Gaz. Fís., Vol. 11, Fasc. 4, 1988

DLA – Um exemplo simples de simulação computacional em física

JORGE CARVALHO SILVA e CARLOS FIOLHAIS
Departamento de Física da Universidade de Coimbra

1. Introdução

O avanço da tecnologia dos computadores, nomeadamente a introdução no início da década de 80 dos chamados computadores pessoais, permitiu generalizar em física (por assim dizer, democratizar) a prática de simulações computacionais. Hoje é possível, tanto a físicos profissionais como a estudantes, programar um algoritmo de interesse físico num computador pessoal e extrair dos resultados conclusões sobre o comportamento do sistema natural que foi modelado.

A agregação limitada por difusão (conhecida pela abreviatura DLA, do inglês «Diffusion Limited Aggregation») constitui um exemplo simples de uma simulação computacional de um fenómeno físico, a qual não obstante a sua simplicidade, só foi introduzida em 1981 por Witten e Sander. A motivação destes autores foi a evidência experimental obtida em 1979 por Forrest e Witten que os agregados de aerosóis eram fractais. Nem sempre porém teoria e experiência concordam e nem sempre esse desacordo representa algo de trágico. Assim, embora a dimensão fractal característica do modelo de DLA para uma geometria tridimensional fosse muito diferente do caso estudado por Forrest e Witten, a DLA veio a revelar-se não só um modelo qualitativamente novo e portanto com interesse teórico, mas também aplicável, com uma ou outra modificação, a toda uma variedade de situações de interesse físico.

Vamos neste artigo descrever a técnica computacional utilizada para obter figuras de DLA, discutir os resultados da sua realização usando a linguagem Turbo Pascal num computador pessoal Mackintosh Plus e, finalmente, discutir os principais problemas em aberto assim como as possibilidades de comparação deste tipo de simulações com a experiência.

O trabalho foi realizado no âmbito da cadeira de Física Computacional do quarto ano do curso de Física da Universidade de Coimbra (ramo científico). Esta cadeira foi introduzida no ano lectivo de 1987-1988 com o intuito de familiarizar os alunos com a simulação computacional de leis físicas. Embora não se reclame nenhuma originalidade para este «trabalho prático», queremos realçar não só o facto de se basear em literatura relativamente recente mas também a perspectiva que abre para uma investigação mais aprofundada dos fractais. Um estudante pode por este meio familiarizar-se com hábitos e técnicas de investigação e percorrer todo o ciclo que vai da formulação de questões interessantes à comparação das respostas obtidas com os resultados publicados na literatura científica, passando pela aplicação das metodologias adequadas.

2. Técnica computacional

Considera-se uma rede num espaço a 2 dimensões (o número de dimensões é uma questão de conveniência de visualização e de rapidez computacional, sendo em princípio igualmente fácil considerar redes a 3 dimensões, mais realistas, ou até redes em hiper-espaços com $d > 3$). Coloca-se uma «semente» num ponto dessa rede. A semente é uma partícula inicial, a partir da qual se vai construir o agregado. Toma-se uma circunferência centrada na semente e cujo raio é grande comparado com a constante da rede. A constante da rede foi considerada igual à separação entre «pixels» no écran (que tem 322×512 pontos), e utilizou-se o valor inicial $r = 20$. É escolhido aleatoriamente um ponto dessa circunferência e larga-se daí uma partícula que se difunde pela rede (o caminho livre médio do passeio aleatório é igual à constante da rede, embora se possam considerar caminhos livres médios maiores se se pretende acelerar o processo). Então uma de duas coisas pode acontecer: ou a partícula toca na semente, considerando-se a partir daí agregada, i.e. imóvel na posição de colisão, ou a partícula se afasta demasiado da semente, i.e. sai para fora de um círculo com um raio que é maior que o raio do círculo

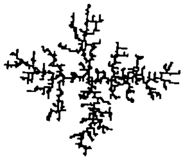

Fig. 1a—Número de capturas = 1139

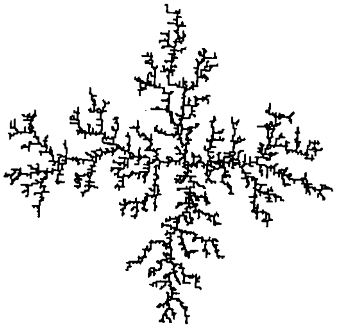

Fig. 1b—Número de capturas = 3486

de partida. Neste último caso, a partícula é abandonada, lançando-se uma outra de uma posição aleatória da mesma circunferência de onde a partícula «perdida» tinha partido. Existe a possibilidade (muito pequena) de o processo de difusão continuar sem que a partícula toque na semente ou se afaste para muito longe. Um contador de iterações e uma condição de limite máximo para o número de iterações pode ajudar a acelerar o cálculo. O processo repete-se em seguida. O raio do círculo é aumentado à medida que o raio do agregado cresce. Os agregados obtidos por este algoritmo encontram-se representadas nas Figs. 1a), 1b) e 2a), correspondendo a uma rede quadrangular (Fig. 1) e a uma rede triangular (Fig. 2; pág. 153).

Atendendo ao grande tempo de cálculo necessário, foi-se guardando a informação obtida sobre o agregado numa ficha de dados de modo a que cada vez que se chamava o programa o processo de agregação recomeça no sítio onde tinha ficado, em vez de tudo voltar ao início.

As figuras obtidas por DLA são exemplos típicos de fractais aleatórios ou estatísticos. A dimensão fractal pode ser calculada por vários processos, obtendo-se aproximadamente o mesmo número (cada processo tem um certo erro associado). Utilizámos dois métodos diferentes:

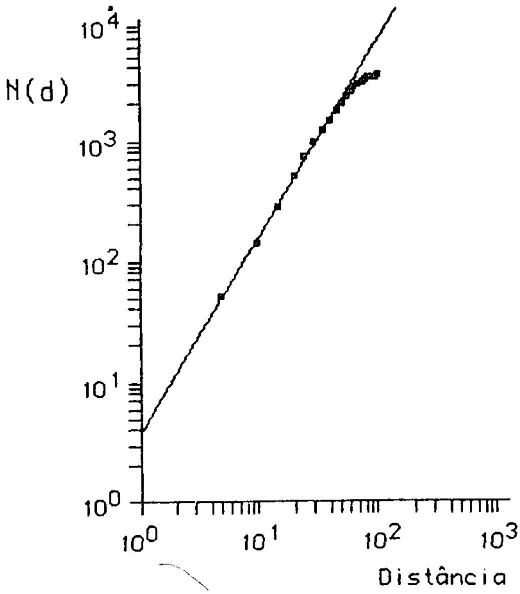

Fig. 1c—Dimensão fraccionária = 1,665 ± 0,104

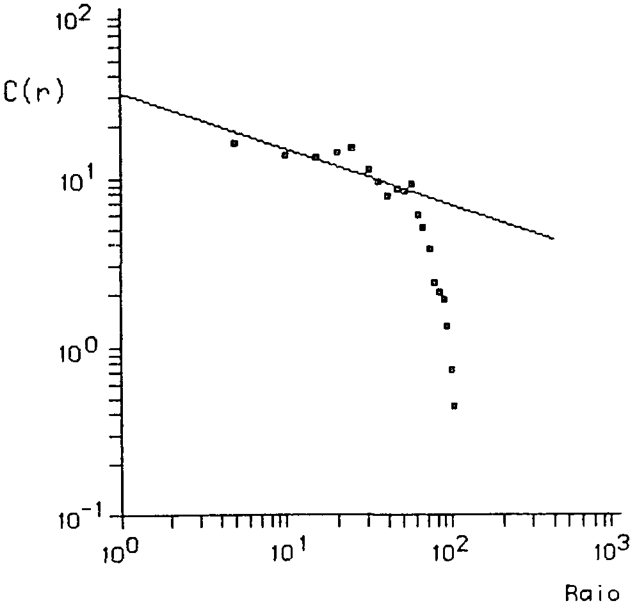

Fig. 1d—Dimensão fraccionária = 1,620 ± 0,001

i) No primeiro, calcula-se a função de correlação densidade-densidade (que indica a relação entre densidades em dois pontos diferentes), dada pela fórmula

$$C(r) = (2\pi\, r\, N)^{-1} \sum_{i} n_i(r)$$

em que N é o número de partículas do agregado, r é o raio interior de uma coroa circular em torno da semente e $n_i(r)$ (consideram-se 20 dessas coroas) é o número de partículas num pequeno círculo em torno de cada partícula i dentro da coroa. Representou-se graficamente (Figs. 1c e 2b) o logaritmo de C(r) contra o logaritmo de r, sendo o declive da recta obtida dado por $D-d$, i.e. a dimensão fractal procurada menos a dimensão geométrica do espaço subjacente (2 no caso presente). Verifica-se das Figs. 1c) e 2b) que os efeitos de bordo do agregado são relevantes, conforme era de esperar, pois interrompeu-se arbitrariamente o crescimento do fractal. O erro obtido pelo método dos mínimos quadrados é relativamente pequeno, uma vez que os pontos da extremidade não são levados em consideração. A Tab. 1 contém os valores obtidos para a dimensão fractal, para os dois tipos de rede:

TABELA 1 — *Tabela de dimensões fractais ($d=2$)*

	Este trabalho (método i)	Outras simulações	Valores teóricos
Rede quadrangular	1,67±0,10	1,68±0,05	5/3
Rede triangular	1,77±0,10	1,71±0,05	7/4

ii) No outro processo, de compreensão mais intuitiva, contam-se simplesmente o número de partículas contidas num certo número de quadrados (20, no caso presente), com tamanhos diferentes, mas todos centrados na semente, e representa-se o logaritmo desse número versus o logaritmo do lado do quadrado. Mais uma vez se aplicou o método dos mínimos quadrados para calcular a dimensão fractal, que é o declive da recta que melhor descreve os dados. Os erros obtidos são muito menores do que no caso anterior. Uma maneira de melhorar o resultado consistiria em considerar, por exemplo, quadrados com centros diferentes, mas encaixados uns nos outros, de tal forma que o centro de cada um deles fosse o centro de gravidade dos pontos no respectivo interior.

Da comparação das dimensões fractais obtidas com os valores existentes na literatura conclui-se que o método i) é superior ao ii) quanto ao valor absoluto, embora o erro que lhe está associado seja maior.

Note-se que uma vez que se trata de um fractal estatístico, uma avaliação mais exacta da dimensão fractal exige a simulação de todo um conjunto de agregados e a construção de uma média sobre o «ensemble» obtido. Levar-se-iam assim em conta as flutuações associadas a fractais particulares. Podia, por exemplo, construir-se um certo número de fractais com vários tamanhos e representar o logaritmo do raio de giração do fractal contra o logaritmo do número de partículas nele contidas.

Deve realçar-se que os valores obtidos para a dimensão fractal estão em bom acordo com os cálculos realizados em computadores mais poderosos (em alguns deles com milhões de partículas nos agregados), e com estimativas teóricas conforme se pode ver na Tab. 1.

A dimensão fractal, ao contrário do que seria de supor em face do conceito de universalidade da teoria dos fenómenos críticos (insensibilidade dos expoentes críticos a pormenores, como o tipo de rede e tipo de interacção) depende da rede subjacente. Para a rede triangular tem-se um valor diferente, embora próximo, do da rede quadrangular, se se usar o método i), que é o de maior confiança para a determinação da dimensão fractal. Pode-se constatar porém uma insensibilidade relativamente a algumas modificações de pormenor do algoritmo. A «classe de universalidade» da DLA é portanto mais restrita do que em mecânica estatística, tendo sido este facto descoberto por via de simulação computacional.

Outra diferença importante em relação à universalidade, é que a dimensão fractal cresce com a dimensão normal (pelo menos isso verifica-se para d < 6), ao contrário dos expoentes críticos das transições de fase que estabilizam nos valores do campo médio para redes com d > 4.

Parece que essas diferenças relativamente à mecânica estatística têm a ver com o facto de na DLA se ter um processo cinético irreversível e não uma mudança de fase reversível.

3. Discussão

O matemático francês Mandelbrot definiu fractal como um objecto cuja dimensão fractal ou dimensão de Hausdorff é menor que a dimensão espacial. Significa isto que à medida que o processo de agregação se desenvolve existem cada vez mais e maiores espaços vazios entre os ramos do agregado, i.e. que o objecto não é compacto mas antes extremamente fragmentado. Um fractal matemático é, de facto, um objecto infinitamente fragmentado. A densidade de um fractal diminui à medida que se aumenta a escala de observação, sendo a diminuição descrita por uma potência em cujo expoente entre a dimensão fraccionária. Os espaços vazios (não se trata de «buracos» pois é praticamente impossível formarem-se arcos que delimitem espaços fechados) têm todas as ordens de grandeza.

Pode-se falar de um efeito de blindagem pois as partículas, embora teoricamente possam, normalmente não entram nos numerosos «fiordes», quer grandes quer pequenos, que são típicos do agregado, pois é grande a probabilidade de encontrarem alguma «rocha» pelo caminho. A Fig. 2a) representa o fractal num estádio inicial do seu desenvolvimento. Como essa figura é bastante parecida com o interior do fractal maior, torna-se nítido o papel de protecção que os pontos exteriores desempenham relativamente aos interiores. Tudo se passa como se um barco navegasse ao acaso (por causa do mar alterado), ao largo da costa norueguesa. A probabilidade de entrar num fiorde seria pequena, sendo mais provável

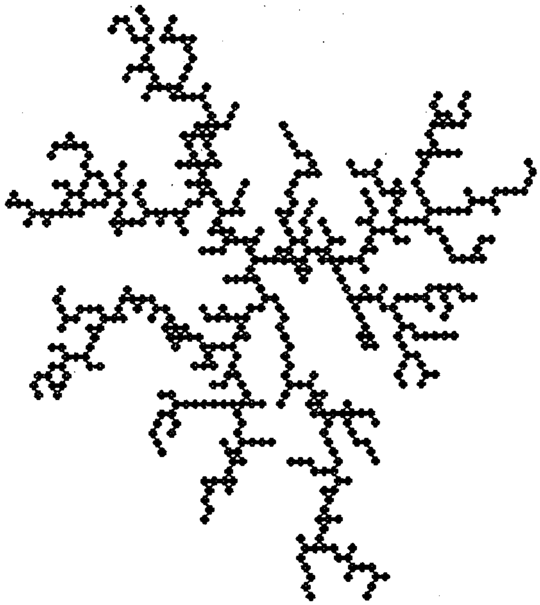

Fig. 2a — Número de capturas = 525

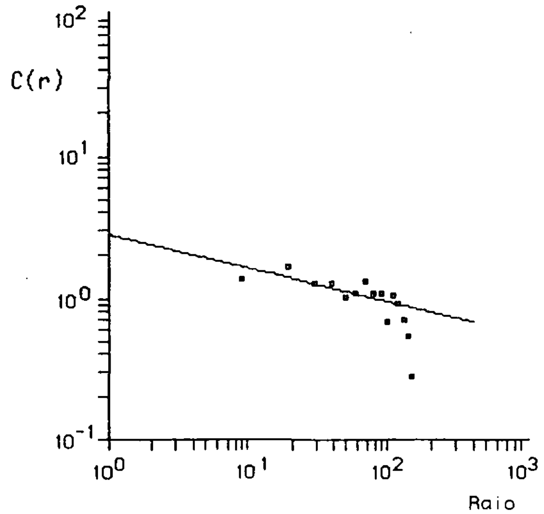

Fig. 2b — Dimensão fraccionária = 1,765 ± 0,100

que o barco se despedaçasse num dos rochedos mais avançados da costa. É este efeito de blindagem que no fundo impede o agregado de ser compacto e lhe confere a sua característica de fractal, i.e. de um objecto com «buracos» de todos os tamanhos. A palavra «todos» não é a mais adequada para um fractal físico pois só num objecto matemático ideal há lugar para todas as ordens de grandeza. Num fractal físico como o da DLA o tamanho da partícula estabelece a ordem de grandeza inferior, existindo obviamente uma ordem de grandeza superior, relacionada com o tamanho máximo admitido ou conseguido para o sistema total.

O facto de a DLA conduzir a um fractal não é de forma alguma trivial. Existem modelos de crescimento aos quais não correspondem fractais, apesar de existir um elemento de aleatoriedade no respectivo algoritmo. Nos assim chamados modelos balísticos (sem ou com parâmetro de impacto) a trajectória das partículas é uma linha recta (que se dirige ou não para a semente inicial), embora o ponto de partida dessas partículas continue a ser aleatório sobre uma circunferência. Os objectos assim obtidos não são fractais. Por outro lado, o chamado modelo de Eden, baseado no crescimento aleatório de uma figura compacta já existente, por adição de uma nova partícula num sítio qualquer do contorno, também não é um fractal.

Pode-se, no entanto, mudar o mecanismo da DLA sem que ocorram grandes diferenças nos resultados, por exemplo:

— a «colagem» ao agregado pode dar-se só com uma certa probabilidade,

— pode considerar-se um certo «tempo de reacção» suficientemente longo, i.e. uma partícula do agregado só «aceita» uma partícula nova desde que não tenha decorrido mais do que um certo tempo sobre a sua própria deposição (se esse tempo for curto a dimensão fractal diminui).

— podem considerar-se passos maiores no início do processo,

— a figura de partida pode ser um quadrado em vez de um círculo.

As figuras resultantes têm em geral o mesmo aspecto, sendo a dimensão fractal a mesma. Experimentámos em particular a última das modificações indicadas, tendo obtido dimensões fractais aproximadamente iguais às indicadas na Tab. 1.

O estudo da DLA sugere um certo número de questões teóricas interessantes.

— Existe alguma relação simples entre a dimensão fractal e a dimensão da rede? Em particular, qual é o comportamento assimptótico para redes num hiper-espaço de grande dimensão?

— É suficiente uma dimensão fractal única para caracterizar o objecto?

Apesar de se terem alguns resultados preliminares (por exemplo, $D=d^2+1/d+1$ para uma rede quadrangular), não se tem ainda uma resposta definitiva à primeira pergunta, sendo necessárias mais simulações e algum novo conceito para a avaliação teórica da dimensão fractal. A resposta à segunda questão parece ser negativa. Com efeito, simulações muito grandes começaram por revelar que é necessário, pelo menos, definir uma dimensão fractal radial e uma dimensão fractal tangencial para definir com exactidão uma figura de DLA. Hoje em dia a conclusão parece ser que se está perante um multifractal, i.e. um objecto com uma infinidade de dimensões fractais.

Uma limitação básica do modelo de DLA é o facto de existir apenas uma semente e de esta se conservar imóvel no decorrer do tempo. Em situações reais de agregação de fumos, aerosóis, colóides, etc. ocorrem vários agregados que se deslocam erraticamente até finalmente se reunirem. Experiências de simulação que levam em conta essa possibilidade forneceram dimensões fractais no espaço tridimensional que são muito parecidas com a dimensão fractal descoberta por Forrest e Witten ($D=1.78$). Note-se que a DLA fornece o valor $D=2.5$ para $d=3$.

No entanto, e como foi dito no início, a DLA, na sua versão mais simples ou em generalizações adequadas (por exemplo, nos chamados fractais laplacianos, onde o crescimento do fractal se faz de dentro para fora sendo a probabilidade de crescimento num certo ponto dada por um número aleatório e pela solução da equação de Laplace para a geometria em causa) é útil para descrever fenómenos tão diferentes mas tão vulgares como a electrodeposição de um material, o contacto entre dois líquidos de densidades diferentes e o fenómeno de uma descarga num dieléctrico (o exemplo mais conhecido é o relâmpago numa trovoada).

A física, com o uso generalizado dos computadores, permite estudar os complicados problemas de morfogénese no mundo macroscópico. O modelo que discutimos tem um inegável interesse didáctico: da sua análise conclui-se como pode ser simples uma descrição, tanto qualitativa como quantitativa, de alguns fenómenos não triviais que surgem na natureza, à nossa volta.

BIBLIOGRAFIA

S. Forrest e T. Witten — *J. Phys.*, **A12**, L-109 (1979).

H. J. Herrmann — *Phys. Rep.*, **136**, 154 (1986).

P. Julien — *Comm. Cond. Matter Phys.*, **13**, 177 (1987).

P. Meakin — *Phys. Rev.*, **A27**, 604 e 1495 (1983).

L. Pietronero e E. Tosatti (eds.) — «Fractals in Physics», North-Holland (1986).

L. Sander — *Scient. American*, **256**, 94 (1987).

T. Witten e L. Sander — *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 1400 (1981).

NOVAS DIVISÕES TÉCNICAS DA SPF

Na Assembleia Geral da Sociedade que se realizou em Aveiro no dia 26 de Setembro p.p. foi decidido dissolver a Divisão Técnica de Cristalografia e criaram-se duas novas Divisões Técnicas:

— Física Atómica e Molecular;

— Meteorologia, Geofísica e Astrofísica.

Está pois aberto o caminho para que estas divisões iniciem a sua actividade, contribuindo para o desenvolvimento das respectivas áreas e para a defesa dos seus interesses. De acordo com os estatutos da SPF e Regulamento das Divisões Técnicas (publicado na Gazeta de Física, vol. 8, Fasc. 1 (1985) pág. 39) é essencial a designação de um Coordenador, coadjuvado por dois vogais, para cada uma das novas Divisões. Conforme se lê no ponto 4 do Regulamento o coordenador é escolhido de entre os 3 mais votados pelos sócios inscritos nessa Divisão. É pois necessário que os sócios interessados se inscrevam nas novas Divisões constituindo assim o corpo eleitoral. Com o objectivo de iniciar e promover a inscrição de sócios nas novas Divisões e ainda de actualizar a inscrição nas Divisões Técnicas, se for caso disso, solicita-se que preencha a ficha de inscrição e a devolva para a sede da SPF (Av. da República, 37-4.° 1000 Lisboa).

No passado a eleição dos coordenadores das Divisões Técnicas tem sido feita sem a prévia apresentação de candidatos. Contudo a apresentação de candidatos à eleição constitui prática corrente em outras Sociedades científicas europeias. Será proventura tempo de iniciar o novo processo de eleição. O seu sucesso depende naturalmente da apresentação de candidaturas sobre as quais os sócios inscritos na respectiva Divisão se possam pronunciar. Não havendo candidatos, eventualmente propostos por outros sócios, cairemos inevitavelmente no anterior processo de eleição em que qualquer eleitor é susceptível de receber votos e ser eleito. É extremamente útil receber as opiniões dos sócios sobre este assunto de modo a que o método a adoptar venha a reflectir o mais largo consenso possível.

Assim e em conclusão solicita-se que:

1 — Preencha a ficha em anexo e a devolva à sede da SPF no caso de querer inscrever-se nas novas Divisões Técnicas ou de querer actualizar a sua inscrição nas já existentes.

2 — Envie por escrito para a Sede sugestões sobre a metodologia da eleição dos coordenadores das Divisões Técnicas.

Participe na sua Sociedade. A actividade da SPF depende da participação activa de cada sócio.

O Secretariado da SPF