporar características adicionais observadas nos mais variados processos de invasão que ocorrem na natureza. Podemos destacar entre estas modificações as que consideram a ação de um campo externo durante o processo de invasão [4] ou incorporam efeitos convectivos atuando em alguma direção privilegiada [5]. Um outro aspecto possível de ser incorporado ao modelo de percolação tradicional, seria o aspecto repetitivo do processo de invasão [6]. Acredita-se que o caráter repetitivo do processo de invasão pode estar presente no processo de formação de veias de pedras preciosas e minérios [7, 8]. Tal formação pode ser um produto de intrusões múltiplas de um fluido reagente em solo poroso, provocando processos de dissolução e, subsequente, recristalização. Sabe-se que a distribuição da rede de depósitos de minério apresenta uma estrutura fractal que pode ser considerada para exploração mineral. Uma situação semelhante pode ser encontrada em vulcanologia, quando o magma é repetidamente injetado sobre o mesmo caminho, até atingir a superfície da Terra. Vale salientar que o processo de reinvasão de magma que ocorre no interior da terra se origina em mecanismos tectônicos ocorrendo em uma escala de tempo muito grande. Após uma determinada invasão ocorrida pelo magma, até a próxima invasão ocorrer, vários processos físico-químicos acontecem permitindo que a estrutura seja estabelecida novamente, porém ficando um pouco mais frágil do que as regiões que nunca foram invadidas. Quando ocorre uma nova invasão, esta irá prioritariamente ocorrer nas regiões que já sofreram algum tipo de dano decorrente da última invasão.

Desse modo, um modelo de percolação invasiva modificado, visando incorporar os aspectos citados anteriormente, permite que um certo número de sítios do sistema possam ser invadidos diversas vezes. Esse modelo é conhecido como *percolação invasiva múltipla* [6] e estuda a evolução da estrutura porosa após diversos casos de invasão. Nesse trabalho de dissertação, propomos uma variante do modelo de percolação invasiva onde existe um mecanismo de memória no sistema, que por um motivo estrutural faz com que as novas invasões acabem ocorrendo em regiões já invadidas previamente. Essa nova estrutura invadida pode ser totalmente ou parcialmente coincidente com as regiões invadidas previamente. Para essa variante do modelo de percolação invasiva, calculamos as dimensões fractais e expoentes críticos inerentes do modelo.

No capítulo 1, introduzimos os conceitos básicos sobre estruturas fractais como auto-similaridade e métodos para determinação de suas respectivas dimensões. Introduzimos, ainda, os fundamentos teóricos da percolação, enfatizando o aspecto heterogêneo dos agregados de percolação. Demonstramos que o agregado percolante apresenta invariância de escala e que o comportamento de uma determinada grandeza associada a esta estrutura, como a massa ou uma propriedade de transporte, em função de seu tamanho, é regido por uma lei de potência.

No capítulo 2, apresentamos o modelo de percolação invasiva como um modelo dinâmico de percolação. Esse modelo é empregado para descrever a fenomenologia envolvida no processo de deslocamento de uma interface de separação entre dois fluidos imiscíveis com viscosidades distintas no interior de um meio poroso. À dinâmica de invasão, impusemos a condição de que a propagação do fluido invasor ocorre a partir de um sítio previamente escolhido (centro da rede) até o instante em que a interface atinge um dos sítios da borda do sistema. Apresentamos um estudo detalhado da dinâmica de crescimento e da estrutura do agregado, verificando a presença de leis de escala.

No capítulo 3, introduzimos os conceitos de percolação invasiva múltipla como um modelo mais realístico de fenômenos naturais como o processo de recristalização. Nosso estudo é restrito ao escoamento bifásico compressível no limite quase-estático em que as forças viscosas podem ser ignoradas em comparação às forças capilares. Posteriormente, nos dedicamos à análise e exposição dos resultados obtidos para o modelo de percolação invasiva múltipla. Analisamos o comportamento da massa do agregado invadido em função do número de invasões. Também fizemos uma análise sobre o comportamento das avalanches, que são presentes durante o fenômeno de invasão no modelo de percolação invasiva. Constatamos que o expoente que controla a distribuição de avalanches, muda em função do número de invasões. Verificamos que o processo atinge um regime de saturação, modificando a classe de universalidade dos expoentes críticos da percolação invasiva tradicional.

Por fim, apresentamos as considerações finais acerca do trabalho aqui desenvolvido. Sugestões e perspectivas são delineadas objetivando a realização de trabalhos futuros nessa mesma linha de pesquisa.

1 DEFINIÇÕES E CONCEITOS TEÓRICOS

Clouds are not spheres, mountains are not cones, coastlines are not circles, bark is not smooth, nor does lightning travel in a straight line.¹ Benoît B. Mandelbrot

A geometria fractal surgiu da necessidade de descrever objetos e fenômenos naturais, tais como superfícies de montanhas, nuvens, trajetória de partículas e linhas de escoamento em sistemas complexos, que apresentavam dificuldades de detalhamento a partir da geometria Euclidiana. Deste modo, originou-se a geometria baseada em um conjunto de formas, denominadas fractais, capaz de investigar a morfologia de objetos irregulares ou fragmentados [9].

Conceitos geométricos que transcenderam a geometria tradicional já haviam sido desenvolvidos por matemáticos, mas não foram aceitos de imediato por serem um tanto abstratos [10]. Tais conceitos só obtiveram aceitação científica alguns anos depois, quando o matemático Benoît B. Mandelbrot [9] reuniu esse conjunto de informações de forma coerente e criativa.

O termo fractal (fractal, i.e., que pode ser dividido infinitamente, originária do Latin *fractus*, do verbo *fragere*, que significa quebrar, fragmentar) foi introduzido no meio científico em 1975, quando Mandelbrot o utilizou na sua obra *Les Objets Fractals* [12]. Segundo Mandelbrot, fractal é uma forma geométrica fragmentada que pode ser dividida em partes e cada parte é uma cópia reduzida do todo [9]. Em outras palavras, o objeto sempre parece o mesmo quando observado em diferentes escalas. Esses objetos fractais surgiram nas últimas décadas e são bastante utilizados em análises morfológicas de fenômenos naturais complexos presentes em diversas áreas do conhecimento.

 $^{^1}$ Nuvens não são esferas, montanhas não são cones, linhas costeiras não são círculos, cascas não são lisas, nem relâmpagos viajam em uma linha reta.

A ideia de fractal está fortemente ligada às propriedades de invariância sob mudança de escala e o seu estudo requer uma análise das características matemáticas que os definem, como comprimentos, áreas e as correspondentes dimensões fractais.

1.1 Fractais

1.1.1 Fractais Determinísticos e Dimensão Fractal

Os fractais podem ser classificados quanto à sua lei de formação como *deter*minísticos ou estatísticos [9].

Os fractais determinísticos são aqueles gerados a partir de uma lei de formação (sistemas de funções iterativas) que pode ser expressa analiticamente. Outra característica associada aos fractais determinísticos é a auto-similaridade exata. Compreende-se por auto-similaridade exata a invariância da estrutura após uma transformação isotrópica, o que significa que o tamanho do sistema aumenta com a mesma intensidade em todas as direções espaciais.

Para ilustrar tal propriedade, utilizaremos inicialmente como exemplo o triângulo de Sierpinski [11]. Sua construção básica começa a partir de um triângulo equilátero cheio, chamado iniciador, com comprimento lateral unitário. Inicialmente, divide-se cada segmento em duas partes iguais e soma-se outros três segmentos de tamanhos iguais de modo a formar quatro triângulos equiláteros. Em seguida, elimina-se o triângulo central, terminando assim a primeira iteração. O mesmo procedimento é repetido para cada um dos três triângulos resultantes (de comprimento 1/2), como é mostrado na Fig. 1. Porém, a curva gerada não é exatamente um fractal, mas um prefractal. Com isso, concluise que um fractal é um objeto matemático obtido no limite de uma série de prefractais quando o número de iterações n tende ao infinito [12]. O triângulo de Sierpinski é obtido quando o processo acima é iterado ad infinitum. A curva desse limite é de comprimento infinito, porém está confinada em uma região finita do plano. Deste modo, o triângulo de Sierpinski é mais "denso" que uma curva unidimensional regular, mas certamente é mais "esparso" que um objeto bidimensional. Desse modo, podemos supor que sua dimensão deve apresentar um valor intermediário entre um e dois.



Figura 1: As seis primeiras gerações do triângulo de Sierpinski. O iniciador (não mostrado) é um triângulo cheio de tamanho lateral unitário. A cada iteração, dividi-se cada triângulo em outros quatro idênticos e elimina-se o triângulo central, de tal forma que, na *n*-ésima geração, o perímetro total da curva é dado por $L(n) = (3/2)^n$. O fractal matemático é obtido quando $n \to \infty$ e tem um comprimento infinito. Disponível em: http://www.kosbie.net/cmu/spring-11/15-110/notes/recitation9.html. Acesso em fev. 2013.



Figura 2: Construção das três primeiras iterações da curva de Mandelbrot-Given. A estrutura inicial tem 8 segmentos de reta. A segunda iteração é obtida substituindo cada segmento de reta pela estrutura inicial. Repete-se esse processo *ad infinitum*. A dimensão de similaridade desse fractal é $D_s \approx 1.8928$ (Nakayama, 2003).

A dimensão de similaridade $D_s[3]$ é definida como o valor para o qual

$$\sum_{i=1}^{N} p_i^{D_s} = 1, \tag{1.1}$$

em que p_i é definido como sendo o fator de redução de cada coordenada x_i .

Como o fator de redução é o mesmo para todo segmento, $p_i = p$ para todo i, então

$$Np^{D_s} = 1 \Rightarrow D_s = -log(N)/log(p).$$
 (1.2)

Para o triângulo de Sierpinski, pode-se reparti-lo em três partes iguais reduzidas pelo fator de 1/2, e pela Eq. 1.2, obtém-se que

$$D_s = -\frac{\log(3)}{\log(1/2)} \approx 1.5850. \tag{1.3}$$

Outro exemplo típico de fractal é a *curva de Mandelbrot-Given* [13]. Esse fractal tem uma estrutura que nos lembra um agregado de percolação que veremos adiante e pode ser utilizado na descrição de meios porosos desordenados. A construção da curva de Mandelbrot-Given é feita a partir da estrutura inicial com 8 segmentos de reta. Em seguida, substitui-se cada segmento de reta pela estrutura inicial. Esse processo é reproduzido indefinidamente (ver Fig. 2).

Para esse fractal, a estrutura é ampliada em 8 partes para cada segmento. Porém, cada nova parte é reduzida por um fator de 1/3. Logo, pela Eq. 1.2,

$$D_s = -\frac{\log(8)}{\log(1/3)} \approx 1.8928.$$
(1.4)

A dimensão de Hausdorff-Besicovitch (ou dimensão fractal) é a dimensão crítica para a qual a medida M_d muda de zero para infinito, de modo que:

$$M_d(S) \propto \lim_{\delta \to 0} N(\varepsilon) \varepsilon^d = \begin{cases} 0, \ d > D; \\ \infty, \ d < D, \end{cases}$$
(1.5)

na qual $N(\varepsilon)$ é o número de compartimentos de tamanho ε necessário para cobrir todo o conjunto.

Analisando as curvas regulares como linhas, superfícies e volumes, pode-se concluir que, para objetos Euclidianos, a dimensão de Hausdorff-Besicovitch coincide com a dimensão topológica. Contudo, para fractais, em geral, D é um número não-inteiro e superior a D_T , o que nos leva a definir que *fractal é, por definição, um conjunto para o qual a dimensão de Hausdorff-Besicovitch excede estritamente a sua dimensão topológica* [9]. Vale ressaltar que, para fractais auto-similares, a dimensão de Hausdorff-Besicovitch é igual à dimensão de similaridade.

1.1.2 Fractais Estatísticos

Os fractais estatísticos são definidos como estruturas auto-similares que possuem comportamento fractal apenas quando analisados a partir de uma amostragem estatística. Isto implica que, observando uma única realização, a geometria fractal não se manisfestará. Apenas quando uma média estatística é obtida, sobrepondo-se diversas estruturas, a dimensão fractal do sistema poderá ser determinada.

Entre esses fractais, podemos citar o agregado de percolação que é composto por um conjunto de sítios que se conectam uns aos outros a partir de uma ligação de primeiros vizinhos. Esses agregados são utilizados para o estudo de fenômenos de transporte em meios porosos fortemente desordenados e apresentam características interessantes como, por exemplo, uma estrutura altamente ramificada. Outra estrutura que pode ser classificada como fractal é o agregado de invasão, que discutiremos em detalhes adiante. Tal estrutura é de grande relevância em problemas que envolvem, por exemplo, a extração de petróleo em poços e caracterização de caminhos mínimos.



Figura 3: Estrutura final de uma monocamada de polietileno fraturado em várias ampliações (Skjeltorp, 1988).

1.1.3 Métodos Aproximativos para o Cálculo da Dimensão Fractal

A definição de dimensão de Hausdorff-Besicovitch nos capacita determinar a dimensão fractal para o caso dos fractais determinísticos. Porém, precisamos recorrer a métodos computacionais para determinar a dimensão de outros tipos de fractais encontrados na natureza, uma vez que os sistemas reais não apresentam uma lei de formação bem definida em sua estrutura, restringindo assim o uso direto da definição matemática. Com esse propósito, vários métodos foram propostos, sendo um dos mais utilizados o método de contagem das caixas (*box counting method*).

Este método se baseia na divisão do objeto em pequenos compartimentos de tamanho ε . Em seguida, conta-se o número de caixas necessárias para englobar todo o objeto. O tamanho das caixas ε é reduzido sucessivamente e calcula-se, a cada vez, o número de caixas necessárias para cobrir o objeto.

Examinando a Eq. 1.5, constata-se que, para que o produto não divirja ou tenda



Figura 4: Gráfico em escala logarítmica do número de caixas de tamanho ε necessárias para cobrir a fratura mostrada na Fig. 3, em função do espaçamento ε da malha utilizada. A linha reta corresponde ao melhor ajuste à função $N(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-1}$. A dimensão fractal encontrada é $D \approx 1.68$ (Skjeltorp, 1988).

a zero, no limite assintótico em que $\varepsilon \to 0$, o fator $N(\varepsilon)$ deve crescer da mesma forma em que o fator ε^D diminui, ou seja,

$$N(\varepsilon) \propto \frac{1}{\varepsilon^D}.$$
 (1.6)

Um gráfico em escala logarítmica de $N(\varepsilon)$ em função de ε deve se apresentar na forma de uma reta cuja inclinação é a dimensão fractal.

Um exemplo que pode ser abordado por tal método é o problema da medida das fraturas de uma camada de polietileno [14]. Na Fig. 3, mostra-se uma parte da placa de polietileno e uma das malhas quadradas empregadas no processo de medida. O objetivo desse método é utilizar valores de espaçamento ε cada vez menores e, para cada um deles, contar o número $N(\varepsilon)$ de caixas necessárias para sobrepor todos os pontos que formam o contorno da fratura. O valor da dimensão fractal dessa fratura é $D \approx 1.68$ e é apresentado na Fig. 4.

Outro método que é frequentemente utilizado para determinar a dimensão fractal de estruturas desordenadas consiste em calcular a massa da estrutura com uma esfera de dimensão D centrada no fractal [12]. Deste modo, a massa da estrutura obedece a relação

$$M \propto R^D. \tag{1.7}$$

Em termos gerais M tem a forma,

$$M = A(R)R^D, (1.8)$$



Figura 5: Estrutura do raio de giração. O momento de inércia do anel de raio r é equivalente ao momento de inércia do conjunto de pontos.

em que $A(R) = A_0 + A_1 R^{-\Omega} + \dots$ tende a um A_0 constante quando $R \to \infty$. Outra observação a se fazer é que, quando os coeficientes A_1, A_2, \dots são não-nulos, A(R) é chamada de *lei de correlação de escala*.

Quando a massa do fractal é representada por um conjunto finito de pontos, o raio R é chamado de *raio de giração* e é dado por

$$R = \left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \left(\vec{r_i} - \vec{r_{cm}}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}},$$
(1.9)

onde N é o número de pontos da estrutura.

O significado físico do raio de giração pode ser dado da seguinte forma: se um conjunto de pontos aleatórios de massa M tem um momento de inércia I em torno do eixo que passa pelo centro de massa r_{cm} , ele se comporta como se toda sua massa estivesse localizada em um ponto rotacionando a uma distância R deste eixo.

1.2 Teoria da Percolação

1.2.1 O Modelo de Percolação

A palavra percolar é originária do Latin *per colare* que significa "fluir através". O termo percolação faz referência a um modelo de desordem binária onde a aleatoriedade está na distribuição dos elementos do sistema, por exemplo, condutores ou isolantes, isto é, o conceito da percolação está relacionado com questões que aparecem quando se considera a conectividade geométrica em objetos da natureza. Essa teoria foi introduzida pela primeira vez nos trabalhos de Broadbent e Hammersley [1] em 1957 com o intuito de estudar o escoamento de fluidos através de um meio desordenado. A principal característica deste modelo é a presença de um ponto crítico p_c , quando se varia o valor da probabilidade de ocupação da rede. Esse ponto crítico corresponde ao limiar de percolação abaixo do qual há perda global de conectividade da rede e somente haverá conectividade local. Em p_c ocorre uma transição de fase de segunda ordem na probabilidade de um sítio pertencer ao agregado infinito [15]. O valor de p_c varia de acordo com a geometria e conectividade da rede e só pode ser determinado exatamente para alguns tipos de rede. Porém, seu valor aproximado pode ser determinado por meio de simulações computacionais. Alguns valores para redes mais conhecidas são apresentados na Tabela 1.1.

Existem várias maneiras de implementar o modelo de percolação. Entre estas maneiras, as mais utilizadas são a percolação de sítios ou ligações, sendo os elementos de conexão da rede sítios ou ligações, respectivamente.

Na percolação por ligação, uma rede é composta por N pontos que podem ou não estar unidos por um segmento de reta, que denominaremos de ligação. A probabilidade de que tal ligação exista é p. Já na percolação por sítios, a aleatoriedade está no fato de existir ou não cada sítio, e caso um sítio tenha um vizinho a ligação entre eles é estabelecida imediatamente. Neste trabalho será descrito o modelo de percolação por sítios, sendo imediata a extensão para o modelo de ligações.

que emana de ca	ua sitio [15].				
i		<u> </u>	 · ~	 	

Tabela 1.1 Valores exatos e estimados numericamente da probabilidade crítica p_c para o

Rede	p_c - ligações	p_c - sítios
Hexagonal	$1 - 2\sin(\pi/18) \approx 0.3473^*$	0.6962
Quadrada	1/2*	0.5927
Triangular	$2\sin(\pi/18) \approx 0.6527^*$	$1/2^{*}$
Diamante	0.388	0.428
Cúbica Simples	0.2488	0.3116
Bethe	$\frac{1}{z-1}*$	$\frac{1}{z-1}*$

^{*} Resultados exatos



Figura 6: Ilustração da vizinhança de Von Neuman do sítio central de uma rede quadrada: (a) os sítios pintados de cinza representam os primeiros vizinhos, enquanto em (b), os sítios cinzas representam o conjunto formado pelos primeiros e segundos vizinhos.

Uma outra variante na implementação da teoria da percolação diz respeito ao modo como cada sítio interage com seus sítios mais próximos. No modelo padrão de percolação de sítios (e também ao longo de todo este trabalho) é adotada a *vizinhança de Von Neuman* [16] de primeiros vizinhos, como mostra a Fig. 6.

Suponha uma rede quadrada cujos sítios são alocados aleatoriamente com uma determinada probabilidade de ocupação p. Sendo a alocação de sítios aleatória, cada sítio está ocupado ou vazio independentemente do estado de ocupação de seus vizinhos. Se p for a probabilidade de um sítio da rede estar ocupado, então, a probabilidade deste mesmo sítio estar vazio será de q = 1 - p.

Possuindo a rede N elementos, ao final do processo de ocupação, pN sítios estarão ocupados e, consequentemente, qN elementos estarão vazios. Como os sítios ocupados são distribuídos aleatoriamente sobre a rede, existe a possibilidade de formação de aglomerados, ou seja, sítios ocupados podem estar localizados próximos uns aos outros. Esses aglomerados de sítios são denominados de *agregados de percolação*. A formação de agregados (*clusters*) depende essencialmente do valor de p. Quando p é pequeno, há uma pequena quantidade de sítios ocupados e predominam os pequenos agregados de sítios conectados entre vizinhos próximos. Aumentando o valor de p, os agregados conectados localmente passam a se conectarem, até um ponto em que se estabelece uma conexão global entre os agregados e forma-se uma estrutura que se estende sobre quase toda a rede conectando lados opostos da mesma, que recebe o nome de *agregado percolante*. Diminuindo o valor da probabilidade p, o tamanho desse agregado também irá diminuir. Para um determinado valor de probabilidade p, observa-se o desaparecimento do agregado percolante. O valor da probabilidade de ocupação da rede que estabelece o desaparecimento desse agregado percolante é chamado de probabilidade crítica, p_c . Desse modo, p_c indica a presença de uma transição de fase estrutural tal que: para $p > p_c$ existe a presença de conectividade global e para $p < p_c$ há perca de conectividade global. Em $p = p_c$, dizemos que a rede percolou, ou seja, existe percolação. Para a percolação de sítios em redes bidimensionais quadradas, por exemplo, a probabilidade crítica para o qual surge o agregado percolante é $p_c = 0.59275 \pm 0.00003$ [17].

A Fig. 7, mostra alguns agregados formados a partir do modelo de percolação de sítios para diferentes valores de p. Para pequenos valores de p, existe apenas pequenos agregados. Entretanto, ao atingir seu valor crítico $p = p_c$, forma-se o agregado percolante, ou agregado incipiente, além de outros agregados de tamanho variados com uma distribuição de tamanhos que apresenta um comportamento em lei de potência [18]. Na Fig. 8 essa característica é ilustrada para uma realização de uma rede quadrada de tamanho L = 1024. Nesta imagem, observa-se vários agregados de diferentes tamanhos, caracterizados pelas diferentes cores, cuja distribuição em lei de potência é regida pelo expoente de Fisher [15].



Figura 7: Efeito do aumento da probabilidade de ocupação p para uma rede de tamanho L = 128. Os valores de probabilidade são (a) p = 0.40, (b) $p = p_c$ e (c) p = 0.70. Nas imagens os agregados isolados estão em cinza e o agregado percolante em vermelho (Oliveira, 2008).



Figura 8: Rede de percolação típica de tamanho L = 1024 no ponto crítico, $p = p_c$. As diferentes cores correspondem a diferentes intervalos de tamanho de agregados. Em vermelho, o agregado percolante, enquanto que as outras cores representam os agregados isolados distribuídos pela rede (Oliveira, 2008).

1.2.2 O Modelo do Fogo na Floresta

Um modelo simples que ajuda na compreensão do fenômeno de criticalidade relacionado ao modelo de percolação é o modelo conhecido como fogo na floresta [19]. Este serve para ilustrar a ideia do limiar de percolação e como calculá-lo. O modelo do fogo na floresta tem como geometria básica uma rede de percolação, em que cada sítio é ocupado ou não por uma árvore e, através de uma dinâmica, procura-se determinar o tempo necessário para que o fogo seja completamente extinto na floresta, utilizando um processo de propagação das "chamas". Basicamente, uma rede quadrada bidimensional² de tamanho L representa a floresta, enquanto os sítios representam as árvores. Cada sítio ocupado pode assumir um entre três diferentes estados: árvore verde (saudável), árvore vermelha (em chamas, infectada) ou árvore preta (imune ou queimada).

O tempo necessário para extinção do fogo está relacionado com a probabilidade de ocupação da floresta p e o critério estabelecido para a propagação do fogo entre as árvores. Em nossa dinâmica, supomos que uma árvore incendiada só poderá transferir o fogo para as árvores que estejam em sua vizinhança imediata, empregando assim a hipótese de interação entre primeiros vizinhos de Von Neuman, e que uma árvore permanecerá queimando somente durante um intervalo de tempo. Cada intervalo de tempo na simulação corresponde a uma varredura completa através da rede, onde esta é realizada sítio a sítio de forma sequencial, da esquerda para direita e de baixo para cima. O tempo de vida, t_v , do fogo na floresta é definido como o número de varreduras através da rede até que o fim do incêndio seja atingido ou até que o fogo tenha atravessado a floresta de um lado a outro. Outra característica que pode ser imposta à propagação do fogo é a condição de contorno periódica, isto é, qualquer árvore em chamas que estiver sobre a borda esquerda da rede pode transferir suas chamas à árvore da borda direita e vice-versa.

Inicialmente, como se ilustra na Fig. 9, a floresta é criada com probabilidade de ocupação p, onde os sítios ocupados são representados como árvores saudáveis (verde) e sítios vazios como ausência de árvores (branca). Posteriormente, atea-se fogo apenas nas árvores pertencentes à primeira linha da floresta. Realizamos a simulação da dinâmica do incêndio e determinamos o tempo de vida do fogo para uma rede de tamanho L = 1000 considerando diversos valores de probabilidade p. Este processo é repetido para 1000 redes diferentes de mesmo tamanho. Por fim, calcula-se a média sobre o tempo de vida da floresta para cada valor de p. A Fig. 10 mostra o tempo de vida médio $\langle t_v \rangle$ do fogo

 $^{^{2}}$ Outros tipos de redes também podem ser investigadas por este modelo como, por exemplo, redes espirais[19].



Figura 9: Algoritmo do Fogo na Floresta para uma rede de tamanho L = 5 com p = 0.44.

na floresta como função da probabilidade de ocupação p. Para pequenos valores de p o tempo de duração do fogo é muito curto, pois existem poucos vizinhos disponíveis para serem queimados e logo o fogo é extinto. A medida que o valor da probabilidade aumenta, também cresce o tempo de vida do fogo, até que este atinge um valor máximo. Esse valor máximo ocorre em $p \approx 0.593$, próximo ao ponto crítico na percolação de sítios em uma rede quadrada. Para este valor de probabilidade, $p \approx p_c$, surge uma estrutura crítica altamente ramificada que conecta a borda inferior à superior da rede, exatamente como o agregado infinito de percolação, permitindo que o fogo atinja quase todas as regiões da floresta. Quando $p = p_c$, o tempo de vida médio, $\langle t_v \rangle$, diverge no limite de $L \to \infty$, caracterizando, assim, um comportamento crítico³. A medida que p aumenta acima do ponto crítico, o tempo de vida do fogo decresce rapidamente. Isto acontece porque a estrutura torna-se suficientemente conectada, de modo a permitir o rápido avanço do fogo. Outra observação interessante a se fazer sobre a Fig. 10 é que a curva de $\langle t_v \rangle$ em função de p não é simétrica quanto ao seu comportamento nas vizinhanças de p_c . Este comportamento caracteriza um fenômeno de transição de fase de 2^a ordem em sistemas críticos [20].

³Devido ao fato de não podermos simular redes de tamanho infinito surge a necessidade de se fazer um número muito grande de realizações para que o erro estatístico seja reduzido.



Figura 10: Comportamento do tempo de vida, t_v , do fogo na floresta em função da probabilidade de ocupação, p, de árvores em uma rede quadrada de tamanho L = 1000. A linha tracejada indica o ponto crítico de percolação de sítios, $p_c = 0.593$ (Oliveira, 2008).

1.3 Parâmetros do Modelo de Percolação

1.3.1 Agregados em Percolação

Sempre que um sistema está na iminência de sofrer uma transição de fase, alguns fenômenos não usuais são observados. Denominamos esses como fenômenos críticos. Aos fenômenos críticos estão associadas leis de escala e a essas, expoentes críticos.

Uma razão pela qual o modelo de percolação é considerado interessante é porque ele exibe o fenômeno de criticalidade [21]. Neste limiar, o agregado percolante apresenta a propriedade de auto-similaridade estatística e, portanto, apresenta ausência de escala, comportando-se assim como um fractal. Dessa maneira, algumas propriedades estruturais do aglomerado infinito se comportam segundo uma lei de potência. Uma dessas propriedades no estudo da percolação é o *número de elementos, tamanho* ou *massa* pertencente ao maior agregado M(L, p).

O comportamento de M(L, p), para grandes tamanhos de rede, varia dependendo da probabilidade de ocupação p da rede. Para $p < p_c$, a massa pertencente ao maior agregado cresce de forma logarítmica com L. No limiar de percolação, $p = p_c$, o tamanho do maior agregado se relaciona com o tamanho L do sistema através de uma lei de potência com expoente D. Esse expoente D depende apenas da dimensão topológica da rede, sendo D = 1.89 e 2.53 para d = 2 e 3, respectivamente [15]. Já para $p > p_c$, a massa do agregado percolante M(L, p), isto é, do maior agregado da rede, ocupa uniformemente quase que toda a rede, sendo proporcional ao número total de elementos da rede L^d . Essas dependência de M(L, p) pode ser expressa matematicamente por:

$$M(L,p) \propto \begin{cases} ln \ L \ , \ se \ p < p_c; \\ L^D \ , \ se \ p = p_c; \\ L^d \ , \ se \ p > p_c. \end{cases}$$
(1.10)

Existem diversas formas de se obter tal expoente crítico. Numericamente, os mais comuns são o método do raio de giração e o método do escalonamento de tamanho finito (finite-size scaling).

O método do raio de giração, já previamente descrito, fornece uma forma de medir o espalhamento do aglomerado em relação ao seu centro de massa. Podemos definir o raio de giração R do maior agregado como

$$R^{2} = \frac{1}{s} \sum_{s} \left| \vec{r}_{i} - \vec{r}_{cm} \right|^{2}, \qquad (1.11)$$

onde s é a massa do maior agregado, $\vec{r}_{cm} = \frac{\sum_s \vec{r}_i}{s}$ é a posição do centro de massa e \vec{r}_i é a posição do *i-ésimo* sítio ocupado, calculada a partir de \vec{r}_{cm} .

A partir da média estatística sobre diversas amostras, a massa do agregado percolante no limiar da criticalidade e no limite termodinâmico se relaciona com o raio de giração na forma

$$\langle M(\infty, p_c) \rangle = \langle s \rangle \propto \langle R \rangle^D.$$
 (1.12)

Já o método do escalonamento de tamanho finito consiste da utilização da propriedade de auto-afinidade de um fractal. Neste método, o número de elementos do maior agregado $M(L, p_c)$ é medido para um determinado tamanho L de rede. Posteriormente, mede-se a mesma propriedade para um sistema maior que o anterior. Esse procedimento é repetido várias vezes para diversos tamanhos do sistema. Deste modo, o expoente Dé calculado a partir de uma regressão em lei de potência sobre os valores obtidos para a massa do agregado em função do tamanho do sistema. A Fig. 11 exemplifica o método descrito acima para uma média de 10^3 simulações.



Figura 11: Gráfico da massa do agregado percolante $M(L, p_c)$ em relação ao tamanho L da rede, em $p = p_c$. A partir de uma média sobre 10^3 simulações foi encontrado o valor de $D = 1.89 \pm 0.02$ para a dimensão fractal do agregado infinito.

Como pode ser observado na Fig. 8, além do agregado incipiente existem vários outros agregados menores. Se definirmos $n_s(p)$ como sendo a distribuição de agregados de tamanho s, no limite termodinâmico, observa-se que tal distribuição é regida pela seguinte lei de potência

$$n_s(p) \propto \begin{cases} s^{-\tau} &, se \ p = p_c; \\ s^{-\tau} f(s^{\sigma}(p - p_c)) &, se \ p \neq p_c. \end{cases}$$
(1.13)

Na criticalidade, o expoente $\tau = 2.055$ e 2.2, para duas e três dimensões, respectivamente, é conhecido como *expoente de Fisher* [15]. Esse comportamento em lei de potência demonstra que, de fato, existem agregados de todos os tamanhos. Uma forma mais adequada de minimizar as flutuações na cauda da distribuição e encontrar tal expoente é considerarmos $N_s(p_c)$ como sendo a distribuição acumulada de $n_s(p_c)$ [22], ou seja,

$$N_s = \sum_{s'} n_{s'} \propto s^{-(\tau - 1)} \tag{1.14}$$

onde o somatório se estende sobre todos os agregados, com exceção do agregado infinito.

No estudo da percolação podemos definir P(L, p) como a fração de elementos que pertencem ao agregado percolante. Esta fração é a razão entre a massa do agregado percolante e o número total de elementos da rede:

$$P(L,p) \propto \frac{M(L,p)}{L^d},\tag{1.15}$$

em que M(L, p) é o número de sítios do agregado percolante e d, a dimensão topológica da rede.

Se traçarmos a probabilidade P(L, p), para uma rede de tamanho L, como função de p, vamos encontrar que no limite $L \to \infty$, P(L, p) se assemelha a função escada de Heavyside, isto é, quando $p \to p_c$ há uma descontinuidade que separa duas fases macroscópicas: com agregado percolante e outra sem agregado percolante. Essa mudança de fase é algo relevante, uma vez que, nas proximidades do ponto crítico, uma pequena mudança no parâmetro microscópico p provoca uma mudança abrupta em um importante parâmetro macroscópico P(L, p) [21].

Para sistemas muito grandes, $L \to \infty$, e para probabilidade de ocupação $p > p_c$, podemos definir $P_{\infty}(p)$ como

$$P_{\infty}(p) = \lim_{L \to \infty} P(L, p) = \lim_{L \to \infty} \frac{M(L, p)}{L^d}.$$
(1.16)

Para que essa equação não seja nula, a massa do agregado percolante deve ser proporcional ao número total de elementos da rede L^d , isto é,

$$P_{\infty}(p) \neq 0 \Leftrightarrow M(L,p) \propto L^d \quad ; \quad L \to \infty.$$
 (1.17)

Essa proporcionalidade do tamanho agregado percolante com o número total de sítios da rede indica que, para grandes valores de L, o agregado percolante é homogeneamente distribuído quase toda a rede.

Para pequenos valores da probabilidade de ocupação p ($p < p_c$), não há agregado percolante, ou seja, $P_{\infty}(p) = 0$. Já em torno da probabilidade crítica, $P_{\infty}(p)$, este segue uma lei de potência:

$$P_{\infty}(p) \propto |p - p_c|^{\beta} \quad ; \quad p \to p_c. \tag{1.18}$$

O expoente β é denominado expoente crítico do parâmetro de ordem e tem valores $\beta = 5/36$ para d = 2 e $\beta = 0.41$ para d = 3 [15].

Por meio de simulação computacional, pode-se obter o comportamento aproximado da curva $P_{\infty}(p)$. A Fig. 12 mostra a média de P(L, p) considerando 10³ simulações em um rede quadrada para o modelo de percolação de sítios assumindo diversos valores de p. Para baixos valores de p, P(L, p) é desprezível. Para $p > p_c$, a curva cresce linearmente



Figura 12: Probabilidade de um sítio pertencer ao maior agregado em função da probabilidade de ocupação p para uma rede de tamanho L. A linha tracejada vertical indica o valor de $p = p_c \approx 0.592$ (Oliveira, 2008).

com o valor de p. Porém, em torno de p_c , P(L, p) cresce abruptamente. Essa transição se torna cada vez mais acentuada quanto maior for o valor de L. O limite em que $L \to \infty$, a transição ocorrerá exatamente na probabilidade crítica p_c . Assim como no modelo do fogo na floresta, a ausência de simetria na transição de fase do parâmetro de ordem é um dos indícios que caracterizam uma transição de segunda ordem [20].

1.3.2 Comprimento de Correlação

O raio de giração, além de sua relação com a dimensão fractal do agregado, é intimamente ligado a outra característica do agregado: o comprimento de correlação ξ . Podemos definir tal comprimento ξ como a média das distâncias médias entre dois sítios ocupados pertencentes a um mesmo agregado, ou seja,

$$\xi^2 = \frac{\langle d^2 \rangle}{\langle s \rangle},\tag{1.19}$$

onde

$$\langle d^2 \rangle = \frac{\sum_s \langle d_s^2 \rangle sn_s(p)}{\sum_s sn_s(p)} \tag{1.20}$$

е

$$\langle s \rangle = \frac{\sum_{s} s^2 n_s(p)}{\sum_{s} s n_s(p)}.$$
(1.21)

Podemos encontrar que a relação entre o raio de giração e a distância média entre

dois sítios de um agregado de tamanho s é dada por

$$R_s^2 = \frac{\langle d_s^2 \rangle}{s^2}.\tag{1.22}$$

Como $2R_s^2$ é a distância quadrática média entre dois sítios de um mesmo agregado, ξ pode ser escrito como [23]

$$\xi^2 = \frac{2\sum_s R_s^2 s^2 n_s(p)}{\sum_s s^2 n_s(p)}.$$
(1.23)

No modelo de percolação, a distância entre os elementos da rede é um comprimento característico evidente. Porém, o fato do agregado infinito ser um fractal exige que tal escala não exista. Essa suposta contradição é explicada pelo fato da distância entre os elementos ser uma propriedade de natureza microscópica, enquanto que a autosimilaridade do agregado percolante é uma característica de caráter macroscópico. Abaixo e acima de p_c , o tamanho médio dos agregados finitos são descritos pelo comprimento de correlação ξ . Na criticalidade, ξ diverge e buracos aparecem no agregado incipiente em todas as escalas, apresentando um comportamento em lei de potência na forma

$$\xi \propto |p - p_c|^{-\nu} \quad ; \quad p \to p_c, \tag{1.24}$$

onde ν é conhecido como *expoente crítico de correlação* e tem valores de $\nu = 4/3$ e 0.88 para duas e três dimensões, respectivamente. Acima de p_c , ξ também representa o tamanho médio dos buracos no cluster infinito. Como ξ é finito acima de p_c , o agregado percolante somente poderá ser auto-similar nas escalas de tamanho menores que ξ .

Podemos observar ainda que a dimensão fractal D se relaciona com os expoentes críticos $\beta \in \nu$. A probabilidade de que um sítio arbitrário dentro de um círculo de raio Rmenor que ξ possa pertencer ao agregado infinito é dada como a razão entre o número de elementos do agregado percolante e o número total elementos:

$$P_{\infty}(p_c) \propto \frac{R^D}{R^d}, \qquad R \ll \xi.$$
 (1.25)

Essa relação também é válida para $R=\lambda\xi$ com $0<\lambda<1.$ Desta forma,

$$P_{\infty}(p_c) \propto \frac{\xi^D}{\xi^d} = \xi^{D-d}.$$
(1.26)

Substituindo as Eq. 1.18 e 1.24 na Eq. 1.26, obtemos que

$$|p - p_c|^{\beta} \propto |p - p_c|^{-\nu(D-d)},$$
 (1.27)

ou seja,

$$D = d - \frac{\beta}{\nu}.\tag{1.28}$$

Esta relação mostra que a dimensão fractal D do agregado incipiente não é um novo expoente crítico independente, mas depende de $\beta \in \nu$. Como $\beta \in \nu$ são expoente universais, D também é universal [15].

Se aplicarmos a Eq. 1.28 na Eq. 1.26, poderemos afirmar que, na criticalidade,

$$P(L, p_c) \propto \begin{cases} L^{-\frac{\beta}{\nu}} , se \ L \ll \xi; \\ \xi^{-\frac{\beta}{\nu}} , se \ L \gg \xi. \end{cases}$$
(1.29)

Tal expressão diz que, para redes em que $L \gg \xi$, toda a análise pode ser feita em função apenas do comprimento de correlação ξ . Para $L \ll \xi$, $P(L, p_c)$ comporta-se na forma de lei de potência em função apenas do tamanho da rede [24].

1.3.3 Sub-estruturas do Agregado Incipiente

Além da massa do agregado incipiente se comportar como um fractal, outras partes que constituem esse agregado também se comportam como fractais. Algumas propriedades frequentemente estudadas no modelo de percolação são as relacionadas ao transporte, quando este ocorre sobre a estrutura do agregado infinito.

Considere uma rede formada por elementos condutores e isolantes. Estes elementos estão presentes na rede com uma probabilidade crítica p_c e $(1 - p_c)$, respectivamente. Se aplicarmos uma diferença de potencial entre dois extremos dessa rede, observa-se uma corrente que percorre o sistema através do agregado incipiente, formado pelos elementos condutores. Porém, nem todos os sítios pertencentes a esse agregado participam efetivamente da condução. Esses sítios são denominados *zonas estagnadas*, ou *mortas*. A porção do agregado incipiente que participa efetivamente do processo de transporte é chamando de *esqueleto condutor*, ou *espinha dorsal* (backbone), e consiste de todos os sítios visitados por todos os caminhos possíveis que não se cruzam, denominados *self-avoiding walks*, que partem de uma extremidade e chegam à extremidade oposta [10].

Estudos mostram que a massa $M_B(L)$ do esqueleto condutor que conecta os extremos de uma rede de tamanho L é regida por leis de potências [12]:

$$M_B(L) \propto L^{D_B}$$
; $D_B \approx \begin{cases} 1.62 \pm 0.02 &, d = 2\\ 1.74 \pm 0.04 &, d = 3. \end{cases}$ (1.30)
O fato de $D_B < D$ implica que, no ponto crítico, quanto maior a rede, menor será a fração do agregado que efetivamente participará do transporte. Outra característica dessa estrutura é que sua morfologia está intrinsecamente relacionada à extremidade onde se aplica a diferença de potencial. Por fim, apesar de seu comprimento de correlação ser igual ao do aglomerado infinito, sua dimensão fractal é menor, pois sua ramificação é finita.

Assim como o *backbone*, existem várias outras sub-estruturas que estão relacionadas ao fenômeno de transporte e que também obedecem a leis de potência. Dentre essas sub-estruturas, podemos destacar as chamadas ligações vermelhas (*red bonds*) [25], que são todos os pontos pertencentes a espinha-dorsal cuja ausência impediriam o fluxo. Tais ligações vermelhas possuem dimensão fractal menor que a dimensão do esqueleto condutor e sua massa média varia com p na forma

$$\langle M_{red} \rangle \propto (p - p_c)^{-1} \propto L^{\frac{1}{\nu}},$$
(1.31)

tal que sua dimensão fractal é $D_{red} = \frac{1}{\nu}$. Como consequência, a maior parte do esqueleto é composta por *blobs*, que são sítios cuja remoção individual não impede o fluxo condutivo.

Devido ao fato de diferentes modelos de percolação (sítio ou ligação) em diferentes topologias de rede (triangular, quadrada, hexagonal etc.), com diferentes pontos críticos p_c , apresentarem os mesmos expoentes característicos, denomina-se que esses modelos pertencem à mesma *classe de universalidade*. Tal classe de universalidade é uma manifestação do *princípio da universalidade do comportamento crítico*, que afirma que, caso um sistema sofra uma transição de fase de um estado desordenado para um estado ordenado através de um ponto crítico, o comportamento ao redor do ponto crítico deve depender apenas de um número pequeno de propriedades, como, por exemplo: a dimensionalidade do sistema, a dimensionalidade do parâmetro de ordem e a simetria [26]. A Tabela 1.2 mostra alguns desses expoentes e a propriedade a qual estão ligados. A Fig. 13 mostra o agregado percolante em uma rede quadrada com algumas estruturas críticas em destaque.

Expoente	$d = 2^{*}$	d = 3	Quantidade
α	-2/3	-0.6	Número total de agregados
β	5/36	0.42	Agregado infinito
ν	4/3	0.88	Comprimento de correlação
σ	36/91	0.45	Número de agregados $(p = p_c)$
au	187/91	2.2	Número de agregados $(p = p_c)$
$D (p = p_c)$	91/48	2.52	Dimensão fractal
$D \ (p > p_c)$	2	3	Dimensão fractal

Tabela 1.2 Valores exatos e estimados de alguns expoentes de percolação (Gouyet, 1996).

* Por convenção, adota-se a divisão entre números inteiros para resultados exatos.



Figura 13: Representação esquemática de algumas estruturas contidas numa rede de percolação para $p = p_c$. O agregado infinito, esqueleto condutor, distância mínima e ligações vermelhas em verde, azul, branco e vermelho, respectivamente. As partes em amarelo representam agregados isolados (Stanley, 1999).

2 PERCOLAÇÃO INVASIVA

2.1 Introdução

O escoamento multifásico em meios porosos é de grande relevância em diversos problemas de interesse científico e industrial. Entre as aplicações científicas e industriais podemos citar a extração de petróleo e gás em reservatórios subterrâneos, engenharia de materiais [27] e transporte de contaminantes em solos e aquíferos [28, 29].

Do ponto de vista teórico, o escoamento multifásico em meios porosos desordenados dificilmente pode ser tratado incorporando todos os aspectos envolvidos no processo. Devido a essa complexidade, muitos modelos simplificados são propostos na tentativa de explicar a fenomenologia envolvida nesse processo de escoamento [10, 15, 2].

Quando se trata da exploração petrolífera, um método frequentemente utilizado para a extração de petróleo consiste na injeção de água ou gás miscível (dióxido de carbono ou metano) em um poço, chamado de poço injetor, com a intenção de se retirar parte do petróleo localizado no interior da rocha porosa. O processo de extração persiste até que a interface de separação entre os dois fluidos atinja o um outro poço, denominado poço extrator, localizado a uma determinada distância do poço injetor. Nesse momento, ocorre uma queda acentuada na produção de petróleo. Devido a interesses econômicos, é importante determinar, ou ao menos estimar, o tempo em que tal decaimento ocorre.

Quando injetamos um fluido não-viscoso em um meio poroso preenchido com um fluido viscoso, dois regimes de escoamento distintos podem ser caracterizados: um regime onde as forças dominantes são de natureza capilar e outro regime onde as forças viscosas são predominantes. Dependendo da taxa de injeção, o sistema pode ser encontrado em um desses regimes. Para podermos determinar os limites de atuação dessas forças durante o processo de deslocamento do fluido viscoso que preenche o meio poroso, definimos o *número capilar* [30]:

$$Ca = \frac{u\mu}{\gamma},\tag{2.1}$$

onde u é a velocidade relativa no escoamento, μ , a viscosidade do fluido e γ , a tensão interfacial entre os dois fluidos. O número capilar Ca é uma grandeza adimensional e pode ser interpretado como sendo a razão entre as forças viscosas e capilares associadas ao fenômeno de escoamento. Com relação ao número capilar, a descrição teórica de tais sistemas é fundamentada em dois modelos básicos: agregação limitada por difusão (DLA) [3], que ocorre para altos valores do parâmetro Ca, onde o fenômeno de escoamento é dominado por forças viscosas; e percolação invasiva (IP) [2], que surge quando Ca é pequeno, sendo o escoamento dominado por forças capilares.

Na hipótese de baixos valores de Ca, a dinâmica do processo de deslocamento é essencialmente determinada a nível de poros, isto é, depende intimamente dos aspectos locais da geometria do meio poroso. Para esse limite, a estrutura do meio poroso pode ser caracterizada a partir de uma rede aleatória, representando a distribuição espacial de tamanhos de poros do meio, e a dinâmica de invasão pode ser descrita apropriadamente pelo modelo de percolação invasiva.

Em virtude dessa possibilidade o modelo de IP e suas variantes têm sido utilizados extensivamente para simular processos de deslocamento de um fluido não-molhante (óleo) através de um meio poroso por meio da injeção de um fluido molhante (água ou gás) com viscosidade diferente. Tal modelo tem apresentado grande eficácia quando a dinâmica de injeção é quase-estática. No modelo de percolação invasiva, a dinâmica de deslocamento é representada por meio do crescimento de um agregado sobre o sistema, supondo que a fronteira (perímetro) deste agregado corresponde a interface de separação entre os dois fluidos.

O modelo de percolação invasiva pode ser tratado de duas formas distintas: *com* e *sem aprisionamento*. Aprisionamentos ocorrem quando o fluido deslocado é incompressível e fica completamente circundando pelo fluido invasor. Na versão sem aprisionamento o fluido defensor é infinitamente compressível.

Nesse trabalho, o modelo de percolação invasiva sem aprisionamento (NTIP) será utilizado para modelar uma dinâmica de invasão através de um meio poroso desordenado.

2.2 O Modelo de Percolação Invasiva

O modelo de percolação invasiva, introduzido por *D. Wilkinson* e *J. F. Willemsen* [2] em 1983, foi motivado pelo estudo do comportamento de dois fluidos imiscíveis em um meio poroso. Nesse modelo o fenômeno de deslocamento do fluido é caracterizado

$$\frac{\pi}{2} + \alpha = \theta$$

$$r_{p} = R \cos \theta$$

$$\gamma$$

$$R_{p} = R \cos \theta$$

$$\gamma$$

$$R_{p} = \frac{2\gamma \cos \theta}{R}$$

$$\Delta p = \frac{2\gamma}{R} = \frac{2\gamma \cos \theta}{r_{p}}$$

Figura 14: Representação das forças capilares presentes sobre a interface de separação entre dois fluidos no interior de um poro cilíndrico. A diferença de pressão entre os dois fluidos é determinada essencialmente pelo inverso do raio do poro.

pelo crescimento de um agregado de invasão sobre a rede, onde a fronteira desse agregado representa a interface de separação entre os fluidos injetado e deslocado. Na simulação de percolação invasiva, geralmente, o meio poroso é representado convenientemente por meio de uma rede de poros unidos por gargalos estreitos. Esse meio idealizado pode ser descrito por meio uma rede regular, onde sítios e ligações correspondem a poros e gargalos, respectivamente.

Quando dois fluidos estão em contato entre si no interior de um poro, surge uma diferença de pressão capilar através da interface de separação entre os fluidos, gerada devido ao fenômeno de tensão superficial. No limite $Ca \rightarrow 0$, efeitos viscosos são ignorados em cada poro, comparados com os efeitos capilares. Nessa situação, o deslocamento é regido somente pela pressão capilar provocada pela tensão superficial, isto é, a diferença de pressão capilar Δp entre os dois fluidos através do menisco pode ser relacionada a forma da superfície de separação. A diferença de pressão capilar através da interface é regida pela equação de Young-Laplace na forma

$$\Delta p = \left(\frac{2\gamma}{r_p}\right)\cos\,\theta,\tag{2.2}$$

onde r_p é o raio do poro, γ , a tensão interfacial e θ , o ângulo entre a interface dos fluidos e a parede do poro (ver Fig. 14). Se consideramos que $\gamma \in \theta$ são constantes ao longo de toda a interface de separação, o avanço do perímetro de separação ocorrerá na região de menor pressão capilar. Como será exposto adiante, durante o processo de invasão, uma variável aleatória $p \propto 1/r_p$ representa as propriedades microscópicas do meio poroso desordenado e caracteriza a acessibilidade local do espaço poroso [30].

A simulação de um processo de invasão por meio do modelo de percolação invasiva consiste em acompanhar a evolução da interface fluido invasor-defensor enquanto esta se desloca através de uma rede com uma distribuição fixa de poros. Quando o fluido invasor avança, é possível que ele circunde completamente algumas regiões do fluido defensor, fazendo surgir regiões desconectadas das bordas do sistema, regiões aprisionadas. Neste caso, podemos considerar dois modelos distintos: *com* e *sem* aprisionamento. No modelo *TIP*, o fluido defensor é considerado incompressível, gerando regiões com aprisionamento do fluido defensor. Essa região é proibida para o fluido invasor. Tal caso foi estudado inicialmente por Wilkinson e Willemsen [2]. No caso do modelo de percolação invasiva sem aprisionamento *NTIP*, ignoramos o efeito de aprisionamento, considerando que fluido defensor é infinitamente compressível. Em nossas simulações foi utilizado o modelo de percolação invasiva sem aprisionamento, *NTIP*.

Computacionalmente, os passos básicos do algoritmo de percolação invasiva em um meio poroso de tamanho $L \times L$ podem ser descritos da seguinte forma:

i - Inicialmente associamos a cada sítio da rede um número p_i , obtido a partir de uma distribuição uniforme entre 0 e 1;

ii - Definimos os sítios onde o processo de invasão irá começar, ou seja, a semente inicial do processo. Em nossas simulações o ponto de injeção inicial do fluido será o centro da rede;

iii - Definimos os sítios defensores que, quando invadidos, encerram a dinâmica de invasão;

iv - Identificamos os sítios passíveis de crescimento, ou *interface*, entre os fluidos. Tais sítios são formados por sítios defensores que são vizinhos dos sítios invasores, ou seja, pertencem ao perímetro do agregado invasor;

v - Dentre os sítios que pertencem a interface, escolhemos o que apresenta menor número aleatório associado. Este sítio é então invadido;

vi - Os processos $iv \in v$ são refeitos até um dos sítios defensores seja atingido.

Na Fig. 15, mostramos uma representação esquemática da dinâmica de invasão. O agregado cresce a partir do sítio injetor situado no centro da rede. Durante o crescimento, todos os sítios da interface (em verde) estão disponíveis para a invasão. O fluido invasor avança sobre a rede escolhendo o sítio de menor valor. O sítio invadido é incluído ao agregado invasor e seus vizinhos serão incorporados aos sítios da interface. Esse processo de invasão é repetidamente observado até que o agregado invadido atinja alguma das bordas da rede. A massa de tal agregado corresponde ao número total de sítios invadidos durante todo o processo de invasão até atingir qualquer sítio pertencente à borda da rede.



Figura 15: Esquema do processo de invasão para o modelo de percolação invasiva sem aprisionamento em 2D. A invasão é iniciada a partir do centro da rede. Os sítios que aparecem em verde são os sítios de crescimento e estão disponíveis para invasão. À medida que o agregado cresce, a vizinhança deve ser atualizada. A parte cinza representa o agregado invasor. Neste caso, a simulação é interrompida quando tal agregado toca a borda da rede.



Figura 16: Agregado formado pela dinâmica de invasão numa rede bidimensional de tamanho L = 128.

Em todas as nossas simulações consideramos o centro da rede como sendo o sítio injetor. A dinâmica de invasão evolui seguindo as regras citadas acima e será interrompida somente quando o agregado formado pelo fluido invasor toca a borda do sistema (Fig. 16).

Quando o fluido invasor forma um aglomerado que conecta os lados opostos do sistema, dizemos que ele percolou. Neste ponto, o agregado invasor possui uma estrutura complexa com várias ramificações.

Na percolação invasiva o agregado invasor cresce em direção ao maior poro disponível, ou seja, menor p_i dentre os sítios pertencentes a interface de separação. Tal movimento faz com que sítios de menores valores sejam ocupados, prioritariamente. O processo de invasão acaba quando o agregado invasor atinge a fronteira da rede, encontrando automaticamente o seu ponto crítico p_c [31], em que sítios com valores maiores que p_c praticamente não participam da dinâmica de invasão. Essa é uma importante característica desse modelo e é conhecida como *criticalidade auto-organizada*, ou seja, o sistema evolui para a criticalidade espontaneamente. Como verificação dessa peculiar propriedade, podemos observar nas Fig. 17 e Fig. 18 a fração de sítios invadidos da rede em função do valor da probabilidade associada a esses sítios, considerando os modelos em 2D e 3D, respectivamente.



Figura 17: Distribuição de probabilidade P(p, L) de um sítio ser invadido em função do valor da probabilidade p associada a cada sítio de uma rede bidimensional. A função probabilidade apresenta uma transição abrupta próxima ao valor de $p_c \approx 0.5927$.



Figura 18: Distribuição da probabilidade P(p, L) em função da probabilidade p para uma rede tridimensional regular. Para esta dimensão, $p_c \approx 0.3116$.

De acordo com as Fig. 17 e 18, a função P(p, L), que representa a fração dos sítios invadidos em função da probabilidade p associada a cada sítio, apresenta uma transição nas proximidades de $p = p_c$, sendo essa transição mais abrupta quanto maior for o valor do tamanho do sistema. Para duas e três dimensões foram encontrados os valores de $p_c = 0.5927$ e 0.3116, respectivamente, que são os mesmos valores das probabilidades críticas encontrados considerando o modelo de percolação ordinária. Os sítios que possuem valores associados maiores que p_c praticamente não contribuem para a massa do agregado invadido, isto é, a própria dinâmica do modelo evolui para uma estrutura crítica, excluindo naturalmente os sítios que apresentam valores acima da probabilidade crítica de percolação.

Em nossas simulações também foi possível observar que o número de sítios invadidos, ou massa do agregado de invasão M(L), escala com o tamanho L da rede da seguinte forma:

$$M(L) \propto L^D, \tag{2.3}$$

onde D é a dimensão fractal do agregado final e tem os valores de D = 1.89 para duas dimensões e D = 2.52 para três dimensões, como mostrado nas Fig. 19 e Fig. 20, respectivamente. Estes resultados também são observados para o modelo de percolação tradicional, mostrando que ambos os modelos pertencem à mesma classe de universalidade. Já quando o fluido é incompressível, ou seja, quando surge zonas de aprisionamento, o expoente torna-se um pouco menor D = 1.82 para duas dimensões. Para três dimensões, a dimensão fractal é D = 2.52 em ambos os casos, uma vez que praticamente não existe a possibilidade de aprisionamento. O fato da dimensão fractal ser diferente para os modelos *com* e *sem* aprisionamento para duas dimensões, revela que tais modelos pertencem à classe de universalidade diferentes.

Outras duas estruturas bastante investigadas no modelo de percolação invasiva são a envoltória de percolação e o perímetro externo do fluido invasor. A envoltória, também conhecida como hull, h(L) é definida como a massa formada pelos sítios defensores que são vizinhos dos sítios invadidos. Essa quantidade também escala com o tamanho do sistema L. Estudos numéricos [32, 33, 34, 35] mostram que a dimensão fractal do hull pode ser representada por $D_h = 1.75 \pm 0.02$ para duas dimensões.

Já o perímetro externo é formado por todos os sítios que são vizinhos e externos ao agregado de invasão. Sua dimensão fractal em duas dimensões é estimada em $D_e = \frac{4}{3}$ [36, 37, 4]. Para três dimensões, a dimensão fractal de ambas coincide, com valor estimado em 2.5 [38, 39].



Figura 19: Distribuição de massa M(L) média do agregado de invasão em função do tamanho L do sistema para 10⁴ simulações em redes bidimensionais quadradas. A dimensão fractal encontrada, D = 1.895, aproxima-se com grande precisão da dimensão fractal do agregado incipiente.



Figura 20: Distribuição de massa M(L) média do agregado de invasão em função do tamanho L do sistema para tridimensionais cúbicas. O valor encontrado para a dimensão fractal para esse caso foi D = 2.52.

2.3 Avalanches

Durante o processo de invasão dos poros pelo fluido injetado, é observado a presença de avalanches. Uma variedade de modelos atribuem a ocorrência de tal fenômeno a criticalidade em sistemas dinâmicos [40, 41, 42], isto é, avalanches ocorrem quando sistemas se encontram na fronteira entre estabilidade e instabilidade.

Para o modelo de percolação invasiva uma avalanche ocorre quando um sítio i, cujo valor associado de probabilidade é p_i , é invadido e uma série de sítios j conectados ao sítio i são sequencialmente invadidos com $p_i > p_j$. Podemos definir o tamanho S de uma avalanche como sendo o número de sítios que são sequencialmente passíveis de serem invadidos e que possuem uma probabilidade p_j menor do que a probabilidade p_i do sítio inicial i.

A distribuição de avalanches P(S, L) no modelo de percolação invasiva apresenta um comportamento em lei de potência [43] na forma

$$P(S,L) \propto S^{-\tau} f\left(S/A_1\right),\tag{2.4}$$

onde a função f(x) tem a forma gaussiana

$$f(x) = exp[-x^2].$$
 (2.5)

Desta forma, obtemos que

$$P(S,L) = A_0 S^{-\tau} exp[(-S/A_1)^2], \qquad (2.6)$$

onde o prefator A_0 e a amplitude A_1 depende do tamanho do sistema [6].

Trabalhos teóricos [38, 44] têm mostrado que o expoente τ pode ser descrito a partir de outros expoentes presentes na teoria da percolação na forma

$$\tau D = D + D_e - \nu^{-1}, \tag{2.7}$$

onde D, $D_e \in \nu$ são, respectivamente, a dimensão fractal do agregado, a dimensão fractal do perímetro externo e o expoente crítico de correlação. Essa relação prediz $\tau = 1.55$ em três dimensões e 1.31 em duas dimensões.



Figura 21: Gráfico em escala logarítmica da distribuição de tamanhos de avalanche P(S) em função do tamanho da avalanche S para L = 1024. A linha sólida representa o ajuste linear obtido. O valor do expoente encontrado para duas dimensões é $\tau = 1.36 \pm 0.05$.



Figura 22: Gráfico em escala logarítmica da distribuição de tamanhos de avalanche P(S) em função do tamanho da avalanche S. Para uma média de 10⁴ realizações em redes cúbicas de tamanho L = 512, encontramos que o valor do expoente é $\tau = 1.55 \pm 0.03$, em ótima concordância com valores encontrados na literatura.

Nas Fig. 21 e Fig. 22, mostramos o comportamento da distribuição de avalanches para diversas simulações do processo de invasão em redes quadradas e cúbicas de tamanho L = 1024 e 512, respectivamente. Para uma média de 10^4 simulações distintas, encontramos o valor de $\tau = 1.55 \pm 0.03$ para três dimensões e 1.36 ± 0.05 em duas dimensões, mostrando bom acordo com os valores teóricos reportados na literatura.

3 PERCOLAÇÃO INVASIVA MÚLTIPLA

3.1 Introdução

Muitas modificações foram propostas ao modelo de percolação invasiva tradicional na tentativa de incorporar características observadas nos mais variados processos de invasão que ocorrem na natureza. Podemos destacar, entre estas modificações, as que consideram a ação de um campo externo durante o processo de invasão [4, 45, 46] ou incorporam efeitos convectivos atuando em alguma direção privilegiada [5].

Um outro fato incorporado ao modelo de percolação tradicional, seria o aspecto repetitivo do processo de invasão. O caráter repetitivo do processo de invasão, pode estar presente no processo de formação de veias de pedras preciosas e minérios. Acredita-se que tal formação é produto de intrusões múltiplas de um fluido reagente em solo poroso, provocando processos de dissolução e, subsequente, recristalização. Alguns casos como depósitos porfiríticos de cobre [7] e olivina [8] foram estudados na literatura. Sabe-se que a distribuição da rede de depósitos de minério apresenta uma estrutura fractal [47, 48] que pode ser considerada para exploração mineral [49]. Uma situação semelhante pode ser encontrada em vulcanologia, quando o magma é repetidamente injetado sobre o mesmo caminho [50], até atingir a superfície da Terra. Vale salientar que o processo de reinvasão de magma que ocorre no interior da terra se origina em mecanismos tectônicos ocorrendo em uma escala de tempo muito grande. Após uma determinada invasão ocorrida pelo magma, até a próxima invasão ocorrer, vários processos físico-químicos acontecem permitindo que a estrutura seja estabelecida novamente, porém ficando um pouco mais frágil do que as regiões que nunca foram invadidas. Quando ocorre uma nova invasão, esta irá prioritariamente ocorrer nas regiões que já sofreram algum tipo de dano decorrente da última invasão. Portanto, existe um mecanismo de memória no sistema que por um motivo estrutural faz com que as novas invasões acabem ocorrendo em regiões já invadidas previamente. Esta nova estrutura invadida pode ser totalmente ou parcialmente coincidente com as regiões invadidas previamente. Entender como esta nova estrutura se modifica é um tema de interesse neste tipo processo.

Desse modo, um modelo de IP modificado, visando incorporar os aspectos citados anteriormente, permite que um certo número de sítios do sistema possam ser invadidos diversas vezes. Esse modelo, conhecido como *percolação invasiva múltipla*, estuda a evolução da estrutura porosa após diversos casos de invasão e foi investigada inicialmente por Salmon [51]. Alguns aspectos topológicos foram estudados e resultados indicam que a dimensão fractal do agregado invadido varia com o número de ciclos de invasões.

O modelo de percolação invasiva múltipla consiste basicamente de todas as etapas presentes no modelo de IP tradicional, conforme descritas anteriormente, porém, com a inclusão do aspecto de invasões múltiplas. Ou seja, a cada nova dinâmica de invasão, o processo de invasão se limita a ocorrer em regiões que foram invadidas previamente. Em termos práticos, ocorre que novos números aleatórios obtidos a partir de uma distribuição uniforme no intervalo]0, 1[são atribuídos a cada sítio do agregado previamente invadido, sendo, em seguida, iniciado um novo processo de invasão. Comparado com o sistema da primeira invasão, onde todos os sítios podiam ser invadidos, o agregado formado na segunda invasão se apresenta substancialmente reduzido, pois a cada nova invasão, apenas os sítios invadidos na etapa anterior permanecem disponíveis para serem invadidos. O processo de invasão é estudado de forma sistemática, sendo a invasão repetida por seguidas gerações G. Para o caso de percolação invasiva tradicional temos G = 1, sendo a estrutura invadida um agregado fractal com características bastante conhecidas na literatura [10].

A medida que o processo de invasão se repete, ou seja, o número de gerações de invasão cresce, a massa do agregado invadido atinge um regime de saturação. Neste limite, a massa do agregado invadido não apresenta mais mudanças consideráveis em sua estrutura, de forma que suas características geométricas permanecem basicamente constantes. Observa-se que este limite de saturação depende do tamanho da rede original, uma vez que o número de sítios disponíveis é proporcional ao tamanho do sistema. Dessa forma, o número G de invasões para o processo de invasão atingir a saturação é diferente para cada tamanho de rede definido inicialmente. Na Fig. 23, mostramos um agregado de invasão gerado para uma rede bidimensional de tamanho L = 512 para quatro valores de geração G. Na Fig. 24, observamos o mesmo regime de saturação ser atingido, entretanto, para um sistema tridimensional de tamanho L = 256.



Figura 23: Ilustração do processo de percolação invasiva múltipla em uma rede quadrada de tamanho L = 512. As cores correspondem aos diferentes agregados de invasão em diferentes estágios do processo, sendo o agregado de invasão em preto, azul, verde e vermelho correspondente a $G = 1, 10, 10^2$ e 10^3 , respectivamente.



Figura 24: Percolação invasiva múltipla em uma rede cúbica de tamanho L = 256. Em sequência, observamos o agregado de invasão a cada etapa do processo de invasão para os seguintes valores do número de geração: (a) G = 1, (b) 10, (c) 25 (d) 100, (e) 500 e (f) 5000.

3.2 Resultados e Discussões

Nesta seção, apresentamos os resultados quantitativos obtidos a partir de simulações numéricas, considerando múltiplas invasões sobre o mesmo substrato. Nestas simulações utilizamos como base o algoritmo de percolação invasiva tradicional sem aprisionamento em redes regulares bidimensionais e tridimensionais. Calculamos a massa do agregado invadido e investigamos como a massa desse agregado se comporta em função das múltiplas invasões que ocorrem sobre o mesmo meio poroso. Considerando o aspecto de múltiplas invasões, calculamos os expoentes críticos característicos do modelo de percolação invasiva tradicional. Em nossas simulações, utilizamos redes quadradas com diversos tamanhos L = 64, 128, 256, 512 e 1024 para o caso bidimensional e redes cúbicas com tamanhos L = 32, 64, 128, 256 e 512 para o caso tridimensional. Em todas as simulações o parâmetro investigado foi a massa do agregado invadido. Também estudamos as distribuições de avalanche para este modelo, o que será discutido em detalhes mais adiante.

3.2.1 Massa do Agregado Invadido

Inicialmente, para cada valor de G, realizamos diversas simulações com substratos diferentes e calculamos a massa M_G média do agregado invadido. Para podermos estimar como a massa do agregado invadido varia em função do número de geração G, calculamos a razão M_G/M_{G-1} em função do número de geração. Estes resultados são mostrados nas Fig. 25 e 26 em escala semi-log, para os casos 2D e 3D, respectivamente. Conforme podemos observar, a razão M_G/M_{G-1} , que define a taxa na qual a massa do agregado invadido muda a cada novo processo de invasão, cresce continuamente como função do logaritmo de G. Este comportamento confirma que a taxa de decréscimo na massa do agregado invadido a cada invasão é aproximadamente constante. A menos de algumas oscilações, que tendem a diminuir a medida que tomamos a média sobre um número maior de realizações, o comportamento pode ser considerado a uma taxa constante. Analisando o comportamento para os diferentes tamanhos de rede, podemos constatar que esta taxa independe do tamanho do sistema. A mesma parece ser inerente ao processo de invasão não dependendo do tamanho do sistema considerado. Agora, comparando os resultados para $2D \in 3D$, podemos afirmar também que este comportamento independe da dimensionalidade do sistema. Esta taxa de decréscimo na massa do agregado invadido a cada invasão permanece inalterada em função do número de geração G, até atingir um limite assintótico onde a massa do agregado invadido não pode mais se alterar. Este limite se



Figura 25: A evolução da razão M_G/M_{G-1} média como função do logaritmo do número de gerações G. No gráfico M_G é a massa média do agregado invadido para redes bidimensionais. As cores correspondem aos diferentes tamanhos de redes estudados aqui L = 64 (preto), 128 (vermelho), 256 (verde), 512 (azul) e 1024 (marrom).

configura pela necessidade de existir uma estrutura mínima que conecte o centro da rede até qualquer uma das bordas da mesma, momento em que o processo de invasão é finalizado. Uma vez atingido esta estrutura crítica, a massa do agregado não pode mais variar pois um caminho mínimo deve existir do centro até a borda da rede. É evidente que o valor de G no qual este limite acontece depende do tamanho da rede. Para confirmar esta suposição definimos um parâmetro, geração de saturação G_S para cada valor de tamanho de rede L, a partir do qual a massa do agregado invadido não sofre mais modificações como função do processo de reinvasão, ou seja,

$$M_{G_{s+1}}/M_{G_s} = 1. (3.1)$$

O valor de G_S depende linearmente com o tamanho do sistema.

Um outro aspecto interessante presente no modelo de percolação invasiva é a característica fractal do agregado invadido. Esta característica fractal é quantificada calculando como a massa do agregado invadido varia com o tamanho do sistema. Podemos afirmar que a massa do agregado invadido apresenta um comportamento do tipo lei de



Figura 26: A evolução da razão M_G/M_{G-1} média em função do logaritmo do número de gerações G, para redes tridimensionais. As cores correspondem aos diferentes tamanhos de redes estudados L = 32 (preto), 64 (vermelho), 128 (verde), 256 (azul) e 512 (marrom). As oscilações observadas ocorrem devido às variações estatísticas do valor da massa média M_G e são gradativamente reduzidas a medida que aumentamos o número de amostras para o cálculo da média.

potência na forma

$$M(L,G) \propto L^{d_G},\tag{3.2}$$

em que d_G é a dimensão fractal do agregado obtido na respectiva geração G. Para o caso de percolação invasiva tradicional sem aprisionamento em 2D, a dimensão fractal do agregado invadido é $d_f = 1.89$. Já o caso tridimensional a dimensão calculada é $d_f = 2.52$.

No caso do modelo de percolação invasiva múltipla, a massa do agregado invadido varia a cada nova invasão, conforme mostrado anteriormente. Tendo em vista esta propriedade, quando calculamos a massa do agregado em função do tamanho do sistema para cada valor do parâmetro G, encontramos que a dimensão fractal da estrutura varia com a geração G. Resultados obtidos de nossas simulações para dois casos limites, G = 1e $G = 10^4$ são mostrados nas Fig. 27 e 28, correspondendo aos casos bidimensional e tridimensional, respectivamente. Para o caso G = 1, recuperamos a dimensão fractal observada em percolação invasiva tradicional, cujo valor encontrado é $d_f = 1.89$ em duas dimensões. Já para o outro caso limite em 2D, onde o número de geração G é muito grande, a estrutura apresenta a dimensão fractal $d_f = 1.22 \pm 0.02$, o que está em perfeito



Figura 27: Gráfico em escala log-log da massa média M do agregado de invadido pelo tamanho do sistema L, caso 2D. Os diferentes símbolos correspondem aos dois valores do número de geração G = 1 e $G = 10^4$. A linha contínua é obtida a partir de uma regressão linear e a inclinação desta reta define a dimensão fractal do agregado.

acordo com o resultado observado para a dimensão fractal do caminho ótimo no limite de desordem muito forte [52]. Para invasões múltiplas em 3D, a dimensão fractal calculada para o caso G = 1 é $d_f = 2.52$, enquanto que no limite de várias invasões, ou seja, Gmuito grande temos $d_f = 1.46 \pm 0.02$. Estes resultados estão em perfeito acordo com os valores reportados na literatura para o caso de percolação invasiva tradicional e caminho ótimo no limite de extrema desordem [52, 53, 54]. Aqui vale salientar que para o caso de G muito grande, os valores de dimensão fractal calculados aqui são também encontrados em outros processos, tais como o processo de fraturas de caminhos ótimos [55]. Interessante é que diferentes processos levam a estruturas que apresentam a mesma dimensão fractal, sugerindo que estes diferentes processos possam pertencer a uma mesma classe de universalidade. Esses expoentes críticos também são observados em sistemas complexos, como gases de spin [56] e proteínas [57], e problemas de otimização [58].

Um outro aspecto que desperta interesse no modelo de invasões múltiplas, é como a massa média do agregado invadido muda a medida que as diferentes invasões ocorrem. Para entender como estas invasões ocorrem e qual parte do substrato invadido é utilizado novamente a cada nova invasão, calculamos como a massa média do agregado invadido varia a cada nova invasão, ou seja, calculamos M(G). Com base em nossas simulações, podemos afirmar que no limite termodinâmico, ou em outras palavras, no limite de redes



Figura 28: Gráfico em escala logarítmica da massa média M do agregado invadido pelo tamanho do sistema L, caso 3D. Os diferentes símbolos correspondem aos dois valores do número de geração G = 1 e $G = 2 \times 10^4$. A linha contínua é obtida a partir de uma regressão linear e a inclinação desta reta define a dimensão fractal do agregado.

muito grandes, a massa do agregado invadido segue um comportamento em lei de potência que pode ser expresso na forma:

$$M_G \propto G^{-\beta},\tag{3.3}$$

onde o expoente β define a forma que a massa média do agregado invadido decai em função do número de geração. Para uma melhor análise dos resultados, normalizamos a massa do agregado invadido M_G a cada geração pela massa do agregado invadido na primeira invasão M_1 , ou seja, a massa do agregado invadido quando G = 1. Os resultados são mostrados em um gráfico em log-log nas Figs. 29 e 30, sendo estes, correspondentes aos casos 2D e 3D respectivamente. Conforme mostrado nas figuras, a massa do agregado invadido decai em ambos os casos estudados, 2D e 3D. A diferença ocorre apenas no valor do expoente β , mas os comportamentos são basicamente parecidos. Este comportamento em lei de potência se estende por várias ordens de magnitude até atingir um limite de saturação que já foi previamente discutido. Quanto maior o tamanho do sistema, maior será a região na qual se estende o comportamento em lei de potência. A forma como a massa do agregado invadido se comporta em função do número de geração G, é muito



Figura 29: Gráfico em escala logarítmica da massa média do agregado invadido M, normalizado pela massa M_1 correspondente a massa do agregado na primeira invasão, em função do número de gerações G. Esse caso se refere a um sistema bidimensional de tamanho L = 64, 128, 256, 512 e 1024.

semelhante ao que se observa em problemas que envolvem crescimento de superfície [59], onde durante o processo de crescimento podemos verificar dois regimes característicos: (i) um comportamento em lei de potência e (ii) uma região de saturação quando $G \to \infty$. No intuito de descrever tal comportamento, foi proposto em um trabalho realizado por Araújo *et al* [6], a seguinte relação de escala,

$$\frac{M(L,G)}{M_1} = L^{-\alpha} f\left(\frac{G-N_0}{L^z}\right),\tag{3.4}$$

onde N_0 é uma constante de ajuste para o número de gerações, enquanto α e z são expoentes de escala. Nós admitimos que a função f(x) tem a seguinte forma nos dois limites:

$$f(x) \sim \begin{cases} x^{-\beta} & , se \ x \ll 1\\ constante & , se \ x \gg 1. \end{cases}$$
(3.5)

Estes dois limites são observados para invasão em 2D e 3D. Como a curva é continua nos dois limites, podemos utilizar esta propriedade para obtermos uma relação direta entre os expoente α , β e z. Nós encontramos que $M_G/M_1 \sim G^{-\beta}$ no limite $L \gg 1$ e que $M_G/M_1 \sim L^{-\alpha}$ na região de saturação ($G \gg 1$). Utilizando estes dois limites de comportamento, e o fato de que a massa do agregado invadido em uma determinada geração é proporcional



Figura 30: Gráfico em escala logarítmica da massa média do agregado invadido M, normalizado pela massa M_1 correspondente a massa do agregado na primeira invasão, em função do número de gerações G. Esses resultados correspondem a um sistema tridimensional de tamanho L = 32, 64, 128, 256 e 512.

ao tamanho da rede elevado a dimensão fractal do mesmo, podemos, nos limites extremos $G = 1 \ e \ G = G_s$, escrever que $M \sim L^{d_1} \ e \ M \sim L^{d_s}$, resultando finalmente em

$$\alpha = d_1 - d_s. \tag{3.6}$$

Na região de transição a dimensão fractal varia de d_1 (G = 1) até d_S ($G = G_s$). Quando o sistema atinge a saturação, ou seja, $f(x) \sim constante$ resulta que

$$(G - N_0) \propto L^z. \tag{3.7}$$

Agora nós temos as seguintes relações de escalas: (i) $M \sim L^{-\alpha}$, (ii) $M \sim G^{-\beta}$ e (iii) $G \sim L^z$. Partindo destas relações podemos escrever que

$$M \sim G^{\beta} \quad \therefore \quad M^{1/\beta} \sim G \quad \therefore \quad M^{1/\beta} \sim L^z \quad \therefore \quad M \sim L^{z\beta}.$$
 (3.8)

Combinando esta última com a relação (i) podemos concluir que $L^{z\beta} \sim L^{\alpha}$ o que resulta em $z = \alpha/\beta$. Utilizando os valores para as dimensões fractais dos agregados invadidos no limite da saturação $d_s = 1.22$ (2D) e $d_s = 1.46$ (3D) podemos facilmente calcular α . A partir do comportamento $M_G \sim G^{-\beta}$ mostrados nas Figs. 29 e 30, podemos



Figura 31: Gráfico indicativo do colapso das funções obtidas na Fig. 29 a partir da Eq. 3.4, utilizando os expoentes de escala calculados. Nesse caso, o melhor ajuste dos resultados indica $\beta \approx 0.59$.

por meio de uma regressão linear estimar o valor do expoente β . Encontramos para o melhor ajuste linear os seguintes valores: $\beta \approx 0.59 \ (2D)$ e $\beta \approx 0.73 \ (3D)$. Destes últimos determinamos os valores de z como sendo 1.15 e 1.45 para o casos bidimensional e tridimensional, respectivamente. Como teste final mostramos nas Figs. 31 e 32 as curvas colapsadas para os diferentes tamanhos aqui estudados tendo como base para o colapso a Eq. 3.4 e os respectivos expoentes obtidos por meio de nossas simulações. Como podemos verificar, a função de escala proposta funciona muito bem tanto para o caso 2D como para o 3D mostrando que o sistema se apresenta invariante de escala. Outro aspecto que o colapso das curvas revela é a acuracidade dos expoentes determinados neste trabalho.



Figura 32: Gráfico do colapso das funções obtidas na Fig. 30 a partir da Eq. 3.4, utilizando os expoentes críticos calculados. Nesse caso, o melhor ajuste encontrado é para $\beta \approx 0.73$.

3.2.2 Avalanches

Avalanche é um fenômeno natural que se verifica quando uma massa acumulada de neve, areia, lama ou qualquer outro material repentinamente se movimenta de forma rápida e violenta. Quando se trata de avalanche em montanhas, uma vez iniciada, a avalanche tende a crescer em quantidade de massa transportada até a massa em movimento atingir uma região de menor inclinação, onde esta estabiliza. Observa-se o fenômeno de avalanche em vários processos na natureza como, por exemplo, no movimento de dunas na região da slip face, a face mais abrupta da duna. Nesta região da duna, a areia transportada pelo vento vai se acumulando até atingir uma inclinação crítica e repentinamente esta começa a deslizar, momento em que se estabelece uma avalanche. Porém, o conceito de avalanche pode ser mais amplo e podemos definir uma avalanche durante o processo da respiração, quando o ar invade as vias respiratórias dentro de nosso pulmão. Algumas vias podem estar colapsadas e a tentativa de entrada do ar nos pulmões aumenta a pressão localmente em uma determinada região que está colapsada e quando essa pressão local atinge um determinado limite que permite que o ar possa penetrar nesta via, uma sequência de vias respiratórias posteriores a esta também são invadidas. A este processo também se dar o nome de avalanche.



Figura 33: Gráfico em escala logarítmica da distribuição de tamanhos de avalanche P(S, L) em função do tamanho da avalanche S para diferentes tamanhos de rede (caso bidimensional). A linha sólida representa o ajuste obtido a partir de uma regressão linear. O valor do expoente encontrado é $\tau = 1.36 \pm 0.05$. As curvas foram superpostas para uma melhor visualização da região de interesse.

No modelo de percolação invasiva também está presente o fenômeno de avalanche. Durante o processo de invasão do meio poroso, uma avalanche acontece quando o fluido invade um poro com uma determinada pressão p_i e então uma série de poros j conectados a esse também são sequencialmente invadidos com uma pressão $p_j < p_i$. O número de poros invadido com pressão menor do que p_i define o tamanho de uma avalanche S. É bastante conhecido que o sistema atinge uma criticalidade auto-organizada [60] com avalanches presente em todos os tamanhos, que são distribuídos na forma de uma lei de potência

$$P(S) \sim S^{-\tau},\tag{3.9}$$

onde S representa o tamanho de uma avalanche e τ o expoente que governa a distribuição. Através de simulações numéricas, calculamos a distribuição de avalanches para diversos tamanhos de rede L considerando inicialmente o caso tradicional G = 1. Os resultados são mostrados nas Figs. 33 e 34 correspondendo aos casos (2D) e (3D), respectivamente. No caso de percolação invasiva tradicional em 2D o valor reportado na literatura para o expoente é $\tau = 1.31$ [38] considerando o sistema no limite termodinâmico. Já para o caso 3D o valor encontrado na literatura é $\tau = 1.55$ [44]. Em nossas simulações encontramos os



Figura 34: Gráfico em escala logarítmica da distribuição de tamanhos de avalanche P(S) em função do tamanho da avalanche S para simulações em diferentes tamanhos de redes (caso tridimensional). A linha sólida corresponde ao melhor ajuste obtido por meio de uma regressão linear. O valor do expoente encontrado é $\tau = 1.55 \pm 0.03$. As curvas foram superpostas para uma melhor visualização da região de interesse.

seguintes valores para τ considerando o caso G = 1, $\tau = 1.36 \pm 0.05$ (2D) e $\tau = 1.55 \pm 0.03$ (3D). Acreditamos que a discrepância entre os valores encontrado aqui e os reportados na literatura, estejam relacionados ao fato dos sistemas estudados aqui estarem longe do limite termodinâmico, ou seja, ainda não são grandes o suficiente para apresentarem uma boa concordância. Vale salientar que, considerando a barra de erro nos expoentes os valores calculados podem ser considerados satisfatórios.

Uma vez calculado a distribuição de avalanches para o modelo de percolação invasiva tradicional, passamos a investigar como o processo de múltiplas invasões pode alterar a forma da distribuição de avalanches. Para isso escolhemos o maior tamanho de rede estudado aqui L = 1024 e L = 512 considerando os casos (2D) e (3D) respectivamente. Inicialmente, analisamos o comportamento da distribuição de avalanches P(S,G) em função do parâmetro G para estes tamanhos L. Calculamos a distribuição de avalanches P(S,G) para os dois casos. Os resultados são mostrados nas Figs. 35 e 36. Observa-se claramente a partir das curvas, que as distribuições P(S,G) apresentam um comportamento em lei de potência com o expoente que governa o decaimento da distribuição dependente do número de gerações G para os dois casos estudados (2D) e (3D).



Figura 35: Gráfico log-log da distribuição de tamanhos de avalanche P(S, G) para diferentes gerações G = 1 (preto), 16 (vermelho), 64 (verde), 128 (azul) e 512 (marrom) em redes quadradas de tamanho L = 1024. A inclinação das linhas sólidas atestam um comportamento em lei de potências com expoente τ . As linhas contínuas indicam os dois casos limites: G = 1 (inferior) e G = 512 (superior).

As linhas sólidas na Fig. 35 indicam as inclinações nos dois casos limites de G: inferior (G = 1), com $\tau = 1.36$, que corresponde ao caso da percolação invasiva tradicional; e superior (G = 512), com $\tau = 1.01$. Já a Fig. 36 corresponde a distribuição de avalanches para o caso de redes cúbicas (caso 3D) e pode ser analisada de forma semelhante à situação descrita acima. Para esse caso, encontramos os valores de $\tau = 1.55$ e 1.02 para os limites inferior G = 1 e superior G = 512, respectivamente.

Para um melhor entendimento de como o expoente da distribuição de avalanches muda em função do número de geração, mostramos nas Figs. 37 e 38, em gráficos com escala log-linear o expoente de avalanches τ como função do número de gerações G para (2D) e (3D), respectivamente. Para G = 1 obtemos o caso particular obtido na dinâmica de invasão tradicional considerando as respectivas dimensões. A medida que aumentamos o número de gerações G, o expoente τ tem seu valor reduzido. Esse comportamento é observado para os dois casos estudados aqui. Analisando primeiro o caso (2D), podemos constatar a partir da curva mostrada que o expoente inicialmente varia lentamente em função de G até quando $G \approx 32$, a partir do qual, o expoente decai de forma mais rápida. Este decaimento persiste até $G \approx 100$ onde o expoente atinge um platô com $\tau \approx 1$,



Figura 36: Gráfico log-log da distribuição de tamanhos de avalanche P(S, G) para diferentes gerações G = 1 (preto), 8 (vermelho), 32 (verde), 128 (azul) e 512 (marrom) em redes cúbicas de tamanho L = 512. As linhas contínuas indicam o limite inferior (G = 1) com $\tau = 1.55$ e superior (G = 512) com $\tau = 1.02$.

permanecendo constante para valores maiores de G. Já para o caso 3D, o expoente varia de forma mais lenta em função de G, mas também apresenta uma região em torno de G = 128 no qual o expoente passa a variar de forma mais rápida. Para altos valores de $G \approx 512$ este também atinge o valor $\tau = 1$. Embora não mostrado aqui, espera-se que a partir deste valor de G o expoente τ permaneça constante.

Vale salientar que na região do platô, para grandes valores de G o expoente converge para $\tau = 1$, independentemente da dimensão topológica da rede. Esse valor é o mesmo encontrado para a distribuição de avalanches P(S) no caso de redes unidimensionais [61]. Tal comportamento já era esperado e ocorre pois, a medida que o agregado remanescente é reinvadido, a massa média do agregado invadido diminui de maneira tal que, no limite $G \to \infty$, o processo de avalanches é limitado a ocorrer sobre um substrato que corresponde a um caminho estreito que é essencialmente de topologia unidimensional. Um fato que devemos destacar é que o expoente que controla a distribuição de avalanches muda de forma contínua de um limite a outro, para os dois casos estudados. Esse fato sugere uma mudança de universalidade de maneira contínua. Os aspectos abordados aqui são consistente com as estruturas exibidas nas Fig. 23 e 24 e demonstra a validade de nossas suposições.



Figura 37: Gráfico log-linear do expoente τ que controla a distribuição de avalanches como função do número G de gerações para redes bidimensionais de tamanho L = 1024.



Figura 38: Gráfico log-linear do expoente τ que controla a distribuição de avalanches como função do número G de gerações para redes tridimensionais de tamanho L = 512.

4 CONCLUSÃO

A necessidade de se melhor compreender o efeito da geometria de uma estrutura porosa sobre a dinâmica de deslocamento de um fluido dentro dessa estrutura, por meio da injeção de um outro fluido com propriedades físico-químicas diferente, é tema de muitos trabalhos teóricos e experimentais. Comumente, o ponto de interesse é examinar aspectos locais da morfologia do meio poroso e relacioná-los com os mecanismo de transporte, com o objetivo de se melhor entender a importante conexão entre a estrutura do meio e a fenomenologia que se pretende investigar. Partindo de um ponto de vista conceitual, este tem sido o objetivo de vários trabalhos onde simulações computacionais utilizando modelos amplamente utilizados na mecânica estatística, permitiram predizer e validar com sucesso correlações existentes entre propriedades geométricas e de transportes em situações reais.

No presente trabalho, investigamos o processo de múltiplas invasões de um fluido que ocorre no interior de uma estrutura desordenada utilizando o modelo de percolação invasiva para representar a dinâmica de invasão. A partir do modelo padrão de percolação invasiva, introduzimos o aspecto de invasões múltiplas para tentar simular o processo de formação de rochas. Acreditamos que após o primeiro processo de invasão ocorrer, a região invadida adquire uma certa fragilidade na sua estrutura o que gera uma espécie de memória para uma nova invasão. Em uma análise quantitativa deste estudo, estudamos como a massa média ou seja a extensão da região invadida varia em função do número de invasões.

Os resultados obtidos por meio de extensivas simulações atestam que a massa média decresce na forma de uma lei de potência $M \sim G^{-\beta}$ em função do número de geração de invasão G, onde o expoente β é dado por: $\beta \approx 0.59$ (2D) e $\beta \approx 0.73$ (3D). Com relação a parte geométrica verificamos que a dimensão fractal da estrutura invadida muda continuamente entre duas classes de universalidade, partindo de percolação invasiva tradicional até caminho ótimo no limite de desordem forte. Os valores encontrados foram: (i) G = 1, temos $d_f = 1.89$ (2D) e $d_f = 2.52$ (3D); (ii) $G \to \infty$, temos $d_f = 1.22$ (2D) e $d_f = 1.46$ (3D). Estabelecemos uma relação de escala para o comportamento de massa média invadida M(G, L), do tipo $M(G, L) \sim L^{-\alpha}f(G/L^z)$, sendo os expoentes z, α e β relacionados na forma $z = \alpha/\beta$. Com base nesta relação de escala e nos expoentes calculados obtivemos um colapso das diferentes curvas para os vários tamanhos estudados, confirmando a invariância de escala para o sistema aqui estudado.

Uma outra grandeza estudada foi a distribuição de avalanches, durante o processo de invasão. Neste estudo, analisamos como o expoente da distribuição de avalanches, que segue um comportamento em lei de potência do tipo $P(S) \sim S^{-\tau}$, muda com relação ao número de geração de invasão G. Verificamos que este expoente, muda de uma forma continua e com base neste resultado sugerimos que o expoente que governa a distribuição de avalanches pertence a diferentes classe de universalidade para cada valor de G. Os valores dos expoente τ encontram-se em perfeito acordo com os reportados na literatura para os casos limite G = 1, avalanches em percolação invasiva tradicional e $G \to \infty$ avalanches em uma dimensão. Este último se justifica pelo fato das repetidas invasões reduzirem o substrato de invasão a um sistema tipicamente unidimensional. Este comportamento foi observado no estudo realizado em duas e três dimensões.

Como perspectiva para trabalhos futuro, podemos aplicar o mesmo modelo de invasões múltiplas agora para o caso de um substrato que apresente correlações espaciais na sua estrutura ou com algum tipo de anisotropia, propriedades bastante observadas em rochas naturais.

Referências

- [1] BROADBENT, S. R.; HAMMERSLEY, J. M. Proc. Camb. Phil. Soc. 53, 629 (1957).
- [2] WILKINSON, D.; WILLEMSEN, J. F. J. Phys. A 16, 3365 (1983).
- [3] WITTEN, T. A.; SANDERS, L. M. Phys. Rev. B 27, 5686 (1983).
- [4] BIROVLJEV, A. et al. Phys. Rev. Lett 67, 584 (1991).
- [5] ONODY, R. N. J. Mod. Phys. C 6, 77 (1995).
- [6] ARAUJO, A. D.; ANDRADE, J. S. Jr.; HERRMANN, H. J. Phys. Rev. E 70, 66150 (2004).
- [7] DILLES, J. H.; EINAUDI, M. T. Econ. Geol. 87, 1963 (1992).
- [8] WANAMAKER, B. J.; WONG, T. F.; EVANS, B. Geophys. Res. 95, 15623 (1990).
- [9] MANDELBROT, B. B. The Fractal Geometry of Nature. New York: W. H. Freeman and Company, 1982.
- [10] FEDER, J. Fractals. New York: Plenum Press, 1988.
- [11] Principles of Computing. Disponível em:; http://www.kosbie.net/cmu/spring-11/15-110/notes/recitation9.html;.Acesso em: 1 fev, 2013.
- [12] GOUYET, J.-F. Physics and Fractal Structures. France: Masson, 1996.
- [13] NAKAYAMA, T.; YAKUBO, K. Fractal Concepts in Condensed Matter Physics. New York: Springer, 2003.
- [14] SKJELTORP, A. Random Fluctuations and Pattern Growth: Experiments and Models. Dordrecht: Kluwer Academic Pub., 1988.
- [15] STAUFFER, D. Introduction to Percolation Theory Philadelphia: Taylor & Francis, 1985.
- [16] BARONE, D. Sociedades Artificiais. Porto Alegre: Bookman, 2003.
- [17] ZIFF, R. M. Phys. Rev. Lett. 56, 545 (1986).
- [18] OLIVEIRA, Erneson A. *Geração de fraturas auto-similares em meios desordenados* (Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, 2008).
- [19] CLAR, S.; SCHENK, K.; CSHWABL, F. Phys. Rev. E. 55, 2174 (1997).
- [20] STANLEY, H. E. Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena. New York: Oxford University Press, 1971.
- [21] STANLEY, H. E.; ANDRADE Jr, J. S.; HAVLIN, S.; MAKSE, A.; SUKI, B. *Physica* A. 266, 5 (1999).
- [22] DOROGOVTSEV, S.; MENDES, J. F. F. Evolution of Networks. New York: Oxford University Press, 2003.
- [23] BERKOWITZ, B.; EWING, R. P. Surveys in Geophysics 19, 23 (1998).
- [24] MOREIRA, André A. Transporte Elétrico em Sistemas Desordenados (Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, 1998).
- [25] STANLEY, H. E. J. Phys. A: Math. Gen. 10, L211 (1977).
- [26] TOME, T.; OLIVEIRA, M. José de. Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade. São Paulo: EDUSP, 2001.
- [27] SAHIMI, M. Rev. Mod. Phys. 65, 1393 (1993).
- [28] BEAR, J. Dynamics of Fluids in Porous Materials. New York: Elsevier, 1972.
- [29] DULLIEN, F. A. Porous Media Fluid Transport and Pore Structure. New York: Academic, 1979.
- [30] ARAUJO, A. D.; VASCONCELOS, T. F. et al. Phys. Rev. E 72, 41404 (2005).
- [31] BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Phys. Rev. A 38, 364 (1988).
- [32] LEATH, L.; REICH, G. R. J. Phys. C 11, 4017 (1978).
- [33] VOSS, F. J. Phys. A 17, 373 (1984).
- [34] ZIFF, M.; CUMMINGS, P. T.; STELL, G. J. Phys. A 17, 3009 (1984).
- [35] WEINRIB, A.; TRUGMAN, S. Phys. Rev. B **31**, 2993 (1985).
- [36] SAPOVAL, B.; ROSSO, M.; GOUYET, J. F. J. Phys. 46, 149 (1985).
- [37] SALEUR, H.; DUPLANTIER, B. Phys. Rev. Let. 22, 2325 (1987).
- [38] NICOS, M.; CIEPLAK, M.; ROBBINS, M. O. Phys. Rev. B 44, 12294 (1991).
- [39] SCHRENK, K. J.; ARAUJO, N. A. M.; HERRMANN, H. J. Phys. Rev. E 84, 41136 (2011).
- [40] ABBOTT, L.; ROHRKEMPER Prog. Brain Res. 165, 13 (2007).
- [41] HALDEMAN, C.; BEGGS, J. Phys. Rev. Lett. 94, 58101 (2005).
- [42] LEVINA, A.; HERRMANN, J.; GEISEL, T. Nat. Phys. 3, 857 (2007).
- [43] ROUX, S.; GUYON, E. J. Phys. A 22, 3693 (1989).
- [44] XU, Lei et al. Phys. Rev. Lett **101**, 94502 (2008).
- [45] WILKINSON, D. Phys. Rev. B **30**, 520 (1984).

- [46] MEAKIN, P. et al. Phys. Rev. A 46, 3357 (1992).
- [47] TURCOTTE, D. L. Fractals an Chaos in Geophysics. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
- [48] MANNING, C. E. *Geology* **22**, 335 (1994).
- [49] PANAHI, A. et al Geochem.: Explor., Environ., Anal. 4, 59 (2004).
- [50] LUIJTEN, E.; BLOTE, W. J.; BINDER, K. Phys. Rev. E 56, 6540 (1997).
- [51] SALMON, E.; AUSLOOS, M.; VANDEWALLE, N. Phys. Rev. E 55, 6348 (1997).
- [52] CIEPLAK, M.; MARITAN, A.; BANAVAR, J. R. Phys. Rev. Lett. 72, 2320 (1994).
- [53] CIEPLAK, M.; MARITAN, A.; BANAVAR, J. R. Phys. Rev. Lett. 76, 3754 (1996).
- [54] DOBRIN, R.; DUXBURY, P. M. Phys. Rev. Lett. 86, 5076 (2001).
- [55] ANDRADE Jr, J. S.; OLIVEIRA, E. A.; MOREIRA, A. A.; HERRMANN, H. J. Phys. Rev. Lett. 103, 225503 (2009).
- [56] MEZARD, M. et al Phys. Rev. L 52, 1156 (1984).
- [57] ANSARI, A. et al Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 82, 5000 (1985).
- [58] KIRKPATRICK, S.; TOULOUSE, G. J. Phys. 46, 1277 (1985).
- [59] STANLEY, H. E.; BARABÁSI, A.-L. Fractals Concepts in Surface Growth. New York: Cambridge University Press, 1995.
- [60] BAK, P. How Nature Works: the science of self-organized criticality. New York: Springer, 1999.
- [61] ALENCAR, A. M. et al Phys. Rev. E 68, 11909 (2003).