

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

ESTUDO DE NOVOS PROCESSOS DE EMPACOTAMENTO EM DUAS DIMENSÕES

por

Pablo Abreu de Morais

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes (Orientador-UFPE) Prof. Bruno Geraldo Carneiro da Cunha (DF - UFPE) Profa. Viviane Moraes de Oliveira (DEI-UFRPE)

> Recife - PE, Brasil Julho - 2008

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

Morais, Pablo Abreu de. Estudo de novos processos de empacotamento em duas dimensões / Pablo Abreu de Morais. -Recife: O Autor, 2008. 58 folhas. il. fig. tab.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 2008.

Inclui bibliografia.

•

1. Física do estado sólido. 2. Empacotamento. I. Título.

530.41 (22.ed.) FQ 2010-031



Universidade Federal de Pernambuco Departamento de Física - CCEN Programa de Pós-Graduação em Física Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil Fone (++ 55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (++ 55 81) 3271-0359 http://www.df.ufpe.br/pg_e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado

Pablo Abreu de Morais

ESTUDO DE NOVOS PROCESSOS DE EMPACOTAMENTO EM DUAS DIMENSÕES

A Banca Examinadora composta pelos Professores Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes (Presidente e Orientador), Bruno Geraldo Carneiro da Cunha, ambos da Universidade Federal de Pernambuco e Viviane Moraes de Oliveira, do Departamento de Estatística e Informática, da Universidade Federal de Pernambuco, consideram o candidato:

(X) Aprovado

() Reprovado

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco em vinte e dois de julho de 2008.

Prof. Marcelo Andrade Filgueiras Gomes Presidente e Orientador

Prof. Bruno Geraldo Carneiro da Cunha

turanen Joraes de Oliver Prof^a. Viviane Moraes de Oliveira

Dedicatória

Aos meus irmãos, Max e Argus, que sempre estiveram ao meu lado nos momentos mais adversos.

Agradecimentos

Agradeço a todos que contribuiram de forma direta ou indireta para a realização deste trabalho:

- Aos meus pais, primeiramente.

- Aos meus irmãos, Max e Argus.

– À Fabiana por ter me incentivado e ajudado durante o mestrado.

- Ao Prof. Dr. Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes, pela orientação, paciência e incentivo.

 – À Cássia Donato, que mesmo à distância contribuiu de maneira fundamental para a realização deste trabalho.

 Aos amigos e colegas que fiz durante a graduação e o mestrado. Em especial, gostaria de agradecer aos meus grandes amigos Sérgio, Erneson, José Júnior, Paschoal, Ana Tereza, George, Saulo, Roner, Janduy e Antônio Márcio.

- Ao CNPq e à CAPES pelo suporte financeiro.

"Há duas fontes perenes de alegria pura: o bem realizado e o dever cumprido". Eduardo Girão

Resumo

O processo de amassamento de fios em cavidades bidimensionais leva à formação de padrões complexos de laços interagentes controlados por interações de auto-exclusão e descritos por leis de escala robustas. A partir da análise de imagens de configurações de fios de cobre amassados em uma cavidade circular, estudamos a geometria individual dos laços. Entre outras propriedades, calculamos médias do ângulo de torção(β) e da relação perímetro/(área)¹/₂ (k). Os valores médios de β e k obtidos obedecem consistentemente as relações para polígonos regulares para um número de lados n fracionário. Experimentos de empacotamento foram realizados utilizando o laço médio e obtivemos a fração de ocupação máxima $p_{max} = 0,8752$ em uma rede, valor intermediário entre a fração de ocupação de empacotamento máxima de discos $p_{max} = 0,9068$ e a fração de ocupação de empacotamento aleatório de discos $p_{aleat} = 0,84$.

Palavras-Chave: sistemas complexos, empacotamento, leis de escala

Abstract

The crumpling process of wires in two-dimensional cavities gives origin to the formation of complex patterns of interacting loops obeyng robust scaling laws. From the analysis of images of configurations of crumpled cooper wire in a circular cavity, we study the individual loops geometry. Among other properties, we calculate averages of the torsin angle (β) and of the relation perimeter/(area)¹/₂ (k). The average values of β and k obtained obey consistently the corresponding relations for regular polygons for a fractonary number of sides n. Experiments of packing with the average loop were performed and we have obtained a maximum packing fraction $p_{max} = 0,8752$ on a lattice, a value intermediate between the maximum fraction of packing of discs $p_{max} = 0,9068$ and the fraction of occupation in the random packing of discs $p_{aleat} = 0,84$.

Keywords: Complex Systems, Packing, Scaling Laws

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

1	Intr	odução		p. 11
	1.1	Empac	cotamento em três dimensões	p. 12
	1.2	Empac	cotamento em duas dimensões	p. 14
		1.2.1	Empacotamento de discos em 2D	p. 16
		1.2.2	Empacotamento de fios em 2D	p. 18
2	Ama	assamen	nto de Fios em 2D	p. 19
	2.1	Detalh	es Experimentais	p. 20
	2.2	Leis de	e Escala	p. 23
		2.2.1	Relação Massa-Tamanho	p. 23
		2.2.2	Número de Laços	p. 25
	2.3	Model	o Hierárquico	p. 25
3	Laço	DS		p. 29
	3.1	Seleçã	o e Edição de Imagens	p. 29
	3.2	Relaçõ	bes Básicas para Polígonos Regulares Convexos	p. 32
	3.3	Geome	etria dos laços	p. 32
		3.3.1	Ângulo externo	p. 33
		3.3.2	Relação Perímetro/(área) ^{$\frac{1}{2}$}	p. 35

	3.4	Laços Médios	p. 36
	3.5	Modelo Geométrico para o Laço Médio	p. 40
4	Emj	pacotamento de Laços	p. 42
	4.1	Empacotamento de Laços em Quadrados	p. 42
	4.2	Empacotamento de Laços em Círculos	p. 45
	4.3	Empacotamento Aleatório de Laços	p. 48
	4.4	Célula Hexagonal	p. 50
5	Sum	aário, Conclusões e Perspectivas	p. 52
6	Refe	erências Bibliográficas	p. 55

Lista de Figuras

1.4	Exemplos de mosaicos que não satisfazem as condições impostas 1 e 2	p. 15
1.5	Mosaicos formados apenas por polígonos regulares	p. 15
1.6	Rede hexagonal construída por abelhas	p. 16
1.7	Rede hexagonal de discos.	p. 16
1.8	Empacotamento ótimos de discos em quadrados.	p. 17
1.9	Empacotamento aleatório de pentágonos.	p. 17
1.10	Fio de cobre empacotado em uma cavidade circular	p. 18
2.1	Aparato experimental	p. 20
2.2	Configuração inicial do experimento	p. 21
2.3	Primeiro laço.	p. 21
2.4	Configuração intermediária de fio amassado	p. 22
2.5	Configuração final de fio amassado.	p. 22
2.6	Relação massa-tamanho para 7 configurações de fios amassados para L(médio) = 438 cm \pm 14,9 cm	p. 24
2.8	Gráfico D versus 1/L para diferentes configurações de fios amassados. As	
	linhas tracejadas mostram as dimensões fractais de um esqueleto de perco- lação(2D) e de uma cadeia polimérica, segundo a teoria de campo médio de	
	Flory.	p. 25
2.9	Gráfico log-log n_l versus p : (\blacksquare) dados experimentais, com ajuste para a re-	
	gião com comportamento lei de potência indicado pela linha reta contínua. A	
	linha tracejada representa os valores teóricos (modelo hierárquico (seção 2.5)).	p. 25
3.1	Configurações de fios de cobre amassados no limite de empacotamento má-	
	ximo	p. 30

3.2	Imagens contendo apenas os laços que aparecem nas configurações de fios	
	amassados mostradas na figura 3.1	p. 31
3.3	Exemplos de polígonos regulares.	p. 32
3.4	Exemplo de laço quase simétrico.	p. 33
3.5	Exemplo de laço anômalo.	p. 33
3.6	Ilustração do ângulo externo de um laço	p. 33
3.7	Gráfico β versus n	p. 34
3.9	113 laços selecionados aleatoriamente	p. 36
3.14	Comparação do laço 3 (mais interno) com o primeiro laço obtido a partir ob-	
	tido a patir do amassamento de fio de cobre em uma cavidade circular(figura	
	2.3).	p. 39
3.15	Ilustração do modelo geométrico	p. 41
4.1	laços empacotados em células quadradas	p. 43
4.2	Gráfico p versus N para laços (\bullet) e discos (\Box e \blacksquare) em quadrados, segundo	
	[15]	p. 43
4.3	Gráfico p versus $1/N$ para laços em quadrados	p. 44
4.4	Gráfico p versus $1/N$ para discos em quadrados, segundo [15].O gráfico in-	
	terno mostra p contra 1/N para discos em quadrados apenas para os valores	
	de N mostrados na Tabela 4.1	p. 45
4.5	laços empacotados em células circulares	p. 46
4.6	Gráfico p versus N para laços (\bullet) em círculos e discos (\Box e \blacksquare) em quadra-	
	dos, segundo [15]	p. 47
4.7	Gráfico p versus $1/N$ para laços em círculos	p. 47
4.8	Gráfico p versus 1/N para discos em quadrados [15].O gráfico interno mostra	
	p contra 1/N apenas para os valores de N mostrados na tabela 4.2	p. 48
4.9	laços empacotados aleatoriamente em um célula circular com raio $R = 18$ cm.	p. 49
4.10	Gráfico p versus n para configurações aleatórias de polígonos regulares (\blacksquare)	
	[16] e laços- (o)valores experimentais. A cruz indica o valor médio dos	
	valores experimentais obtidos para a fração de empacotamento de laços	p. 50

Lista de Tabelas

3.1	valores experimentais de $\frac{p}{\sqrt{A}}$ e β dos laços médios e os respectivos valores de <i>n</i> .	p. 40
3.2	valores experimentais e analíticos (modelo geométrico) de β e $\frac{p}{\sqrt{A}}$ dos laços médios.	p. 41
4.1	valores das frações de empacotamento de laços em quadrados (p_1) e discos em quadrados (p_2) , segundo [15]	p. 44
4.2	valores das frações de empacotamento de laços em círculos (p ₃) e discos em quadrados (p ₂), segundo [15]	p. 46
4.3	valores experimentais das frações de empacotamento do empacotamento ale- atório de polígonos regulares obtidos por M. Ammi, D. Bideau e J. P. Troadec	
	[16]	p. 49

1 Introdução

Economizar tempo e espaço são necessidades básicas do mundo moderno e têm influência direta no nosso estilo de vida. Pensando nisso, o conceito de multifuncionalidade foi desenvolvido e bastante aplicado na tecnologia. Um exemplo claro disso é o computador, que permite, utilizando um só aparelho, desempenhar diversas tarefas ao mesmo tempo, possibilitando assim uma economia simultânea de tempo e espaço.

Nas indústrias de embalagens e na construção civil existe uma relação direta entre espaço utilizado e lucros. No caso das indústrias é interessante obter embalagens adequadas que gastem a menor quantidade de material possível, pois quanto menor for o valor do produto final a ser vendido mais competitivo ele será no mercado consumidor. Já na construção civil objetiva-se encontrar uma relação (subjetiva) favorável entre área construída e "conforto", quanto melhor for essa relação mais lucrativa será a venda do imóvel.

No nosso cotidiano também é freqüente a necessidade de economizar espaço quando desejamos colocar objetos em um dado recipiente, pois muitas vezes queremos que o recipiente comporte a maior quantidade possível de objetos a serem guardados. Como saber que quantidade é essa? Quantas maneiras distintas de arranjar essa quantidade de objetos são possíveis? Como descobrir esses possíveis arranjos? A partir de questões aparentemente simples, como essas, surge naturalmente a motivação para se entender melhor o processo de ocupação do espaço e tentar desenvolver uma teoria que forneça métodos sistemáticos de preencher o espaço de maneira otimizada.

Muitos fenômenos envolvendo o amassamento (ou empacotamento) de materiais estão associados com problemas de interesse científico e tecnológico. Impulsionado por isso, nas últimas décadas, alguns cientistas passaram a estudar o processo de amassamento de diferentes materiais e a explorar aspectos físicos, estatísticos e geométricos das configurações finais dos materiais amassados, possibilitando assim uma maior compreensão desses sistemas físicos ainda tão pouco explorados.

1.1 Empacotamento em três dimensões

A matéria sólida apresenta-se, de modo geral, em dois estados fundamentais de ordenação: o amorfo e o cristalino. Apenas os sólidos cristalinos apresentam estruturas internas ordenadas, conhecidas como estruturas cristalinas. A disposição espacial (ou empacotamento) dos átomos dentro dos sólidos influencia nas propriedades eletrônicas dos mesmos, daí a importância de se estudar os diferentes tipos de arranjos periódicos de átomos que formam as estruturas cristalinas. Alguns desses arranjos são mostrados na figura 1.1a. A menor subdivisão de uma rede cristalina que conserva as características gerais de todo o retículo e que permite, através do processo de multiplicação da mesma, reconstruir todo o sólido cristalino, é denomidada de célula unitária. De acordo com as possíveis localizações das partículas (átomos, íons ou moléculas) na célula unitária, definem-se 14 estruturas cristalinas básicas, denominadas de redes de Bravais. As 14 redes de Bravais são mostradas na figura 1.1b.



(a) Diferentes arranjos periódicos de átomos.



Figura 1.1

Em 1611, o astrônomo alemão Johannes Kepler conjeturou que para o empacotamento de esferas rígidas a maior fração de empacotamento possível ocorre para o arranjo cúbico de face centrada (figura 1.1b) e apresenta fração de empacotamento $p = \sqrt{2}\frac{\pi}{6} \approx 0,7404$. A conjetura de Kepler estava correta, mas só foi provada quase 400 anos depois, em 1998, por Thomas Hales, da Universidade de Michigan [1]. O problema de empacotamento de esferas rígidas desempenha um papel importante como modelo teórico e tem aplicações em áreas como *design* de antenas de radar e tomografias. Além disso, variações desse problema são fundamentais na teoria microscópica de fluídos, vidros e cristais [2,3].

Outro famoso problema de empacotamento foi estudado por William Thomson - Lorde Kelvin (figura 1.2a), que em 1887, aos 63 anos, formulou, ao tentar modelar geometricamente o éter eletromagnético, a seguinte pergunta: Qual é o arranjo de células de igual volume, com menor área, que preenche o espaço euclidiano sem deixar lacunas? Esse problema está relacionado com a teoria de espumas secas e apresenta uma solução simples em duas dimensões - um arranjo de células hexagonais. Kelvin propôs como solução um poliedro de 14 faces: seis quadradas e oito hexagonais [4]. As células de Kelvin ficaram sendo solução do problema por mais de cem anos, até que em 1994, D. Weaire e R. Phelam anunciaram a descoberta de uma nova estrutura com área menor que a célula de Kelvin [4]. Essa nova estrutura proposta é formada por células unitárias que consistem de seis poliedros de 14 faces e dois de 12 faces. A célula de Wearie e Phelan (figura 1.2b) é derivada da estrutura do Na₈Si₄₆ e aparece na organização fundamental de células orgânicas e na teoria de espumas secas.



(a) Lorde Kelvin (primeiro plano) e ao fundo duas células de Kelvin.

(b) Estrutura proposta por Phelan e Wearie.

Figura 1.2

Nos últimos anos, o amassamento de folhas de papel, devido a sua associação com muitas áreas de pesquisa como emissão acústica [5], modelos de crescimento [6], polímeros e membranas [7-12], entre outras, foi bastante estudado. O amassamento de estruturas com topologias diferentes da do plano também foi estudado, mas com menor intensidade. Em particular, leis de escala robustas e dimensões fractais associadas com o amassamento de fios em 3D foram reportadas [13]. Os aspectos teóricos e experimentais interessantes revelados no estudo desses sistemas desordenados estimularam o estudo de empacotamento de diferentes materiais e o estudo de diferentes tipos de empacotamento.

1.2 Empacotamento em duas dimensões

O mosaico é uma forma de arte decorativa milenar, que teve seu apogeu na era grecoromana, e tem como objetivo preencher algum tipo de plano, como chão e paredes, com unidades poliédricas aproximadamente convexas. O calçadão de Copacabana (figura 1.3b) e a pedra portuguesa (figura 1.3a) são exemplos conhecidos de mosaicos.



(a) Pedra portuguesa.



(b) Calçadão de Copacabana.

Figura 1.3

Em matemática, mosaico é o estudo do preenchimento do plano com figuras geométricas. Para não nos estendermos muito nesse assunto, iremos analisar apenas o preenchimento do plano utilizando polígonos regulares convexos. Além disso, duas condições adicionais serão impostas para simplificar o problema:

- 1- Se dois polígonos intersectam-se, então essa intersecção é um lado ou um vértice em comum.
- 2- A distribuição de polígonos regulares ao redor de cada vértice é sempre a mesma.

Impondo estas duas condições estamos proibindo configurações como as mostradas, abaixo, na figura 1.4.



Figura 1.4: Exemplos de mosaicos que não satisfazem as condições impostas 1 e 2.

Para se construir um mosaico no plano formado apenas por polígonos regulares convexos de *n* lados é preciso que o ângulo interno α do polígono regular, que é dado por $\alpha = 180(1 - \frac{2}{n})$, seja um divisor de 360. Ou seja,

$$180(1-\frac{2}{n}) = \frac{360}{m} \longrightarrow \frac{1}{n} + \frac{1}{m} = \frac{1}{2}$$

As soluções possíveis para a condição anterior são: n = 3(m = 6), n = 4(m = 4) e n = 6(m = 3), onde *n* representa o número de lados do polígono e *m* representa o número de polígonos de *n* lados distribuídos ao redor de cada vértice. Esses mosaicos são mostrados logo abaixo na figura 1.5.



Figura 1.5: Mosaicos formados apenas por polígonos regulares.

O mosaico formado por hexágonos, em detrimento dos outros dois também formados por polígonos regulares, é o mais comum na natureza. As abelhas, por exemplo, quando fabricam o mel, precisam guardá-lo em compartimentos individuais de modo que não existam lacunas entre os compartimentos, pois precisam otimizar o aproveitamento do espaço para poupar trabalho e energia. Por que essa preferência natural por hexágonos? A resposta está na relação área x perímetro desse polígono, o hexágono é o polígono regular que cobre o plano que contém a maior área para um dado valor de perímetro. Por esse motivo, os favos têm forma hexagonal (figura 1.6), pois assim, gastando a mesma quantidade de cera, as abelhas conseguem uma

superfície maior para guardar o mel. Evidentemente, espécies de abelhas que não se comportem dessa maneira tenderiam a arcar com o ônus da evolução Darwiniana.



Figura 1.6: Rede hexagonal construída por abelhas.

1.2.1 Empacotamento de discos em 2D

O empacotamento de discos em 2D apresenta aspectos teóricos importantes na estrutura de filmes monomoleculares [2,3] e tem conexão com diversos problemas de empacotamento [14]. O arranjo bidimensional de discos mais denso possível é a rede hexagonal (figura 1.7) e apresenta fração de empacotamento $p = \frac{1}{6}\pi\sqrt{3} \approx 0.9069$.



Figura 1.7: Rede hexagonal de discos.

O empacotamento otimizado de *n* discos em quadrados é o tipo mais natural e o mais estudado nos problemas de empacotamento envolvendo discos. Nesse estudo, geralmente objetivase descobrir as configurações de discos mais densas possíveis. Em 1960, esse problema foi resolvido analiticamente por Graham, Meir e Schaer para um número de discos $n \le 9$ [15]. Para valores pequenos de *n* as provas matemáticas são simples, mas à medida que o número de discos empacotados vai crescendo, a dificuldade de se conseguir essas provas matemáticas vai aumentando consideravelmente. Diante desse panorama, muitos trabalhos utilizam simulações computacionais para abordar esse tipo de problema. K. J. Nurmela e P. R. Ostergard, utilizando um algoritmo baseado na minimização de uma função energia, definida em [15], analisaram o empacotamento de discos rígidos em quadrados. Em [15], empacotamentos ótimos foram encontrados para n = 1, 2, ..., 50 (figura 1.8) e os resultados obtidos foram comparados com os resultados já conhecidos para esse tipo de problema e também comparados com outros problemas de empacotamento.



Figura 1.8: Empacotamento ótimos de discos em quadrados.

Experimentos de empacotamento aleatórios de discos e de outros polígonos regulares (figura 1.9) foram feitos e suas frações de empacotamento reportadas [16]. Em [16] também foi proposta uma expressão analítica para a fração de ocupação de empacotamentos aleatórios de polígonos regulares. Os resultados analíticos mostraram boa concordância com os resultados experimentais.



Figura 1.9: Empacotamento aleatório de pentágonos.

1.2.2 Empacotamento de fios em 2D

Um novo problema de empacotamento em 2D que foi recentemente investigado é o amassamento de fios em cavidades planas. Em 2002/2003, C. C. Donato, M. A. Gomes e R. E. de Souza realizaram um extenso estudo de aspectos geométricos e estatísticos desses sistemas [17,18]. Em [17,18], mostrou-se que o experimento de empacotamento de fios em uma cavidade circular plana leva à formação de estruturas geométricas exóticas (figura 1.10), denominadas de laços, os quais geram uma estrutura heterogênea rígida que pode ser descrita como sendo uma cascata de laços, apresentando carcaterísticas físicas e estatísticas relacionadas com outros sistemas físicos bem conhecidos.



Figura 1.10: Fio de cobre empacotado em uma cavidade circular.

No capítulo 2, descrevemos com maiores detalhes o experimento de amassamento de fios de cobre em uma cavidade circular plana e comentamos os resultados mais importantes reportados em [17,18]. No capítulo 3, explicaremos detalhadamente como procedemos para encontrar estruturas médias de laços a partir da utilização de imagens de fios no limite de empacotamento máximo. Apresentamos também algumas propriedades geométricas dos laços e propomos que estes podem ser descritos como polígonos regulares com número de lados fracionário. No capítulo 4, mostramos nossos resultados para o empacotamento de laços médios obtidos no capítulo 3 e fazemos uma comparação com o empacotamento aleatório de polígonos regulares [16] e também o empacotamento de discos em quadrados [15]. Por último, no capítulo 5, apresentamos nossas conclusões gerais e perspectivas.

2 Amassamento de Fios em 2D

Como mencionamos no capítulo 1, muitos fenômenos envolvendo amassamento de materiais estão relacionados com problemas de interesse científico e tecnológico. Na biologia, por exemplo, existe um interesse crescente em se entender melhor os fenômenos de empacotamento de DNA em cápsulas virais e o confinamento da cromatina no núcleo celular [19]. Embora os dois problemas citados acima envolvam diferentes tipos de sistemas e ocorram em diferentes escalas de tamanho, os mesmos apresentam características físicas comuns, como simetrias presentes nas estruturas amassadas e a dimensão topológica igual a unidade dos objetos confinados [19].

Uma extensa análise das propriedades estatísticas e geométricas do amassamento de fios em duas dimensões foi realizada originalmente por Donato, Gomes e Souza [17,18]. Em [17,18], mostrou-se que à medida em que o comprimento de fio injetado dentro de uma cavidade circular vai aumentando, a estrutura confinada, formada por uma cascata de laços de tamanhos decrescentes, torna-se progressivamente mais rígida até que a velocidade de injeção do fio cai a zero abruptamente e a estrutura torna-se completamente rígida, limitando o sistema à fração de empacotamento máxima $p_{max} \cong 15\%$. Leis de escala robustas e propriedades exóticas como condensação de energia elástica [20] e difusão anômala [21] estão associadas a essa nova estrutura heterogênea rígida caracterizada por uma hierarquia de laços. Semelhanças entre o fenômeno de condensação de energia observado nas configurações de fios amassados e a teoria geofísica conhecida como Tectônica das Placas foram observadas e reportadas em [22]. Uma revisão dos aspectos geométricos e estatísticos presentes nas configurações de arames amassados, assim como uma análise da possível relevância das leis de escala robustas associadas ao empacotamento de fios em 2D nas propriedades conformacionais de cadeias moleculares longas e densamente empacotadas em estado não-sólido, foi feita recentemente [23]. Baseado em experimentos e confirmado por simulações computacionais, foi mostrado que fios em duas dimensões podem se amassar em diferentes morfologias [24], sendo que um diagrama de fase associado às diferentes morfologias de fios amassados foi apresentado [24]. Padrões espirais semelhantes aos laços presentes nas configurações de fios amassados foram observados em diferentes tipos de empacotamento envolvendo estruturas flexíveis [25]. Recentemente, mostrou-se a partir de experimentos, que quando cordas feitas de materias elásticos caem em superfícies sólidas, existe a formação de uma série de estruturas semelhantes aos laços presentes no amassamento de fio em 2D [26].

Para não alongar em demasia este capítulo, nos restringiremos abaixo a apresentar os resultados mais importantes para os nossos fins. Os resultados apresentados nas seções seguintes foram obtidos para o amassamento de fios de cobre em uma cavidade circular plana e podem ser vistos com maiores detalhes em [17,18].

2.1 Detalhes Experimentais

Uma célula circular plana foi utilizada para realizar os experimentos de amassamento de fios de cobre. Essa célula, mostrada na figura 2.1, consiste na superposição de dois discos de acrílico, unidos por parafusos, com altura externa de 1,8 cm e diâmetro externo de 30 cm. A célula apresenta uma cavidade circular interna com 20 cm de diâmetro e 0,11 cm de altura e acomoda uma única camada de fio amassado com diâmetro ligeiramente menor que a altura da cavidade. Para minimizar os efeitos de fricção, a cavidade da célula foi polida e utilizou-se um fio de cobre $n^{\circ}19$, de diâmetro $\zeta = 0,1$ cm, com superfície esmaltada. A cavidade e o fio operam em regime seco, livre de lubrificação. A célula contém cinco canais radiais que possibilitam a injeção do fio dentro da célula com ângulos $\theta = 10^{\circ}$, 90 $^{\circ}$ e 180 $^{\circ}$, no entanto, neste trabalho, nos limitaremos a apresentar os resultados obtidos para $\theta = 180^{\circ}$.



Figura 2.1: Aparato experimental.

Para realizar o experimento, primeiro mede-se o comprimento L de fio desejado, depois coloca-se o fio dentro da cavidade, com o cuidado de posicionar o fio de maneira simétrica com relação a origem, ou seja, metade do comprimento L disposto a esquerda do centro da cavidade, e a outra metade posicionada a direita do centro da cavidade. Depois disso, injeta-se o fio dentro da cavidade, manual e uniformemente, nos dois lados dos canais da célula. Esse processo continua até que todo o comprimento L de fio seja introduzido dentro da cavidade. A velocidade de injeção do fio é da ordem de 1 cm/s.



Figura 2.2: Configuração inicial do experimento.

Pode-se dividir, quanto às configurações de fios amassados, o experimento descrito anteriormente em três estágios:

• Estágio 1: Existe o primeiro contato fio-fio gerando o primeiro laço (figura 2.3). Isso acontece para um comprimento crítico, $L_c = h_1$, onde

$$\eta = \frac{h_1}{2\pi R_o} = 0,684 \pm 0,008 \tag{2.1}$$

- R_0 : Raio da cavidade
- η : Razão adimensional



Figura 2.3: Primeiro laço.

• Estágio 2: À medida em que o fio vai sendo injetado na cavidade, a fração de empacotamento do fio, *p*, que é dada pelo parâmetro adimensional

$$p = \frac{\zeta L}{\pi R_o^2} \quad , \tag{2.2}$$

cresce, a velocidade de injeção do fio vai ficando cada vez menor e o fio amassado vai se tornando uma estrutura progressivamente mais rígida (figura 2.4). Durante essa fase é comum haver rearranjos locais e globais das dos laços já formados.



Figura 2.4: Configuração intermediária de fio amassado.

Estágio 3: Nesta fase, a velocidade de injeção cai a zero e a estrutura de fio amassado torna-se completamente rígida (figura 2.5), impossibilitando continuar o processo de injeção do fio. Neste estágio, o sistema apresenta fração de empacotamento máxima, p = p_{max}, medida experimentalmente e dada por:

91

$$p_{max} = \frac{\zeta L_{max}}{\pi R_o^2} = 0,140 \pm 0,006$$

Figura 2.5: Configuração final de fio amassado.

(2.3)

Para verificar se o atrito tem influência nas configurações formadas, testes experimentais foram realizados com a cavidade lubrificada com óleo mineral para reduzir o efeito das forças de fricção. Assim como no regime seco, as configurações de fios amassados atingem um limite no qual é impossível inserir mais fio na cavidade e tornam-se estruturas rígidas. O resultado obtido foi o mesmo, dentro das flutuações estatísticas, observado para o regime seco. A fração de empacotamento máxima obtida para o regime lubrificado foi

$$p = p_{max} = \frac{\zeta L_{max}}{\pi R_0^2} = 0,14 \pm 0,02$$
(2.4)

2.2 Leis de Escala

Algumas leis de escala robustas estão associadas ao comportamento dos fios amassados. Apresentaremos alguns desses comportamentos descritos como leis de escala nas subseções seguintes.

2.2.1 Relação Massa-Tamanho

Para calcular a dimensão fractal das configurações de fios amassados, foi calculada a dependência M(R) da massa do sistema dentro de um círculo de raio R. A massa (ou área projetada) das configurações de fios amassados tendem a escalar como uma lei de potência em R.

$$M(R) \sim R^D$$

Na figura 2.6, mostramos um gráfico log-log da relação massa-tamanho para sete configurações equivalentes de fios amassados (limite de p_{max}) para um comprimento médio de fio L =438 cm ± 14,9 cm. A massa média na região 0,6 cm $\leq R \leq 6$ cm escala como $M(R) \sim R^D$, com $D = 1,9 \pm 0,1$. Em particular, devemos notar que este último valor numérico é compatível com uma dimensão fractal igual a do agregado de percolação, como conjeturado em 2006 [21].



Figura 2.6: Relação massa-tamanho para 7 configurações de fios amassados para L(médio) = $438 \text{ cm} \pm 14,9 \text{ cm}.$

A dimensão fractal $D = 1,9 \pm 0,1$, associada ao estágio 3 (seção 2.3) do experimento de empacotamento de fios em 2D, é similar à dimensão fractal D = 1,89 do tapete de Sierpinsk (figura 2.7a) [27], bem como o agregado de percolação (figura 2.7b) [28]. No regime de uma única alça formada, estágio 1 (seção 2.3), a dimensão fractal associada ao sistema apresenta o valor trivial $D \cong 1$. Já no regime de muitas alças e baixa densidade, estágio 2 (seção 2.3), a estrutura de fio amassado apresenta dimensão fractal efetiva $D \cong 1,4 \pm 0,1$ e pode ser explicado qualitativamente por um modelo de campo médio tipo-Flory para uma cadeia polimérica auto-excludente sem ramificação em um bom solvente, ou caminhada aleatória auto-excludente em (dimensão topológica) d = 2 [29]. Na figura 2.8, mostramos um grafico de D versus 1/Lesquematizando a correlação dos valores de dimensão fractal associados aos 3 estágios (seção 2.3) do fio amassado com sistemas conhecidos e bem estudados.



Figura 2.7



Figura 2.8: Gráfico *D* versus 1/L para diferentes configurações de fios amassados. As linhas tracejadas mostram as dimensões fractais de um esqueleto de percolação(2D) e de uma cadeia polimérica, segundo a teoria de campo médio de Flory.

2.2.2 Número de Laços

O número de laços, n_l , exibe dois comportamentos com relação a sua dependência com a fração de empacotamento, p:

- 1: um ombro para $p \lesssim 0.032$.
- 2: uma lei de potência $n_l(p) \sim p^{1.55\pm0.10}$ para $p \gtrsim 0.032$.



Figura 2.9: Gráfico log-log n_l versus p: (\blacksquare) dados experimentais, com ajuste para a região com comportamento lei de potência indicado pela linha reta contínua. A linha tracejada representa os valores teóricos (modelo hierárquico (seção 2.5)).

2.3 Modelo Hierárquico

Um modelo hierárquico com uma única constante ajustável não trivial foi proposto em [17] para explicar os dados experimentais do amassamento de fios em uma cavidade circular plana.

Esse modelo divide o número total de laços dentro da célula em uma hierarquia de iterações i = 1, 2, 3, ..., I, de forma que para cada iteração i, existe um número n_i de laços com um perímetro característico h_i . Logo,

$$L = \sum_{i=1}^{I} n_i h_i \quad , \tag{2.5}$$

onde *I* é o número máximo de iterações. Duas contantes, $\eta \in v$, de acordo com o modelo, controlam a cascata de laços, tal que

$$\frac{h_{i+1}}{h_i} = \eta < 1 \quad , \tag{2.6}$$

$$\frac{n_{i+1}}{n_i} = v > 1$$
 , (2.7)

onde h_1 é o perímetro da maior alça (primeiro contato fio-fio).

Das equações (2.6) e (2.7), obtem-se

$$h_i = \eta^{i-1} h_1 \tag{2.8}$$

$$n_i = \mathbf{v}^{i-1}, i = 1, 2, \dots, I$$
 (2.9)

Eliminado i nas equações (2.8) e (2.9) encontra-se a função distribuição de perímetros das alças, dada por

$$n(h) = (\frac{h}{h_1})^{-D}$$
, (2.10)

onde

$$D = D(\eta, \nu) = \frac{\ln \nu}{\ln \eta^{-1}}$$
 (2.11)

Portanto, D é a dimensão fractal dos fios amassados no limite de empacotamento máximo.

Assumindo que a área s envolvida pelo perímetro h de um laço escala como s $\sim h^d$,

encontra-se

$$n(s) \sim \frac{s}{s_1}^{-\tau}$$
, (2.12)

onde

$$\tau = \frac{D+d-1}{d} \tag{2.13}$$

e d é a dimensão do espaço no qual os laços estão inseridos.

Substituindo d = 2 (expoente euclidiano) e $D = 1,9 \pm 0,1$ (valor experimental no regime de empacotamento máximo), obtém-se

• $\tau = 1.45 \pm 0.10$, resultado compatível com o valor experimental $\tau = 1.4 \pm 0.2$

Considerando que o número de laços dobra a cada iteração (v = 2), obtem-se $\eta = 0.69 \pm 0.01$, valor praticamente igual ao experimental (seção 2.2)

Assumindo $\frac{h_{i+1}}{h_i} = \eta = \eta_c = 0,68$ e manipulando as equações (2.5), (2.6) e (2.7), acha-se

$$L = \frac{L_c[(\eta_c v)^I - 1]}{[\eta_c - 1]} \quad , \tag{2.14}$$

 $L_c = 2 \pi R_0 \eta_c, \eta_c = 0.68 \pm 0.01 \text{ e } v = 2$

Resolvendo a equação anterior para *I* e aplicando o resultado na expressão do número total de laços, encontra-se

$$n_l = \sum v_i = \frac{v^l - 1}{v - 1} \quad . \tag{2.15}$$

Substituindo L = $\frac{p\pi R_0^2}{\zeta}$ e $\frac{R_0}{\zeta}$ = 100, tem-se que

$$n_l = (26, 5p+1)^{2,11} - 1 \tag{2.16}$$

A expressão para n_l (eq. 2.15) é mostrada como uma linha contínua na figura 2.9 e apresenta boa concordância com os resultados experimentais. Fazendo uma avaliação geral, não deixa de

ser surpreendente como um modelo bastante simples como o que acabamos de rever seja tão bem sucedido na explicação de diversas propriedades físicas do problema de empacotamento de arames em 2D.

3 Laços

3.1 Seleção e Edição de Imagens

Sete configurações de fios amassados, com comprimento de fio *L* variando de 410 cm a 470 cm, no limite de empacotamento máximo, obtidas a partir do experimento descrito em 2.1, foram utilizadas por nós para fazer um estudo da geometria dos laços. Neste ponto do trabalho é importante explicar, com maiores detalhes, o que foi considerado por nós como sendo laços. Inicialmente, todo pedaço de fio que se tocava em pelo menos um ponto foi considerado laço; no entanto, fazendo isso estávamos tornando relevantes formas geométricas praticamente amorfas, resultantes mais do fato do fio sentir a finitude da cavidade do que do processo de amassamento em si. Por causa disso, refinamos o nosso critério para definir laço e consideramos como sendo laços apenas os pedaços de fios que se tocavam em pelo menos um ponto e exibiam, baseado no nosso conceito, formas geométricas minimamente regulares. Em termos práticos não houve muita diferença, pois inicialmente contabilizamos 266 laços e por fim, após melhorarmos o critério para se definir um laço, contabilizamos 249 laços.

Por questão de conveniência as imagens originais passaram por um processo de filtragem e edição até se tornarem imagens binárias e conterem apenas o que foi considerado por nós como sendo laços.Todo o processo de obtenção, filtragem e edição das imagens foi feito na tese de doutorado de Cássia Cristina Donato [22].

Nas figuras 3.1 e 3.2 mostramos as imagens originais do experimento e as imagens após o processo de filtragem e edição, respectivamente. Comparando as figuras 3.1 e 3.2 fica claro quais formas geométricas foram consideradas laços.



(e) *L*=448cm





Figura 3.1: Configurações de fios de cobre amassados no limite de empacotamento máximo.



Figura 3.2: Imagens contendo apenas os laços que aparecem nas configurações de fios amassados mostradas na figura 3.1.

3.2 Relações Básicas para Polígonos Regulares Convexos

Um polígono convexo é considerado regular se todos os seus lados e ângulos forem iguais. Quadrado e triângulo equilátero são exemplos de polígonos regulares (figura 3.3).



Figura 3.3: Exemplos de polígonos regulares.

Da teoria dos polígonos regulares, temos:

$$\beta = \frac{360}{n} \tag{3.1}$$

$$\frac{P}{\sqrt{A}} = 2\sqrt{n.tan(\frac{\pi}{n})}$$
(3.2)

- *P*: perímetro do polígono regular
- A: área do polígono regular
- *n*: número de lados do polígono regular
- *L*: lado do polígono regular

As relações (3.1) e (3.2) são válidas para qualquer polígono regular independentemente dos valores de n e L.

3.3 Geometria dos laços

Analisando a figura 3.2 vemos que embora os laços não exibam valores característicos (fixos) de perímetro, área e ângulo de torção, os mesmos, de modo geral, apresentam a mesma forma geométrica. Em outras palavras, assim como os polígonos regulares, aparentemente os laços também exibem um comportamento geral, o que torna possível descrever a geometria dos mesmos.

Para classificar os laços de acordo com sua simetria dividimos os 249 laços contabilizados em dois subgrupos:

Laços quase simétricos (figura 3.4): Totalizando 162 laços que apresentam, com boa aproximação, um eixo de simetria razoavelmente bem definido.



Figura 3.4: Exemplo de laço quase simétrico.

Laços anômalos (figura 3.5): Totalizando 87 laços que não exibem eixo de simetria.



Figura 3.5: Exemplo de laço anômalo.

Dos 249 laços totais, 56 laços, 8 de cada configuração, sendo 4 anômalos e 4 quase simétricos, foram selecionados e tiveram seus ângulos externos e a relação perímetro/(área)^{1/2} medidos com o objetivo de tentar descrever os laços como polígonos regulares de lados fracionários. Os resultados obtidos são mostrados nas duas subseções seguintes.

3.3.1 Ângulo externo

Definimos o ângulo externo ou ângulo de torção de um laço de forma análoga ao ângulo externo de um polígono regular. Para ficar mais claro para o leitor, ilustramos o ângulo externo de um laço na figura 3.6.



Figura 3.6: Ilustração do ângulo externo de um laço.

Utilizando régua e transferidor medimos os ângulos externos dos 28 laços quase simétricos e dos 28 laços anômalos. Expandimos a equação 3.1 para valores reais de número de lados *n* e achamos as os valores fracionários de *n* e correspondentes às medidas dos ângulos externos dos laços. O valor de *n* correspondente a um dado valor de β foi considerado como sendo $n = \overline{n} + \delta n$, onde $\overline{n} = \frac{n_+ + n_-}{2}$ e $\delta n = \frac{|n_+ - n_-|}{2}$. Os valores n_+ e n_- são os valores correspondentes às quantidades $\beta + \delta\beta$ e $\beta - \delta\beta$. Os resultados obtidos são mostrados a seguir.

- Laços quase simétricos: $\beta = 147,9^{\circ} \pm 4,7^{\circ} \longrightarrow n = 2,43 \pm 0,08$
- Laços anômalos: $\beta = 136, 1^{\circ} \pm 13, 7^{\circ} \longrightarrow n = 2, 64 \pm 0, 30$

Considerando os pesos referentes aos tipos de laços, anômalos ou quase simétricos, a média ponderada obtida foi:

$$\beta = [(147,9x162) + (136,1x87)]/249$$

$$\beta = 143,8^{\circ} \pm 7,8^{\circ} \longrightarrow n = 2,51 \pm 0,14$$

Na figura 3.7 localizamos o ponto referente ao valor ponderado de β e o seu correspondente valor de *n* no gráfico β versus *n* (eq. 3.1) para valores reais de *n*.



Figura 3.7: Gráfico β versus *n*.

3.3.2 Relação Perímetro/(área) $\frac{1}{2}$

Utilizando a linguagem de programação Matlab calculamos a razão $\frac{P}{\sqrt{A}}$ para os mesmos 56 laços citados anteriormente. De modo análogo ao que foi feito na seção 3.2.1, expandimos a equação 3.2 para valores reais de *n* e achamos os valores fracionários de *n* correspondentes às medidas da razão $\frac{P}{\sqrt{A}}$ dos laços. Para encontrar o valor de *n* correspondente a um dado valor da razão $k = \frac{P}{\sqrt{A}}$, procedemos de maneira análoga à descrita na seção anterior para calcular o valor correspondente de de *n* para um dado valor de β . Os valores obtidos foram os seguintes:

- Laços quase simétricos: $\frac{P}{\sqrt{A}} = 5,20 \pm 0,31 \longrightarrow n = 2,63 \pm 0,12$
- Laços anômalos: $\frac{P}{\sqrt{A}} = 5,20 \pm 0,52 \longrightarrow n = 2,67 \pm 0,22$

O fato dos valores médios de *n* serem iguais para laços anômalos e laços quase simétricos reforça a idéia de que embora hajam flutuações nas propriedades geométricas dos laços, a geometria dos mesmos se comporta, em média, do mesmo modo. Considerando os pesos referentes aos tipos de laços, anômalos ou quase simétricos, a média ponderada obtida foi:

$$\frac{P}{\sqrt{A}} = 5,19 \pm 0,38 \longrightarrow n = 2,65 \pm 0,15$$

Nas figura 3.8 e 3.9, localizamos o ponto referente ao valor ponderado de $\frac{P}{\sqrt{A}}$ dos laços nos gráficos $\frac{P}{\sqrt{A}}$ versus β/π e $\frac{P}{\sqrt{A}}$ versus *n* para valores reais de *n*, respectivamente.



Figura 3.8

Os valores de *n* encontrados a partir da cálculo do ângulo externo e da relação perímetro/(área)^{$\frac{1}{2}$} são iguais dentro da margem de erro. Isso mostra, pelo menos com relação a essas duas propriedades geométricas analisadas, que os laços se comportam consistentemente como polígonos regulares de lados fracionários.

3.4 Laços Médios

Analisando os laços, vemos que os mesmos não apresentam valores característicos (fixos) de suas propriedades geométricas; ou seja, o experimento de empacotamento de fios de cobre em 2D gera uma distribuição de laços, orientados de diversas maneiras, com diferentes perímetros, áreas e ângulos de torção. Em particular, as curvaturas dos laços que estão relacionadas com os ângulos de torção, não são perfeitamente definidas. Os laços exibem curvaturas das caudas variadas e orientadas de modo a não privilegiar nenhuma direção ou sentido, o que indica que, em média, essas curvaturas devem se cancelar. Em outras palavras, devemos esperar que o laço médio seja uma figura praticamente convexa e apresente geometria regular e bem comportada.

Foram escolhidos aleatoriamente 113 laços com o objetivo de extrair formas médias. Como os laços têm diferentes orientações e tamanhos, os mesmos foram reorientados e reescalados de modo que todos ficassem com a mesma orientação e tamanho para poderem ser utilizados para calcular os laços médios. Na figura 3.9 exibimos os 113 laços escolhidos.



Figura 3.9: 113 laços selecionados aleatoriamente.

Três métodos foram utilizados para calcular esses laços médios:

• Método 1: Utilizando um eixo fixo divide-se todos os 113 laços inicialmente escolhidos em duas partes (figura 3.10a): parte superior e parte inferior. Feito isso, para cada valor

de x, verificamos se os laços têm valores de f(x) bem definidos nas partes superior e inferior. Depois disso, utilizando apenas os valores f(x) bem definidos, calculamos para todo valor de x os valores médios $\langle f(x) \rangle$ referente a parte superior e $\langle f(x) \rangle$ referente a parte inferior. Terminado esse processo, temos uma parte superior média e uma parte inferior média que unidas resultam em um laço médio (figura 3.10b).



Figura 3.10

Como vemos na figura 3.10b o resultado obtido através desse método não é bom, muita informação fica faltando nas extremidades do laço médio. Isso ocorre porque os laços diferem de maneira óbvia com relação à curvatura e orientação, o que torna impossível definir um eixo fixo que divida os laços em duas partes praticamente iguais. Como o eixo fixo utilizado para dividir os laços não é, com boa aproximação, um eixo de simetria, é natural que para vários valores de x os laços não tenham valores de f(x) bem definidos acima ou abaixo do "eixo de simetria", o que acarreta na perda de informação.

Método 2: Para os 113 laços selecionados calcula-se o mínimo e o máximo de f(x), f(x)_{min} e f(x)_{max} para todo x. Atribui-se f(x)_{max} à parte superior do laço e f(x)_{min} à parte inferior do laço e depois disso são calculados os valores médios <f(x)_{max}> e <f(x)_{min}> para todo x. Assim como no método 1, o laço médio é formado pela união da parte superior média e da parte inferior média. A vantagem desse método com relação ao anterior é que utilizamos todos os pontos dos laços para fazer a médias de f(x)_{max} e f(x)_{min}, pois embora os laços não tenham um eixo de simetria fixo, todos eles apresentam f(x)_{max} e f(x)_{min} para todo x. Mesmo utilizando esse método, ainda se perde alguma

informação das extremidades do laço médio (figura 3.11a). Para contornar isso foi feito um ajuste de modo a completar o laço médio obtido. Com o objetivo de suavizar a curva obtida fizemos um ajuste da mesma com uma função polinomial de grau 10, que por ter muitos parâmetros não interfere nas características da curva (figura 3.11b).



Figura 3.11

Como o laço médio não é simétrico, definimos um eixo de reflexão para refletir a parte superior e a parte inferior do laço com relação a esse eixo e gerar dois laços completamente simétricos. Depois disso, fizemos a média dos laços médios resultantes do processo de reflexão das partes superior e inferior e geramos um novo laço médio. Na figura 3.12 mostramos os laços médios resultantes e o eixo de reflexão utilizado. Chamamos os laços gerados a partir da reflexão das partes inferior e superior de laço 1 e laço 2, respectivamente, e o laço obtido a partir da médias desses dois laços foi chamado de laço 1_2.

Método 3: Procedemos da mesma maneira do método 2, a única diferença foi o conjunto de laços utilizados. Neste método, para gerar o laço médio fizemos uma seleção dos 20 laços mais simétricos (figura 3.13a) dentre os 113 inicialmente selecionados de forma aleatória. Para encontrar o laço médio (figura 3.13b), geramos uma parte superior média e uma parte inferior média, mas refletimos apenas a parte superior, que se apresentou mais regular.

Como podemos ver na figura 3.14, o laço 3 é muito semelhante ao primeiro laço obtido a partir do amassamento de fio de cobre em uma cavidade circular (figura 2.3). Esse resultado era esperado, pois o laço formado a partir do primeiro contato fio-fio pode ser considerado o laço ideal, pois o mesmo não sente a finitude da cavidade e não interage com outros laços.



Figura 3.12



(a) 20 laços mais simétricos.



(b) laço médio obtido pelo método 3 (laço 3).

Figura 3.13



Figura 3.14: Comparação do laço 3 (mais interno) com o primeiro laço obtido a partir obtido a patir do amassamento de fio de cobre em uma cavidade circular(figura 2.3).

Medimos o ângulo externo e a razão $\frac{P}{\sqrt{A}}$ dos laços médios calculados a partir dos métodos 2 e 3 descritos anteriormente. Os resultados obtidos e os correspondentes valores do número de lados baseado na expansão da teoria de polígonos regulares são mostrados na tabela abaixo.

	β_{exp}	n _β	$k_{exp} = \frac{P}{\sqrt{A}}$	n_k
laço 1	$124,1^{\circ}\pm0,3^{\circ}$	2,90	4,44	3,11
laço 2	$132,2^{\circ}\pm0,8^{\circ}$	2,72	4,86	2,78
laço 1_2	$128,0^{\circ}\pm0,7^{\circ}$	2,81	4,61	2,95
laço 3	$144,2^{\circ}\pm0,5^{\circ}$	2,50	4,96	2,72

Tabela 3.1: valores experimentais de $\frac{p}{\sqrt{A}}$ e β dos laços médios e os respectivos valores de *n*.

- n_k : número de lados *n* associado ao valor da razão $\frac{p}{\sqrt{A}}$.
- n_{β} : número de lados *n* associado ao valor do ângulo externo β .

Para todos os efeitos práticos, podemos definir que o número de lados associado ao laço médio é dado pela média dos valores n_{β} e n_k mostrados na última linha da Tabela 3.1:

$$n = 2,61 \pm 0,11$$

3.5 Modelo Geométrico para o Laço Médio

Tentamos descrever os laços médios como sendo híbridos de triângulos com círculos (ver figura 3.15), onde cada segmento de reta contribui com 1 lado e a parte referente ao círculo contribui com a parte fracionária do número de lados do laço. As propriedades associadas ao empacotamento de laços, φ_{α} , podem ser descritas como combinações lineares das respectivas propriedades de triângulos e círculos, φ_{\triangle} e φ_{\circ} :

Seja, por definição, o peso do triângulo (círculo), φ_{\triangle} (φ_{\circ}), igual à razão entre o número de lados do triângulos (círculo) e o número total de lados, então:

$$\varphi_{\alpha} = P_{\triangle}.\varphi_{\triangle} + P_{\circ}.\varphi_{\circ} \tag{3.3}$$

- $P_{\triangle} = \frac{2}{2.61}$: peso do triângulo
- $P_{\circ} = \frac{0.61}{2.61}$: peso do círculo



Figura 3.15: Ilustração do modelo geométrico.

- φ_{\triangle} : propriedade arbitrária associada ao empacotamento de triângulos
- φ_o: propriedade arbitrária associada ao empacotamento de círculos
- φ_{α} : propriedade arbitrária associada ao empacotamento de laços

A expressão analítica para razão $k_{mod} = \frac{P}{\sqrt{A}}$ do modelo geométrico é dada por:

$$k_{mod} = \frac{P}{\sqrt{A}} = 2.\sqrt{\frac{\pi}{2} + \theta + \cot(\theta)}$$
(3.4)

Para obter (3.4) usamos argumentos básicos de geometria plana, mais especificamente, utilizamos as relações de área e perímetro de triângulos e círculos. Para ver se o modelo geométrico descreve bem as propriedades calculadas dos laços médios, substituimos os valores experimentais de β (= 180° – 2 θ) e k, β_{exp} e k_{exp} , na expressão 3.4 e obtivemos os valores correspondentes do modelo, β_{mod} e k_{mod} . O laço 3 foi o que mostrou melhor concordância com o modelo. Os resultados estão sumarizados na tabela abaixo.

	β_{exp}	k _{mod}	<i>k_{exp}</i>	β_{mod}
laço 1	$124, 1^{\circ} \pm 0, 3^{\circ}$	3,97	4,44	143,3°
laço 2	$132,2^{\circ}\pm0,8^{\circ}$	4,11	4,86	152,5°
laço 1_2	$128,0^{\circ}\pm0,7^{\circ}$	4,04	4,61	147,9°
laço 3	$144,2^{\circ}\pm0,5^{\circ}$	4,47	4,96	$144,5^{\circ}$

Tabela 3.2: valores experimentais e analíticos (modelo geométrico) de β e $\frac{p}{\sqrt{A}}$ dos laços médios.

4 Empacotamento de Laços

Vimos no capítulo anterior que os laços se comportam como polígonos regulares de maneira consistente quando analisamos propriedades geométricas básicas como ângulo externo e a razão perímetro/(área)^{1/2} dos mesmos. Agora podemos questionar se as unidades básicas associadas ao empacotamento de arames em 2D também se comportam como polígonos regulares em experimentos de empacotamento. Alguma perguntas surgem naturalmente. Podemos ladrilhar o plano com um arranjo de laços? Como esses monômeros se comportam em domínios circulares e quadrados? Essas são algumas das perguntas que tentaremos responder no decorrer deste capítulo.

Experimentos de empacotamento foram feitos utilizando o laço 3 (laço médio obtido pelo método 3 descrito em 3.4). Nesses experimentos objetivou-se maximizar a fração de empacotamento p em células circulares e quadradas, assim como calcular p para configurações aleatórias de laços. Os testes experimentais foram realizados da seguinte forma: primeiro imprimimos réplicas do laço 3 em papel fotográfico, depois cortamos os laços, e geramos manualmente configurações ordenadas de laços que visavam maximizar a fração de empacotamento em células circulares e quadradas de tamanhos típicos entre 5 cm e 36 cm. Em seguida, também geramos configurações aleatórias de laços. Vale ressaltar que as limitações técnicas dos experimentos tornam os resultados obtidos limitantes inferiores.

4.1 Empacotamento de Laços em Quadrados

Através de múltiplas tentativas, buscamos descobrir quais as menores células quadradas (e circulares) que comportam um número N (variando) de laços. Para células quadradas, fizemos o experimento para N = 1, 2, 3, 5, 10, 21 e 30. Na figura 4.1, mostramos as fotos dos laços empacotados em células quadradas.



Figura 4.1: laços empacotados em células quadradas

A seguir, mostramos na figura 4.2 os nossos resultados para o empacotamento de laços em células quadradas (fração de empacotamento p_1), bem como os resultados similares obtidos para o empacotamento de discos em quadrados (p_2) [15].



Figura 4.2: Gráfico p versus N para laços (\bullet) e discos (\Box e \blacksquare) em quadrados, segundo [15].

N	1	2	3	5	10	21	30
<i>p</i> ₁	0,4486	0,6404	0,7648	0,7454	0,8005	0,8014	0,8079
<i>p</i> ₂	0,7854	0,5390	0,6096	0,6737	0,6900	0,7533	0,7920

Tabela 4.1: valores das frações de empacotamento de laços em quadrados (p_1) e discos em quadrados (p_2) , segundo [15].

Como podemos ver na figura 4.2, a fração de empacotamento de laços em quadrado apresenta menos flutuações e converge mais rapidamente do que a fração de empacotamento de discos em quadrados. Para estimar o valor da fração de empacotamento quando o número de laços (ou discos) é muito grande ($N \rightarrow \infty$), geramos o gráfico p versus 1/N, fazemos um ajuste linear e verificamos o valor da fração de empacotamento p nesse caso limite. Para o empacotamento de laços em quadrados obtivemos p = 0,8336 (figura. 4.3) e para o empacotamento de discos em quadrados obtivemos p = 0,7847 ($N \le 30$) (figura. 4.4).



Figura 4.3: Gráfico p versus 1/N para laços em quadrados.



Figura 4.4: Gráfico *p* versus 1/*N* para discos em quadrados, segundo [15].O gráfico interno mostra *p* contra 1/*N* para discos em quadrados apenas para os valores de *N* mostrados na Tabela 4.1.

4.2 Empacotamento de Laços em Círculos

Para células circulares, realizamos o mesmo experimento descrito na seção 4.1 para um número de laços N = 1, 2, 3, 4, 5, 10, 20, 79. As fotos dos empacotamentos de laços em círculos são mostradas na figura 4.5. No caso N = 79, a célula circular tinha diâmetro de 36 cm.



Figura 4.5: laços empacotados em células circulares.

Assim como na seção 4.1, comparamos o resultado obtido para o empacotamento de laços em círculos (índice 3) com o empacotamento de discos em quadrados (índice 2) [15] e observamos que os laços em domínios circulares se empacotam mais densamente que os discos em domínios quadrados, para os valores de N analisados (figura 4.6). Através do ajuste linear do gráfico de p versus N^{-1} , estimamos $p_{\infty} = 0,8249$ para o empacotamento de laços em círculos (figura 4.7) e $p_{\infty} = 0,7985$ para o empacotamento de círculos em quadrados ($N \le 79$) (figura 4.8).

Ν	1	2	3	4	5	10	20	79
<i>p</i> ₃	0,3348	0,5761	0,6593	0,7084	0,7441	0,7638	0,7884	0,8360
p_2	0,7854	0,5390	0,6096	0,7853	0,6737	0,6900	0,7795	0,8208

Tabela 4.2: valores das frações de empacotamento de laços em círculos (p₃) e discos em quadrados (p₂), segundo [15].



Figura 4.6: Gráfico p versus N para laços (•) em círculos e discos (\Box e \blacksquare) em quadrados, segundo [15].



Figura 4.7: Gráfico p versus 1/N para laços em círculos.



Figura 4.8: Gráfico *p* versus 1/*N* para discos em quadrados [15].O gráfico interno mostra *p* contra 1/*N* apenas para os valores de *N* mostrados na tabela 4.2.

4.3 Empacotamento Aleatório de Laços

No capítulo 3, propusemos que os laços podem ser descritos como polígonos regulares com número de lados fracionário, pois os mesmos obedecem as relações de ângulo externo (eq. 3.1) e de perímetro/(área)^{1/2} (eq. 3.2) para polígonos regulares convexos. Para reforçar a proposta de descrever os laços como "polígonos regulares", geramos configurações aleatórias de laços, calculamos as respectivas frações de empacotamento e comparamos os resultados com os valores experimentais das frações de ocupação de empacotamento aleatório (p_{aleat}) de polígonos regulares obtidos por M. Ammi, D. Bideau e J. P. Troadec em 1987 [16].

As configurações aleatórias de laços foram geradas através de processo manual, o que em princípio estabelece uma certa organização no agrupamento de laços e torna o nosso experimento não completamente equivalente ao empacotamento aleatório de polígonos regulares realizado por M. Ammi, D. Bideau e J. P. Troadec [16]. No entanto, tentamos maximizar a fração de empacotamento das configurações de laços sem privilegiar nenhum arranjo de laços em particular e diversificando as orientações e os tipos de contato dos laços, assim como ocorre nas configurações aleatórias de polígonos regulares [16]. Geramos 4 configurações aleatórias de laços em uma célula circular de diâmetro de 36 cm (figura 4.9) e obtivemos as frações de



Figura 4.9: laços empacotados aleatoriamente em um célula circular com raio R = 18 cm.

empacotamento $p_1 = 0,7408$, $p_2 = 0,7937$, $p_3 = 0,7513$ e $p_4 = 0,7619$ que têm como valor médio p = 0,7619. Tais valores experimentais da fração de empacotamento de configurações aleatórias de laços são mostrados na figura 4.10.

Ν	3	5	7	9	15	∞(discos)
p_{aleat}	0,78	0,78	0,79	0,80	0,82	0,84

Tabela 4.3: valores experimentais das frações de empacotamento do empacotamento aleatório de polígonos regulares obtidos por M. Ammi, D. Bideau e J. P. Troadec [16].

Do gráfico acima, observamos que a fração de empacotamento p_{aleat} dos polígonos regulares tende a escalar de forma linear com o número de lados *n*. No entanto, o valor de p_{aleat} para triângulos equiláteros (n = 3) foge dessa tendência e apresenta valor maior que o esperado. Isso é decorrente do fato de ser possível gerar arranjos de triângulos com fração de ocupação máxima $p_{max} = 1$ (seção 1.2). Domínios locais com $p_{max} = 1$ presentes nas configurações aleatórias de triângulos fazem com que a fração de ocupação de empacotamento aleatório de triângulos equiláteros apresente valor maior que o esperado. Contudo, o valor médio das frações de empacotamento obtidas para configurações aleatórias($p_{aleat} = 0,7619$) de laços segue a mesma tendência de comportamento mostrada para os polígonos regulares com número de lados n ≥ 5 de laços.

Com o intuito de verificar se o modelo geométrico proposto na seção 3.5 descreve bem as propriedades relativas ao empacotamento de laços, substituimos os valores das frações de empacotamento para o empacotamento aleatório de discos e triângulos (tabela 4.3), assim como os valores dos pesos referentes ao triângulo e ao círculo (seção 3.5) para o laço 3 (seção 3.4) na



Figura 4.10: Gráfico p versus n para configurações aleatórias de polígonos regulares (\blacksquare) [16] e laços- (\circ)valores experimentais. A cruz indica o valor médio dos valores experimentais obtidos para a fração de empacotamento de laços.

expressão analítica do modelo geométrico proposto na seção 3.5 e obtivemos $p_{aleat} = 0,7940$, valor compatível com o maior valor experimental de fração de empacotamento obtido para o empacotamento aleatório de laços ($p_{aleat} = 0,7937$).

$$\varphi_{\alpha} = P_{\triangle}.\varphi_{\triangle} + P_{\circ}.\varphi_{\circ} \tag{4.1}$$

$$p_{aleat} = \frac{2}{2,61} \cdot 0,78 + \frac{0,61}{2,61} \cdot 0,84 \tag{4.2}$$

$$p_{aleat} = 0,7940$$
 (4.3)

4.4 Célula Hexagonal

No nosso estudo de empacotamento de laços propusemos uma célula unitária que maximiza a fração de empacotamento dessas estruturas. Esta célula é um hexágono não regular que comporta dois laços e apresenta fração de empacotamento $p_{max} = 0,8752$ para o arranjo mostrado na figura 4.6a. Como mencionamos no capítulo 1, um arranjo de células hexagonais preenche por completo o plano, portanto podemos formar um mosaico de células hexagonais com fração de empacotamento $p_{max} = 0,8752$, que é um valor interessante, pois está situado entre p_{aleat} = 0,84 e p_{max} = 0,9068, que são as frações de empacotamento aleatória e máxima de discos, respectivamente.



Figura 4.11

Como foi dito no início deste capítulo, os resultados obtidos para as frações de ocupação nos experimentos de empacotamentos são limitantes inferiores, o que deixa a perspectiva de aprimorar os experimentos e consequentemente melhorar os resultados obtidos. No caso da célula unitária proposta, acreditamos que através de uma leve distorção nas bordas da mesma podemos elevar consideravelmente a fração de empacotamento dos laços. Também é importante fazer mais testes experimentais para poder fazer uma comparação mais efetiva entre o empacotamento de laços e o empacotamento de polígonos regulares.

5 Sumário, Conclusões e Perspectivas

O experimento de amassamento de fios em cavidades bidimensionais revelou uma nova estrutura heterogênea, rígida, que é formada por uma distribuição de laços com diferentes tamanhos, fortemente controlados por interações de auto-exclusão e descritos por leis de escala robustas. Esse novo estado de matéria amassada pode ser entendido como um estado intermediário entre um gás e um líquido constituído de laços. Abaixo, como ilustração, localizamos as configurações de fios amassados em um diagrama de fases clássico tipo temperatura (T) - pressão (P). Nessa figura, a região de fases intermediárias exibe a estrutura de laços obtida com um fio de cobre, bem como um cristal líquido nemático de laços. Em seguida, fazemos um sumário, apresentando nossas conclusões e comentários gerais para cada capítulo desta tese.



No capítulo 2, citamos alguns dos trabalhos mais recentes envolvendo o processo de amassamento de materiais e mostramos os resutados mais importantes para os nossos objetivos, obtidos para o confinamento de fios de cobre em cavidades bidimensionais [11,12].

No capítulo 3, classificamos os laços de acordo com a tendência ou não de apresentarem um eixo de simetria e os dividimos em dois subgrupos: (i) Laços quase simétricos: Totalizando 162 laços que apresentam, com boa aproximação, um eixo de simetria razoavelmente bem definido. (ii) Laços anômalos: Totalizando 82 laços que não exibem simetria.

De cada subgrupo, selecionamos 28 laços, totalizando 56 laços, e calculamos o ângulo de torção e a razão perímetro/(área)^{$\frac{1}{2}$}, β e k, de cada laço previamente selecionado. Feito isso, calculamos os valores médios ponderados dessas duas propriedades geométricas e constatamos que os resultados obedecem as relações de $\beta(n)$ e k(n) para polígonos regulares convexos de n lados. Segundo os dados experimentais e essas últimas funções, os laços se comportam consistentemente como polígonos regulares com número de lados fracionário. Os valores médios obtidos para o número de lados dos laços foram $\overline{n} = 2,51 \pm 0,14$ e $\overline{n} = 2,65 \pm 0,15$, a partir dos valores mdios $\overline{\beta} = \beta(\overline{n})$ e $\overline{k} = k(\overline{n})$, respectivamente. Ainda nesse capítulo, calculamos algumas estruturas médias de laços a partir de uma seleção aleatória de 113 laços. As estruturas médias de laços então obtidas são figuras praticamente convexas e apresentam formas regulares e bem comportadas, o que nos estimulou a propor um modelo geométrico para descrever os laços médios como sendo híbridos de discos e triângulos. Os valores experimentais de β e k das formas médias não foram reproduzidos com boa concordância pelo modelo geométrico proposto, exceto para o chamado "laço 3", que apresentou concordância considerável com o modelo. No entanto, o modelo geométrico proposto é bem simples e pode ser modificado de modo a contemplar melhor a proporção entre círculo e triângulo na formação dos laços e apresentar melhores resultados.

No capítulo 4, explicamos os experimentos de empacotamento aleatório de laços e empacotamento de laços em células circulares e quadradas. Nesses experimentos, constatou-se que embora as configurações de laços e discos tenham comportamento semelhante no que diz respeito a fração de empacotamento, a fração de ocupação dos laços em círculos e quadrados, converge mais rapidamente e para um valor maior que o observado para discos em quadrados. Seria interessante comparar os resultados obtidos também com o empacotamento de discos em células circulares, além de fazer os experimentos citados com mais laços. Assim poderemos fazer uma comparação mais efetiva e analisar com maior precisão como a fração de ocupação de configurações de laços em domínios circulares e quadrados varia em função do número de estruturas empacotadas. Nos experimentos de empacotamento aleatório, geramos 4 configurações aleatórias de laços e obtivemos o valor médio da fração de cobretura $p_{med} = 0,7619$. Esse valor é interessante, pois como mencionamos no capítulo 4, ele está de acordo com o comportamento quase linear da fração de ocupação com o número de lados *n* dos polígonos regulares para empacotamentos aleatórios. Analisando o gráfico de *p* versus *n*, mostramos que os triângulos equiláteros estão fora da tendência da curva de p(n) devido a existência de domínios com densidade local máxima (p = 1) nas configurações aleatórias de triângulos, mas para n < 3 os "polígonos regulares" voltam a seguir a mesma tendência de comportamento dos demais polígonos regulares. Por último, apresentamos uma célula unitária hexagonal que maximiza a fração de empacotamento dos laços. Calculamos p = 0,875 para dois laços empacotados dentro dessa célula hexagonal com três pares de lados diferentes e capaz de cobrir todo o plano. No entanto, existe a perspectiva de aumentar o valor da fração de empacotamento através, possivelmente, de uma leve distroção nas bordas da célula.

6 Referências Bibliográficas

[1] S. Ferguson, T. Hales. *A Formulation of the Kepler Conjecture, Preprint Math.MG/9811072*, (2002).

[2] S. Jasty, M. Al-Naghy e M. de Llano. *Physical Review A*, **35**, 1376 (1987).

[3] R. Radhakrishnan, K. E. Gubbins e M. Sliwinska-Bartkowiak. *Physical Review Letters*, **89**, 076101 (2002).

- [4] M. A. F. Gomes. *Ciência Hoje*, **18**, (1994).
- [5] P. A. Houle e J. P. Sethna. *Physical Review E*, 54, 278 (1996).
- [6] J. -M. Devierre e R. M. Bradley. Journal Physics A: Math. Gen., 22, L213 (1989).
- [7] Y. Kantor, M. Kardar e D. R. Nelson. Physical Review Letters, 57, 791 (1986).
- [8] M. Plischke e D. Boal. *Physics Review A*, **38**, 4943 (1998).
- [9] A. Baumgärtner. Journal Physics I, 1, 1549 (1991).
- [10] F. F. Abraham e M. Kardar. Science, 252, 419 (1991).

[11] X. Wen, C. W. Garland, T. Hwa, M. Kardar, E. Kokufuta, Y. Li, M. Orkisz e T. Tanaka. *Nature (Londres)*, **355**, 426 (1992).

- [12] E. Bouchaud e J. -P. Bouchaud. Journal Physics (França), 50, 829 (1989).
- [13] J. A. Aguiar, M. A. F. Gomes e A. S. Neto. Journal Physics A, 24, L109 (1991).

[14] H. T. Croft, K. J. Falconer e R. K. Guy. *Unsolved Problems in Geometry* (Springer, New York.), (1991).

- [15] K. J. Nurmela e P. R. J. Östergard. *Discrete Computational Geometry*, **18**, 111-120, (1997).
- [16] M. Ammi, D. Bideau e J. P. Troadec. Journal Physics D: Appl. Phys, 20, 424-428, (1987).
- [17] C. C. Donato, M. A. F. Gomes e R. E. de Souza. *Physical Review E*, **66**, 051502(R) (2002).

- [18] C. C. Donato, M. A. F. Gomes e R. E. de Souza. Physical Review E, 67, 026110 (2003).
- [19] E. Katzav, M. Adda-Bedia e A. Boudaoud. PNAS (USA), 103, p. 18900-18904, (2006).
- [20] C. C. Donato e M. A. F. Gomes. *Physical Review E*, **75**, 066113 (2007).
- [21] C. C. Donato, F. A. Oliveira e M. A. F. Gomes. *Physica A*, 368, 1-6, (2006).
- [22] C. C. Donato. Tese de Doutorado, Universidade de Brasília, 2006.

[23] M. A. F. Gomes, V. P. Brito e M. S. Araújo. *Journal Brazilian Chemical Society*, **19**, 293-298, (2008).

[24] N. Stoop, F. K. Wittel e H. J. Herrmann. *Morphological Phases of Crumpled Wire*, *Preprint*, (2008).

[25] L Boué, M. Adda-Bedia, A. Boudaoud, D. Cassani, Y. Couder, A. Eddi e M. Trejo. *Physical Review Letters*, **97**, 166104 (2006).

[26] M. Habibi, N. M. Ribe e Daniel Bonn. *Physical Review Letters*, **99**, 154302 (2007)

[27] B. B. Mandelbrot *The fractal geometry of nature*. W. H. Freeman and Company, Nova York, (1983).

[28] H. J. Herrmann e H. E. Stanley. *Physical Review Letters*, **53**, 1121-1124, (1984).

[29] P. -G de Gennes. *Scaling concepts in polymer physics*. Cornell University Press, Ithaca-Nova York, (1979).

Livros Grátis

(<u>http://www.livrosgratis.com.br</u>)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração Baixar livros de Agronomia Baixar livros de Arquitetura Baixar livros de Artes Baixar livros de Astronomia Baixar livros de Biologia Geral Baixar livros de Ciência da Computação Baixar livros de Ciência da Informação Baixar livros de Ciência Política Baixar livros de Ciências da Saúde Baixar livros de Comunicação Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE Baixar livros de Defesa civil Baixar livros de Direito Baixar livros de Direitos humanos Baixar livros de Economia Baixar livros de Economia Doméstica Baixar livros de Educação Baixar livros de Educação - Trânsito Baixar livros de Educação Física Baixar livros de Engenharia Aeroespacial Baixar livros de Farmácia Baixar livros de Filosofia Baixar livros de Física Baixar livros de Geociências Baixar livros de Geografia Baixar livros de História Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura Baixar livros de Literatura de Cordel Baixar livros de Literatura Infantil Baixar livros de Matemática Baixar livros de Medicina Baixar livros de Medicina Veterinária Baixar livros de Meio Ambiente Baixar livros de Meteorologia Baixar Monografias e TCC Baixar livros Multidisciplinar Baixar livros de Música Baixar livros de Psicologia Baixar livros de Química Baixar livros de Saúde Coletiva Baixar livros de Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo