

ALGORÍTMOS PARA ESTUDOS DE LIMIAR DE PERCOLAÇÃO ATRAVÉS DA DIMENSÃO FRACTAL EM HIPER-REDES

D. T. Santos^{1,2}, D. Ecco¹, J. E. Freitas², L. R. Silva²

¹Instituto Federal do Rio Grande do Norte

²Prog. de Pós-graduação em Ciência e Eng. de Petróleo - Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN
mathdaniel@hotmail.com*

Submetido 30/03/2017 - Aceito 22/08/2017

DOI: DOI: 10.15628/holos.2017.5089

RESUMO

Após estudos de Percolação em Hiper-Redes, foi desenvolvido um algoritmo que determina se uma rede bidimensional percola percorrendo apenas parte da fronteira dos aglomerados, isto é, sem a necessidade de preencher todos os sítios que formam os aglomerados. Neste trabalho, o algoritmo foi aperfeiçoado para estudar o comportamento da dimensão fractal da fronteira do aglomerado percolante em redes dos mais diversos tamanhos e com uma grande quantidade de simulações, as quais os resultados permitem concluir,

estatisticamente, que o limiar de percolação de uma rede bidimensional ocorre quando a dimensão fractal da fronteira do aglomerado percolante atinge o valor máximo. Conclusão esta que não foi encontrada ainda na literatura.

Serão apresentados gráficos que mostram a convergência do limiar de percolação de uma rede bidimensional, quando a dimensão fractal da fronteira do aglomerado atinge o valor máximo, e sugestões para trabalhos futuros.

PALAVRAS-CHAVE: Limiar, Percolação, Fronteira, Aglomerado Percolante e dimensão fractal.

ALGORITHMS FOR PERCOLATION THRESHOLD STUDIES THROUGH FRACTAL DIMENSION IN HYPER - NETWORKS

ABSTRACT

After Hyper-Networks percolation studies, an algorithm was developed that determines if there is percolation in two dimensional network runs only part of the boundary of the clusters, that is, without the need to fill all the sites that form the agglomerates. In this work, the algorithm was improved to study the behavior of the fractal dimension of the boundary of the agglomerate in a network of different sizes and with a large number of simulations, which the results allow to conclude statistically that the percolation threshold of a

network dimensional relationship occurs when the fractal dimension of the boundary of the agglomerate reaches the maximum value. Conclusion this is not yet found in the literature.

Graphs will be presented showing the convergence of the percolation threshold of a two-dimensional network, when the fractal dimension of the boundary of the cluster reaches the maximum value, and suggestions for future work.

KEY-WORDS: Threshold, Percolation, Sequences with Repetition, Border and Cluster Percolating and fractal dimension.

1 INTRODUÇÃO

Muitos sistemas na área de exploração de petróleo, entre outros, têm alta complexidade e comportamento não-linear. Problemas como estes que não têm solução analítica (Stanley, 1971) (Broadbent e Hammersley, 1957), são estudados por simulações numéricas. Assim, é desenvolvido neste trabalho um algoritmo supereficiente para simular alguns desses problemas, obtendo resultados interessantes.

O modelo de percolação foi formulado no final dos anos 50 por Broadbent e Hammersley (1957), como um modelo de transporte de fluidos em meios porosos em que a propagação de fluidos ocorre de forma não linear. Também é definido como um ramo da teoria de probabilidades que trata das propriedades de meios aleatórios, tem uma definição simples em termos geométricos, embora, em casos gerais, não tenha solução analítica e apresenta características não triviais do ponto de vista da Física, incluindo fenômenos críticos e fractalidade (Stauffer e Aharony, 1994) (Hunt, 2005).

Neste trabalho, é usado o modelo de ligação por sítios em uma rede quadrada para definir a percolação. Então, seja L o comprimento linear da rede e considere que cada sítio da rede é ocupado aleatoriamente com probabilidade p ou permanece vazio com probabilidade $1-p$. Dois sítios são vizinhos se eles têm dois lados em comum. Se dois sítios vizinhos são ocupados, então eles formam um aglomerado de dois sítios ocupados (Freitas e Lucena, 1999) (Freitas, 2002). Para valores pequenos de p , a figura resultante apresenta a maioria dos sítios ocupados isolados, cercados por sítios não ocupados. Os sítios ocupados formam agrupamentos à medida que p aumenta. Na Figura 1 temos três casos de ocupações com $p = 0,20$, $p = 0,40$ e $p = 0,60$.

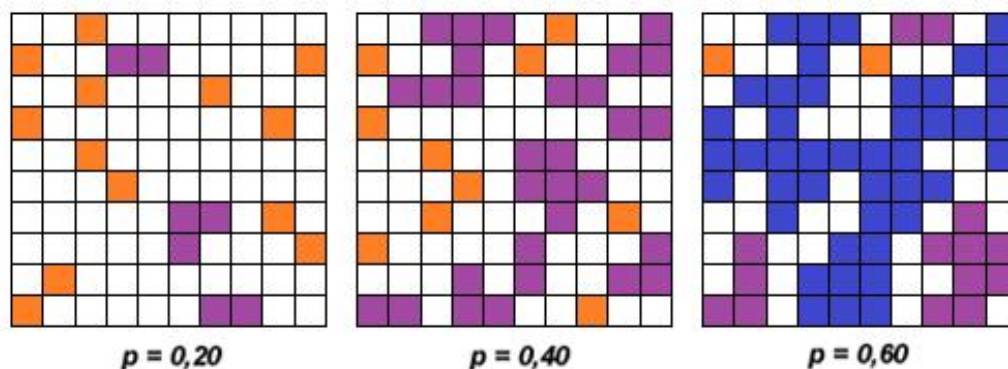


Figura 1: Redes com 10 x 10 sítios e probabilidades de ocupação diferentes.

Para um determinado valor da probabilidade de ocupação p , denotado por p_c , surge um aglomerado dominante sobre os outros que passa a conectar margens opostas da rede, sendo assim chamado de aglomerado percolante. Quando isso acontece diz-se que a rede percolou e denomina-se a probabilidade mínima p_c de limiar de percolação ou concentração crítica, pois separa fases distintas (isolantes e condutoras). No caso de redes de tamanho linear infinito, o limiar de percolação conhecido na literatura para o caso da rede quadrada é $p_c = 0,5927$.

Para $p > p_c$, os aglomerados formados são absorvidos pelo aglomerado percolante (Stanley, 1971) (Freitas e Lucena, 1999), conectando lados opostos da rede, como visto na

figura 1. Se $p < p_c$, o sistema é isolante, isto é, não há nenhum caminho conectando dois lados opostos da rede. Dessa forma, o limiar de percolação é a característica fundamental da teoria da percolação.

Assim como a percolação, os conceitos fractais introduzidos por Benoit (2000) transformaram a teoria da percolação em uma poderosa ferramenta disponível nos dias atuais.

Essa teoria foi estudada inicialmente por matemáticos como Hausdorff, Cantor, Koch, Sierpinski e outros, que já "desafiavam" o Princípio Euclidiano, ou seja, pensavam na dificuldade de se descrever todas as formas da natureza a partir de linhas, círculos, cubos, etc. No início do século 20 (1919), Hausdorff e Besicovitch adiantaram as primeiras ideias sobre dimensões fractais.

Logo depois, essa teoria foi usada para análise de cristais, labirintos e meios aleatórios em geral, assim como, de áreas tipo engenharia de petróleo, fractais matemáticos, física da indução magnética e transição de fases.

O primeiro aspecto refere-se à classificação dos fractais por meio do conceito de dimensão fractal. Esse conceito representa uma ruptura com a Geometria e a Topologia tradicionais, pois permite que um objeto tenha como dimensão um valor não inteiro. Uma grande quantidade de estruturas complexas de interesse de cientistas, médicos e engenheiros tem sido quantitativamente descrita utilizando-se da ideia de dimensão fractal, pois caracteriza de uma maneira única a forma geométrica em estudo.

A segunda característica dos fractais é a auto-similaridade, o que significa que um fractal é invariante por mudança de escalas, ou seja, se fizermos uma ampliação de uma parte do fractal, veremos uma figura similar à anterior.

A terceira característica diz respeito à maneira como os fractais são construídos. Há sempre a utilização de um processo iterativo. Isso quer dizer que, na construção de um fractal, iremos repetir um determinado procedimento infinitamente. Esse procedimento pode ser determinado por cálculos algébricos, ou construção geométrica, ou ainda alguma regra que envolva uma aleatoriedade (Pereira, 2006).

Existem várias maneiras de se definir um fractal. Talvez a mais simples seja a que diz respeito à condição de invariância geométrica do objeto quando observado em escalas diferentes. Nos exemplos a seguir, podemos visualizar tal definição.

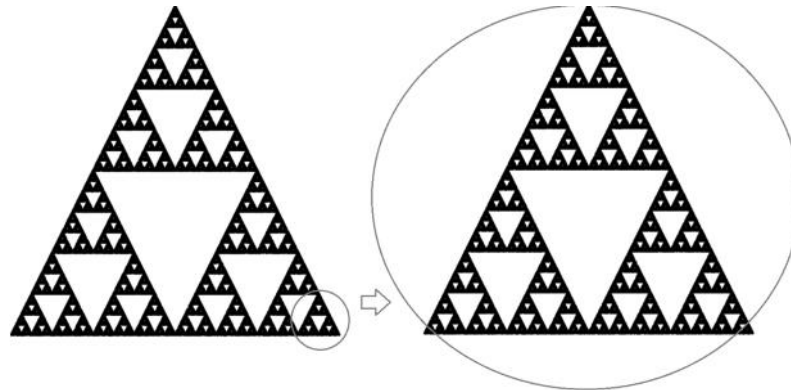


Figura 2: Triângulo de Sierpinski.

Muitos fractais são intitulados de Sistemas de Função Iterada, pois são originados de uma função que foi iterada muitas vezes. Ligado ao conceito de iteração temos o conceito de recursividade, que é a aplicação da mesma regra só que em pontos diferentes do conjunto e em outra escala (Moreira, 2005). Segue alguns:

Conjunto de Cantor: (Georg Cantor, 1845-1918) é um dos fractais mais conhecidos e foi obtido pela primeira vez em 1883 (Clarke, 2006).

Para construir o conjunto de Cantor, inicia-se com um intervalo fechado $C_0 = [0, 1]$ como é apresentado na Figura 3.

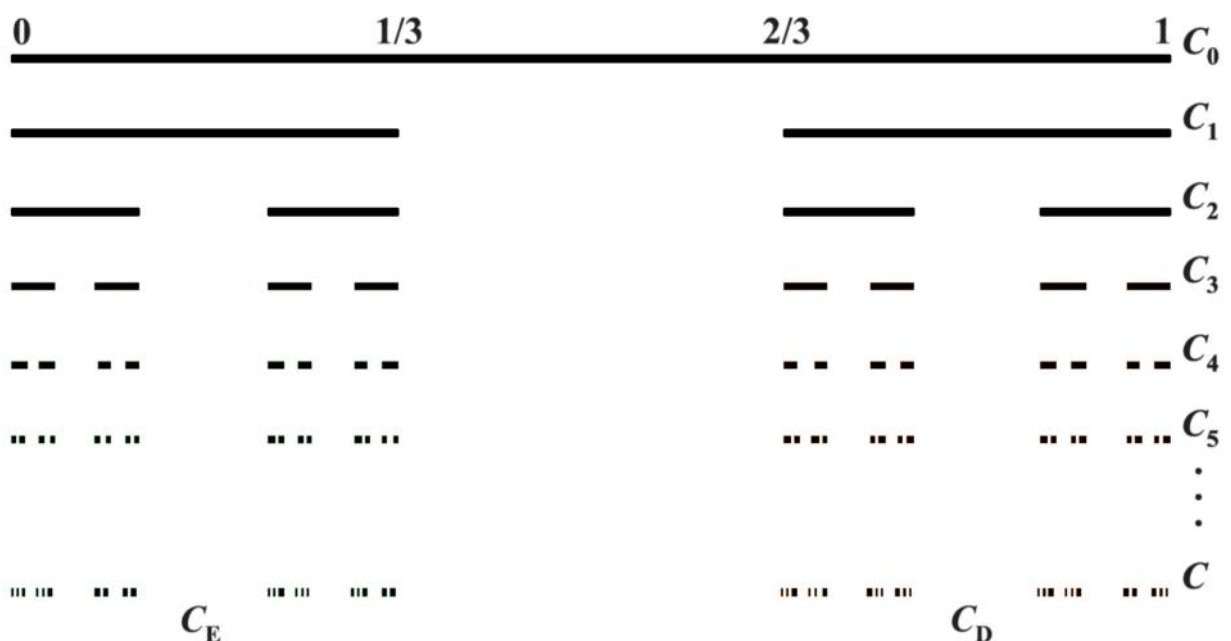


Figura 3: Construção do Conjunto de Cantor. Em cada estágio o terço do meio é retirado.

Em seguida, é retirado de C_0 o intervalo $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3})$, que é o terço aberto do meio e denota-se o conjunto fechado restante por C_1 . C_2 é construído pela aplicação deste mesmo procedimento a cada um dos quatro segmentos de C_1 , e assim sucessivamente.

Continuando este processo de retirada dos terços abertos do meio de cada intervalo fechado do estágio anterior, obtemos uma sequência de conjuntos fechados C_k , onde contém os seus sucessores e C_{k+1} é obtido retirando-se os terços abertos do meio de cada intervalo fechado C_k . Então, C_k consiste de 2^k intervalos de comprimentos $\left(\frac{2}{3}\right)^k$. Logo, o comprimento de C_k , é dado por $\left(\frac{2}{3}\right)^k$.

As características encontradas no conjunto de Cantor também são encontradas em outros fractais. Podemos destacar:

1. Simetria: Todos os pontos do conjunto são simétricos ao ponto $\left(\frac{1}{2}\right)$;
2. Auto-similaridade: O conjunto de cantor contém cópias de si próprio em infinitas escalas diferentes;
3. Estrutura fina: contém detalhes em escalas arbitrariamente pequenas, o que significa dizer que, quanto mais ampliarmos a sua figura mais intervalos vazios se tornarão visíveis;
4. Definição simples;
5. Recursividade;
6. A geometria não é facilmente descrita em termos clássicos;

Triângulo de Sierpinski: Outro exemplo de fractal construído através de exemplo recursivo é o Triângulo de Sierpinski. Este triângulo existe desde o século XII em algumas catedrais, mas foi o matemático Sierpinski (1916) que introduziu formalmente ao grupo dos conjuntos matemáticos estranhos, em 1916.

Para construir este fractal, considere E_0 o triângulo equilátero de lado unitário, em seguida remova de E_0 o triângulo equilátero cujos lados são obtidos unindo-se os pontos médios dos lados de E_0 . O resultado é denotado por E_1 , como apresentado na Figura 4.

Em seguida repete-se o procedimento unindo os pontos médios dos lados dos três triângulos de E_1 e remove-se os triângulos equiláteros invertidos para obter E_2 . Repetindo estes passos até obter E_k e fazendo k tender a infinito, obtem-se o fractal triângulo de Sierpinski.

A soma dos perímetros dos triângulos restante na etapa E_k é $3 \cdot \left(\frac{3}{2}\right)^k$. No limite possui um perímetro infinito e área zero.

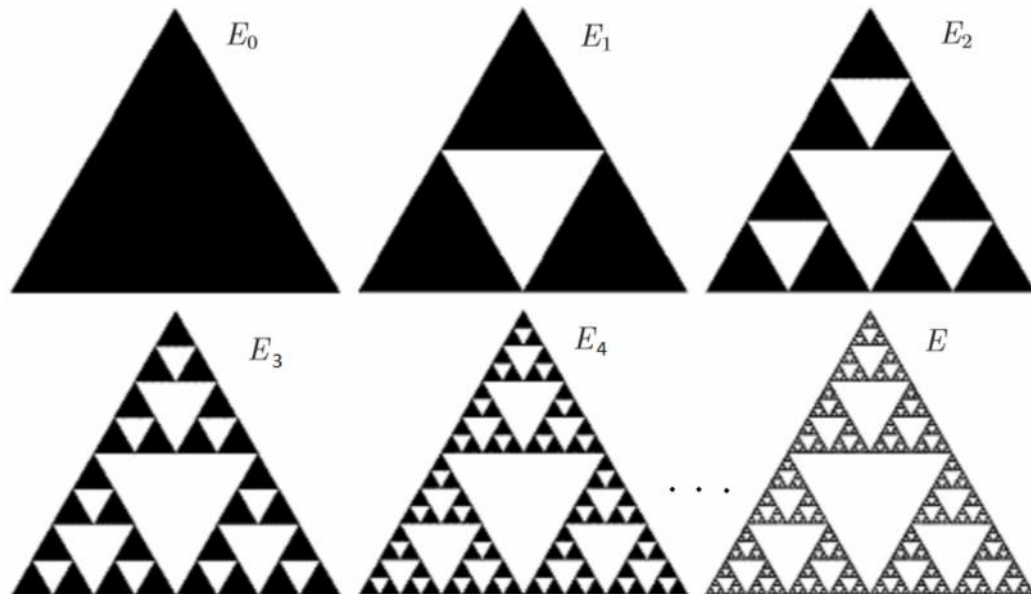


Figura 4: Construção do Triângulo de Sierpinski. Este conjunto representa duas características comuns aos fractais: simetria e auto-similaridade.

Os fractais são caracterizados quantitativamente por meio da ideia de dimensão fractal. Essa ideia consiste em associar um número (dimensão fractal), de maneira única à forma geométrica de um objeto. Ela é particularmente útil para distinguir conjuntos de natureza geométrica suave de outros que apresentam padrões de extrema irregularidade, indicando quanto espaço um conjunto ocupa próximo a cada um de seus pontos.

As dimensões fractais são importantes porque são definidas em conexão com dados do mundo real e podem ser medidas aproximadamente por meio de experiências. Estão associadas a nuvens, penas, árvores, couve-flor, brócolis, redes de neurônios e muitos outros objetos e fenômenos.

Intuitivamente a ideia de dimensão está ligada ao número de informações necessárias para se localizar um ponto naquele conjunto. Um plano Euclidiano é bidimensional pois é necessário um par de números, (x, y) , para se especificar qualquer ponto dele. A seguir será descrito a definição de dimensão de similaridade, que será aplicado aos objetos fractais apresentados anteriormente (Moreira, 2005).

Há muitas maneiras de se definir dimensão. A razão para a existência de tantas definições é o fato de que em alguns casos elas produzem valores distintos. Uma definição de dimensão fractal simples de entender e de se trabalhar é a *Dimensão de Escala*, denotada por D_f . A dimensão de escala pode ser definida para qualquer conjunto geometricamente auto-similar.

Suponha um conjunto auto-similar por ser subdividido em N réplicas, tais que, quando reduzidas por um fator de escala $b < 1$, tornam-se semelhantes ao conjunto inicial. Os objetos auto-similares com parâmetros N e b são descritos por leis de potência, da forma

$$N = \left(\frac{1}{b}\right)^{D_f} \quad (1)$$

com $D_f \geq 0$ sendo a dimensão da lei de escala.

Para melhorar a visualização da dimensão, basta usarmos logaritmos em ambos os lados da equação anterior, obtendo

$$D_f = \frac{\ln(N)}{\ln\left(\frac{1}{b}\right)} = \frac{\ln(\text{núm. de réplicas})}{\ln\left(\frac{1}{\text{fator de redução}}\right)} \quad (2)$$

Esta definição será ilustrada iniciando com casos simples e em seguida será calculado a dimensão de alguns fractais.

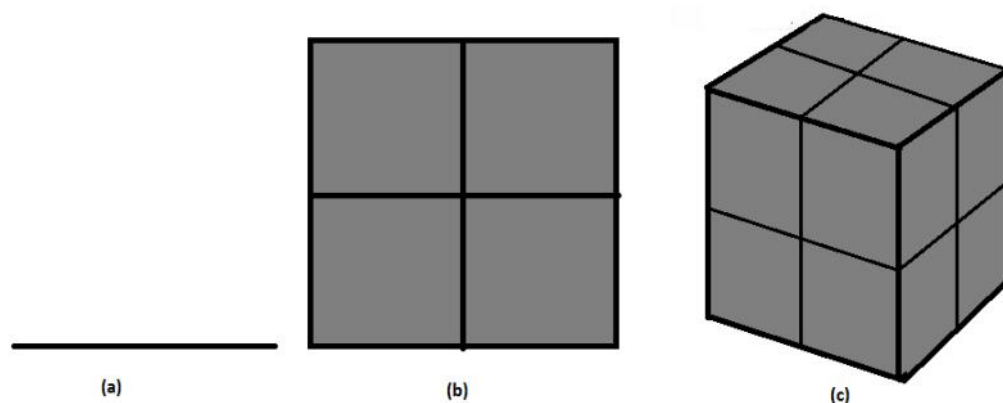


Figura 5: Em (a) um segmento de reta unitário com duas réplicas, $N = 2$; em (b) um quadrado unitário com quatro réplicas, $N = 4$ e em (c) um cubo unitário com oito réplicas, $N = 8$, todas com fator de redução $b = \frac{1}{2}$.

Em (a), o segmento de reta é dividido pela metade, obtendo duas réplicas, $N = 2$, e o fator de redução é $b = \frac{1}{2}$, encontrando

$$D_f = \frac{\ln(2)}{\ln\left(\frac{1}{2}\right)} = 1. \quad (3)$$

Em (b), o quadrado foi dividido em quatro quadrados idênticos, ou seja, $N = 4$ e $b = \frac{1}{2}$, encontrando

$$D_f = \frac{\ln(4)}{\ln\left(\frac{1}{2}\right)} = 2 \quad (4)$$

E em (c), o cubo é dividido em oito cubos idênticos, ou seja, $N = 8$ e $b = \frac{1}{2}$, encontrando

$$D_f = \frac{\ln(8)}{\ln\left(\frac{1}{2}\right)} = 3 \quad (5)$$

Nota-se que a dimensão de escala obtém os valores apropriados 1 para a reta, 2 para o quadrado e 3 para o cubo. Considere agora alguns conjuntos fractais:

Conjunto de Cantor: No seu processo de construção, na Figura 3, cada iteração é dividido em $N = 2$, onde cada uma é diminuída por um fator $b = \frac{1}{3}$. Logo possui dimensão de escala

$$D_f = \frac{\ln(2)}{\ln(3)} = 0,6309 \dots \quad (6)$$

Triângulo de Sierpinski: No seu processo de construção, na Figura 4 é subdividido em três réplicas, $N = 3$, onde cada uma é diminuída por um fator $b = \frac{1}{2}$. Logo, possui dimensão de escala

$$D_f = \frac{\ln(3)}{\ln(2)} = 1,5849 \dots \quad (7)$$

Fractais Aleatórios: Os exemplos de fractais que vimos até agora são todos determinísticos, obedecem a regras bem determinadas sem necessidade do uso de uma distribuição de probabilidade. Entretanto, nem sempre é possível encontrar na Natureza a repetição de um padrão determinístico. Para modelá-la, muitas vezes se faz necessária a introdução de uma componente aleatória. Por isso, é adicionado elementos estocásticos na geração de um fractal.

Por exemplo, para gerar o triângulo de Sierpinski, inicia-se com uma região triangular de lado 1 dividindo em quatro triângulos menores de lado $\frac{1}{2}$. Em seguida, é retirado o triângulo central e é repetido o processo com os três triângulos restantes. Continuando infinitamente, obtem-se o triângulo de Sierpinski. Observe que a regra de retirada do triângulo está bem estabelecida: retirar o triângulo central. É possível acrescentar uma aleatoriedade nesse ponto. Imagine que, quando o triângulo inicial é dividido em quatro, pode-se retirar qualquer um deles de acordo com alguma distribuição de probabilidade. A Figura 6 apresenta a evolução desse processo até o passo 6.

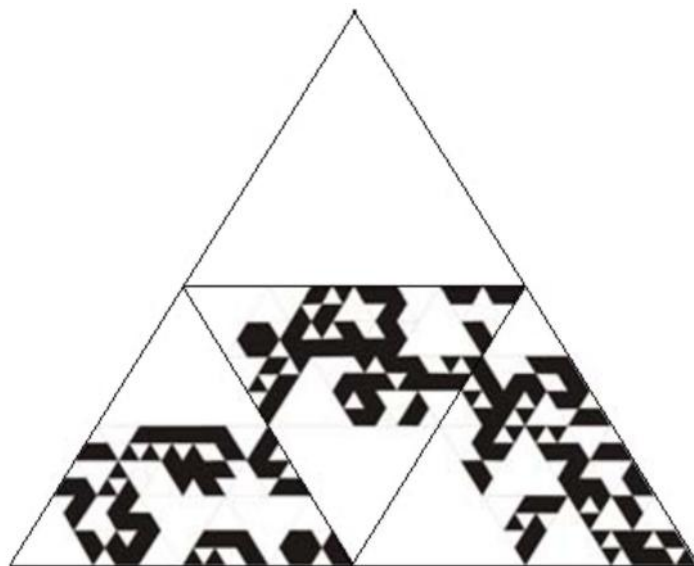


Figura 6: Triângulo de Sierpinski Aleatório.

É visível que a nova figura não é feita de cópias exatas de si mesma, isto é, não é auto-similar no sentido que definimos. Entretanto, podemos argumentar que o objeto da Figura 6 é auto-similar em um sentido estatístico. Por exemplo, a distribuição de tamanho e quantidade dos buracos continua a mesma do triângulo de Sierpinski. Temos um buraco de lado $\frac{1}{2}$, três buracos de lado $\frac{1}{4}$, nove buracos de lado $\frac{1}{8}$ e assim sucessivamente. Se a região triangular inicial tem massa $M = 1$, a massa vai diminuindo em cada passo exatamente da mesma maneira que o triângulo de Sierpinski. Em cada etapa temos a massa dada por $M = 1, M = \frac{3}{4}, M = \left(\frac{3}{4}\right)^2, \dots, M = \left(\frac{3}{4}\right)^n$. Dessa forma, esse triângulo de Sierpinski aleatório tem a mesma dimensão fractal que o determinístico $D_f = \frac{\ln(3)}{\ln(2)}$.

Fractais aleatórios são muito úteis na modelagem de fenômenos naturais. A natureza apresenta inúmeros exemplos de objetos que não são exatamente auto-similares, mas que apresentam uma auto-similaridade estatística que será descrita para o triângulo de Sierpinski aleatório. Suas dimensões fractais são geralmente encontradas numericamente.

2 METODOLOGIA

2.1 O Problema

Através de estudos sobre percolação, foi determinado que é possível saber se uma rede bidimensional percola, percorrendo apenas parte das fronteiras dos aglomerados, verificando se existe dois sítios da fronteira em lados opostos da rede, isto é, sem a necessidade de preencher todos os sítios que formam os aglomerados (*cluster*). Isto motivou o desenvolvimento de um algoritmo (Ecco, Santos, Freitas e Silva, 2015) que é usado neste trabalho para estudos da dimensão fractal do aglomerado percolante.

O algoritmo foi executado em uma máquina com especificações: sistema operacional Windows 8, 64bits, processador Intel i7, 4 processadores lógicos de 3Ghz de velocidade, memória Ram de 8 Gb e HD de 500 Gb + 32 Gb SSD.

Para a realização das estatísticas, é utilizado neste trabalho os mesmos parâmetros do estudo de limiar de percolação que já foi desenvolvido (Ecco et al., 2015), as mesmas sequências (sem repetição e com repetição) na distribuição do limiar de percolação dentro do intervalo centrado em 0,5927 e o KPZ (KPS) como gerador dos números aleatórios, lembrando que este sofreu uma adaptação devido aos vícios apresentados quando um grande número de simulações é realizado.

Cada execução tem uma probabilidade informada (*Pinf*) que deve coincidir com a frequência relativa de sucessos, obtida pelo gerador de números aleatórios. Como não coincidem sempre, é interessante ter o controle das frequências relativas obtidas, gerando duas estatísticas, uma para o *Pinf* e outra para *p* igual a frequência realizada, como será visto nas tabelas 2 e 3.

Mínimos Quadrados

O Método dos Quadrados Mínimos, ou Quadrados Mínimos Ordinários (MQO) ou OLS (do inglês *Ordinary Least Squares*) é uma técnica de otimização matemática que procura encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados tentando minimizar a soma dos quadrados das diferenças entre o valor estimado e os dados observados (tais diferenças são chamadas resíduos).

Um requisito para o método dos mínimos quadrados é que o fator imprevisível (erro) seja distribuído aleatoriamente, essa distribuição seja normal e independente. O Teorema Gauss-Markov garante (embora indiretamente) que o estimador de mínimos quadrados é o estimador não-enviesado de mínima variância linear na variável resposta.

Outro requisito é que o modelo é linear nos parâmetros, ou seja, as variáveis apresentam uma relação linear entre si. Caso contrário, deveria ser usado um modelo de regressão não-linear.

Credita-se Carl Friedrich Gauss como o desenvolvedor das bases fundamentais do método dos mínimos quadrados, em 1795, quando Gauss tinha apenas dezoito anos. Entretanto, Adrien-Marie Legendre foi o primeiro a publicar o método em 1805, em seu *Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes*. Gauss publicou suas conclusões apenas em 1809.

Inicialmente será demonstrado como ajustar um conjunto de pontos a uma reta $y = a + bx$, onde a e b são parâmetros a serem determinados. Neste caso, o interesse é em minimizar a distância de cada ponto (x_i, y_i) à cada ponto $(x_i, a + bx_i)$ da reta, conforme ilustra a figura 7.

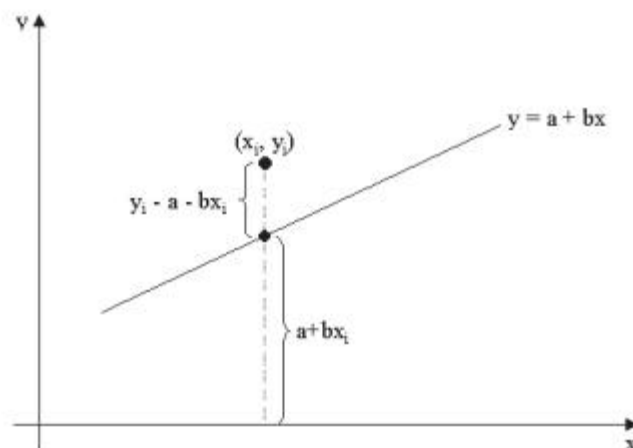


Figura 7: Distância de um ponto (x_i, y_i) à reta $y = a + bx$

A distância entre esses pontos é $|y_i - a - bx_i|$ e a soma dos quadrados dessas distâncias é:

$$q = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 \quad (8)$$

Os candidatos a ponto de mínimo da função acima são aqueles para os quais são nulos as derivadas parciais de q em relação a cada um de seus parâmetros, isto é:

$$\frac{\partial}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i) = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n x_i (y_i - a - bx_i) = 0 \quad (10)$$

Tendo em vista que:

$$\sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i) = \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n a - \sum_{i=1}^n bx_i = \quad (11)$$

$$= \sum_{i=1}^n y_i - n - (\sum_{i=1}^n x_i) b \quad (12)$$

e que:

$$\sum_{i=1}^n x_i (y_i - a - bx_i) = \sum_{i=1}^n x_i y_i - (\sum_{i=1}^n x_i) a - (\sum_{i=1}^n x_i^2) b \quad (13)$$

obtem-se o seguinte sistema de equações, denominado “equações normais” do problema, cujas incógnitas são os parâmetros a e b da equação $y = a + b$:

$$\begin{cases} n + (\sum_{i=1}^n x_i) b = \sum_{i=1}^n y_i \\ (\sum_{i=1}^n x_i) a + (\sum_{i=1}^n x_i^2) b = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{cases} \quad (14)$$

O objetivo, agora, é demonstrar como ajustar os pontos de uma tabela com n pontos a uma função polinomial de grau m :

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_m x^m \quad (15)$$

com $m \leq n - 1$. Neste caso, a soma dos quadráticos das distâncias de y_i à $P(x_i)$ é dada por:

$$q = \sum (y_i - P(x_i))^2 \quad (16)$$

e depende de $m + 1$ parâmetros $a_0 + a_1, \dots, a_m$. Para minimizar essa função, temos que satisfazer às $m + 1$ condições a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial a_i} = 0, \forall i = 0, 1, \dots, m \quad (17)$$

a qual fornece um sistema de $m + 1$ equações normais.

No caso de a função polinomial ser quadrática, isto é:

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \quad (18)$$

as equações normais são:

$$\begin{cases} na_0 + (\sum_{i=1}^n x_i) a_1 + (\sum_{i=1}^n x_i^2) a_2 = \sum_{i=1}^n y_i \\ (\sum_{i=1}^n x_i) a_0 + (\sum_{i=1}^n x_i^2) a_1 + (\sum_{i=1}^n x_i^3) a_2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ (\sum_{i=1}^n x_i^2) a_0 + (\sum_{i=1}^n x_i^3) a_1 + (\sum_{i=1}^n x_i^4) a_2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i \end{cases} \quad (19)$$

Observe que este sistema é simétrico. Para resolvê-lo, isto é, para encontrar as incógnitas a_0, a_1, \dots, a_m , pode-se aplicar qualquer um dos métodos numéricos.

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Como resultados e discussões, primeiro reveja alguns conceitos importantes que foi definido na rede de percolação usada no trabalho, tais como: interior, fronteira externa e limite bloqueado de um cluster em uma rede quadrada.

Primeiramente será definido o que é interior, fronteira externa e fronteira bloqueada de um aglomerado em uma rede quadrada.

Um sítio é interior a um aglomerado se possui oito sítios vizinhos, por lado ou por vértice, no aglomerado. O sítio interior pode ser ou não do aglomerado.

Um sítio de um aglomerado é da fronteira se não é sítio interior. As fronteiras de um aglomerado formam curvas fechadas e conexas. Uma fronteira fechada divide a rede estendida ao plano em três regiões: a própria; uma finita, a qual é denominada de região interior e outra infinita chamada de região exterior. Quando a região exterior de uma fronteira não contiver sítios do aglomerado, é dito que essa fronteira é a fronteira externa do aglomerado. Cada aglomerado tem uma e somente uma fronteira externa. Em outras palavras, a fronteira externa é a fronteira que, juntamente com seu interior, contém o aglomerado. A fronteira bloqueada de um aglomerado é formada por sítios vizinhos da fronteira externa e que estão na região externa.

O algoritmo visita todos os sítios que tocam o lado da rede, de lado L , formado pelos sítios de $(1, 1)$ a $(L, 1)$. A partir do sítio mais à esquerda fora da rede $(1,0)$, o algoritmo percorre a fronteira externa dos aglomerados visitando também os locais de limite bloqueados, onde cada local tem uma probabilidade de ser ocupado, dependendo do gerador de números aleatórios.

Considerando os sítios externos da rede, $(1,0)$ a $(L, 0)$, como sítios já ocupados, o aglomerado será percolante se a borda formada pelos sítios visitados (fronteira externa) chegar ao lado da rede formada por sítios de $(1, L)$ a (L, L) . Se a fronteira dos sítios visitados atinge o lado da rede formado por sítios de $(L, 1)$ a $(L, L - 1)$ não há aglomerado percolante.

Um sítio da rede pertence a fronteira bloqueada se ele tiver sido visitado e bloqueado.

Um sítio da rede pertence à fronteira externa se foi visitado, mas não ocupado, tornando-se assim um sítio não ocupado, sítios marcados com "x" na Figura 8.

Os sítios em que o algoritmo ocupa ao verificar se o aglomerado percola ou não são os sítios amarelos, formando parte da fronteira do aglomerado, como apresentado na Figura 8. A fronteira total de um aglomerado é formada pelos sítios amarelos e vermelhos e o aglomerado percolante é formado pelos sítios amarelos, vermelhos e azuis, como se ver na Figura 9. Para efeito de programação, considera-se que a rede possui uma coluna vertical de sítios desocupados no lado esquerdo (sítios laranjas) e ocupados no lado inferior (sítios cinzas).

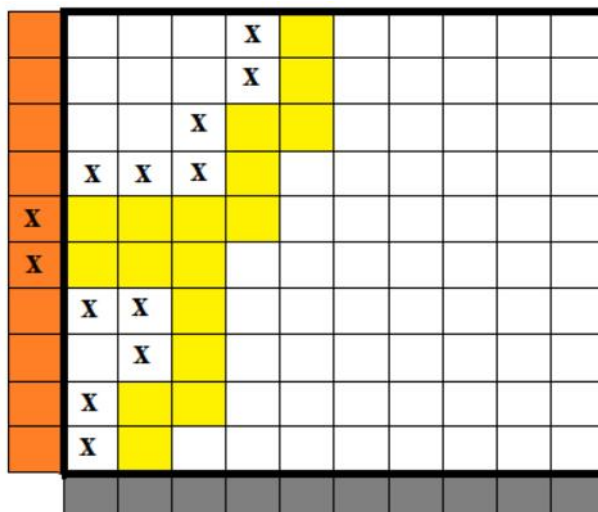


Figura 8: Parte da fronteira de um aglomerado percolante (sítios em amarelo) e sua fronteira externa (sítios marcados com "x") em uma rede de $L_2 = 100$ sítios.

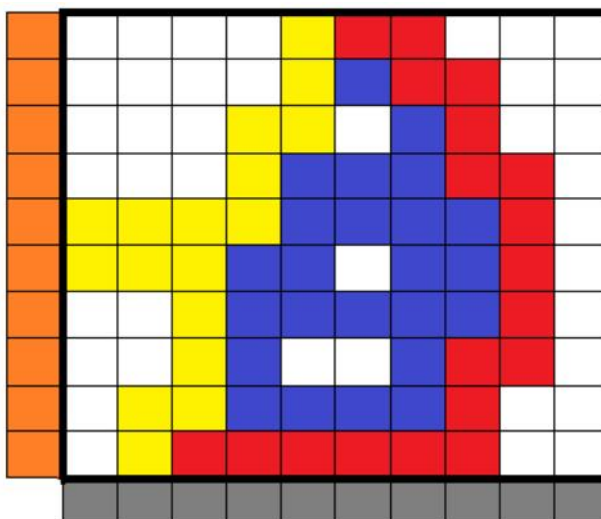


Figura 9: O aglomerado percolante e sua fronteira em uma rede de $L_2 = 100$ sítios.

Chama-se de **nsitoc** o número de sítios da parte da fronteira do aglomerado percolante; **nsitdesc** o número de sítios da fronteira externa, logo o limiar de percolação calculado (P) é:

$$P = \frac{n}{n + n} \quad (20)$$

Após a execução de cada rede, é gerado um arquivo com os dados referentes ao limiar de percolação (P_{inf}) e a dimensão fractal da fronteira do aglomerado percolante. Os aglomerados são formados pela fronteira percolante. A seguir é apresentada a Tabela 1, onde temos redes de lado 2^{11} a 2^{21} com no máximo 8001 execuções. Com redes de lados maiores, o tempo de execução fica inviável para chegar a um mesmo número de execuções de redes

menores. Dessa forma, as redes de lado 2^2 e 2^2 sítios tem um ajuste por mínimos quadrados menos preciso.

Tabela 1: Tamanho do lado da rede e número de execuções.

Tamanho do lado	Execuções
2^{11}	8001
2^{12}	8001
2^{13}	8001
2^{14}	3969
2^{15}	3969
2^{16}	1953
2^{17}	465
2^{18}	465
2^{19}	465
2^{20}	225
2^{21}	105

Ao ler todos os arquivos gerados pelo algoritmo, nos diversos tamanhos de rede, foi gerada as estatísticas em um único arquivo organizado por limiar de percolação, dimensão fractal da fronteira do aglomerado percolante e por tamanho de rede. Com esse arquivo, é possível analisar graficamente a distribuição de percolação e a dimensão fractal por cada tamanho de rede. Lembre-se que ao executar uma rede de lado 2^r sítios, todas as redes de lados $2^3, 2^4, \dots, 2^{r-1}$ sítios também têm suas estatísticas apuradas.

Para demonstrar a dimensão fractal da fronteira do aglomerado percolante, basta calcular a dimensão fractal de parte da fronteira (sítios amarelos de A a D), que foram os sítios ocupados pelo algoritmo, segue exemplo na Figura 10.

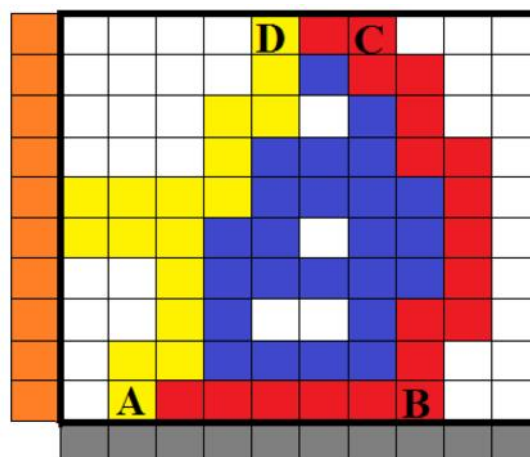


Figura 10: O aglomerado percolante e sua fronteira em uma rede de $L^2 = 1$ sítios.

$$M = ABCD = AB + BC + CD + AD = AB + CD + 2AD \quad (21)$$

Assim,

$$AD \leq M \leq 4AD \quad (22)$$

$$\frac{\ln(A)}{\ln(L)} \leq \frac{\ln(M)}{\ln(L)} \leq \frac{\ln(4)}{\ln(L)} + \frac{\ln(A)}{\ln(L)} \quad (23)$$

Como L "tende" ao infinito, isto é, no algoritmo chegando a $L = 2^2$ sítios, $\frac{\ln(4)}{\ln(L)}$ tende a zero.

Logo,

$$\frac{\ln(A)}{\ln(L)} \leq \frac{\ln(M)}{\ln(L)} \leq \frac{\ln(A)}{\ln(L)} \quad (24)$$

ou seja, a dimensão fractal da fronteira total é igual a dimensão fractal de AD, que é parte da fronteira do aglomerado percolante.

A dimensão fractal da fronteira do aglomerado percolante é calculada através da expressão:

$$di = \frac{(\alpha_{[0]} + \alpha_{[1]})}{L} \quad (25)$$

acumSt[0] representa a contagem dos sítios desocupados da fronteira do aglomerado.

acumSt[1] representa a contagem dos sítios ocupados da fronteira do aglomerado.

L representa a distância do vértice inicial (0,0) da rede ao ponto mais distante do aglomerado.

Após análise gráfica da dimensão fractal da fronteira do aglomerado percolante distribuídas pela faixa de limiar de percolação, foi gerado no plano cartesiano, para cada limiar de percolação (eixo das abscissas), a média das dimensões fractais (eixo das ordenadas), ou seja, a média das dimensões fractais em função das variações dos limiares em cada tamanho de rede.

Foram obtidos dois resultados a respeito de limiares de percolação: *P_{inf}* (Limiar de percolação informado) e *P* (Limiar de percolação calculado). As estatísticas de percolação foram analisadas nos dois casos, com as diversas redes geradas pelo algoritmo. Foram usadas redes de lados 2^1 , 2^1 , 2^2 e 2^2 sítios, para que ocorra convergência nas estatísticas geradas.

Nestes gráficos, foi usado uma aproximação por uma função polinomial de grau 2 através do método de mínimos quadrados, aproximando para cada limiar informado e calculado. Com isso, foi possível verificar que o ponto em que a média das dimensões fractais atinge o maior valor é em torno do limiar de percolação, como é visto a seguir.

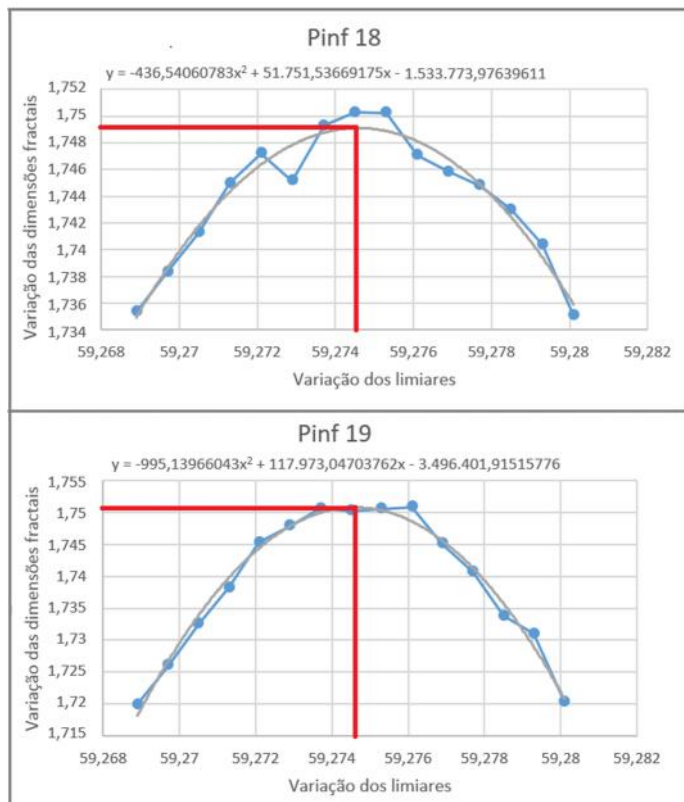


Figura 11: Limiar de percolação calculado para as redes de lados Z^1 e Z^1 sítios.

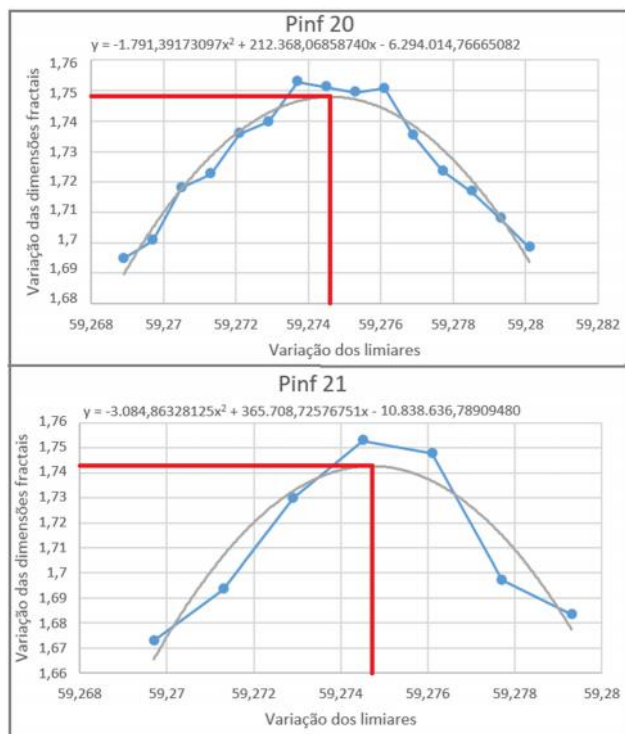


Figura 12: Limiar de percolação calculado para as redes de lados Z^2 e Z^2 sítios.

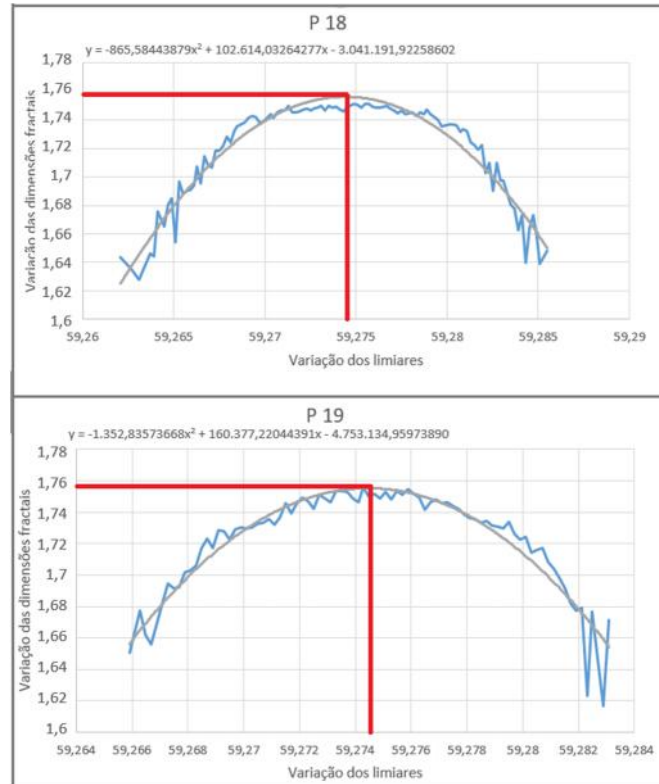


Figura 13: Limiar de percolação informado para as redes de lados Z^1 e Z^1 sítios.

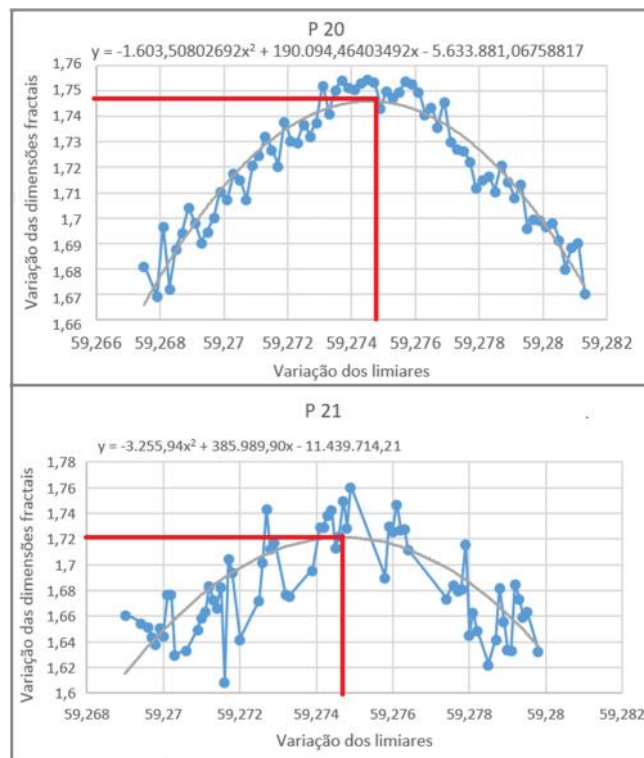


Figura 14: Limiar de percolação calculado para as redes de lados Z^2 e Z^2 sítios.

Com os resultados obtidos nos gráficos, os limiares e as dimensões fractais entre P_{inf} e P foram organizados por tamanho de rede. A seguir tem-se a média desses valores para cada resultado:

Tabela 2: Lado da rede, quantidade de execuções, média máxima da dimensão da fronteira do aglomerado percolante e limiar de percolação obtido através do iP_{inf} .

Tamanho do lado	Execuções	Dimensão fractal da	P_{inf}
2^{18}	$15 \times 31 = 465$	1,756466	59,274606
2^{19}	$15 \times 31 = 465$	1,763399	59,274626
2^{20}	$15 \times 15 = 225$	1,757972	59,274619
2^{21}	$7 \times 15 = 105$	1,750367	59,27471

Tabela 3: Lado da rede, quantidade de execuções, média máxima da dimensão da fronteira do aglomerado percolante e limiar de percolação obtido através do P .

Tamanho do lado	Execuções	Dimensão fractal da	P
2^{18}	$15 \times 31 = 465$	1,771870	59,274575
2^{19}	$15 \times 31 = 465$	1,757348	59,274602
2^{20}	$15 \times 15 = 225$	1,755916	59,274568
2^{21}	$7 \times 15 = 105$	1,749051	59,274708

Nas Tabelas 2 e 3, tem-se as maiores médias de dimensões fractais para cada tamanho de rede e seus respectivos limiares de percolação. Com isso, foi possível comprovar que o limiar de percolação se torna cada vez mais preciso quando a média das dimensões fractais, obtida nas execuções em cada rede, atinge o maior valor.

Complexidade do Algoritmo

A complexidade do algoritmo é maior do que 1 quando a razão entre o tempo t e o número de sítios da rede L^2 , $\frac{t}{L^2}$, é crescente no limite, ou seja, quando L tende a infinito. Neste caso, o t aumenta em relação ao número de sítios L^2 .

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{t}{L^2} = \infty \quad (26)$$

A complexidade do algoritmo é linear (em relação as LP) se a razão $\frac{t}{L^2}$, tende a uma constante quando L tende a infinito. Neste caso, t é proporcional a L^2 , o que é um resultado rápido e muito desejado na execução de um algoritmo.

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{t}{L^2} = c c \quad (27)$$

A complexidade do algoritmo é menor do que 1 quando a razão, $\frac{t}{L^2}$ é decrescente e tendendo a zero no limite. Este caso, apresenta um ganho computacional ainda maior em relação a complexidade linear.

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{t}{L^2} = 0 \quad (28)$$

A complexidade do algoritmo desenvolvido neste trabalho em relação ao número de sítios da rede, é calculada através da dimensão fractal da fronteira ($D_f \cong 1,7$) e o número de sítios da fronteira, pela seguinte fórmula $\frac{L^{D_f}}{L^2}$. Considerando a a constante de proporcionalidade, tem-se:

$$t \cong aL^{D_f} \quad (29)$$

$$\ln(t) \cong \ln(a) + \ln(L^{D_f}) \quad (30)$$

$$\frac{\ln(t)}{\ln(L^2)} \cong \frac{\ln(a)}{\ln(L^2)} + \frac{\ln(L^{D_f})}{\ln(L^2)} \quad (31)$$

$$\frac{\ln(t)}{\ln(L^2)} \cong \frac{\ln(a)}{\ln(L^2)} + \frac{D_f}{2} \quad (32)$$

Para $L \rightarrow \infty$, $\frac{D_f}{2} \cong \frac{1,7}{2} \cong 0,85 < 1$ é o valor da complexidade do algoritmo.

4. CONCLUSÕES

Com os valores obtidos de limiar de percolação e dimensão fractal, foram gerados gráficos considerando no eixo das abscissas a variação $\frac{1}{2^r}$. Isso significa que próximo de zero, concentram-se as maiores redes. Em seguida, foi usado o recurso linha de tendência, de primeiro grau, para encontrar o limiar de percolação e a dimensão fractal quando a rede tende ao infinito.

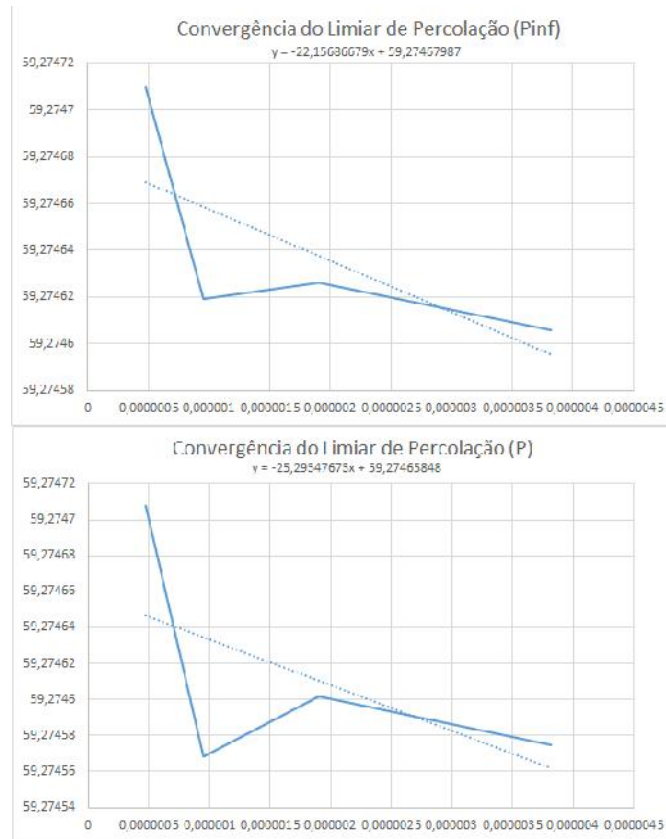


Figura 15: Convergência do limiar de percolação para P e Pinf.

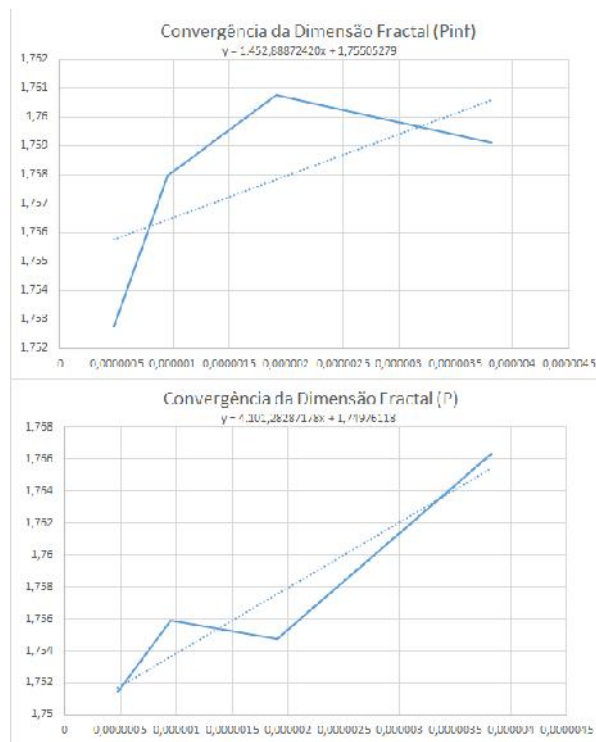


Figura 16: Convergência da dimensão fractal para P e Pinf.

Isso significa que próximo de zero, quando a rede tende ao infinito, a curva converge para o limiar de percolação existente na literatura e, é possível concluir, o valor da dimensão fractal da fronteira do aglomerado percolante. Valor este que ainda não foi encontrado na literatura. Segue, resumidamente, a convergência dos valores obtidos nos gráficos acima quando a rede tende ao infinito:

Convergência do limiar de percolação (Pinf): **59,27467987**

Convergência do limiar de percolação (Pinf): **59,27465848**

Convergência da dimensão fractal (Pinf): **1,75505279**

Convergência da dimensão fractal (P): **1,74976118**

Trabalhos futuros na área de Matemática, Física, Estatística e Engenharia de Petróleo poderão ser feitos com este algoritmo que foi desenvolvido. Assim como a demonstração matemática que a dimensão fractal máxima do aglomerado percolante, tende ao limiar de percolação da rede quadrada.

REFERÊNCIAS

- BENOIT, M. B. (2000). *The Fractal Geometry of Nature*. Nova Iorque: W. H. Freeman and Company, Nineteenth Printing, 11-12.
- BROADBENT, S. R., & HAMMERSLEY, J. M. (1957). *Percolation Processes I. Crystals and Mazes*. Reino Unido: Proceedings of the Cambridge Philosophical Society.
- CLARKE, A. C (2006). *The Color of Infinity*. Singapore: Clear Book.
- ECCO, D., SANTOS, D. T., FREITAS, J. E., SILVA, L. R. (2015). *Algoritmos para Estudos de Percolação em Hiper-Redes*. Natal-RN: Holos.
- FREITAS, J. E., LUCENA, L. S., ROUX, S. (1999). Statistics of largest cluster growth through constant rate random filling of lattices. *Physica A* 266. Natal-RN.
- FREITAS, J. E. (2002). *Estudos de Alguns Sistemas Complexos*. Universidade Federal do Rio Grande do Norte (Tese de Doutorado). Natal-RN.
- GRIMMETT, G. (1999). *Percolation*. Berlin: Springer-Verlang.
- HUNT, A. G. (2005). *Percolation Theory for Flow in Porous Media – Lecture Notes in Physics*. Springer.
- MOREIRA, D. A. (2005). *Percolação convencional, percolação correlacionada e percolação por invasão num suporte multifractal*. Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal-RN, 13-23.
- PEREIRA, M. G. (2006). *Aplicação da teoria da percolação à modelagem e simulação de reservatórios de Petróleo*. Universidade Federal do Rio Grande do Norte (Tese de Doutorado). Natal-RN, 11-59.
- SAHIMI, M. (1994). *Applications of Percolation Theory*. London: Taylor and Francis.

SIERPINSKI, C. R. Acad. Paris 162629-632, 1916.

SILVA, L. R., PAUL, G., HAVLIN, S., BAKER, D.R, STANLEY, H. E. (2003). Scaling of cluster mass between two lines in 3D percolation. Physica A 318.

STANLEY, H. E. (1971). Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford University Press. Nova Iorque.

STAUFFER, D, AHARONY, A. (1994). Introduction to Percolation Theory. London: Taylor and Francis, second edition ed.

WILKINSON, D., & WILLEMSSEN, J.F (1983). Invasion percolation: a new form of percolation theory. J. Physica A.