



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

RAFAEL SOUSA DE OLIVEIRA

**UTILIZAÇÃO DO EMPACOTAMENTO APOLONIANO NO
ESTUDO DE FLUIDOS EM MEIOS POROSOS E EM
SISTEMAS MAGNÉTICOS**

Salvador
2016

RAFAEL SOUSA DE OLIVEIRA

**UTILIZAÇÃO DO EMPACOTAMENTO APOLONIANO
NO ESTUDO DE FLUIDOS EM MEIOS POROSOS E
EM SISTEMAS MAGNÉTICOS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física Estatística.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Orientador: Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade

Salvador

2016

Sistema de Bibliotecas da UFBA

Oliveira, Rafael Sousa de.

Utilização do empacotamento Apoloniano no estudo de fluidos em meios porosos e em sistemas magnéticos / Rafael Sousa de Oliveira. - 2016.

121 f.: il.

Inclui apêndices.

Orientador: Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade.

Tese (doutorado) - Universidade Federal da Bahia, Instituto de Física, Salvador, 2015.

1. Mecânica dos fluidos. 2. Fluidodinâmica computacional. 3. Dinâmica dos fluidos. 4. Ising, Modelo de. I. Andrade, Roberto Fernandes Silva. II. Universidade Federal da Bahia. Instituto de Física. III. Título.

CDD - 532
CDU - 531.72

RAFAEL SOUSA DE OLIVEIRA

UTILIZAÇÃO DO EMPACOTAMENTO APOLONIANO NO ESTUDO DE FLUIDOS EM MEIOS POROSOS E EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física Estatística.

Trabalho aprovado. Salvador, 27 de agosto de 2015:

**Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva
Andrade**
Orientador

**Prof. Dr. Thiago Albuquerque de
Assis**
IF/UFBA

Prof. Dr. Ernesto Pinheiro Borges
IF/UFBA

**Prof. Dr. Marcelo Albano Moret S.
Gonçalves**
SENAI/CIMATEC

Prof. Dr. Marcelo Lyra
UFAL

Salvador
2016

*Dedico aos meus pais, Antonio e Marinalva,
e à minha esposa Anabel.*

Agradecimentos

- Agradeço, primeiramente, a Deus, por ter me dado força e saúde para concluir este trabalho;
- À minha esposa Anabel, pela compreensão, carinho e companheirismo;
- Aos meus pais, Antonio e Marinalva, pela vida, apoio e ensinamentos;
- Minhas irmãs, Maridalva, Adriana e Junia por todo carinho e apoio;
- Um agradecimento muito especial ao meu orientador, Prof. Roberto Andrade, pela proposta de trabalho, orientação, por ter acreditado e investido em mim, por toda a paciência que teve para comigo. Aproveito para registrar minha admiração e meu respeito, não só pela reconhecida competência profissional, mas também pelo exemplo de ser humano;
- Aos amigos, Sergio Boss e Vanessa Facina pelo apoio e proveitosas conversas;
- Ao amigo Rodrigo De Paula, pela amizade e apoio dado para conclusão deste trabalho;
- A todos os companheiros de trabalho do CFP/UFRB, pelo apoio e incentivo;
- A todos os companheiros(as) da pós-graduação, em especial, a João Cláudio, Leandro, Thiago, Erick, Marivaldo, Manuela e Miralvo, minha sincera gratidão;
- Aos demais professores do Instituto, pelos ensinamentos e convivência;
- Aos servidores técnicos e aos funcionários terceirizados do Instituto, em especial Marli, Sr. Nelson e Dalva. Meu muito obrigado pela simpatia e disponibilidade que sempre demonstraram.

“A persistência é o menor caminho do êxito”.
(Charles Chaplin)

Resumo

Neste trabalho o empacotamento Apoloniano (EA) é aplicado como um meio poroso granular não estacionário e não homogêneo e como uma rede apoloniana (RA) para modelar um material magnético. No primeiro caso, o EA é posicionado na região central de um canal bidimensional, formando uma espécie de tampão, e a simulação de um fluido Newtoniano escoando através dele é considerada. O modelo adquire a característica não estacionária, pois, sob a influência da força de arrasto do fluido, os discos podem girar em torno dos seus respectivos centros. Investigação sobre a região de validade da lei de Darcy, bem como do comportamento da resistência hidráulica, são consideradas. Na segunda aplicação, um modelo de Ising é considerado na RA, onde a constante de troca entre dois sítios vizinhos (i, j) , é definida em função da distância de separação entre os sítios por $J_{i,j} \sim 1/(r_i + r_j)^\alpha$, sendo r_i e r_j os raios dos círculos tangentes centrados nos sítios e obtidos pelo EA. O estudo do comportamento crítico do sistema é realizado com ajuda da técnica de matrizes de transferência. No estudo do escoamento verifica-se: (i) que dependendo dos fatores geométricos escolhidos para o meio, a resistência hidráulica pode ser maior ou menor que o caso correspondente com discos fixos; (ii) a redistribuição dos fluxos no interior do canal devido à rotação dos discos; (iii) o surgimento de um perfil de velocidade angular oscilatório estável para a maioria dos discos inseridos no empacotamento após a segunda geração. No caso magnético, apesar do sistema não exibir uma temperatura finita de transição de fase, um comportamento crítico aparece em função de α , observa-se que para $\alpha > 0.743$, o sistema exibe características de um paramagneto e para $\alpha < 0.743$ uma fase ferromagnética, independentemente do valor da temperatura.

Palavras-chave: Fluidos. Meios porosos. DFC. Leis de escala. Modelo de Ising. Transição de fase. Matrizes de transferência.

Abstract

In this work the Apollonian packing (AP) is used as non-stationary, inhomogeneous granular porous media and as an Apollonian network (AN) to model a magnetic material. In the first case, an AP is placed in the central region of a two-dimensional channel, forming a kind of plug, and the simulation of a non-stationary Newtonian fluid flowing through it is considered. The model acquires the characteristic of non-stationarity because, under the influence of drag force of the fluid, disks may rotate around their respective centers. The investigation of the region of validity of Darcy's law as well as the study of behavior of the hydraulic resistance, are considered. In the second application, an Ising model is considered on the AN where the exchange constant between neighboring sites (i, j) , is a function of the distance of separation between the sites, expressed by $J_{i,j} \sim 1/(r_i + r_j)^\alpha$. r_i and r_j are the radii of tangent circles centered on the sites and obtained by the AP. The study of critical behavior of the system is performed with the help of the transfer matrix method. The flow study verifies that: (i) depending on the geometric factors chosen for the porous medium, the hydraulic resistance of rotating circles may be larger or smaller than that of the corresponding static case; (ii) flow redistribution in the channels as a result of the rotation pattern; (iii) the emergence of a stable oscillatory angular velocity profile for almost all circles that are inserted into the assemblies after the second generation. In the magnetic case, despite the magnetic system does not display a finite temperature for phase transition, a critical behavior arise in function of α , to $\alpha > 0.743$ the behavior of the system is close to that observed for paramagnetic system and for $\alpha < 0.743$ reveal a ferromagnetic phase, regardless of the value of the temperature.

Keywords: Fluids. Porous media. CFD. Scale properties. Ising Model. Phase transitions. Transfer Matrix.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Esforço cisalhante entre duas placas paralelas.	19
Figura 2 – Tensão de cisalhamento em um fluido.	20
Figura 3 – Volume de controle utilizado para o desenvolvimento da equação da continuidade.	24
Figura 4 – Volume de controle tridimensional utilizado para o desenvolvimento da equação da continuidade.	26
Figura 5 – Volume de controle utilizado para o desenvolvimento da equação do <i>momentum</i> linear.	27
Figura 6 – Superfície arbitrária de um volume de controle.	27
Figura 7 – Tensões normais e tangenciais na direção x sobre o elemento de fluido bidimensional.	28
Figura 8 – Tensões normais e tangenciais na direção y sobre o elemento de fluido bidimensional.	30
Figura 9 – Tensões normais e tangenciais sobre um elemento de fluido tridimensional.	31
Figura 10 – Esquema do experimento de filtragem de Darcy.	36
Figura 11 – Modelo de um canal sinuoso.	41
Figura 12 – Configurações iniciais do EA com fator de redução $s = 0.9$ para (a) $g = 1$, (b) $g = 2$ e (c) $g = 3$	44
Figura 13 – Identificação dos discos que compõem o empacotamento. A configuração da figura corresponde a geração $g = 3$ com fator de redução $s = 0.7$	45
Figura 14 – Malha para $g = 4$ e $s = 0.8$	53
Figura 15 – Flutuações no valor de ΔP^R e ΔP^S	57
Figura 16 – Dependência das resistências hidráulica G^R e G^S como função do número de Reynolds Re	58
Figura 17 – Código de cores para o módulo da velocidade	60
Figura 18 – Dependência dos fluxos parciais φ_i e $\bar{\varphi}_i$ com o número de Reynolds Re	61
Figura 19 – Dependência de β^X , $\bar{\beta}^X$, e δ_i^X (com $X = R, S$ e $i = 1, 2$) com respeito a Re	62
Figura 20 – Comportamento da permeabilidade k em função do fator de porosidade de Kozeny-Carman	64
Figura 21 – Ajuste linear da relação de KC modificada para $g = 2$ e $g = 3$ nos modelos estacionário e não estacionário.	65
Figura 22 – Ajustes por mínimos quadrados da relação de KC modificada para $g = 2$ e $g = 3$ nos modelos estacionário e não estacionário.	67
Figura 23 – Dependência de $\Omega_{g,j}^g$ (rad/s) com relação ao tempo para dois discos principais $D_{1,1}$ e $D_{1,2}$	68

Figura 24 – Valor de $\langle \Omega_{g,j}^g \rangle$ como função de Re para os discos $D_{1,1}$ e $D_{1,2}$, quando $s = 0.8$ e $g = 2$	69
Figura 25 – Comportamento oscilatório de $\Omega_{g,j}^g$ com relação ao tempo para alguns discos introduzidos em $g = 3$	70
Figura 26 – Resultado da análise FFT de $\Omega_{3,1}^3$ e $\Omega_{3,5}^3$, quando $g = 3$ e $Re = 2.8$ para $s = 0.6$ e $s = 0.8$	71
Figura 27 – Dependência de $f_{g,j}^g(s, Re)$ com relação a Re quando $g = 3$ para $s = 0.6$ e $s = 0.8$	72
Figura 28 – Influência da densidade do disco (ρ^D) sobre a fase transiente do círculo $D_{1,1}$ para $g = 2$, $s = 0.7$ e $v = 0.5$ m/s	73
Figura 29 – Influência de ρ^D sobre a fase transiente do disco $D_{2,1}$	74
Figura 30 – Modelo de uma cadeia linear.	76
Figura 31 – Construção da RA a partir do EA	77
Figura 32 – Rede apoloniana com $g = 1$	78
Figura 33 – Modelos simplificados para aplicação da técnica de MT: (a) cadeia linear com dois sítios e (b) cadeia com três sítios na forma triangular.	80
Figura 34 – Rede apoloniana com quatro sítios.	83
Figura 35 – Comportamento da energia e entropia em função da temperatura para as gerações $g = 5, 7, 10, 12, 14$ e 15	94
Figura 36 – Comportamento do calor específico c em função da temperatura T para diferentes valores de g para $\alpha = 0.5$ e $\alpha = 0.8$	95
Figura 37 – Comportamento de $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ em função da temperatura para $g = 5, 7, 10, 12, 14$ e 15 , com $\alpha = 0.5$ e 0.87	95
Figura 38 – Comportamento de T_d em função da geração para diferentes valores de α	97
Figura 40 – Histogramas do $\log(R_i + R_j)$, $\log(J_{ij})$ e $\log(R_i)$	99
Figura 41 – Distribuição do $\log(R_i)$ e ajustes pela distribuição Gaussiana e Lorentziana.	100
Figura 42 – Configuração de Descartes.	115
Figura 43 – Empacotamento Apoloniano com curvaturas iniciais $(0,0,1,1)$	116
Figura 44 – Empacotamento Apoloniano com curvaturas iniciais $(-1,2,2,3)$	117
Figura 45 – Modelo de cadeia linear com três sítios com condição de contorno periódica.	119

Lista de tabelas

Tabela 1 – Método <i>Spring-Based Smoothing</i>	49
Tabela 2 – Método <i>Local Cell Remeshing</i>	50
Tabela 3 – Lista dos métodos utilizados no ANSYS FLUENT.	55
Tabela 4 – Configurações possíveis dos quatro sítios que formam a RA com $g = 2$	85
Tabela 5 – Valores da temperatura em que a variável $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ diverge numericamente para diferentes valores de α . Representamos esta temperatura de divergência por T_d	96

Lista de símbolos

ϕ	Porosidade
ρ^D	Densidade dos discos
τ	Passo de tempo de integração
\vec{v}	Velocidade local de filtro
A_s	Área total de superfície intersticial dos poros
g	Geração do empacotamento Apoloniano
k	Permeabilidade
Q	Vazão ou taxa de escoamento
R_h	Raio hidráulico
S	Área de superfície específica em termos da unidade de massa do material poroso
S_0	Área de superfície específica em termos do volume de sólidos da amostra porosa
S_v	Área de superfície específica
T	Tortuosidade do meio poroso
v	Velocidade média de filtro
V_s	Volume de sólidos da amostra porosa
V_T	Volume total do meio poroso

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Motivação	15
1.2	Organização da tese	17
2	FLUIDOS EM MEIOS POROSOS	19
2.1	Fluidos	19
2.1.1	Hipótese do <i>Continuum</i>	21
2.1.2	Representações de Euler e de Lagrange	21
2.1.3	Formas de descrever o escoamento	22
2.1.4	Equação da Continuidade	23
2.1.5	Conservação do <i>Momentum</i> Linear	26
2.1.6	Classificação de escoamentos	31
2.2	Meios Porosos	32
2.2.1	Porosidade	33
2.2.2	Superfície específica	34
2.2.3	Permeabilidade	35
2.2.4	Modelo de Raio Hidráulico ou Modelo de Kozeny-Carman	39
2.3	Empacotamento Apoloniano como meio poroso	43
2.4	Metodologia de Solução	46
2.4.1	Malha Dinâmica	46
2.4.2	Método <i>Spring-Based Smoothing</i>	47
2.4.3	Método <i>Local Cell Remeshing</i>	49
2.4.4	O <i>Solver 6DOF</i>	51
2.4.5	Construção da malha e Implementação do 6DOF	52
3	RESULTADOS E DISCUSSÕES: EMPACOTAMENTO APOLONIANO	56
3.1	Propriedades Gerais do Escoamento	56
3.1.1	Resistência Hidráulica	56
3.1.2	Ajuste Kozeny-Carman (KC)	64
3.2	Dinâmica rotativa do empacotamento	66
3.2.1	Padrão da velocidade angular	66
3.2.2	Densidade dos discos e resposta transiente	72
4	SISTEMAS MAGNÉTICOS	75
4.1	Modelo de Ising	75

4.2	Modelos de Ising em rede apoloniana	76
4.3	Modelo com interações dependentes das distâncias entre os sítios .	79
4.3.1	Técnica de matrizes de transferência na rede apoloniana	80
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES: REDE APOLONIANA	93
5.1	Propriedades termodinâmicas	93
5.2	Propriedades geométricas do modelo	98
6	CONCLUSÕES	101
6.1	Empacotamento Apoloniano como meio poroso não homogêneo e não estacionário	101
6.2	Modelo de Ising com interações dependentes da distância entre os nós da rede apoloniana	102
	Referências	105
	 APÊNDICES	 113
	APÊNDICE A – EMPACOTAMENTO APOLONIANO E OS TEO- REMAS DE DESCARTES	114
	APÊNDICE B – MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA	118

1 Introdução

1.1 Motivação

Um meio poroso pode ser definido como um material sólido que contenha em seu interior espaços vazios, denominados de poros [1–4]. A partir desta definição, diversos materiais podem ser classificados como meios porosos, tais como, tecidos, filtros, madeira, pulmão humano, ossos, rochas sedimentares, entre outros. Várias são as aplicações que envolvem meios porosos e muitas delas estão presentes no nosso cotidiano, por exemplo, o ato de coar um café envolve o escoamento de um fluido (a água) por um meio poroso (café + filtro). Talvez para um consumidor comum, coar um café seja uma tarefa simples e que não envolve nenhuma tecnologia. No entanto, o simples fato de mudar o filtro de papel para um de pano, já irá provocar uma mudança no sabor que, com certeza, um barista saberá fazer a distinção, pois os poros do coador de pano são mais abertos que os do filtro de papel e, conseqüentemente, o café coado em um filtro de pano será mais encorpado. Dentre as diversas aplicações que os meios porosos estão presentes pode-se citar a recuperação de gás e petróleo; migração de contaminantes e fertilizantes em solos; lixiviação de minerais; preparação de catalisadores e materiais cerâmicos; processos de separação com catalisadores, membranas, filtros; preparação de cimentos e concretos [1–4].

As diversas aplicações que envolvem escoamento de fluidos em meios porosos vêm motivando ao longo de décadas pesquisadores de diferentes campos da ciência e engenharia. No entanto, a complexa natureza da geometria e topologia do espaço poroso real dificulta o entendimento e a modelagem de fenômenos físicos. Por exemplo, na indústria de petróleo o conhecimento das equações de movimento na escala de poros é de fundamental importância para uma melhor compreensão de propriedades do escoamento, mas as soluções não são obtidas de maneira trivial, pois, na maioria dos casos, as equações de movimento formam um conjunto de equações diferenciais parciais não lineares e acopladas (ver Seção 2.1). Já no caso da investigação do comportamento da adsorção de fluidos em meios porosos, a interconexão da rede de poros de vários tamanhos e formas gera uma complexa distribuição na absorção de energia. Este é o caso da sílica gel e o carvão ativado que são dois adsorventes importantes [5]. Para contornar esta limitação, abordagens fenomenológicas usam modelos teóricos na representação da matriz porosa, mas que descrevem características físicas observadas em meios reais. Como pode ser observado para meios porosos granulares em duas ou três dimensões, onde os modelos mais utilizados consistem de um aglomerado de partículas ou grãos, com forma fixa ou aleatória, distribuídos de maneira regular ou randomicamente no espaço onde o escoamento será observado [6, 7].

Um modelo que vem sendo utilizado [8–13] e que é adequado para representar

um meio poroso formado pela mistura de partículas de vários tamanhos é baseado no empacotamento Apoloniano (EA). Este empacotamento foi originalmente proposto pelo matemático Apolônio de Perga (262-190 a.C.), quando ele tentava determinar o empacotamento ótimo, isto é, aquele com o menor número de círculos (em 2D) ou esferas (em 3D) para ocupar uma região finita ao espaço (ver Apêndice A) e sua solução consta no tratado *Tangências* [14–16]. O EA pode também ser encontrado na literatura [17] na forma das redes apolonianas (RA), onde os nós da rede são definidos pelas posições dos centros dos círculos do EA, e as arestas são desenhadas entre qualquer par de círculos tangentes. As aplicações do EA (ou RA) não estão restritas à modelagem de meios porosos. A rede pode representar, por exemplo, as conexões de cidades densamente localizadas nas quais interessa saber o fluxo de veículos ou o suprimento de energia [17]. Neste trabalho o EA será utilizado em duas aplicações: na simulação de um escoamento de fluido em um meio poroso em que os grãos, como consequência das forças de arrasto, poderão girar em torno dos seus centros e como modelo de um material magnético.

Na primeira parte do trabalho nós retomamos e estendemos as investigações anteriores [11, 18] em que consideramos o comportamento de um fluido escoando em um canal com obstáculos, onde a localização específica de cada obstáculo foi definida por meio do EA. Agora, o meio poroso ainda será modelado pelo EA, mas os discos poderão girar em torno dos seus centros como uma consequência das forças de arrasto exercidas pelo escoamento do fluido. Este efeito, que pode ser tratado adequadamente em pacotes de dinâmica de fluidos computacional¹ (DFC), representa um avanço na modelagem de meios porosos granulares. De fato, ele aborda possíveis mudanças nas propriedades do escoamento e do meio poroso quando a matriz porosa é submetida a ação de um fluido escoando nos seus canais intersticiais. Sabe-se que o escoamento através de meios porosos deformáveis é um importante e bem documentado problema da exploração de petróleo. Estudos de laboratório e campo indicam que, durante quase toda a operação de campo, os fluidos (por exemplo, a água e outros produtos químicos) que são injetados para a recuperação de petróleo aperfieçoada interagem com os minerais da rocha e podem alterar ou danificar propriedades da rocha, principalmente a permeabilidade [20]. Sendo assim, embora no modelo não seja permitido aos obstáculos o deslocamento ao longo do canal, os resultados que serão discutidos podem ser considerados como um primeiro passo para o tratamento de um meio completamente deformável, o qual requer a adição de graus de liberdade de rotação e translação para os obstáculos.

Já na segunda parte, um modelo magnético será aplicado sobre a RA. A aplicação de modelos magnéticos sobre redes complexas tem sido muito importante para a compreensão do comportamento de muitos sistemas, como de redes sociais, econômicas e de comunicação [21]. Estudos teóricos também têm mostrado que é possível estender métodos de física

¹ Em inglês, computational fluid dynamics (CFD) [19].

estatística do equilíbrio para investigar o comportamento da adsorção de fluidos em meios porosos desordenados [5]. Além disso, desde que P. G. de Gennes [22, 23] propôs que uma mistura binária de dois líquidos confinada em um meio microporoso aleatório pode se comportar de maneira análoga ao modelo de Ising em um campo aleatório, um considerável esforço experimental e teórico tem sido dedicado para estudar o comportamento de transição de fase em tais sistemas [24–26]. Por exemplo, o modelo de Ising [27–29] e o modelo de Potts de q estados [30] têm sido aplicados em redes aleatórias que modelam o vidro Vycor ou aerogel [5]. No caso da rede apoloniana, um dos primeiros trabalhos a estudar modelos magnéticos sobre ela foi publicado em 2005 pelos autores da referência [17] e desde então muitos pesquisadores passaram a investigar outros modelos físicos sobre a RA, dentre os quais podemos citar [21, 31–40]. Apesar dos esforços de todos estes pesquisadores, nenhum dos sistemas magnéticos definidos sobre a RA apresentou uma temperatura de transição de fase. Como uma nova proposta, neste trabalho vamos considerar o modelo de Ising com spins $\sigma \pm 1$ alocados em cada sítio da rede apoloniana com uma constante de troca $J_{i,j}$ dependente da distância de separação entre os nós da rede (ver Eq. 4.11 na página 79). Esta alteração constitui uma proposta com maior ligação com o mundo físico pois, apesar da rede apoloniana ser muito importante para o estudo de empacotamento granulares e redes de força [10], os modelos adotados até o momento não levaram em consideração o tamanho dos grãos ou a distância de separação dos vizinhos.

1.2 Organização da tese

Os demais capítulos desta tese são organizados como segue.

No Capítulo 2 apresentamos um resumo da teoria de escoamento em meios porosos. É fornecida uma descrição de meios porosos, bem como suas propriedades geométricas e formas de medição. São apresentados os tipos de escoamentos e suas equações, assim como a Lei de Darcy e os conceitos de alguns parâmetros macroscópicos da estrutura porosa. O problema a ser resolvido é apresentado através de sua descrição matemática, geométrica e física. São expostas também as ferramentas computacionais utilizadas nesta tese para solução do problema, desde a geração de domínios e malhas, até a discretização por volumes finitos e a solução iterativa das equações discretizadas.

No Capítulo 3 são apresentados os resultados obtidos para a primeira parte dos estudos deste trabalho. Como estratégia organizacional, os resultados serão apresentados e discutidos em duas seções: propriedades gerais do escoamento e dinâmica rotativa do empacotamento.

No Capítulo 4 apresentamos uma breve teoria sobre o modelo de Ising, e aplicações do modelo de Ising na rede apoloniana. O problema do modelo de Ising com interações dependentes dos nós da RA é apresentado, assim como o método MT para resolução do

problema.

No Capítulo 5 apresentamos e discutimos os resultados para o modelo magnético adotado.

As conclusões são apresentadas no Capítulo 6. Optamos em organizar este capítulo em duas seções para uma melhor compreensão do leitor.

Para complementar a teoria apresentada nos Capítulos 2 e 4, adicionamos dois apêndices. No Apêndice A, o método de construção do empacotamento Apoloniano é detalhado. No Apêndice B a técnica de matrizes de transferência é aplicada em uma rede homogênea.

2 Fluidos em meios porosos

No estudo de escoamento de fluidos em meios porosos procura-se entender o processo de interação fluido e meio poroso. Portanto, um conhecimento prévio sobre estes dois constituintes faz-se necessário. Com este objetivo, nesta seção vamos fazer um breve resumo de fluidos, meios porosos e também da dinâmica de fluidos computacional.

2.1 Fluidos

Fluidos são substâncias que não tem forma própria e se estiverem em repouso deformam-se continuamente sob a ação de forças tangenciais [4, 41, 42]. Em contraste a esta definição, temos a dos sólidos, os quais podem resistir a forças desta natureza. Para ilustrar esta diferença, consideremos um material entre duas placas paralelas de tal forma que as paredes do material estejam unidas às placas. Se uma força F é aplicada na placa superior (como mostrado na Fig. 1), esta exercerá um esforço cisalhante sobre o material. A experiência mostra que se o material entre as placas for substituído por um bloco sólido (sólido de Hooke) ele terá sua forma modificada (caracterizada por um ângulo $\Delta\theta$) de tal forma que a força por unidade área $\tau = F/A$ (esforço cisalhante ou tensão de cisalhamento) será proporcional ao deslocamento ΔL e inversamente proporcional a distância entre as placas H [42].

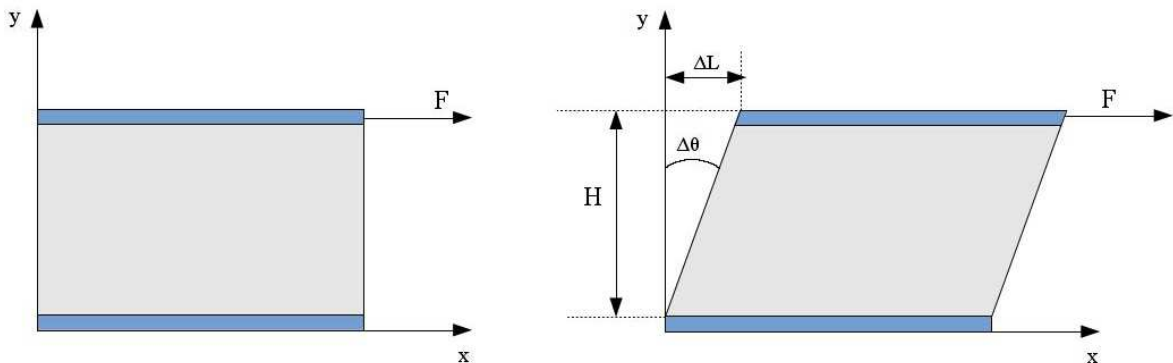


Figura 1 – Esforço cisalhante entre duas placas paralelas.

Da Fig. 1 temos:

$$\Delta L = H \tan(\Delta\theta)$$

Para pequenas deformações teremos $\tan(\Delta\theta) \approx \Delta\theta$. Sendo assim

$$\tau = G\Delta\theta \quad (\Delta\theta \ll 1), \quad (2.1)$$

onde G é o módulo de elasticidade. Quando uma substância obedece à Eq. (2.1) ela é denominada de sólido de Hooke.

Por outro lado, se o material entre as placas for substituído por um fluido, o deslocamento irá aumentar continuamente no tempo com a aplicação da força tangencial constante. Com efeito, não será possível obter um valor fixo para o ângulo de deformação $\Delta\theta$ e, conseqüentemente, não haverá uma relação direta entre a deformação e a força tangencial. Experiências mostram que para muitos fluidos (por exemplo água, ar e óleo) a tensão de cisalhamento é proporcional à taxa de mudança do deslocamento [41, 42], isto é, a velocidade da deformação, ou seja

$$\tau \propto \frac{\Delta\theta}{\Delta t}. \quad (2.2)$$

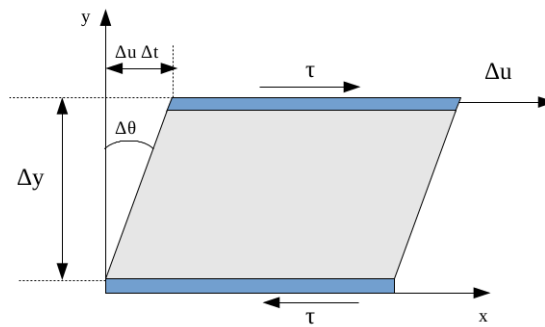


Figura 2 – Tensão de cisalhamento em um fluido.

Imaginemos que a placa superior desloca-se com uma velocidade Δu e em um certo intervalo de tempo Δt tiramos uma fotografia como mostra a Fig. 2. Desta figura vemos que

$$\tan \Delta\theta = \frac{\Delta u \Delta t}{\Delta y}. \quad (2.3)$$

No limite de variações infinitesimais temos

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{du}{dy}. \quad (2.4)$$

Aplicando esta relação na Eq. (2.2) e incluindo uma constante de proporcionalidade μ , denominada de coeficiente de viscosidade dinâmica, obtemos

$$\tau = \mu \frac{d\theta}{dt} = \mu \frac{du}{dy}. \quad (2.5)$$

No S. I. a unidade de medida para μ é o kg/m.s. Costuma-se classificar os fluidos que obedecem à relação linear da Eq. (2.5) como *fluidos newtonianos* e os que não a obedecem como *não newtonianos* [41, 42]. Uma condição de contorno que frequentemente é utilizada na análise do escoamento é considerar que a velocidade u seja zero em relação à parede. Esta condição é chamada de condição antiderrapante¹ e é característica de todos os escoamentos de fluido viscoso [41].

¹ Em inglês *no-slip condition*.

2.1.1 Hipótese do *Continuum*

Sabe-se que fluidos são agregados de moléculas largamente espaçadas para um gás e pouco espaçadas para um líquido [41]. No entanto, na definição de fluidos dada acima não nos preocupamos em mencionar a estrutura molecular dos mesmos. Isto aconteceu, pois na escala em que os fluidos estão sendo estudados há interesse apenas nas manifestações médias mensuráveis de várias moléculas (por exemplo, densidade, pressão e temperatura) e os efeitos individuais das moléculas não irão provocar flutuações significativas nos valores médios. Sendo assim, consideramos o fluido como uma substância que pode ser dividida infinitamente, ou melhor, uma porção de matéria denominada de *continuum*, no lugar do conjunto discreto de moléculas. Mas esta hipótese tem validade restrita, pois os efeitos moleculares tornam-se importantes sempre que a distância média entre as colisões das moléculas (aproximadamente $1,6 \times 10^{-7}$ m para o ar nas CNTP) torna-se da mesma ordem de grandeza que a menor dimensão relevante característica do problema. Por exemplo, a densidade ρ de um fluido é melhor definida por

$$\rho = \lim_{\Delta V \rightarrow \Delta V^*} \frac{\Delta m}{\Delta V}. \quad (2.6)$$

O volume limite ΔV^* é em torno de 10^{-9} mm³ para todos os líquidos e gases sob pressão atmosférica [41].

2.1.2 Representações de Euler e de Lagrange

Com a hipótese do *continuum* é possível descrever o escoamento do fluido em termos do movimento de elementos de fluidos em lugar do movimento individual de suas moléculas [43]. O estudo do escoamento destes elementos de fluido na mecânica dos fluidos pode ser feito por dois métodos de descrição distintos. O primeiro, chamado de descrição de Lagrange, consiste em monitorar individualmente o movimento dos elementos de fluido e determinar como as propriedades do fluido associadas a estes elementos mudam em função do tempo. Pode-se, por exemplo, especificar um determinado elemento de fluido por suas coordenadas x_0, y_0, z_0 , em um instante inicial $t = t_0$, e descrever o movimento do fluido por meio das funções $x(x_0, y_0, z_0, t)$, $y(x_0, y_0, z_0, t)$, $z(x_0, y_0, z_0, t)$ que determinam as coordenadas x, y, z no tempo t do elemento de fluido que estava em x_0, y_0, z_0 no instante t_0 [44].

No segundo método, denominado de descrição de Euler, abandona-se a ideia de monitorar individualmente cada elemento de fluido, para observar as propriedades do fluido em cada ponto no espaço e em cada instante de tempo, ou seja, utiliza o conceito de campo. Neste método, as informações sobre o escoamento são obtidas em termos do que acontece em pontos fixos do espaço quando o fluido que está escoando passa por eles.

Para contrastar estes dois métodos de análise, consideremos o seguintes exemplos. Em uma certa avenida de Salvador pretende-se monitorar os pontos de lentidão. Para este

fim, coloca-se em vários pontos desta avenida sensores de velocidade. Ao longo do dia diferentes veículos passarão por esta avenida, mas as únicas informações que interessam ao pesquisador são as velocidades médias como função do tempo e da posição. Sendo assim, a abordagem utilizada pelo pesquisador para estudar o fluxo nada mais é que a descrição de Euler. Por outro lado, se um helicóptero estiver em uma perseguição policial a um fugitivo pilotando uma moto, pouco importa para o piloto da aeronave saber a velocidade dos demais veículos na avenida, neste caso a informação mais importante é a trajetória seguida pelo fugitivo, e sendo assim, o método de descrição será o de Lagrange.

2.1.3 Formas de descrever o escoamento

No exemplo anterior da descrição de Euler, as informações obtidas pelo pesquisador foram velocidades médias como função do tempo e da posição, ou seja, o campo de velocidades $\vec{V}(x, y, t)$. Em mecânica dos fluidos, o campo de velocidades é uma das variáveis mais importantes do escoamento, pois outras propriedades podem ser obtidas diretamente deste campo (o campo de pressão, por exemplo). Geralmente a velocidade é uma função vetorial da posição e do tempo e suas três componentes u , v e w são campos escalares:

$$\vec{V}(x, y, z, t) = u(x, y, z, t)\hat{i} + v(x, y, z, t)\hat{j} + w(x, y, z, t)\hat{k}. \quad (2.7)$$

Uma vez que o método de descrição de Euler foca a atenção em um ponto no espaço ao invés do elemento de fluido, e as leis da mecânica são aplicadas a elementos de fluido, ou seja, são formuladas para partículas (ou sistemas) distinguíveis. A taxa de variação temporal da velocidade do elemento de fluido com respeito a um **ponto fixo** do espaço é obtida pela derivada parcial com relação ao respectivo tempo ($\partial\vec{V}/\partial t$). A taxa com a qual a velocidade do elemento de fluido muda com respeito a um **ponto móvel** ao longo do escoamento é obtida pela derivada total. Assim, a aceleração para um elemento de fluido é dada por:

$$\vec{a} = \frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{du}{dt}\hat{i} + \frac{dv}{dt}\hat{j} + \frac{dw}{dt}\hat{k}. \quad (2.8)$$

Mas (u, v, w) são também funções de (x, y, z, t) . Assim:

$$\frac{du(x, y, z, t)}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{dz}{dt}. \quad (2.9)$$

Por definição, $u = dx/dt$, $v = dy/dt$, $w = dz/dt$. Logo

$$\frac{du(x, y, z, t)}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z}. \quad (2.10)$$

Como

$$\vec{V} \cdot \vec{\nabla} = (u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{k} \right) = u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.11)$$

Temos

$$\frac{du(x, y, z, t)}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla})u . \quad (2.12)$$

Para as outras componentes temos expressões similares, de modo que

$$\vec{a} = \frac{d\vec{V}}{dt} = \left[\frac{\partial u}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla})u \right] \hat{i} + \left[\frac{\partial v}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla})v \right] \hat{j} + \left[\frac{\partial w}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla})w \right] \hat{k} \quad (2.13)$$

$$= \frac{\partial(u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k})}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla})(u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}) \quad (2.14)$$

$$= \frac{\partial\vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla})\vec{V} \quad (2.15)$$

$$= \frac{\partial\vec{V}}{\partial t} + \left(u \frac{\partial\vec{V}}{\partial x} + v \frac{\partial\vec{V}}{\partial y} + w \frac{\partial\vec{V}}{\partial z} \right) . \quad (2.16)$$

O termo $\partial\vec{V}/\partial t$ é chamado de aceleração local, e se anula quando o escoamento é estacionário. Os três termos dentro do parêntese são chamados de aceleração convectiva. Eles surgem quando a partícula move-se por regiões em que a velocidade varia espacialmente [41].

A derivada temporal total $d()/dt$ é algumas vezes chamada de derivada substantiva ou material [41, 43] e o seu conceito pode ser aplicado a qualquer variável macroscópica ϕ do fluido, por exemplo, a densidade ρ . Para diferenciar do símbolo de derivada ordinária, costuma-se representar a derivada substantiva por $D()/Dt$ (Vale salientar que matematicamente elas têm o mesmo significado!). Assim, no caso geral teremos:

$$\frac{D\vec{\phi}}{Dt} = \frac{\partial\vec{\phi}}{\partial t} + \left(u \frac{\partial\vec{\phi}}{\partial x} + v \frac{\partial\vec{\phi}}{\partial y} + w \frac{\partial\vec{\phi}}{\partial z} \right) = \frac{\partial\vec{\phi}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla})\vec{\phi} \quad (2.17)$$

2.1.4 Equação da Continuidade

A equação da continuidade representa uma expressão matemática da lei da física de conservação da massa, ou seja, a matéria não é criada nem destruída. Em outras palavras, na ausência de fontes ou sorvedouros, toda a massa que entra em um sistema deve sair e/ou se acumular no sistema [44, 45]. Para encontrar esta expressão, consideremos um fluido escoando entre duas placas planas com área de seção reta igual a A . Utilizando o método de descrição de Euler escolheremos uma pequena região, que denominaremos de volume de controle (VC), através da qual o fluido poderá escoar (indicado na Fig. 3). Vale lembrar que na descrição Euleriana, permanecemos estacionários e observamos o comportamento do fluido em uma posição fixa [43]. Consideremos que o fluido tenha densidade ρ e move-se com velocidade $\vec{V} = u\hat{i} + v\hat{j}$ entre as duas placas planas.

Vamos supor que este volume de controle tenha dimensões pequenas o suficiente para que seja possível escrever as propriedades macroscópicas (como velocidade e pressão, por exemplo) nas suas fronteiras como função dos respectivos valores definidos no seu centro. Como não há fontes nem sorvedouros no interior do volume, do princípio de

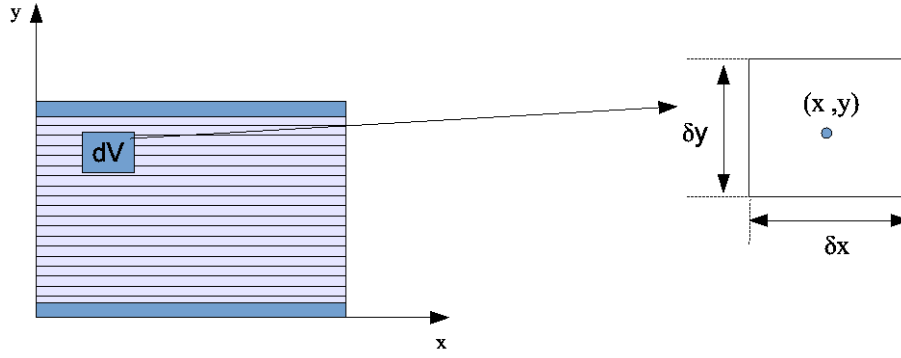


Figura 3 – Volume de controle utilizado para o desenvolvimento da equação da continuidade.

conservação da massa podemos afirmar que:

$$\left(\begin{array}{c} \text{taxa de variação} \\ \text{temporal de massa no VC} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{taxa de entrada de} \\ \text{massa no VC} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{taxa de saída de} \\ \text{massa no VC} \end{array} \right) \quad (2.18)$$

A massa total contida no elemento é $\rho(\delta x)(\delta y)$, portanto a variação temporal da quantidade de massa no elemento é

$$\left(\begin{array}{c} \text{taxa de variação} \\ \text{temporal de massa no VC} \end{array} \right) = \frac{\partial \rho}{\partial t}(\delta x)(\delta y) . \quad (2.19)$$

Consideremos ρu e ρv os fluxos de massa (ou vazões mássicas) nas direções x e y no centro do elemento. Vamos obter a quantidade de massa que escoar nas faces esquerda e direita, ambas a uma distância $\delta x/2$ do centro pela expansão em série de Taylor em torno do ponto central. Para a face da esquerda temos:

$$f\left(x - \frac{\delta x}{2}\right) = f(x) - \frac{\delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(\delta x/2)^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + O(\delta x/2)^3 . \quad (2.20)$$

Uma vez que o elemento de volume é muito pequeno, utilizaremos apenas os dois primeiros termos da expansão. Assim a vazão mássica para a face esquerda é:

$$\rho u|_{x-(\delta x/2)} = \left[\rho u - \frac{\delta x}{2} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \right] \delta y. \quad (2.21)$$

Analogamente, para a face direita:

$$\rho u|_{x+(\delta x/2)} = \left[\rho u + \frac{\delta x}{2} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \right] \delta y. \quad (2.22)$$

Fazendo esta mesma análise para as faces inferior e superior, as seguintes expressões são obtidas:

$$\rho v|_{y-(\delta y/2)} = \left[\rho v - \frac{\delta y}{2} \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right] \delta x \quad (2.23)$$

$$\rho u|_{y+(\delta y/2)} = \left[\rho u - \frac{\delta y}{2} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \right] \delta x \quad (2.24)$$

Assim os termos do lado direito da equação 2.18 são:

$$\left(\begin{array}{c} \text{taxa de entrada de} \\ \text{massa no VC} \end{array} \right) = [\rho u|_{x-(\delta x/2)}] + [\rho u|_{y-(\delta y/2)}] \quad (2.25)$$

e

$$\left(\begin{array}{c} \text{taxa de saída de} \\ \text{massa no VC} \end{array} \right) = [\rho u|_{x+(\delta x/2)}] + [\rho u|_{y+(\delta y/2)}] . \quad (2.26)$$

Substituindo esses valores na equação 2.18 temos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} (\delta x)(\delta y) = -\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} (\delta x)(\delta y) - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} (\delta x)(\delta y) \quad (2.27)$$

Reorganizando os termos obtemos a equação diferencial da equação da conservação da massa (frequentemente denominada de equação da continuidade) para um volume de controle infinitesimal:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 . \quad (2.28)$$

Podemos estender a análise feita até aqui para o caso tridimensional, para isto vamos considerar um volume de controle com forma cúbica, como o mostrado na Fig. 4. Em três dimensões, a taxa de aumento de massa no volume de controle é dada por (ver Eq. 2.19):

$$\frac{\partial(\rho \delta x \delta y \delta z)}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \delta x \delta y \delta z . \quad (2.29)$$

E a taxa de massa que atravessa uma face do elemento é obtida pelo produto da densidade do fluido, área da face e componente da velocidade normal à face. Considerando que o fluido move-se com velocidade $\vec{V} = u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}$, teremos, a partir da Eq. 2.18, a equação da continuidade para caso tridimensional:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 . \quad (2.30)$$

A equação da continuidade pode ser expressa de forma compacta utilizando o operador $\vec{\nabla}$, pois

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) . \quad (2.31)$$

Sendo assim:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) = 0 . \quad (2.32)$$

A Eq. 2.33(ou 2.28) expressa na forma vetorial da Eq. 2.32 tem um caráter mais geral, pois independe do sistema de coordenadas adotado.

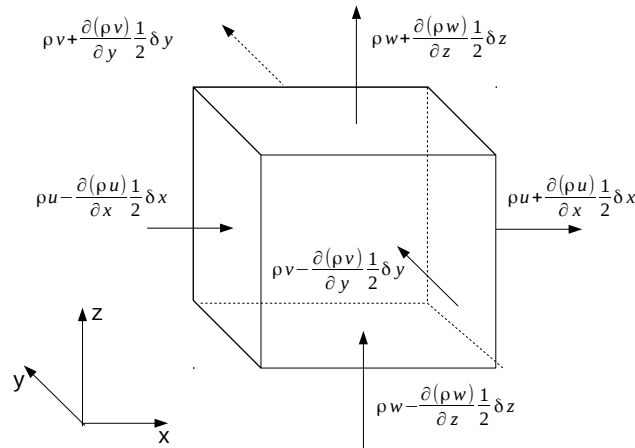


Figura 4 – Volume de controle tridimensional utilizado para o desenvolvimento da equação da continuidade.

Neste trabalho estudaremos o escoamento de um fluido com densidade constante. Sendo assim, podemos simplificar a Eq. 2.32 e trabalhar com a seguinte expressão:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 . \quad (2.33)$$

Portanto, esta será a equação da continuidade para o caso em estudo.

2.1.5 Conservação do *Momentum* Linear

Para o desenvolvimento da equação da continuidade, utilizamos o princípio físico de conservação da massa. Agora, para desenvolver a equação diferencial da quantidade de movimento linear que modela o escoamento do fluido, vamos utilizar o princípio de conservação do *momentum* linear (ou 2ª Lei de Newton) que pode ser matematicamente expresso por:

$$\sum \vec{F} = \frac{D\vec{P}}{Dt} . \quad (2.34)$$

Utilizamos a notação da derivada substantiva, para evidenciar que estamos acompanhado o movimento de uma partícula de fluido em relação a um referencial inercial. Portanto a abordagem de sistema será mais adequada para desenvolver a equação diferencial da quantidade de movimento linear. Para modelar o escoamento, vamos utilizar o mesmo elemento de fluido da Fig. 3, mas agora ele desloca-se com o fluido, como mostrado na Fig. 5.

Para este elemento de fluido teremos

$$\delta \vec{F} = \frac{D(\delta m \vec{V})}{Dt} = \delta m \frac{D\vec{V}}{Dt} , \quad (2.35)$$

onde $\delta \vec{F}$ é a resultante das forças que atua no volume de controle e δm a massa contida em seu interior, que permanece constante, no mesmo. As forças que agem sobre o elemento

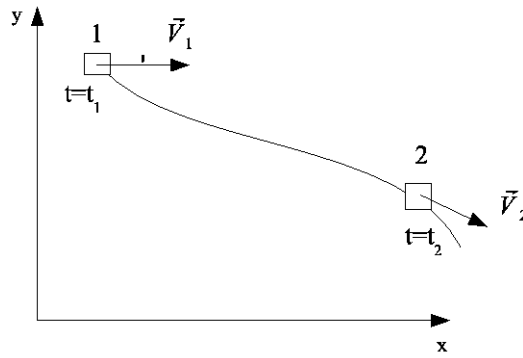


Figura 5 – Volume de controle utilizado para o desenvolvimento da equação do *momentum* linear.

de fluido são de dois tipos: forças de superfície (por exemplo, forças de pressão e forças viscosas) e as forças de campo (força gravitacional, eletromagnética e em referenciais não inerciais força de Coriolis e centrífuga). É uma prática comum incluir os efeitos das forças de campo como termos auxiliares (fontes) nas equações de *momentum* [19, 41, 45–47]. Para um volume de controle tridimensional, se denotarmos a força de campo por unidade de massa que atua sobre o elemento de fluido por \vec{f} . Considerando o volume do elemento ($dx dy dz$), então a força sobre o elemento de fluido será: $\rho \vec{f}(dx dy dz)$. Por exemplo, se o efeito da força gravitacional é importante para o escoamento, então $\vec{f} = \vec{g}$, sendo \vec{g} o vetor aceleração gravitacional [45].

As forças superficiais que atuam no elemento são resultado da interação do elemento com o meio [43]. Para estudar as forças de superfície, consideremos a face superior do elemento de volume, com área δA na qual está atuando uma força de superfície $\delta \vec{F}_s$ como indicado na Fig. 6. A força $\delta \vec{F}_s$ pode ser decomposta nas componentes δF_n , normal a área δA , e δF_1 e δF_2 paralelas ao plano considerado.

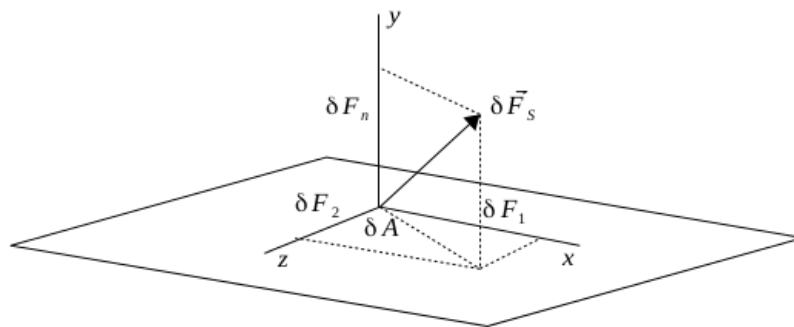


Figura 6 – Superfície arbitrária de um volume de controle.

Define-se a tensão normal, σ_{yy} , e as tensões de cisalhamento, τ_{yx} e τ_{yz} , por

$$\sigma_{yy} = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta F_n}{\delta A}, \quad \tau_{yx} = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta F_1}{\delta A} \quad \text{e} \quad \tau_{yz} = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta F_2}{\delta A}. \quad (2.36)$$

O índice duplo utilizado para identificar as tensões τ_{de} denota uma tensão na direção do eixo e sobre um plano perpendicular ao eixo d . Assim, a tensão τ_{yx} indica uma componente do tensor de cisalhamento, que atua em um plano perpendicular ao eixo y (plano xz) na direção do eixo x . A tensão normal σ_{nn} tem índice repetido pois a direção da normal ao plano sobre a qual a tensão atua é a própria direção da tensão, ou seja, são colineares. Uma vez que o fluido está em movimento, a tensão normal σ_{nn} será composta pela soma da pressão hidrostática p com a componente da tensão viscosa, τ_{nn} , que atua perpendicularmente em cada face do volume de controle. Sendo assim, teremos:

$$\sigma_{nn} = -p + \tau_{nn} . \quad (2.37)$$

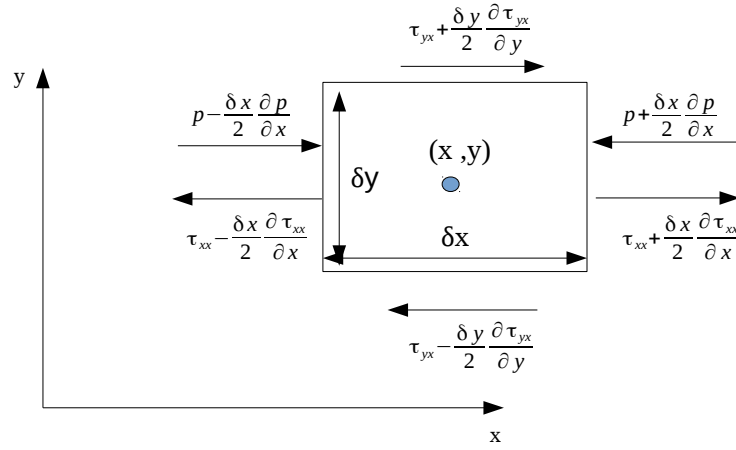


Figura 7 – Tensões normais e tangenciais na direção x sobre o elemento de fluido bidimensional.

Por simplicidade, consideremos um elemento de fluido bidimensional com área $(\delta x)(\delta y)$, como mostrado na Fig 7. Nós podemos exprimir as forças superficiais que atuam nesse elemento em função das tensões que atuam em cada face. Vamos expressar as forças que atuam nas várias faces do elemento em função das tensões que atuam no seu centro e dos gradientes das tensões nas direções do sistema de coordenadas, pois, normalmente, as tensões que atuam no fluido variam de ponto a ponto do campo do escoamento [43]. Novamente, considera-se o elemento de fluido pequeno o suficiente de forma que os campos de pressão, p , e tensão, τ , variam suavemente e seus valores nas faces podem ser obtidos utilizando expansão em série de Taylor em torno do ponto central. Vamos utilizar a seguinte convenção de sinal: as tensões serão positivas quando apontarem no sentido positivo dos eixos coordenados. Aplicando essa convenção de sinal e pela Eq. 2.20, as forças que atuam nas faces do elemento de fluido na direção do eixo x são dadas por:

$$\text{Face esquerda} = \left[\left(p - \frac{1}{2} \frac{\partial p}{\partial x} \delta x \right) - \left(\tau_{xx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \delta x \right) \right] \delta y \quad (2.38)$$

$$\text{Face direita} = \left[- \left(p + \frac{1}{2} \frac{\partial p}{\partial x} \delta x \right) + \left(\tau_{xx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \delta x \right) \right] \delta y \quad (2.39)$$

$$\text{Face superior} = \left(\tau_{yx} + \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \delta y \right) \delta x \quad (2.40)$$

$$\text{Face inferior} = - \left(\tau_{yx} - \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \delta y \right) \delta x \quad (2.41)$$

Assim a força de superfície resultante na direção do eixo x , considerando o limite $\delta x, \delta y \rightarrow 0$, é:

$$F_{sx} = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \right) dx dy + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dx dy . \quad (2.42)$$

Podemos agora voltar para a Eq. 2.35 e escrever suas componentes. Considerando $\vec{V} = u\hat{i} + v\hat{j}$, a componente da Eq. 2.35 na direção do eixo x é:

$$\rho dx dy \frac{Du}{Dt} = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \right) dx dy + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dx dy + \rho f_x dx dy . \quad (2.43)$$

Dividindo ambos os lados por $(dx dy)$ teremos:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \right) + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \rho f_x . \quad (2.44)$$

A Eq. 2.44 descreve a conservação do *momentum* linear na direção do eixo x . Para obter a equação da conservação do *momentum* linear na direção do eixo y , consideremos as tensões normais e tangenciais na direção y , como mostrado na Fig. 8. Após manipulações algébricas, análogas ao caso anterior, a seguinte equação é obtida:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \rho f_y . \quad (2.45)$$

As equações 2.44 e 2.45 estão na forma não-conservativa², e são chamadas de *equações de Navier-Stokes*. Os resultados numéricos costumam ser melhores quando as equações estão escritas na sua forma conservativa. É possível obter as equações de Navier-Stokes na forma conservativa utilizando a definição de derivada substantiva em conjunto com equação da continuidade, após algumas manipulações algébricas, as seguintes equações são obtidas³:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho u \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \rho f_x , \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho v \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \rho f_y . \quad (2.47)$$

² As equações diferenciais parciais (EDP) expressas na forma conservativa, apresentam os coeficientes das derivadas constantes ou, se variáveis, suas derivadas não aparecem na EDP. [45].

³ Para maiores detalhes o leitor poderá consultar as referências [19, 45–47].

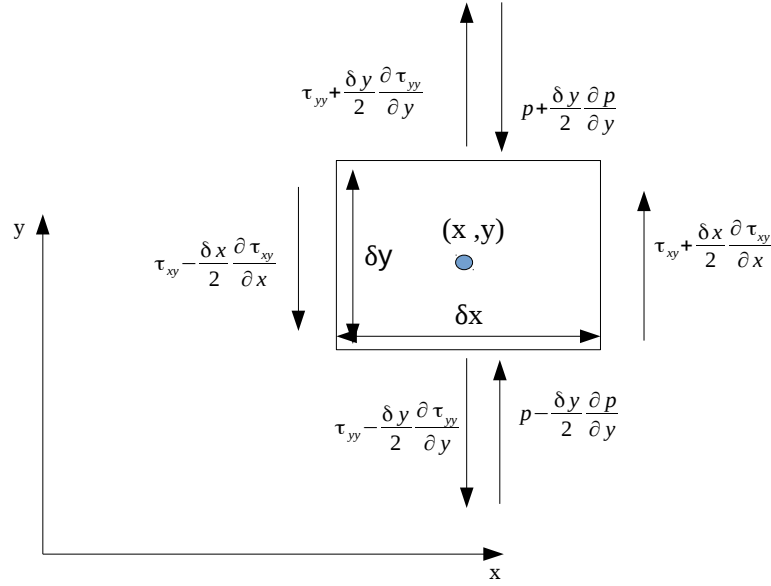


Figura 8 – Tensões normais e tangenciais na direção y sobre o elemento de fluido bidimensional.

Como visto anteriormente, em um fluido newtoniano as tensões viscosas são proporcionais à taxa de deformação. As componentes da lei de Newton para viscosidade, obtidas em 1845 por Stokes, são [19, 45–47]:

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda(\vec{\nabla} \cdot \vec{V}), \quad \tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (2.48)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica, que relaciona a tensão com a deformação linear. O coeficiente λ é chamado de segundo termo de viscosidade, ele relaciona a tensão com a deformação volumétrica. Stokes fez a hipótese que

$$\lambda = \frac{2}{3}\mu. \quad (2.49)$$

Apesar de frequentemente usada e ser uma boa aproximação para gases, a hipótese de Stokes ainda não foi verificada experimentalmente [19, 45–47]. Substituindo as Eq. 2.48 nas equações 2.46 e 2.47 as seguintes expressões são obtidas:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho u \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda(\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \rho f_x \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho v \vec{V}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda(\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \rho f_y \quad (2.51)$$

Toda análise feita até aqui para o caso bidimensional pode ser estendida para o caso tridimensional. Podemos, por exemplo, considerar um elemento de fluido de forma

cúbica, como mostrado na Fig. 9. Diferentemente do caso bidimensional, aqui as tensões sobre as faces do cubo devem ser multiplicadas pela área da face. Após algumas manipulações algébricas, as seguintes equações são obtidas para as componentes da equação da conservação do *momentum* linear na direção do eixo x , y e z :

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \right) + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x. \quad (2.52)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y. \quad (2.53)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \left(-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \rho f_z. \quad (2.54)$$

Para maiores detalhes o leitor poderá consultar a referência [19, p.15].

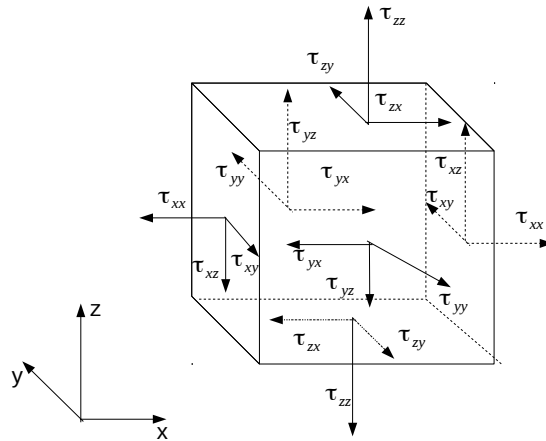


Figura 9 – Tensões normais e tangenciais sobre um elemento de fluido tridimensional.

2.1.6 Classificação de escoamentos

Vários são os critérios utilizados para classificar os diferentes tipos de escoamentos de fluidos. Considera-se, por exemplo, escoamentos *estacionários* ou *permanentes* aqueles cujas grandezas como velocidade e pressão não variam com o tempo. Caso contrário, eles são ditos *transientes* ou *não permanentes*.

Em 1883, o físico britânico Osborne Reynolds verificou experimentalmente a existência de dois tipos de escoamentos, que ele classificou como laminar e turbulento. O escoamento laminar ocorre quando camadas muito finas, ou lâminas, de fluido parecem escorregar umas sobre as outras havendo somente troca de quantidade de movimento molecular. Quando as partículas de fluido individuais apresentam um movimento desordenado,

isto é, a velocidade apresenta componentes transversais ao movimento geral do conjunto ao fluido, o escoamento é considerado turbulento [4, 41, 43, 45].

A classificação se o escoamento é laminar ou turbulento e sua posição relativa numa escala de turbulência é indicada por um parâmetro adimensional, denominado de *número de Reynolds* (Re). Este parâmetro é definido como a razão das forças inerciais (F_i) (devido à velocidade) pelas forças viscosas (F_μ), matematicamente expresso por:

$$Re = \frac{\sum F_i}{\sum F_\mu} = \frac{\rho LV}{\mu} \quad (2.55)$$

onde ρ é a densidade e μ a viscosidade do fluido. L e V são comprimentos e velocidades características do escoamento, e dependem do problema em estudo. Para dutos circulares de diâmetro D , temos:

$$Re = \frac{\rho V D}{\mu} . \quad (2.56)$$

Com o número de Reynolds é possível avaliar o papel das forças inerciais ($Re > 1$) e das forças viscosas ($Re < 1$) no escoamento. Verifica-se que para valores de $Re \gg 1$, as regiões de influência das forças viscosas serão aquelas adjacentes às superfícies sólidas, pois ao redor da superfície de corpos imersos em fluidos em movimento, surge uma fina região, denominada de camada limite, na qual o gradiente de velocidade normal à superfície do corpo ($\frac{\partial v}{\partial n}$) é significativo [4, 41, 43, 45]. Escoamentos abaixo de um valor crítico Re_c são laminares e acima desse valor os escoamentos tornam-se turbulentos. Para um escoamento permanente em um tubo circular, convencionou-se $Re_c = 2000$ [45] e para um canal bidimensional $Re_c = 5772$ [48].

2.2 Meios Porosos

Por meio poroso entende-se um material sólido que contenha no seu interior espaços vazios denominados de poros. Estes poros, frequentemente estão preenchidos por algum tipo de fluido, tal como ar, óleo, água, etc., ou uma mistura de diferentes fluidos [3]. São exemplos de meios porosos a areia de praia, rochas porosas como pedra calcária e pedra-pomes, agregados fibrosos como tecidos e filtros, madeira e pulmão humano. Em materiais onde os poros estão interligados, o meio poroso é denominado de permeável, ou seja, é permitido ao fluido escoar através do material saturando o meio. No caso mais simples, escoamento de fase⁴ única (ou monofásico), os espaços vazios estão saturados por um único fluido, como exemplo podemos citar os reservatórios de água e de petróleo⁵.

⁴ Por fase subentende-se uma porção quimicamente homogênea do sistema delimitada por uma interface de espessura infinitesimal que a separa de outras porções [2]. O escoamento de água em ebulição é considerado um escoamento de duas fases, ou bifásico.

⁵ Estamos considerando reservatórios de petróleo constituídos de duas fases miscíveis, por exemplo, óleo e gás sob pressão.

Uma outra característica que difere os meios porosos é quanto a estabilidade da sua matriz sólida. Eles podem ser classificados em *consolidados* (a configuração dos poros é mantida com uma certa rigidez - ossos e pedra-pomes) e *não consolidados* (esponja e areia). No caso de rochas reservatório de petróleo, dependendo da constituição dos seus grãos (podem variar de areia muito solta e não consolidada até materiais duros e densos como arenitos, calcário ou dolomita) e do tipo de material que os mantém juntos (denominado de cimento, sendo os mais comuns: sílica, calcite e argila) podem ser modeladas tanto como rochas consolidadas ou não consolidadas [49, 50].

Todas as propriedades macroscópicas dos meios porosos são influenciadas, em maior ou menor grau, pela estrutura porosa [3]. Como um meio poroso natural é constituído de muitos poros, busca-se parâmetros macroscópicos da estrutura porosa que representem o comportamento médio de uma certa amostra. Estes parâmetros devem ser completamente determinados pela estrutura porosa do meio e não depender de nenhuma outra propriedade [3]. Dentro destas exigências, os parâmetros macroscópicos mais relevantes são a *porosidade* (ϕ - medida do espaço vazio) e a *permeabilidade* (k - medida da capacidade do meio de permitir o escoamento). Estes dois parâmetros são tão importantes que a busca de informações sobre eles é anterior ao de questões acerca dos tipos/quantidades de fluidos e estimativas de recuperação [20]. Além da porosidade e permeabilidade, outro parâmetro que merece destaque é a *área de superfície específica* (S_v - Eq. 2.62).

2.2.1 Porosidade

Define-se *porosidade* (ϕ) de um material poroso como a fração do volume total da amostra que não está ocupada por qualquer estrutura sólida deste material, ou seja o volume ocupado pelos poros [3, 20, 49]. Sendo uma amostra porosa com volume total V_T e um volume de poro V_P , a porosidade será determinada matematicamente pela seguinte relação:

$$\phi = \frac{V_P}{V_T} . \quad (2.57)$$

Durante o processo de formação da matriz porosa, pode acontecer de muitos poros ficarem interconectados enquanto alguns espaços vazios ficarem completamente isolados⁶. Para dar conta destas particularidades define-se dois tipos de porosidade: porosidade absoluta (ϕ_a) e porosidade efetiva (ϕ_e).

A porosidade absoluta é definida por

$$\phi_a = \frac{\text{volume total de poros}}{V_T} . \quad (2.58)$$

⁶ Por exemplo, no processo de formação de uma rocha, os sedimentos que são depositados ao longo de eras geológicas formam espaços vazios que, devido a excessiva cementação, podem ficar isolados de outros espaços vazios [49].

Considerando o volume de sólido (V_S) da amostra porosa, podemos reescrever a porosidade absoluta por:

$$\phi_a = \frac{V_T - V_S}{V_T} = 1 - \frac{V_S}{V_T}. \quad (2.59)$$

A porosidade efetiva é a porcentagem de poros interconectados em relação ao volume total da amostra porosa, ou seja

$$\phi_e = \frac{\text{volume de poros interconectados}}{V_T}. \quad (2.60)$$

A porosidade desempenha um papel muito importante na indústria do petróleo, pois ela determina a capacidade de armazenamento de um reservatório de petróleo e gás. No entanto, a porosidade absoluta não costuma ser considerada, uma vez que a rocha reservatório pode ter considerável porosidade absoluta e ainda assim não permitir a condução do fluido. Sendo assim, em todos os cálculos de recuperação de petróleo utiliza-se o valor da porosidade efetiva do reservatório, pois ela representa os poros interconectados que contém os fluidos recuperáveis [49]. Porém, no modelo de meio poroso adotado neste trabalho não teremos poros isolados. Desta forma, optamos em trabalhar apenas com a porosidade absoluta. Deste ponto em diante a porosidade absoluta ϕ_a será chamada apenas de porosidade e representada pela letra grega ϕ .

Devido à grande importância da porosidade para a indústria, diversos métodos experimentais vêm sendo desenvolvidos ao longo dos anos para determinar a porosidade de um material poroso, particularmente de rochas. Podemos citar a intrusão de mercúrio, expansão a gás, análise de imagens digitais, transmissão de raios gama e microtomografia de raios X. O leitor interessado em obter maiores detalhes sobre estes métodos encontrará boas informações na referência [3].

2.2.2 Superfície específica

A razão da área total de superfície intersticial dos poros (A_s) pelo volume total do meio poroso (V_T) é definida como *área de superfície específica* (S_v) do material [2, 3], ou seja,

$$S_v = \frac{A_s}{V_T}. \quad (2.61)$$

A superfície específica tem um papel importante em uma variedade de aplicações em meios porosos. Ela é a medida da capacidade de adsorção de vários adsorventes industriais; desempenha um papel importante na determinação da efetividade de catalisadores, coluna de troca iônica e filtros; também está relacionada com a condutividade de fluidos ou permeabilidade de meios porosos [3].

Pode-se expressar a área de superfície específica em termos do volume de sólidos da amostra (V_s) e costuma-se representá-la por S_0 [3]. Utilizando a Eq. 2.59, a seguinte

relação entre S_v e S_0 é obtida:

$$S_v = \frac{A_s}{V_T} = \frac{A_s(1 - \phi)}{V_s} = (1 - \phi)S_0 \quad (2.62)$$

ou,

$$S_0 = \frac{A_s}{(1 - \phi)V_T}. \quad (2.63)$$

Para um meio poroso modelado por grãos uniformes com forma esférica e raio r , a estimativa para a superfície específica pode ser obtida como segue [2]:

$$S_0 = \frac{4\pi r^2}{\frac{4}{3}\pi r^3} = \frac{3}{r} = \frac{6}{d}, \quad (2.64)$$

onde d é o diâmetro da esfera.

É possível também definir uma área de superfície específica S , em relação a uma unidade de massa do material:

$$S = \frac{A_s}{\text{unidade de massa do material poroso}}. \quad (2.65)$$

Para o arenito S é encontrado no intervalo $0.5 - 5.0 \text{ m}^2/\text{g}$, enquanto que para o xisto pode ser encontrada em torno de $100 \text{ m}^2/\text{g}$ [2].

Assim como ocorre com a porosidade, a superfície específica também não é uma grandeza que pode ser determinada experimentalmente em um ponto [51]. Existem vários métodos na literatura para estimar a superfície específica de uma material poroso. As três maiores técnicas são [3]: (a) métodos de absorção: medida da absorção de componentes químicos específicos e gases (por exemplo, o nitrogênio com método de BET⁷); (b) métodos estatísticos como estereologia [53], óticos e análise por ressonância magnética nuclear (NMR); (c) métodos baseados em escoamento de fluidos: a superfície específica é obtida a partir da permeabilidade e porosidade aplicando a equação de Kozeny-Carman [54] (ver próxima seção). Para maiores detalhes sobre estes métodos, o leitor poderá consultar as referências [2, 3].

2.2.3 Permeabilidade

A capacidade da matriz porosa de permitir o escoamento de fluidos pelos seus poros interconectados é denominada de *permeabilidade* (k). A permeabilidade é uma propriedade muito importante, pois controla a direção do movimento e a vazão dos fluidos no interior do material [49]. Esta grandeza foi definida matematicamente pela primeira vez em 1856

⁷ "Denominação dada à isoterma ou equação destinada ao estudo do fenômeno de adsorção de gases à superfície de sólidos, em camadas multimoleculares. A sigla BET é composta pelas iniciais de seus autores, Brunauer, Emmett e Teller" [52, p. 410].

por meio de um experimento realizado por Henry Darcy [49]. Basicamente, o experimento consistia em investigar o escoamento de água em um filtro de areia homogêneo colocado na vertical. Na Fig. 10 apresentamos esquematicamente o aparelho experimental utilizado por Darcy.

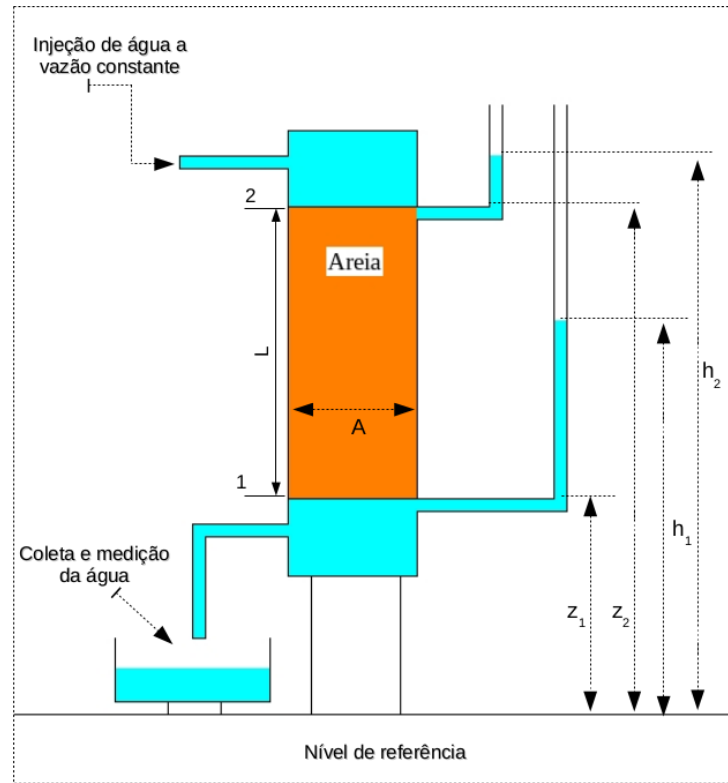


Figura 10 – Esquema do experimento de filtragem de Darcy.

A partir dos experimentos, Darcy determinou que a taxa de escoamento (Q), com unidades de $[L^3T^{-1}]$, da água através do filtro de areia com seção reta A e comprimento L poderia ser descrita pela equação:

$$Q = -KA \frac{(h_2 - h_1)}{L} \quad (2.66)$$

onde h_1 e h_2 representam as alturas da água em tubos piezométricos colocados na entrada e na saída (ver Fig. 10), respectivamente, do filtro de areia. O coeficiente K , com unidades $[LT^{-1}]$, é uma constante que depende das propriedades do fluido e do meio poroso.

Reescrevendo a Eq. 2.66 em termos da pressão teremos:

$$Q = -\frac{KA}{\rho g L} (p_2 - p_1 + \rho g L) \quad (2.67)$$

onde ρ é a densidade do fluido e g o módulo da aceleração da gravidade. Introduzindo uma nova constante $K' = K/\rho g$, com unidades $[L^3TM^{-1}]$, a seguinte equação é obtida:

$$Q = -K' A \left(\frac{p_2 - p_1 + \rho g L}{L} \right) . \quad (2.68)$$

Um vez que a constante K' depende das propriedades do meio e do fluido, a Eq. 2.68 tem validade restrita, pois não é possível, a partir desta equação, distinguir as influências do meio poroso com as do fluido. Na tentativa de dar um caráter mais geral a equação de Darcy, em 1930 P. G. Nutting propôs substituir a constante de proporcionalidade K' por k/μ , onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido (ou seja, propriedade do fluido) e k , com unidades $[L^2]$, uma propriedade que depende somente do material poroso, denominada de *permeabilidade específica* (neste trabalho chamaremos de *permeabilidade*) [2].

A unidade de medida da permeabilidade no S.I. é o m^2 , mas uma outra unidade que é largamente utilizada na engenharia de petróleo e geologia é o Darcy (D), que equivale a $0.987 \times 10^{-12} m^2$ ou $0.987 (\mu m)^2$ [2, 3, 55]. Como a permeabilidade de muitas rochas reservatório de petróleo apresentam permeabilidade menor do que 1 Darcy, na indústria de petróleo e gás costuma-se utilizar o milidarcy (mD) [20].

Substituindo K' por k/μ na Eq. 2.68 e definindo a *velocidade média de filtro* (v) como a vazão por unidade de seção reta na direção normal ao escoamento ($v = Q/A$), a seguinte relação é obtida:

$$v = -\frac{k}{\mu} \frac{(p_2 - p_1 + \rho g L)}{L} \quad (2.69)$$

A Eq. 2.69 pode ser escrita na forma diferencial. Para isto, consideramos o limite de $L \rightarrow 0$ e definimos um vetor $\vec{v} = (\delta Q/\delta A)\vec{n}$, de forma que [1]:

$$\vec{v} = -\frac{k}{\mu} (\vec{\nabla} p - \rho \vec{g}) , \quad (2.70)$$

onde \vec{g} é o vetor aceleração da gravidade, \vec{v} é denominado de *velocidade local de filtro* e $\vec{\nabla} p$ é o gradiente de pressão. O sinal negativo na Eq. 2.70 indica que a pressão decresce na direção do fluxo.

Para meios porosos anisotrópicos, a permeabilidade deixa de ser uma grandeza escalar e passa a ser uma grandeza tensorial [2]. Sendo assim, a lei de Darcy pode ser expressa de forma mais geral pela seguinte expressão:

$$\vec{v} = -\frac{1}{\mu} \mathbf{K} \cdot (\vec{\nabla} p - \rho \vec{g}) , \quad (2.71)$$

onde agora \mathbf{K} é, em geral, um tensor de segunda ordem.

A permeabilidade, k , na Eq. 2.70 é denominada de *permeabilidade absoluta* se o meio estiver 100% saturado com um único fluido (ou fase). Na presença de mais de uma fase (como em alguns reservatórios de petróleo que encontra-se óleo, gás e água), considera-se que o material poroso tem uma *permeabilidade efetiva* para cada fluido e esta será uma função do percentual de saturação (por exemplo, k_o , k_g e k_a para óleo, gás e água, respectivamente). Definindo a *permeabilidade relativa* (k_r) como a razão da permeabilidade efetiva para um fluido em particular com relação a uma permeabilidade absoluta de referência ou base da rocha. Por exemplo, $k_{ro} = k_o/k$, $k_{rg} = k_g/k$ e $k_{ra} = k_a/k$,

a permeabilidade relativa para o óleo, gás e água, respectivamente, onde a permeabilidade absoluta k , neste caso, pode ter sido obtida quando o meio estava 100% saturado com água [2, 20, 49, 56].

Neste trabalho os efeitos gravitacionais não são relevantes, pois considera-se um escoamento de uma única fase em um canal bidimensional, cujo comprimento é muito maior do que sua largura. Além disso, optou-se em trabalhar com a velocidade média de filtro (Eq. 2.69) em lugar da velocidade local de filtro (Eq. 2.70), pois as equações de movimento do fluido são resolvidas sem levar em consideração a validade da lei de Darcy. Sendo assim, a seguinte equação é utilizada no decorrer desta tese:

$$v = -\frac{k(p_2 - p_1)}{\mu L} = -\frac{k \Delta p}{\mu L} . \quad (2.72)$$

Validade da lei de Darcy

A lei de Darcy foi verificada experimentalmente por muitos autores [55]. No entanto, as seguintes condições necessitam existir durante a medida da permeabilidade: (a) escoamento viscoso laminar, (b) não existir reações químicas entre o fluido e a rocha e (c) um única fase presente na saturação de 100% do espaço poroso [49]. Fora destas condições, desvios começam a ser observados.

Um dos primeiros desvios ocorre com o aumento da velocidade local de filtro. Muitos autores observaram que a relação linear entre \vec{v} e $\vec{\nabla}p$ deixa de existir, conseqüentemente a lei de Darcy torna-se inválida neste regime [2]. Na Seção 2.1.6, foi visto que para escoamentos em tubulações, o número de Reynolds (Re) é o parâmetro utilizado para classificar se o escoamento será laminar ou turbulento. Por analogia, um número de Reynolds também pode ser definido para escoamento em meios porosos, para isso, o diâmetro D do duto circular na Eq. 2.56 é substituído por uma dimensão de comprimento, d , que representa os canais elementares da matriz porosa [2].

$$Re = \frac{\rho v d}{\mu} . \quad (2.73)$$

No entanto, devido à dificuldade de relacionar o parâmetro d com os canais do meio poroso, alguns autores consideram alguma dimensão representativa dos grãos no lugar de d . Contudo, apesar dos diferentes valores adotados para d , foi verificado que a lei de Darcy é válida para regimes de escoamento em que o número de Reynolds, definido pela Eq. 2.73, não exceda algum valor entre 1 e 10 [2]. Pela discussão da Seção 2.1.6, esta deve ser uma região de predominância das forças viscosas e o escoamento é laminar. No entanto, o autor da referência [2] adverte que é preciso tomar cuidado para não identificar os desvios da linearidade que ocorrem com o aumento deste número de Re , com a transição de escoamento laminar, para turbulento.

Neste trabalho, optou-se em trabalhar com o número Reynolds expresso pela Eq. 2.56, com o diâmetro D do duto substituído pela largura H do canal. A abordagem

adotada neste trabalho para estudar os desvios da permeabilidade se dará pelo uso do seguinte *ansatz*, sugerido pela referência [57]:

$$-\frac{\Delta P}{L} = \alpha \mu v + \beta H v^2 + \frac{\gamma \rho^2 v^3}{\mu}, \quad (2.74)$$

onde o coeficiente α corresponde ao inverso da permeabilidade do material poroso e os coeficientes β e γ podem ser interpretados, respectivamente, como correções de segunda e terceira ordem para dar conta da contribuição das forças inerciais ao escoamento. A Eq. 2.74 pode ser reescrita em termos do número de Reynolds. Para isto, defini-se a grandeza

$$G = -\frac{\Delta P H^2}{\mu V L}, \quad (2.75)$$

que pode ser interpretada como uma medida adimensional da resistência hidráulica. De forma que,

$$G = \alpha H^2 + \beta H Re + \gamma Re^2. \quad (2.76)$$

Em um regime do número de Reynolds suficientemente baixo a Eq. 2.74 é reduzida a lei de Darcy.

Determinação da permeabilidade

Sendo a permeabilidade uma propriedade que depende somente da matriz porosa, é razoável pensar que seja possível obtê-la em termos de parâmetros geométricos, pelo menos para geometrias simples. Neste sentido, um grande esforço tem sido realizado por diversos pesquisadores e várias expressões matemáticas são descritas na literatura relacionando k com propriedades da matriz porosa. Vários resultados são descritos detalhadamente nas referências [2, 3, 55, 56, 58]. Algumas destas fórmulas são puramente empíricas, outras são puramente teóricas, obtidas de derivações da lei de Darcy. Existe também um terceiro tipo de relações, denominadas de semiempíricas, que utilizam modelos teóricos para relacionar a permeabilidade com os parâmetros da matriz porosa, entretanto, coeficientes numéricos precisam ser determinados experimentalmente para cada tipo de meio poroso [2]. Os modelos teóricos mais conhecidos são: modelos de *tubos capilares*, de *fissuras*, de *raio hidráulico*, de *escoamento de resistência* e *estatísticos*. Provavelmente os modelos mais simples em que a lei de Darcy pode ser derivada são aqueles feitos de tubos capilares [2]. Devido a sua grande popularidade, abaixo faremos uma breve descrição do modelo sugerido por Kozeny-Carman que é baseado no modelo de raio hidráulico. O leitor encontrará maiores detalhes sobre este e outros modelos na referência [2, p.161].

2.2.4 Modelo de Raio Hidráulico ou Modelo de Kozeny-Carman

Uma das expressões matemáticas mais aceitas e populares para relacionar a permeabilidade com as propriedades do meio poroso foi derivada em 1927 pelo físico austríaco

Josef Kozeny [59] e modificada em 1937 [60] e novamente em 1956 [61] por Philip C. Carman [2, 62]. No modelo proposto por Kozeny, o meio poroso foi considerado como um agregado de tubos capilares paralelos de mesmo comprimento, com seção reta não necessariamente circular. As equações para o movimento e permeabilidade foram obtidas analiticamente por Kozeny aplicando as equações de Navier-Stokes, simultaneamente, para todos os canais que passavam por uma seção reta normal ao escoamento no meio poroso. As seguintes expressões foram obtidas [1, 2, p.125,p.166]:

$$v = - \left(\frac{c_0 \phi^3}{\mu S_v^2} \right) \Delta P; \quad k = \frac{c_0 \phi^3}{S_v^2} \quad (2.77)$$

onde c_0 é um coeficiente numérico chamado de *constante de Kozeny*; ela varia ligeiramente de acordo com a forma da geometria dos canais individuais no modelo ($c_0 = 0.5$ para um círculo, $c_0 = 0.562$ para um quadrado, $c_0 = 0.597$ para um triângulo equilátero e $c_0 = 0.667$ para uma tira [2]). A expressão para k em (2.77) é chamada de *equação de Kozeny*.

Vimos na Seção 2.2.2 (Eq. 2.62) que é possível relacionar a área de superfície específica, S_v , com a área de superfície específica por unidade de volume sólido S_0 . Sendo assim, combinando a Eq. 2.62 com a Eq. 2.77, a seguinte relação é obtida:

$$k = \frac{c_0}{S_0^2} \frac{\phi^3}{(1 - \phi)^2}. \quad (2.78)$$

Em 1937, Carman considerou a Eq. 2.78 com $c_0 = \frac{1}{5}$ pois, segundo ele, este era um valor próximo do teórico [2, 60]. Com essa substituição chega-se a *equação de Kozeny-Carman* [1, 2]:

$$k = \frac{1}{5 S_0^2} \frac{\phi^3}{(1 - \phi)^2}. \quad (2.79)$$

No entanto, Carman verificou que o valor para c_0 não era fixo e que os resultados experimentais eram melhores ajustados para c_0 no intervalo entre $\frac{1}{2}$ e $\frac{1}{6}$ [2].

A equação de Kozeny passou por diversas modificações desde a sua dedução em 1927, uma modificação importante consiste em considerar a sinuosidade dos poros, pois o comprimento médio do caminho que a partícula de fluido percorrerá será maior que o comprimento L da amostra porosa. Esta nova característica da matriz porosa será introduzida pelo *fator de tortuosidade* (ou apenas *tortuosidade*). Para entender melhor o efeito da sinuosidade, consideremos um único canal sinuoso, como mostrado na Figura 11. Observa-se que é possível medir o comprimento L na direção i , ou seja, do ponto 1 onde a pressão piezométrica é p_1 até o ponto 2 onde ela é p_2 . No entanto, a distância que as partículas de fluido precisam se mover para passar do ponto 1 ao ponto 2, não é tão simples de ser determinada diretamente. Designando este comprimento do trajeto por L_e , ele representará a distância efetiva do escoamento entre os pontos 1 e 2. No caso deste modelo simplificado, vemos claramente que $L_e > L$. Estendendo esta análise para o conjunto de tubos capilares, Kozeny considerou L_e como o comprimento médio dos

capilares. Em 1937, Carman sugeriu duas importantes consequências para o fato de L_e/L ser maior que 1 [2, 51]:

- O valor médio de $-\frac{\partial P}{\partial L_e}$ agindo sobre o fluido é

$$\frac{p_1 - p_2}{L_e}$$

ou

$$\frac{L}{L_e} \left(\frac{p_1 - p_2}{L} \right).$$

- A média da componente da velocidade na direção i , \bar{u}_i , é

$$\bar{u}_i = \frac{L}{L_e} \bar{u}_t,$$

onde \bar{u}_t é a média da velocidade tangencial no escoamento.

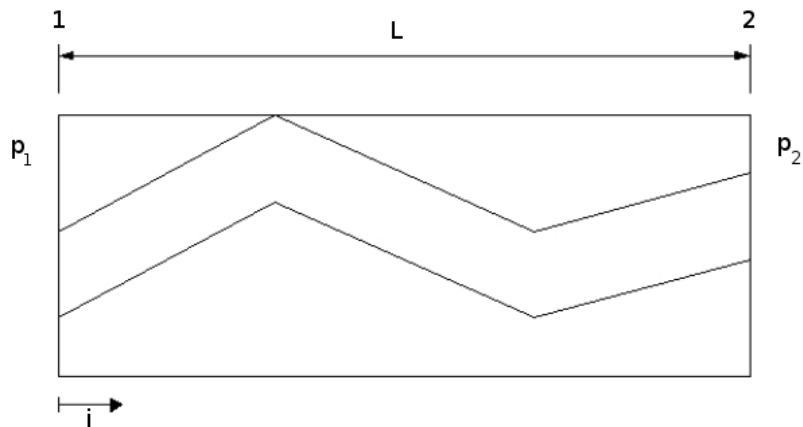


Figura 11 – Modelo de um canal sinuoso.

Sabe-se que a equação de Hagen-Poiseuille para uma tubulação cilíndrica de seção circular e raio R é expressa por [2]:

$$v = \frac{R^2}{8\mu} \frac{\Delta P}{L} \quad (2.80)$$

Se no lugar do raio R usarmos o raio hidráulico R_h , definido como a razão entre a área de seção reta e o perímetro molhado [41, 51, 63], teremos

$$R_h = \frac{\text{área de seção reta}}{\text{perímetro molhado}} = \frac{\pi R^2}{2\pi R} = \frac{R}{2}, \quad (2.81)$$

de forma que a Eq. 2.80 pode ser reescrita por

$$v = \frac{R_h^2}{2\mu} \frac{\Delta P}{L} \quad (2.82)$$

A equação de Hagen-Poiseuille expressa na forma da Eq.2.82 pode ser generalizada para tubos com seção não circular por [2, 51, 63]:

$$v = \frac{R_h^2 \Delta P}{\alpha \mu L_e} \quad (2.83)$$

onde α é um coeficiente numérico (*fator de forma*) utilizado para contabilizar a forma não circular do tubo. Para escoamento em tubos capilares de seção circular, $\alpha = 2$. Para escoamento entre duas placas paralelas, $\alpha = 3$ [63].

Considerando que somente seja conhecido, R_h para o tubo da Fig. 11 e os valores de p_1 e p_2 , aplicando a Eq. 2.83 em conjunto com as argumentações de Carman, a seguinte expressão para \bar{u}_t pode ser obtida:

$$\bar{u}_t = \frac{R_h^2}{\alpha \mu} \left(\frac{p_1 - p_2}{L_e} \right) \quad (2.84)$$

ou

$$\bar{u}_i = \frac{R_h^2}{\alpha \mu} \left(\frac{L}{L_e} \right)^2 \left(\frac{p_1 - p_2}{L} \right) = \frac{R_h^2}{\alpha \mu \left(\frac{L_e}{L} \right)^2} \left(\frac{p_1 - p_2}{L} \right) = \frac{R_h^2}{\alpha \mu T} \left(\frac{\Delta p}{L} \right), \quad (2.85)$$

onde $T = (L_e/L)^2$ é chamado de *tortuosidade do meio poroso* [1–3].

Uma outra definição dada para o raio hidráulico R_h é a razão do volume de poros do meio (V_p) sobre a área de superfície intersticial dos poros (ou superfície molhada - A_s). A combinação desta definição com a idealização do meio poroso como uma rede de canais interconectados e equações 2.57 e 2.61, conduz a seguinte relação entre R_h e a superfície específica S_v (ver subseção 2.2.2) [2, 63, p.165,p.265]:

$$R_h = \frac{\phi}{S_v}. \quad (2.86)$$

Considerando esta nova definição para R_h (Eq. 2.86) e assumindo que a velocidade intersticial u_i se relaciona com a velocidade média de filtro v (ver Eq. 2.69) pela aproximação de Dupuit-Forchheimer, $v = \bar{u}_i \phi$ [1–3], chega-se a seguinte relação:

$$v = \frac{\phi R_h^2}{\alpha \mu T} \left(\frac{\Delta p}{L} \right) = \frac{\phi^3}{\alpha \mu T S_v^2} \left(\frac{\Delta p}{L} \right) \quad (2.87)$$

Comparando a Eq. 2.87 com a lei de Darcy expressa pela Eq. 2.69, as seguintes formas modificadas das equações 2.77 e 2.79 são obtidas:

$$k = \frac{\phi^3}{\alpha T S_v^2} \quad \text{ou} \quad k = \frac{1}{\alpha T S_0^2} \frac{\phi^3}{(1 - \phi)^2}. \quad (2.88)$$

O fator combinado $k' = \alpha T$ é também, frequentemente, chamado de constante de Kozeny [3, 60, 61]. Carman (1937,1956) reporta que a substituição de $k' = \alpha T = 5$ na Eq 2.88 ajusta a maioria dos dados experimentais [3, 60, 61]. Devido à dificuldade para estimar

o valor do fator L_e/L , Carman (1956) relata que se $L_e/L = \sqrt{2}$, o fator de forma será $\alpha = 2.5$, o que ele mencionou ser plausível para seções de forma não circular [2, 61].

A equação de Kozeny-Carman pode ser preditiva em regime de alta porosidade, em materiais compostos por partículas bem distribuídas, tais como areias naturais e rochas sedimentares. Bons resultados também podem ser obtidos para meios porosos de alta porosidade, compostos por partículas com forma aproximadamente esférica e com pequena variação nos tamanhos dos diâmetros. Sua aplicação pode estender-se inclusive a alguns casos em que as partículas se encontrem pobremente distribuídas, como no caso de sedimentos, desde que seja adotada uma definição adequada para o comprimento característico (L_e). No entanto, nos casos em que as partículas desviam fortemente da forma esférica, o tamanho das partículas apresenta uma distribuição larga, e o meio poroso é consolidado, a equação de Kozeny-Carman começa a falhar e, portanto, deve sempre ser utilizada com cautela [3, 55]. O autor da referência [3] relata que vários testes foram realizados com a equação de Kozeny-Carman e que apesar do fator de forma α dos meios ficarem em torno de 2.0 e 3.0, como sugerido originalmente por Carman ([60, 61, 63]), os valores obtidos para k' foram muito maiores do que 5.0.

Apesar da baixa capacidade de predição da equação de Kozeny-Carman, ela é amplamente utilizada e muitas outras equações surgiram a partir de modificações dela. Das várias modificações encontradas na literatura pode-se citar os trabalhos [64–69]

2.3 Empacotamento Apoloniano como meio poroso

O modelo de meio poroso considerado neste trabalho consiste em um EA posicionado na região central de um canal linear bidimensional de largura H e comprimento $L = 32H$, formando uma espécie de tampão (ver Fig. 12 na página 44). O método de construção deste empacotamento já foi detalhado em trabalhos anteriores [11, 18]. Como nesta tese avançamos em áreas que não foram abordadas anteriormente, optamos em deixar a discussão mais detalhada do método de construção no Apêndice A.

Para posicionar o EA, considera-se um sistema de coordenadas fixo no meio do canal de tal forma que as coordenadas dos vértices do canal sejam $(\pm L/2, \pm H/2)$. Devido à geometria do EA ser baseada em círculos tangentes, em 2D o empacotamento bloqueará completamente o canal e não permitirá o fluxo do fluido, levando a uma condição de permeabilidade nula ($k = 0$). Sendo assim, para garantir o escoamento, canais entre os discos são abertos seguindo o mesmo procedimento do trabalho anterior [11, 18], onde os raios de todos os discos são reduzidos por um fator $s \leq 1$, de modo que $s = 1$ corresponda ao caso de discos tangentes. Na Fig. 12 são apresentadas três configurações de discos, cujo fator de redução dos raios, em todos os casos, foi $s = 0.9$. Para o estudo em questão, foram analisadas quatro configurações (ou gerações - g) de discos que, sob a ação das forças de

arrasto do fluido, poderão girar em torno dos seus respectivos centros. Eliminando o grau de liberdade de rotação, restaura-se as condições do trabalho [11].

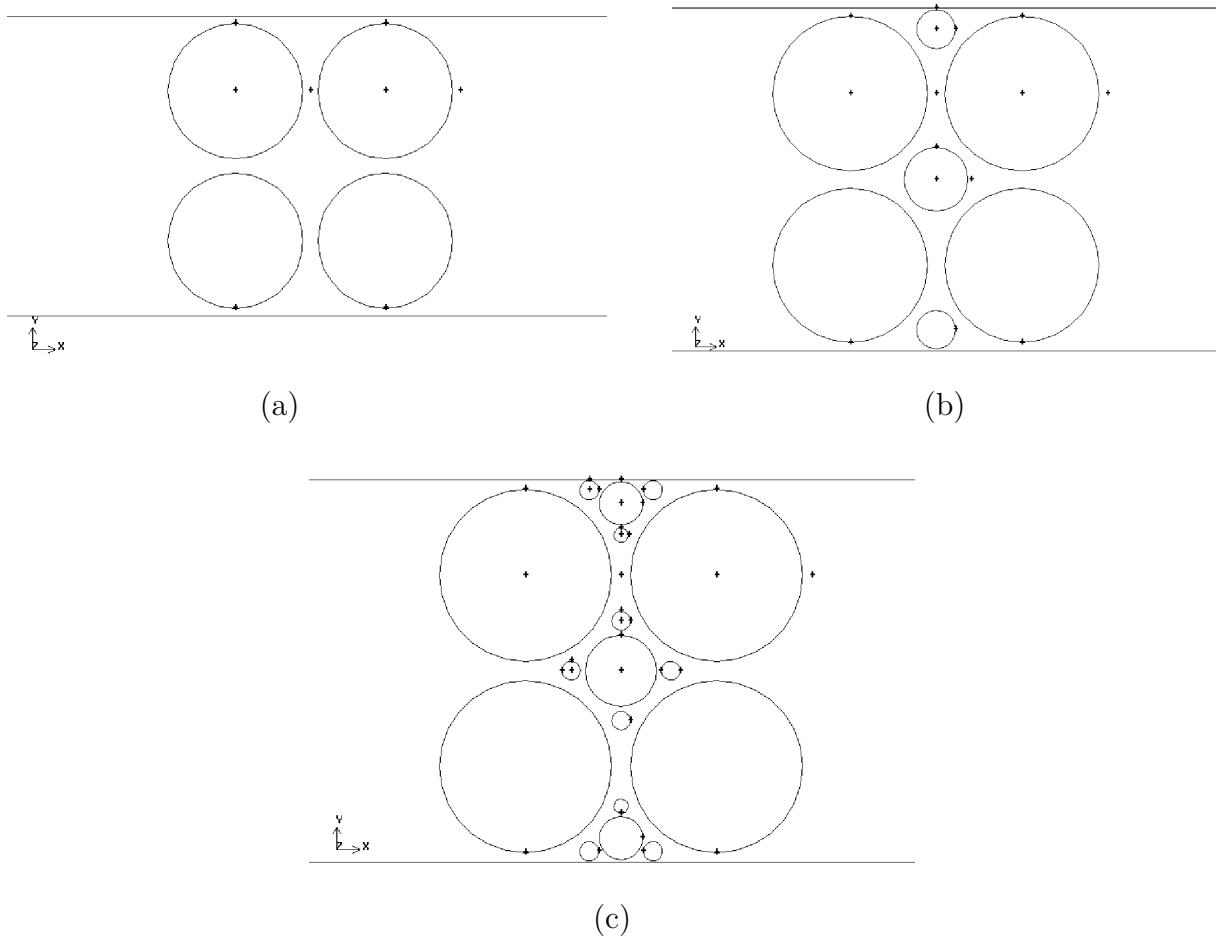


Figura 12 – Configurações iniciais do EA com fator de redução $s = 0.9$ para (a) $g = 1$, (b) $g = 2$ e (c) $g = 3$.

Para a adição do grau de liberdade de rotação faz-se necessário a identificação dos discos que compõem o empacotamento, o que é feito por um duplo subscrito (g, j) , onde g indica a geração na qual o disco foi introduzido no empacotamento e j identifica cada disco. A geração $g = 1$ do EA consiste de quatro discos de raio $r_{1,j} = H/4$, com centros nos pontos $c_{1,j}(x = \pm H/4, y = \pm H/4)$ (Fig. 12a). As paredes do canal podem ser consideradas como discos de raio infinito posicionados em $(0, \pm\infty)$. Assim, em $g = 2$, três novos discos são adicionados nas regiões limitadas pelos discos de $g = 1$: o primeiro está centrado na origem do sistema de coordenadas, enquanto os outros dois estão simetricamente posicionados entre os dois discos originais e a parede (Fig. 12b). Para $g > 2$, um novo disco tangente é adicionado em cada espaço livre limitado pelos três discos tangentes, incluindo os discos representados pelas paredes, como pode ser observado para $g = 3$ na Fig. 12c. O número total de discos para $g \in [1, 4]$ são: 4, 7, 17, 47. Em uma dada geração g , os discos são

primeiro ordenados de acordo com o valor crescente de suas curvaturas⁸. Para um conjunto de discos de mesma curvatura, j aumenta no sentido horário de acordo com as coordenadas dos centros dos discos $c_{g,j}(x_{g,j}, y_{g,j})$, iniciando no disco com maior $y_{g,j}$ e menor $x_{g,j}$. Sendo assim, os discos inseridos na primeira geração são identificados por $D_{1,1}$, $D_{1,2}$, $D_{1,3}$ e $D_{1,4}$, como pode ser observado na Fig. 13 (página 45). Em $g = 2$, o disco central apresenta a menor curvatura e ele será identificado por $D_{2,1}$, os outros dois discos apresentam a mesma curvatura, o posicionado próximo a parede superior é identificado por $D_{2,2}$ e o localizado da parte inferior por $D_{2,3}$.

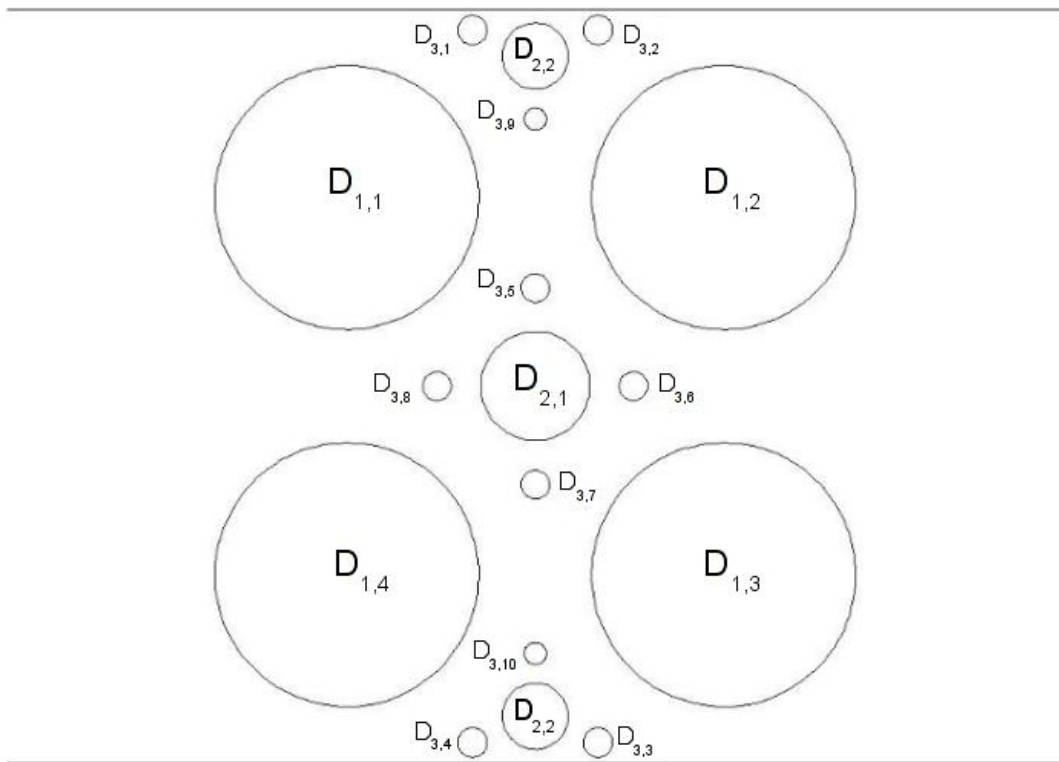


Figura 13 – Identificação dos discos que compõem o empacotamento. A configuração da figura corresponde a geração $g = 3$ com fator de redução $s = 0.7$.

Uma vez que os discos estão livres para girar, a condição de contorno estática fica limitada às paredes do canal. Isto requer integrar numericamente as equações do movimento na região porosa considerando o escoamento transiente, o que exige um maior esforço computacional quando comparado com a busca do estado estacionário no modelo de discos parados. Para um fluido newtoniano incompressível escoando em um regime não estacionário e isotérmico, as equações da continuidade (Eq. 2.32) e de Navier-Stokes (Eq. 2.50) se reduzem a:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (2.89)$$

⁸ A curvatura b_j é definida como o inverso do raio r_j , ou seja, $b_j = \frac{1}{r_j}$.

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \vec{u}, \quad (2.90)$$

com ρ sendo a densidade do fluido e μ a viscosidade dinâmica. Como de costume, a condição de não deslizamento (ver Seção 2.1) é imposta nas paredes do canal. No que diz respeito ao acoplamento entre o fluido e os discos girantes, assume-se que ele é descrito também por uma condição de não deslizamento do fluido sobre as fronteiras dos discos. Fisicamente isto corresponde a uma transferência instantânea de *momentum* do fluido para os obstáculos, sendo que a dissipação de energia cinética dos discos é descrita pelo coeficiente de viscosidade do fluido entre camadas adjacentes. Se a comparação é feita com um sistema de rolamentos ou engrenagens sob atrito estático, a condição de não deslizamento equivale a considerar um coeficiente de atrito infinito entre os rolamentos [6].

2.4 Metodologia de Solução

A simulação do escoamento do fluido no canal na presença do EA foi feita utilizando técnicas de DFC disponíveis no pacote computacional ANSYS FLUENT 12 [70]. Consideramos o fluido escoando da esquerda para direita devido a uma diferença de pressão ΔP_0 constante imposta entre a entrada e saída do canal. Como condições independentes do tempo, foram consideradas a pressão de saída constante e um perfil de velocidade de entrada uniforme $u_x(0, y) = V$, o qual usamos para definir o número de Reynolds do canal $Re = \rho V H / \mu$. No ambiente DFC, fixamos $\rho = 889 \text{ kg/m}^3$, $H = 4 \text{ m}$, $\mu = 636 \text{ kg/ms}$, de forma que $Re = 5.59V$ (onde V é medida em m/s). A solução das equações (2.89) e (2.90) para os campos de velocidades e pressão foram obtidas utilizando o ambiente de DFC em uma malha discretizada (Seção 2.4.5) obtida por meio de técnicas de volume finitos disponíveis no pacote computacional GAMBIT 2.4 [71]. Para levarmos em conta obstáculos não estáticos, empregamos o método de malha dinâmica (Seção 2.4.1) em conjunto com o *solver* 6DOF (Seção 2.4.4.).

Nas próximas seções, são apresentadas breves discussões dos métodos de solução que foram empregados nesta tese.

2.4.1 Malha Dinâmica

Neste trabalho estamos interessados em permitir que, devido às forças de arrasto do fluido, os discos girem em torno dos seus respectivos centros. Sendo assim, diferentemente do caso anterior [11], as fronteiras não serão mais fixas e conseqüentemente o domínio mudará com o tempo. Para dar conta do movimento dos discos precisamos conhecer em cada instante de tempo as forças que atuam sobre eles. E, a partir destes dados, calcular a velocidade angular (e linear quando for o caso). Uma vez feito isto, é preciso atualizar a malha no passo seguinte com estas novas informações. No aplicativo ANSYS FLUENT,

problemas como este podem ser tratados usando o modelo de malha dinâmica (*dynamic mesh model – DM*), para atualizar e modificar o domínio, em conjunto com o *solver six degree of freedom – 6DOF*, para obter o balanço das forças sobre os objetos que irão se comportar como corpos rígidos [70].

No ANSYS FLUENT existem três grupos de métodos disponíveis para atualizar a malha em regiões sujeitas a movimentos de suas fronteiras: *smoothing methods*, *dynamic layering* e *local remeshing methods* [70]. Dentro de cada um destes métodos existem submétodos. No entanto, como estas questões são demasiadamente técnicas e fogem ao escopo deste trabalho, discutiremos em detalhes somente os métodos que foram utilizados nas simulações analisadas, que são: *Spring-Based Smoothing Method* e *Local Cell Remeshing Methods*.

2.4.2 Método *Spring-Based Smoothing*

No método *Spring-Based Smoothing*, idealiza-se a aresta que liga quaisquer dois nós da malha como uma mola, formando assim uma rede de molas interconectadas [70, 72, 73]. Neste método, o comprimento de equilíbrio da mola é definido como o comprimento inicial da aresta antes de qualquer movimento das fronteiras. Com isso, qualquer mudança na posição de um nó da fronteira irá gerar uma força proporcional ao deslocamento ao longo de todas as molas ligadas a este nó, e uma nova posição de equilíbrio da rede de molas deverá ser encontrada. Considerando pequenas deformações das molas, a força sobre um nó i , devido às influências de todos os seus vizinhos, pode ser calculada usando a lei de Hooke

$$\vec{F}_i = \sum_j^{n_i} \vec{F}_{ij} = \sum_j^{n_i} k_{ij}(\Delta\vec{x}_j - \Delta\vec{x}_i), \quad (2.91)$$

onde $\Delta\vec{x}_i$ e $\Delta\vec{x}_j$ são os deslocamentos do nó i e de seu vizinho j , n_i é o número de nós vizinhos conectados ao nó i , e k_{ij} é a constante da mola entre o nó i e o seu vizinho j . Para a rede de molas voltar ao estado de equilíbrio após uma mudança de posição dos nós das fronteiras, a força resultante sobre cada nó deverá ser igual a zero, ou seja,

$$\sum_j^{n_i} k_{ij}(\Delta\vec{x}_j - \Delta\vec{x}_i) = 0. \quad (2.92)$$

O que nos leva a

$$\Delta\vec{x}_i = \frac{\sum_j^{n_i} k_{ij} \Delta\vec{x}_j}{\sum_j^{n_i} k_{ij}}.$$

Reescrevendo esta equação de maneira iterativa, temos

$$\Delta\vec{x}_i^{m+1} = \frac{\sum_j^{n_i} k_{ij} \Delta\vec{x}_j^m}{\sum_j^{n_i} k_{ij}} \quad (2.93)$$

onde m denota o número de iterações. No ANSYS FLUENT a Eq. 2.93 é resolvida iterativamente até que a seguinte relação tenha sido satisfeita,

$$\left(\frac{\Delta \vec{x}_{rms}^m}{\Delta \vec{x}_{rms}^1} \right) < \text{critério de convergência} \quad (2.94)$$

onde $\Delta \vec{x}_{rms}^1$ é o valor quadrático médio do deslocamento dos nós internos na primeira iteração. Aqui, o critério de convergência e o número de iterações são estipulados pelo usuário [70]. Uma vez que os deslocamentos dos nós da malha com relação às novas configurações das fronteiras são conhecidos, isto é, as novas posições dos nós das fronteiras terem sido atualizadas pelo *solver 6DOF*, e levando em conta as coordenadas dos nós do passo anterior, o sistema de equações obtido pela Eq. 2.93 é resolvido para todos os nós internos usando o método de Jacobi [70, 72, 73]. Após a convergência, as posições dos nós são atualizadas de tal forma que

$$\vec{x}_i^{n+1} = \vec{x}_i^n + \Delta \vec{x}_i^m \text{ convergido} \quad (2.95)$$

onde $n + 1$ e n são usados para indicar o próximo passo de tempo e o passo de tempo anterior, respectivamente. Maiores detalhes sobre este procedimento podem ser encontrados na referência [70].

De acordo com as referências [70, 72], as constantes de mola na Eq. 2.91 podem ser escritas por:

$$k_{ij} = \frac{k_{fac}}{\sqrt{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}}, \quad (2.96)$$

onde k_{fac} é um parâmetro para controlar a rigidez da mola, denominado no ANSYS FLUENT como *Spring Constant Factor*. O valor de k_{fac} pode ser ajustado pelo usuário com valores entre 0 e 1. Segundo o manual do aplicativo, um valor 0 indica que não há amortecimento sobre as molas idealizadas, de forma que os deslocamentos dos nós das fronteiras têm uma maior influência sobre os movimentos dos nós do interior. Por outro lado, um valor 1 (utilizado neste trabalho) representa o nível padrão de amortecimento e os deslocamentos dos nós do interior são determinados pela Eq. 2.93.

Um outro parâmetro que pode ser controlado pelo usuário é denominado de *Boundary Node Relaxation* (β), que é utilizado em modelos que contenham zonas de fronteiras sujeitas a deformação. Este parâmetro controla como as posições dos nós sobre as fronteiras são atualizadas. Para que as posições desses nós sejam atualizadas utiliza-se a seguinte expressão

$$\vec{x}_i^{n+1} = \vec{x}_i^n + \beta \Delta \vec{x}_i^m \text{ convergido} . \quad (2.97)$$

Um valor de $\beta = 0$ impede deformações dos nós da fronteira a partir do movimento (equivalente a desativar a suavização sobre as zonas de fronteiras deformantes) e um valor 1 indica que não há sub-relaxamento [70]. Como no modelo adotado na tese as fronteiras não se deformam, foi considerado $\beta = 1$ nas simulações realizadas.

Na tabela 1 resumimos os parâmetros que foram ajustados no ANSYS para o método *Spring-Based Smoothing* no estudo desta tese.

Tabela 1 – Método *Spring-Based Smoothing*

Parâmetro	Valor
<i>Spring Constant Factor</i> (k_{fac})	1
<i>Boundary Node Relaxation</i> (β)	1
<i>Convergency Tolerance</i>	0.001
<i>Number of Iterations</i>	20

É importante salientar que no ANSYS FLUENT a utilização do método *spring-based smoothing* é por padrão restrita a malhas com elementos triangulares ou tetraédricos pois, com outros tipos de elementos, as células resultantes poderão ter valores de assimetria elevados. Com efeito, nem todas as combinações de pares em células não triangulares (ou não tetraédricas em 3D) podem ser idealizadas como molas. Caso seja necessário utilizar este método para malhas com outros tipos de elementos, é possível desabilitar esta restrição. Porém, é importante que os seguintes critérios sejam considerados [70]:

- As fronteiras das zonas das células devem mover-se predominantemente em uma direção. Esta exigência garante que não exista excesso de estiramento anisotrópico ou compressão da zona da célula.
- O movimento deve ser predominantemente normal a zona fronteira.

2.4.3 Método *Local Cell Remeshing*

Quando o método *spring-based smoothing* é utilizado, os deslocamentos das fronteiras podem ser muito maiores do que o tamanho das células locais. Se isto ocorre, a qualidade das células pode ser comprometida ou as células podem ser corrompidas. Em situações como estas, a malha pode ser invalidada (por exemplo, resultar em células com volume negativo) e conseqüentemente, levar a problemas de convergência no passo seguinte [70]. Para contornar este problema, utilizamos o método *Local Cell Remeshing* do ANSYS FLUENT. Este método consiste em se fazer uma busca por células da malha que violam critérios de assimetria (em inglês *skewness*) ou de escalas de comprimento mínimo e máximo, e refaz (*remeshing*) localmente estas células ou faces.

A medida de assimetria é uma forma de avaliar a qualidade da malha. Ela é definida comparando os ângulos máximo (θ_{max}) e mínimo (θ_{min}) entre as arestas do elemento da malha em relação ao ângulo (θ_{eq}) de um elemento equilátero de forma semelhante, usando a relação abaixo:

$$Q_{EAS} = \max \left(\frac{\theta_{max} - \theta_{eq}}{180 - \theta_{eq}}, \frac{\theta_{eq} - \theta_{min}}{\theta_{eq}} \right). \quad (2.98)$$

Para elementos triangulares e tetraédricos $\theta_{eq} = 60^\circ$. O valor máximo de assimetria da célula do modelo é ajustado no ANSYS FLUENT pelo parâmetro *Maximum Cell Skewness*. O valor padrão para o máximo de assimetria é 0.9 em simulações tridimensionais (3D) e está entre 0.6 e 0.7 para simulações em duas dimensões (2D). Pequenos valores do máximo de assimetria resultam em uma maior qualidade da malha, mas em compensação, o custo computacional será maior.

A especificação das escalas de comprimento mínimo e máximo podem ser definidas utilizando a função *Mesh Scale Info* disponível no aplicativo. Neste trabalho, os valores utilizados para estes parâmetros dependiam da geração g do EA e do fator de redução s utilizado.

Com os parâmetros definidos, o ANSYS FLUENT selecionará as células que serão refeitas se, no processo de avaliação, pelo menos um dos seguintes critérios for atendido:

- Ter uma assimetria maior que o valor máximo de assimetria especificado;
- Ter um comprimento de escala mínimo menor que o especificado;
- Ter um comprimento de escala máximo maior que o especificado.

Se as novas células satisfazem o critério de assimetria, a malha é localmente atualizada com estas células (com os dados de solução interpolados a partir das células antigas). Caso contrário, elas serão descartadas. A seleção das células baseada no critério de assimetria é feita a cada passo de tempo. Entretanto, a marcação baseada no tamanho é realizada dentro de um intervalo de integração que é especificado pelo parâmetro *Size Remesh Interval*. Esta estratégia é adotada, pois a mudança na distribuição do tamanho da células é pequena ao longo de um passo de tempo [70].

Na Tab. 2 resumimos os parâmetros que foram ajustados no aplicativo ANSYS FLUENT para o método *Local Cell Remeshing* no nosso estudo.

Tabela 2 – Método *Local Cell Remeshing*

Parâmetro	Valor
<i>Minimum Length Scale</i>	$\approx 10^{-3}$
<i>Maximum Length Scale</i>	≈ 1
<i>Maximum Cell Skewness</i>	0.6
<i>Size Remeshing Interval</i>	5

É importante salientar que o método *Local Cell Remeshing* só pode ser aplicado em zonas da malha que contenham células triangulares ou tetraédricas [70].

2.4.4 O Solver 6DOF

Como mencionado anteriormente, para permitir que sob a influência do movimento do fluido os discos girem, temos que conhecer em cada instante de tempo as forças que atuam sobre eles. Estas informações podem ser obtidas utilizando a ferramenta disponível no ANSYS FLUENT chamada de *solver six degree of freedom – solver 6DOF*. Esta ferramenta utiliza as forças e *momenta* do objeto a fim de calcular o movimento translacional e rotacional do centro de gravidade (G) deste objeto. A equação que governa o movimento translacional do centro de gravidade no sistema de coordenadas inercial (representado pelo subscrito i) é

$$\left(\frac{d\vec{v}_G}{dt}\right)_i = \dot{\vec{v}}_{G,i} = \frac{1}{m} \sum \vec{f}_{G,i}, \quad (2.99)$$

onde $\dot{\vec{v}}_G$ é o movimento translacional do centro de gravidade, m é a massa, e \vec{f}_G é o vetor força no centro de gravidade.

O movimento angular do objeto é mais facilmente computado utilizando as coordenadas do corpo [74]. Sabe-se da mecânica que, para um sistema de coordenadas com movimento de rotação (representado pelo subscrito B) em relação ao sistema inercial teremos

$$\left(\frac{d\vec{L}}{dt}\right)_i = \left(\frac{d\vec{L}}{dt}\right)_B + \vec{\omega}_B \times \vec{L}, \quad (2.100)$$

onde \vec{L} é o vetor *momentum* angular do corpo, $\vec{\omega}_B$ é o vetor velocidade angular. O lado esquerdo desta equação corresponde ao torque externo resultante (\vec{N}_i) aplicado ao corpo. Exprimindo este termo em função do tensor de inércia $\{I\}$ com respeito ao centro de gravidade, isto é $\vec{L} = \{I\}\vec{\omega}_B$, teremos

$$\vec{N}_i = \{I\} \cdot \left(\frac{d\vec{\omega}_B}{dt}\right)_B + \vec{\omega}_B \times \{I\} \cdot \vec{\omega}_B, \quad (2.101)$$

onde

$$\{I\} = \begin{bmatrix} I_{xx} & -I_{xy} & -I_{xz} \\ I_{yx} & -I_{yy} & -I_{yz} \\ I_{zx} & -I_{zy} & -I_{zz} \end{bmatrix}. \quad (2.102)$$

Os torques podem ser transformados do sistema de coordenadas inercial para o referencial do corpo usando

$$\vec{N}_B = \mathbf{R}\vec{N}_i \quad (2.103)$$

onde, \mathbf{R} representa a seguinte matriz de transformação:

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \psi & \cos \theta \sin \psi & -\sin \theta \\ \sin \phi \sin \theta \cos \psi - \cos \phi \sin \psi & \sin \phi \sin \theta \sin \psi + \cos \phi \cos \psi & \sin \phi \cos \theta \\ \cos \phi \sin \theta \cos \psi + \sin \phi \sin \psi & \cos \phi \sin \theta \sin \psi - \sin \phi \cos \psi & \cos \phi \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Aqui ϕ , θ e ψ representam os ângulos de Euler e a matriz R é obtida utilizando a sequência de rotação 3 – 2 – 1 (ou zyx) dos eixos coordenados. Sendo assim

$$\left(\frac{d\vec{\omega}_B}{dt}\right)_r = \{I\}^{-1} \cdot [\vec{N}_B - \vec{\omega}_B \times \{I\} \cdot \vec{\omega}_B] . \quad (2.104)$$

Como as acelerações translacional e angular são determinadas pelas equações (2.99) e (2.104), as derivadas são obtidas por integração numérica com métodos de passo múltiplo aplicando a fórmula de Adams-Moulton de 4ª ordem [74, 75]:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{\Delta t}{24}(9\dot{x}_{n+1} + 19\dot{x}_n - 5\dot{x}_{n-1} + \dot{x}_{n-2})$$

onde x representa $\vec{v}_{G,i}$ ou $\vec{\omega}_B$. A velocidade angular é transformada de volta para o sistema de coordenadas inercial usando

$$\vec{N}_i = \mathbf{R}^T \vec{N}_B . \quad (2.105)$$

2.4.5 Construção da malha e Implementação do 6DOF

Diferentemente do caso de discos estáticos estudados no trabalho [11], no estudo atual é preciso manter uma região em torno dos discos com uma malha de boa qualidade, de forma que o *solver 6DOF* obtenha com maior precisão as forças de arrasto sobre os corpos girantes. Esta região é declarada no FLUENT como uma zona passiva (*passive zone*), ou seja, uma zona em que o *solver* não irá calcular as forças e *momenta* e ela não será modificada. Estas zonas terão o mesmo movimento do corpo rígido, mas as forças serão calculadas somente nas zonas não passivas [70]. Na Fig. 14a (página 53) mostramos a região criada para alguns discos da geração $g = 4$ com fator de redução $s = 0.8$ e $V = 0.1$ m/s. Já na Fig. 14b é mostrada a malha da região porosa sem a presença da zona passiva dos discos. Para evidenciar o papel desta zona, nas Figs. 14c e 14d mostra-se a malha nos instantes $t = 0$ e $t = 8$ s (passo de tempo de 10^{-5} s), respectivamente. Como esperado, a partir das discussões da seções anteriores, observa-se que a região porosa é modificada, exceto a região definida como zona passiva.

Todo o processo de construção da geometria até a geração da malha foi realizado no ambiente computacional *GAMBIT* [71]. Existem duas formas de trabalhar com este aplicativo: uma utilizando a interface gráfica, e a outra por linha de comando. Pensando na automatização do processo de criação da geometria e da malha, optou-se pela segunda opção. Os comandos do *GAMBIT* são escritos em uma linguagem que é própria do aplicativo e podem ser passados diretamente pelo teclado ou via arquivo externo (denominado de *journal file*). Sendo assim, em conjunto com este aplicativo, um código feito em FORTRAN foi utilizado para gerar um arquivo com os comandos necessários para construção da geometria, que depois era lido pelo *GAMBIT*.

O processo de construção da geometria é iniciado com o canal e em seguida com os discos da geração, cujos raios e centros são obtidos pelos teoremas de Descartes (ver

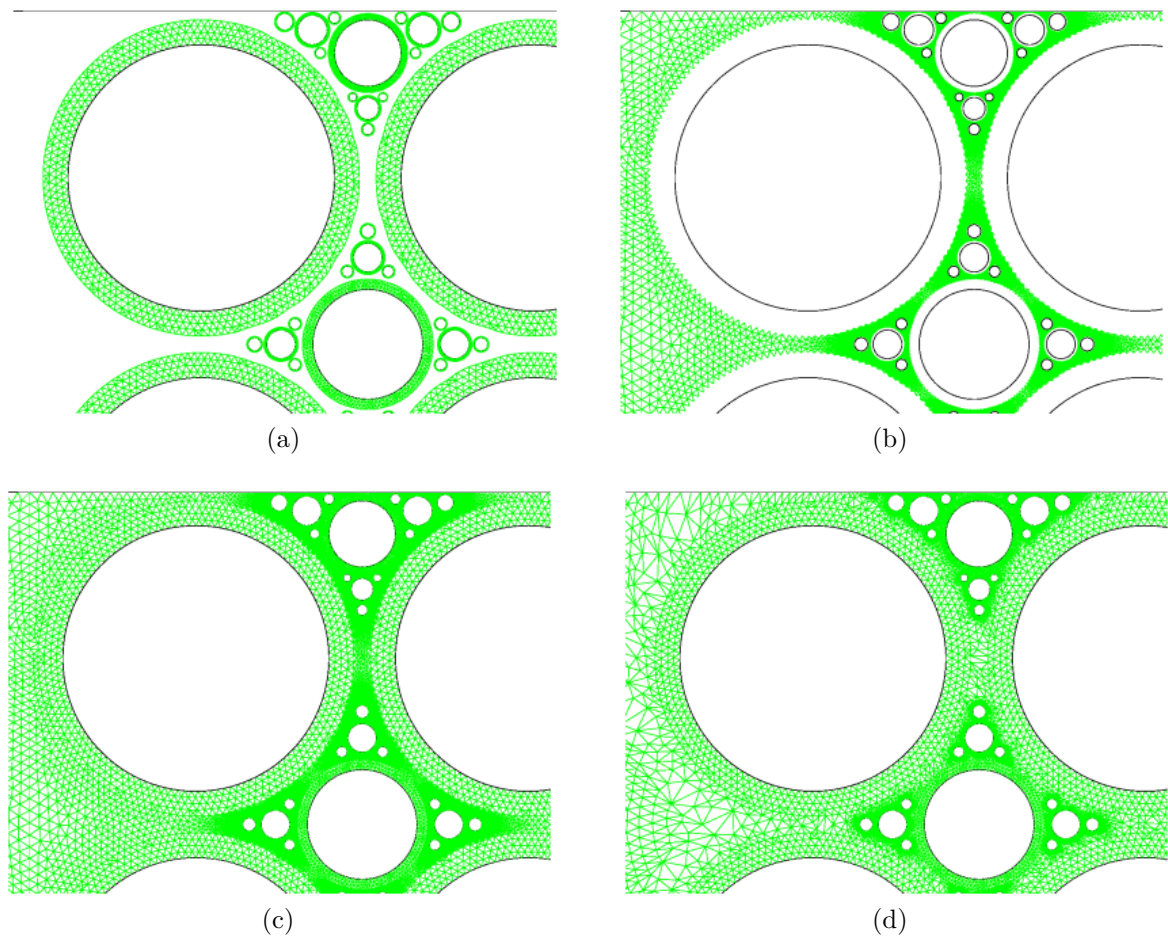


Figura 14 – (a) Região de zona passiva criada para $g = 4$ com fator de redução $s = 0.8$. (b) Malha da região porosa sem a presença da zona passiva dos discos. (c) Malha no instante inicial ($t = 0$ s). (d) Malha no instantes $t = 8$ s e $V = 0.1$ m/s.

Apêndice A). Para gerar os discos no GAMBIT, fez-se uso de uma ferramenta do aplicativo (denominada *Create Circular Arc*) que gera um círculo a partir do centro e de outros dois pontos pertencentes ao círculo. Após construção de todos os discos da geração, ainda é preciso reduzi-los pelo fator de escala (s) desejado e também criar a região de zona passiva em torno de cada disco. Na construção da zona passiva de um determinado disco da geração adota-se o seguinte procedimento: (i) faz-se uma cópia do disco e multiplica-se o raio do disco copiado por s ; para efetuar este procedimento utiliza-se a ferramenta do GAMBIT denominada de *face cscale*; (ii) multiplica-se o raio do disco original por um fator $s < f < 1$; neste procedimento fez-se uso da ferramenta do GAMBIT denominada de *face scale*. Após testes, chegou-se a conclusão que um tamanho adequado para a região passiva seria obtido utilizando um fator $f \geq (s + 0.15)$ para a função *face scale* do passo (ii). Desta forma, para $s = 0.6, 0.7$ e 0.8 foram utilizados $f = 0.8, 0.9$ e 0.95 , respectivamente. Devido a esta limitação técnica, neste trabalho foram consideradas geometrias do EA com fator de redução $s \leq 0.8$. Uma outra limitação surge quando considera-se o caso de $s \leq 0.5$. Nesta situação, os discos introduzidos em $g \geq 3$ tornam-se muito pequenos, de forma que

os tamanho dos elementos das regiões próximas a estes discos podem ser muito menores que os deslocamentos dos discos. Quando este tipo de situação acontece a qualidade da célula pode deteriorar-se ou as células podem torna-se degeneradas. Este fato irá invalidar a malha (por exemplo, acarretando em erros de volume negativo) e, conseqüentemente, levar a problemas de convergência durante a simulação [70].

Finalizado o processo de construção da geometria, faz-se necessário definir as características do modelo, como entrada, saída, paredes e região de fluido. No GAMBIT, isto é feito utilizando as duas classes de especificações de tipos de zona (*Zone-type specifications*), que são *Boundary types* e *Continuum types*. Na primeira especificamos: parede vertical esquerda do canal como *VELOCITY-INLET*, parede vertical direita como *PRESSURE-OUTLET*, paredes horizontais e todos os discos como *WALL*. Já em *Continuum types*, definimos todas as regiões de zonas passivas como *FLUID*.

Em todas os casos considerados neste trabalho, uma malha não estruturada com elementos triangulares foi utilizada. A escolha por este tipo de malha deu-se pela sua flexibilidade de adaptação às fronteiras do domínio do EA, que apresenta uma geometria complexa [19, 46]. Para manter um número mínimo de três camadas de elementos na região de zona passiva, a ferramenta *Proximity Size Functions* do aplicativo GAMBIT foi utilizada. Os parâmetros que se mantiveram fixos nesta função para todos os discos foram: $Cells/gap=3$, $Growth\ rate=1.1$ [71]. Das ferramentas disponíveis no GAMBIT para avaliar a qualidade da malha, utilizamos a medida do ângulo de distorção (ver Eq. 2.98 na página 49). Segundo informações da literatura, este ângulo de distorção deve ser $Q_{EAS} < 0.97$ para que a qualidade da solução numérica não seja comprometida [71]. A grande maioria dos elementos das malhas utilizados neste trabalho mantiveram um ângulo de distorção menor que 0.6. Sendo assim, tomando como base este parâmetro, nossas malhas são de boa qualidade.

Após concluído o processo de geração da malha, o passo seguinte é resolver as Eqs. 2.89 e 2.90 no domínio discretizado pela malha. Este passo é feito no *solver*, que no nosso caso foi o ANSYS FLUENT 12 [70]. Para permitir a rotação dos discos em torno dos seus respectivos centros, utilizamos o *solver 6DOF* em conjunto com a técnica de malha dinâmica, já detalhados anteriormente nas seções 2.4.1 e 2.4.4.

Para utilizar o *solver 6DOF* no ANSYS FLUENT é requerida uma série de informações sobre o objeto que se comportará como corpo rígido, tais como massa, *momentum* de inércia, bem como as sobre o sistema. Estas informações podem ser passadas para o *solver* utilizando funções definidas pelo usuário (*User-defined functions –UDFs*) que permitem adaptar o ANSYS FLUENT as necessidades do problema a ser resolvido, aumentando significativamente a sua capacidade [70]. No nosso estudo as informações passadas pela UDF utilizada foram a massa e as coordenadas x, y e z do *momentum* de inércia de cada disco em relação ao seu centro de massa. Conjuntamente com o *solver 6DOF*, utilizamos

as seguintes técnicas de malha dinâmica: *spring-based smoothing methods* e *local cell remeshing methods* (ver Seção 2.4.1). No primeiro método foram mantidos os parâmetros que são padrões do aplicativo. Já no segundo, os parâmetros *Minimum Length Scale* e *Maximum Length Scale* foram definidos para cada malha, enquanto o *Maximum Cell Skewness* foi fixado em 0.6.

Finalizando esta seção, na Tab. 3 é apresentado um resumo dos métodos/modelos que foram ajustados no ANSYS FLUENT, antes de iniciar todas as simulações:

Tabela 3 – Lista dos métodos utilizados no ANSYS FLUENT.

<i>Models</i>	
<i>Time</i>	<i>Unsteady, 1st-Order Implicit</i>
<i>Viscous</i>	<i>Laminar</i>
<i>Pressure-Velocity Coupling</i>	
<i>Type</i>	<i>SIMPLE</i>
<i>Discretization Scheme</i>	
<i>Pressure</i>	<i>Standard</i>
<i>Momentum</i>	<i>Second Order Upwind</i>

3 Resultados e Discussões: Empacotamento Apoloniano

3.1 Propriedades Gerais do Escoamento

3.1.1 Resistência Hidráulica

Neste trabalho, o passo de tempo de integração utilizado foi $\tau = 1 \times 10^{-4}$ s, exceto para $g = 4$, onde a convergência só pode ser atingida quando adotou-se $\tau = 1 \times 10^{-5}$ s. Como primeira investigação, procurou-se estudar o comportamento da resistência hidráulica da matriz porosa (Eq. 2.75 da página 39). Para investigá-la, nós conduzimos uma exaustiva análise numérica das equações do movimento para valores de $0.28 < Re < 23$, $g \leq 4$, e $0.6 \leq s \leq 0.8$. Como as simulações consideradas foram dependentes do tempo, os resultados obtidos para os campos de pressão tiveram que ser analisados considerando a sua flutuação temporal, que pode ser observado pela dependência de $\Delta P \times t$ na Fig. 15 (Página 57), onde as linhas traço-pontilhada e preta sólida representam, respectivamente, os resultados para os casos em que os discos estão parados e em movimento. Diferentemente da metodologia utilizada na referência [11], onde uma solução estacionária foi imposta para uma precisão pré-estabelecida (frequentemente $\leq 10^{-6}$), aqui procuramos uma estacionariedade média para a solução dependente do tempo. Para isso, avaliamos $\langle \Delta P \rangle$, a média móvel (MM) do campo de pressão, obtida utilizando a função *Smoothing using Adjacent Averaging*¹ do *OriginPro 7.5* [76], cujos valores temporais são indicados pela linha vermelha sólida na Fig. 15.

Os nossos resultados indicam que o tempo de integração necessário para alcançar o regime estacionário médio aumenta quando Re decresce. Sendo assim, fez-se necessário impor um limite inferior para o intervalo do número de Reynolds para a investigação. Esta restrição, entretanto, não interferiu no controle de validade da lei de Darcy, uma vez que o regime de validade foi obtido para um grande intervalo acima deste limite.

Após aguardar $\langle \Delta P \rangle$ atingir um valor constante (dada uma tolerância de flutuação pré-estabelecida), a resistência hidráulica foi calculada utilizando a Eq. 2.75 (página 39), substituindo ΔP por $\langle \Delta P \rangle$. A sua análise leva, no primeiro momento, à identificação da região de validade da lei de Darcy. Para este propósito, foram coletados os valores médios das quedas de pressão para cada valor da velocidade de entrada usada no processo de integração. Na Fig. 16 (página 58) é ilustrado o comportamento de $G \times Re$ para o modelo do EA quando $g = 2$ e $g = 3$ com três valores do fator de redução do raio $s = 0.6$, $s = 0.7$ e

¹ Este método de suavização plota a média móvel de um determinado intervalo de valores.

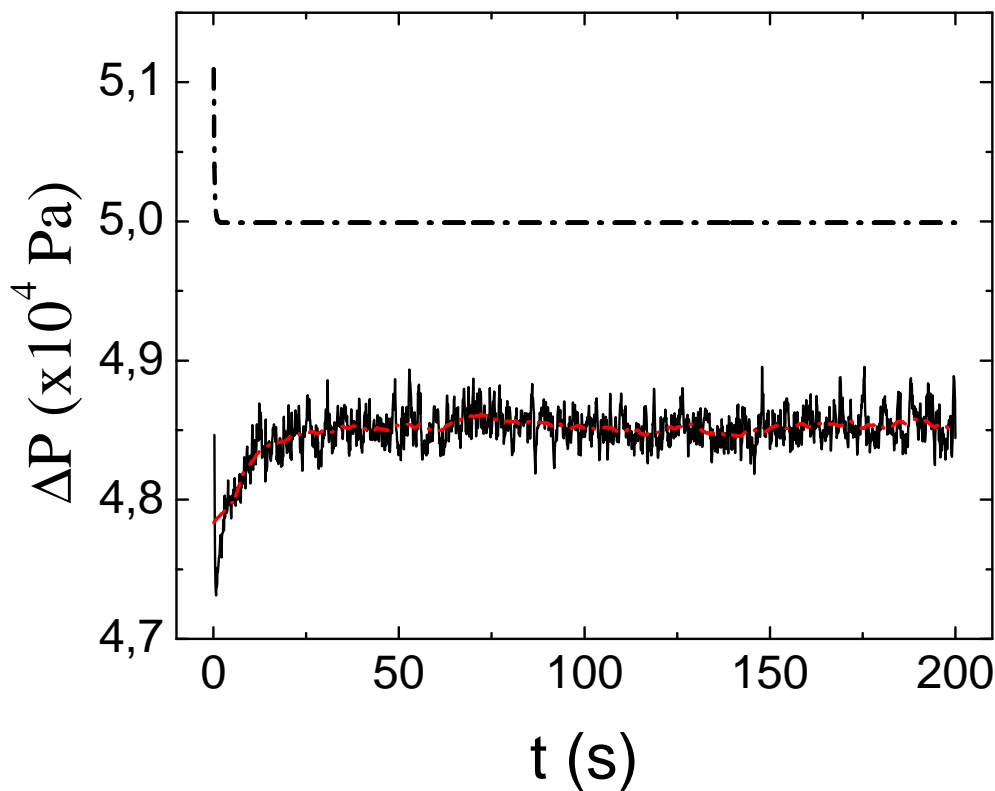


Figura 15 – Comportamento de ΔP para os discos girantes e parados, representados, respectivamente por ΔP^R e ΔP^S . A integração foi realizada para $g = 2$; $s = 0.75$; $Re = 0.56$ e passo de tempo de integração $\tau = 0.0001$ s. Para efeito de comparação, nós plotamos ΔP^S para o caso estacionário (linha traço-pontilhada), onde as flutuações são da ordem da menor magnitude. A linha preta sólida representa a flutuação no valor de ΔP^R para o sistema girante. Já a linha vermelha sólida indica a média móvel, cuja largura da janela foi obtida com 100 pontos.

$s = 0.8$. Observa-se que, para $Re \lesssim 0.56$, uma relação constante entre as duas quantidades pode ser estabelecida, a qual garante a validade da lei de Darcy. Como mencionado anteriormente, quando Re decresce o tempo necessário para atingir a estacionariedade aumenta, o que dificulta a exploração para pequenos valores de velocidade.

Para $Re > 3.4$, observa-se uma inclinação da curva em relação ao eixo horizontal, indicando assim, uma ruptura da dependência linear entre a velocidade média e a diferença de pressão. A Fig. 16 (página 58) deixa claro que, dependendo do valor de s e Re , as resistências hidráulicas para os discos em movimento (G^R) e estáticos (G^S) apresentam uma dependência complexa e não linear com relação a Re , com a geometria dos obstáculos, e com a presença do grau de liberdade de rotação.

Os resultados da Fig. 16 indicam também que, no regime de Darcy, os discos girantes, com relação aos discos estáticos, contribuem positivamente para o escoamento (isto é, aumentam a permeabilidade) quando a largura dos canais entre eles é pequena

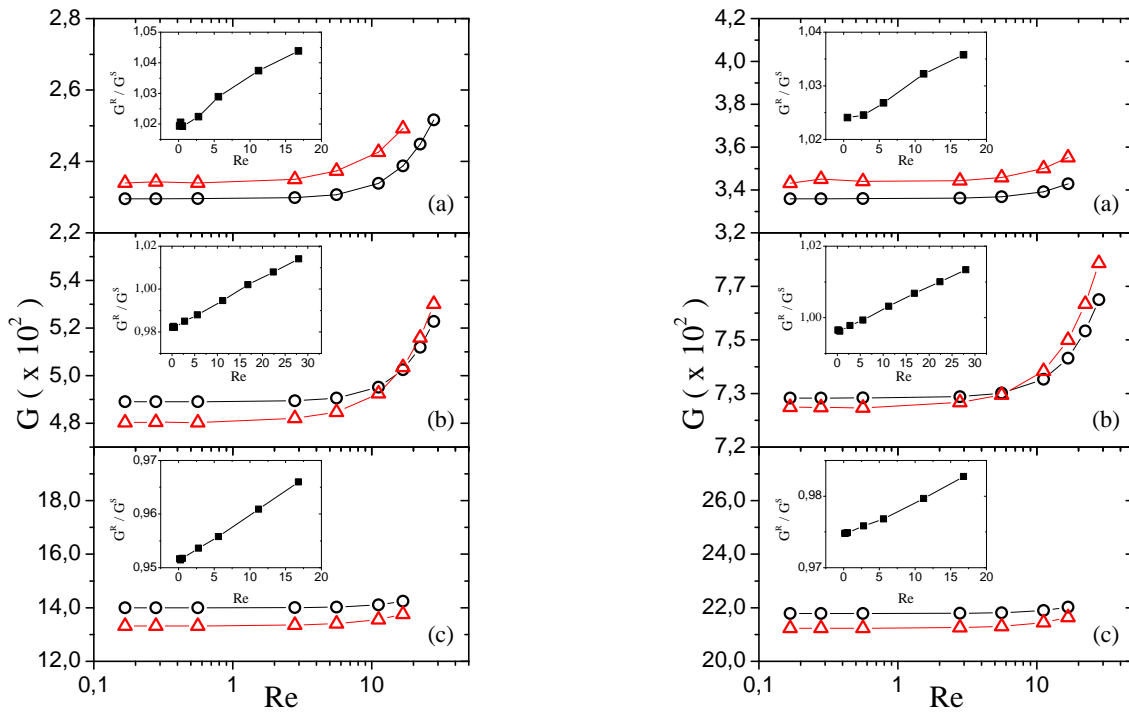


Figura 16 – Dependência das resistências hidráulica G^R (triângulos para cima) e G^S (círculos) como função do número de Reynolds Re do canal principal para $g = 2$ (painel da esquerda) e $g = 3$ (painel da direita) do EA para três valores do fator de redução do raio $s = 0.6$ (a), $s = 0.7$ (b), e $s = 0.8$ (c). No regime linear, os canais mais largos (mais finos) tem sua permeabilidade reduzida (aumentada) quando os discos estão girando. Para valores relativamente altos de Re , os discos parados levam a uma menor resistência para qualquer valor de s . Isto é mostrado pela dependência da razão G^R/G^S como função de Re nos painéis internos.

(ou seja, quando s assume valores próximos de um). Para canais largos, entretanto, a rotação causa um decréscimo na permeabilidade efetiva. No entanto, este comportamento não prevalece se o regime de Darcy é ultrapassado: se no regime de Darcy a resistência é maior para os discos parados, em velocidades suficientemente altas a situação estática oferecerá menor resistência para o escoamento que o caso com obstáculos girantes. Este comportamento é ilustrado nos gráficos internos da Fig. 16, onde é possível observar que G^R/G^S , a razão entre as resistências dos discos em movimento e parados, respectivamente, aumenta monotonicamente e aproximadamente linearmente com Re .

Este resultado pode ser analisado observando que a geometria do EA, promovendo um grande número de encontro de três discos mutuamente tangentes, é frustrada. Ou seja, ocorre grande dissipação de energia por atrito se qualquer um dos discos é posto para rotacionar por uma força externa. Uma vez que o padrão da frustração se propaga pelo fluido durante o escoamento através do modelo de redução dos raios, nossos resultados indicam que grandes gradientes de velocidade aparecem (aumentam o efeito dos termos

viscosos na Eq. 2.90 da página 46) e se tornam determinantes quando Re aumenta ou s decresce.

Para entender melhor as variações de G^R com relação a G^S , e o surgimento das inversões da Fig. 16 (página 58), é preciso estudar as mudanças provocadas pela rotação dos discos no perfil do escoamento. Um típico exemplo é ilustrado na Fig. 17 (página 60), em que temos os diagramas da magnitude dos campos de velocidade para os casos em que os discos estão parados (Fig. 17a) e em movimento (Fig. 17b), quando $g = 3$, $s = 0.7$ e $Re = 0.56$. As principais diferenças entre as duas configurações, que já estão presentes quando $g = 1$, são aumento do fluxo através da parte central do empacotamento, concomitantemente com uma diminuição da magnitude dos campos de velocidade nas regiões entre os discos maiores e as paredes do canal. Outra mudança perceptível está na localização das principais zonas de estagnação, que sofrem um descolamento das bordas dos maiores discos tanto na direção do fluxo quanto na direção oposta. Mudanças no campo de velocidade na região entre os discos maiores ($|x| < H(1 - s)$ ou $|y| < H(1 - s)$) são claramente indicadas pela posição das zonas de estagnação. Todos estes efeitos são induzidos pela condição de não deslizamento² e pela velocidade angular resultante dos discos, como indicado na Fig.17b.

Na Fig.17b é possível notar que mudanças no padrão do escoamento devido à rotação dos discos menores, introduzidos para altos valores de g , são menos evidentes e dependem da posição em que estão localizados. Alguns destes discos que estão mais afastados do centro do canal conseguem ter sucesso em desviar o fluxo através dos canais maiores. Este é o caso, por exemplo, dos discos $D_{3,5}$ e $D_{3,7}$ localizados em $y = 0$, imediatamente acima e abaixo do disco $D_{2,1}$ com centro $c_{2,1} = (0, 0)$ (ver Fig. 13 da página 45). Como pode ser observado pela comparação com o caso estático (Fig.17a), a rotação deles causa um acréscimo no escoamento na parte central do empacotamento entre cada par de discos maiores, junto com uma redução no escoamento através dos pequenos canais limitados, respectivamente, pelos discos $D_{3,5}$ e $D_{2,1}$ e $D_{3,7}$ e $D_{2,1}$.

As mudanças mais relevantes no escoamento podem ser identificadas quantitativamente pela medida da vazão φ_i ($\bar{\varphi}_i$) em alguns canais C_i (\bar{C}_i) formados entre os obstáculos e identificados na Fig. 17b. Nós escolhemos C_1^\pm , \bar{C}_1^\pm , C_2 , e \bar{C}_2 , pois os fluxos através deles caracterizam a entrada e saída da região dos obstáculos. Aqui, os subscritos 1 e 2 identificam, respectivamente, os canais adjacentes as paredes e parte central, enquanto \pm identifica os canais adjacentes as paredes em $y = \pm H/2$. Como a largura dos canais centrais (C_2 and \bar{C}_2) correspondem exatamente ao dobro da largura dos canais da parede (C_1^\pm e \bar{C}_1^\pm), consideramos φ_1 ($\bar{\varphi}_1$) a soma das vazões nos canais C_1^+ e C_1^- (\bar{C}_1^+ e \bar{C}_1^-). Uma vez que $\varphi_2 > \varphi_1$, espera-se que o arrasto resultante sobre os discos maiores favoreça a rotação no sentido anti-horário (horário) para discos localizados na parte superior (inferior)

² Em inglês non-slip condition

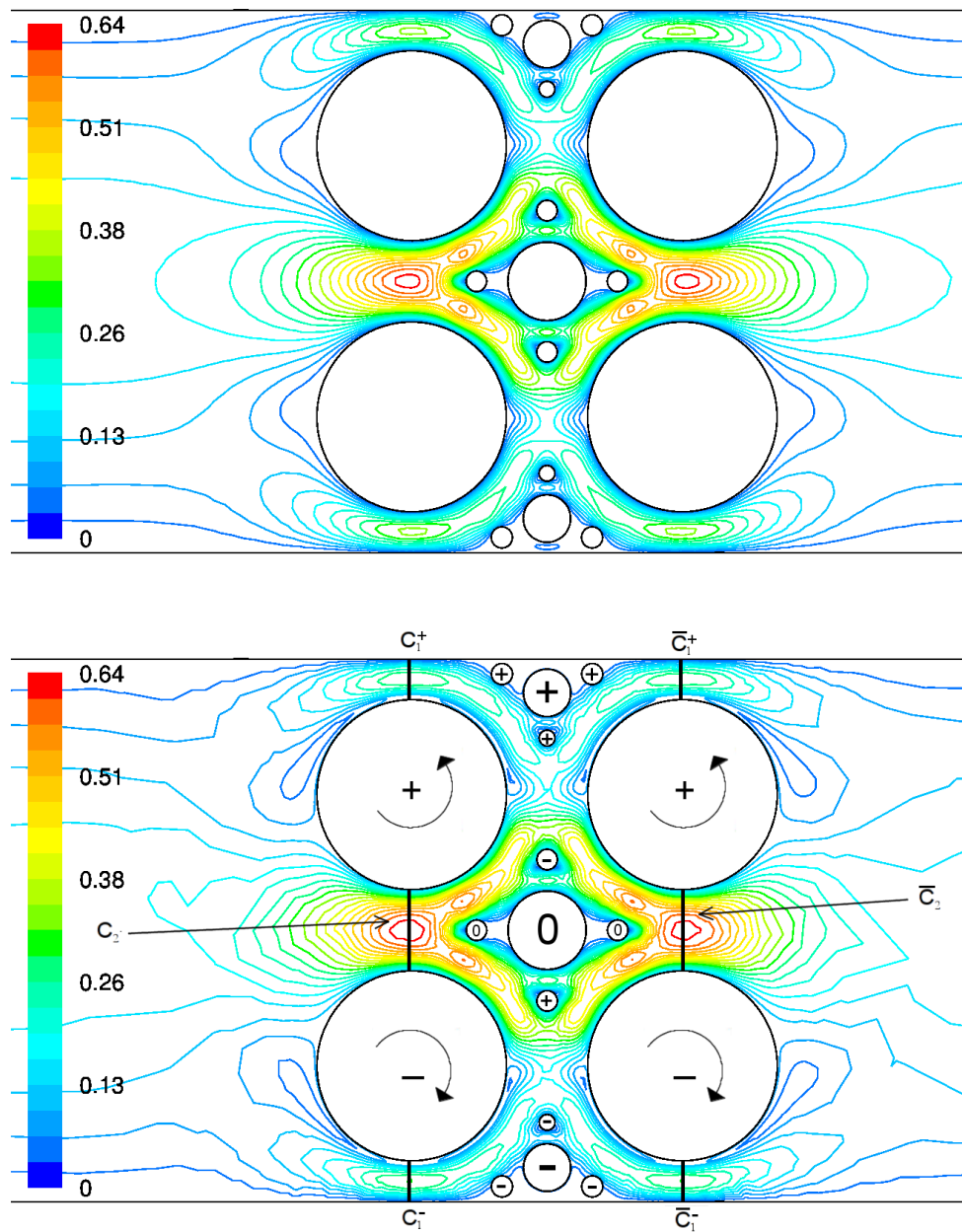


Figura 17 – Código de cores para o módulo da velocidade para os casos dos discos estáticos (a) e girantes (b) quando $g = 3, s = 0.7, Re = 0.56$. Em (b), as setas indicam o sentido de giro dos discos maiores. A velocidade angular média dos discos centrados em $y = 0$ se anula quando o intervalo de tempo $\rightarrow \infty$. As linhas numeradas identificam os canais específicos onde os fluxos locais foram analisados.

do canal (como pode ser observado pelas setas da Fig. 17b). Na Fig. 18 (página 61), temos a dependência de φ_i^R ($\bar{\varphi}_i^R$) e φ_i^S ($\bar{\varphi}_i^S$) como função de Re para $g = 3$ e $s = 0.7$. Comparando os painéis (a) e (b) da Fig. 18 observa-se que, para as condições de discos estáticos e girantes, o fluxo de saída do empacotamento através do canal central é menor que o correspondente fluxo de entrada ($\varphi_2 > \bar{\varphi}_2$), com comportamento inverso para o fluxo através dos canais da parede ($\varphi_1 < \bar{\varphi}_1$). Com intuito de proporcionar uma comparação

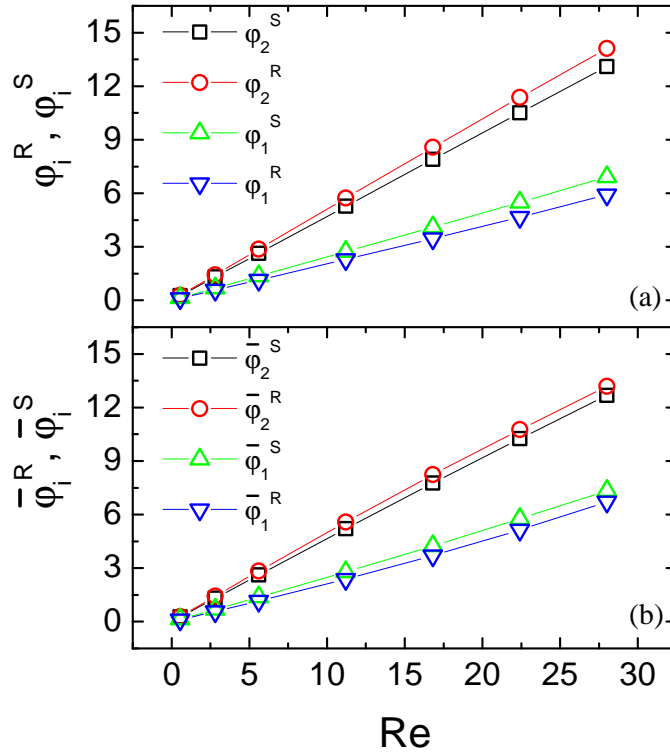


Figura 18 – Dependência dos fluxos parciais φ_i e $\bar{\varphi}_i$ com o número de Reynolds Re para $i = 1$ e 2 . A rotação dos discos favorece o escoamento através dos canais centrais, como é possível observar pelos resultados $\varphi_1^R < \varphi_1^S$ e $\varphi_2^R > \varphi_2^S$ (painel a), e $\bar{\varphi}_1^R < \bar{\varphi}_1^S$ e $\bar{\varphi}_2^R > \bar{\varphi}_2^S$ (painel b).

quantitativa entre as mudanças no escoamento induzidas pela rotação dos discos, vamos definir as seguintes variáveis $\beta^X = \varphi_2^X / \varphi_1^X$ ($\bar{\beta}^X = \bar{\varphi}_2^X / \bar{\varphi}_1^X$), e $\delta_1^X = \bar{\varphi}_1^X / \varphi_1^X$ ($\delta_2^X = \bar{\varphi}_2^X / \varphi_2^X$), onde $X = S, R$.

Na Fig. 19 (página 62) temos a dependência de β e δ com Re para $g = 3$ e $s = 0.7$. Como esperado, observa-se no painel (a) que $\beta^X, \bar{\beta}^X > 1$. O mesmo painel mostra que $\bar{\beta}^R > \bar{\beta}^S$ e $\beta^R > \beta^S$, indicando que a rotação dos discos provoca um aumento do fluxo no canal central em comparação com os da parede. Observa-se que a intensidade deste efeito decai quando Re aumenta, mas não é possível afirmar que, para valores ainda maiores de Re , pode-se chegar a um regime no qual $\bar{\beta}^R < \bar{\beta}^S$, como o gráfico sugere. Uma vez que os discos próximos as paredes movem-se em oposição ao escoamento, o volume de fluido advindo do aumento do fluxo nos canais C_1 e \bar{C}_1 experimenta uma maior força de arrasto local. Este efeito contribui para uma maior resistência hidráulica identificada na Fig. 16b. Este mesmo comportamento também é evidenciado pela Fig. 19b, uma vez que δ_1^S e δ_1^R crescem monotonicamente com Re enquanto, ao mesmo tempo, o fluxo pelos

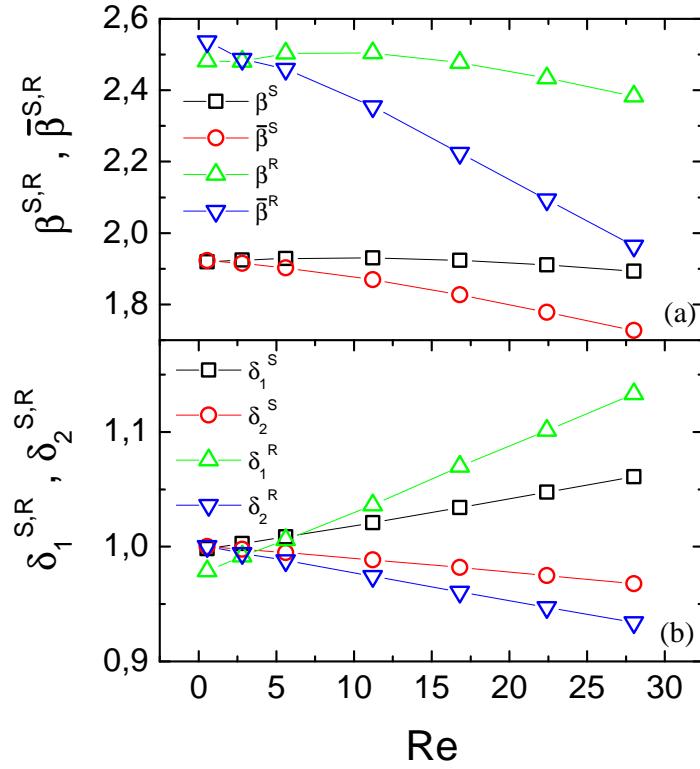


Figura 19 – Dependência de $\beta^X = \varphi_2^X / \varphi_1^X$ ($\bar{\beta}^X = \bar{\varphi}_2^X / \bar{\varphi}_1^X$), e $\delta_i^X = \bar{\varphi}_i^X / \varphi_i^X$ (com $X = R, S$ e $i = 1, 2$) com respeito a Re . O painel (a) mostra que o fluxo através dos canais centrais (laterais) diminuem (aumenta) quando Re cresce. No painel (b) observamos uma diminuição (aumento) do fluxo de saída com relação ao fluxo de entrada para os canais centrais (laterais). A intensidade das mudanças é maior para o caso dos discos girantes, o que provoca um aumento na resistência hidráulica e está de acordo com o comportamento de G mostrado na Fig. 16b.

canais centrais (δ_2^S e δ_2^R) decrescem com Re . Estes resultados atestam que, com aumento de Re , grandes frações de fluido que entraram pelo canal central C_2 são desviados para os canais das paredes \bar{C}_1 , conduzindo a um aumento geral da resistência hidráulica. Por outro lado, observa-se na Fig. 19a que para $Re < 2.8$ temos $\bar{\beta}^X > \beta^X$, ou seja, nesta região há um aumento no fluxo central. Este fato também pode ser constatado pela Fig. 19b, onde $\delta_1^X < \delta_2^X$, pois da definição de δ temos $\bar{v}_1^X < v_1^X$ e $\bar{v}_2^X > v_2^X$. Nota-se que este aumento no fluxo central é mais forte para os discos girantes do que para os discos parados. Sendo assim, este efeito contribui para uma menor resistência hidráulica identificada no painel (b) do lado esquerdo da Fig. 16.

Nós encontramos que as características não lineares em relação à dependência da resistência hidráulica com Re e s para $g = 4$ são qualitativamente similares àqueles

ilustrados para $g = 2$ e $g = 3$ na Fig. 16 (página 58).

3.1.2 Ajuste Kozeny-Carman (KC)

A dependência entre a porosidade e a permeabilidade no regime de Darcy tem sido explicada com o arcabouço teórico de Kozeny-Carman (KC) para uma grande variedade de meios porosos [3, 20, 67]. Na relação proposta por Kozeny-Carman, a permeabilidade k pode ser escrita, a menos de uma constante $\sim 0.1 - 1$, por (vide Eq. 2.79, página 40)

$$k \sim \phi^3 / (1 - \phi)^2 .$$

No entanto, como discutido nas referências [11, 18], a porosidade ϕ do modelo baseado no EA é descrita por uma função de dois parâmetros, isto é, $\phi = \phi(s, g)$. Como g e s influenciam as propriedades da porosidade, o fluxo resultante será influenciado de diferentes formas. Este fato pode ser observado na Fig. 20, onde também foram plotados as permeabilidades obtidas para $g = 2$ e $g = 3$, com s variável, versus a expressão proposta por Kozeny-Carman. Verifica-se que os dados não são ajustados por esta função, pois se assim o fosse, os gráficos deveriam apresentar uma relação linear.

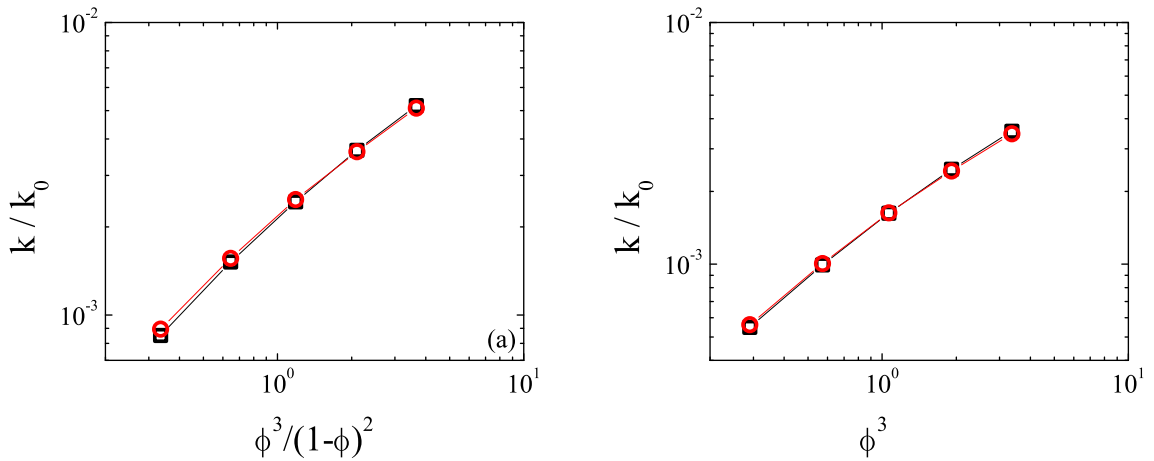


Figura 20 – Comportamento da permeabilidade k em função do fator de porosidade de Kozeny-Carman para os casos com discos parados (quadrado) e girantes (círculos) para as gerações $g = 2$ (a) e $g = 3$ (b). Aqui, k_0 indica a permeabilidade do canal de largura H . Verifica-se que os dados não são ajustados por esta função, pois não apresentam uma relação linear.

Contudo, no trabalho [11], foi possível mostrar que, para a condição de discos sem movimento, a expressão de KC pode ser adequadamente modificada, a fim de descrever os resultados obtidos para o modelo do EA como segue:

$$\frac{k_g(s, g)}{k_0} = A_g \frac{s^2}{\Theta(g)^2} \frac{(\phi(s, g) - \phi(s = 1, g))^3}{(1 - \phi(s, g) + \phi(s = 1, g))^2} . \quad (3.1)$$

Aqui, k_0 indica a permeabilidade do canal vazio de largura H , e $\Theta(g) = 2 \sum_{i=1}^{N_g} r_i / \sum_{i=1}^{N_g} r_i^2$ é a razão entre as somas dos perímetros dos discos e a soma de suas áreas, para todos

N_g discos da geração g do EA. Temos também que r_i indica o raio original dos discos tangentes do empacotamento apoloniano correspondente a $s = 1$. O valor $\phi(s = 1, g)$ necessita ser subtraído de $\phi(s, g)$ porque, para um g finito, a fração de espaço vazio em $s = 1$ não é nula.

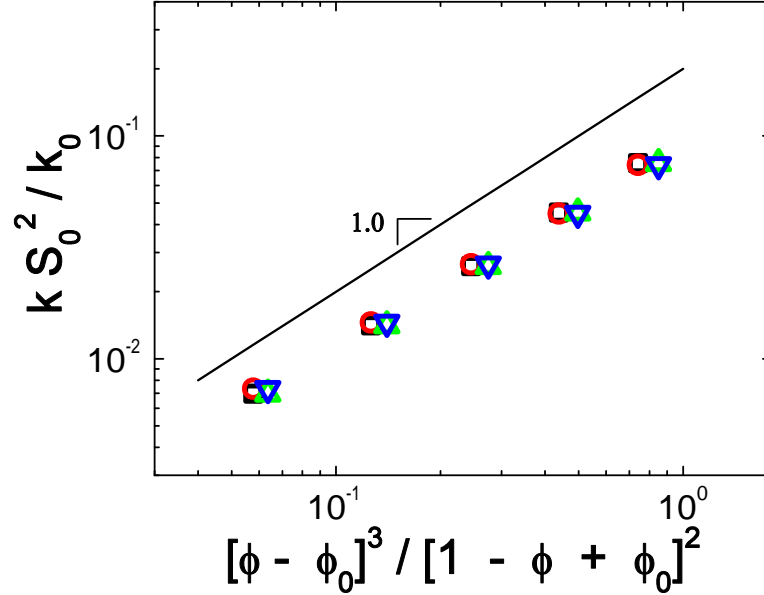


Figura 21 – Dependência de kS_0^2/k_0 em relação a $(\phi - \phi_0)^3/(1 - \phi + \phi_0)^2$ para $g = 2$ e 3 nos modelos estacionário e não estacionário, onde $\phi_0 = \phi(s = 1, g)$ e $\phi = \phi(s, g = 2, 3)$. A linha reta com declividade 1.0 mostra que a Eq. 3.1 continua válida para ambos os casos com elevado grau de precisão. Quadrados e triângulos para cima indicam resultados para $g = 2$ e 3 no caso estacionário, enquanto círculos e triângulos para baixo correspondem aos mesmos valores de g no modelo não estacionário.

Os resultados obtidos neste trabalho indicam que as modificações sugeridas na referência [11], dadas pela Eq. 3.1, ainda continuam válidas para o caso dos discos em movimento, como ilustrado na Fig. 21. Nesta figura foram plotados os valores de kS_0^2/k_0 em função de $(\phi(s, g) - \phi(s = 1, g))^3/(1 - \phi(s, g) + \phi(s = 1, g))^2$ para ambos os casos estudados (discos parados e girando) quando $g = 2$ e $g = 3$. Aqui $S_0 = \Theta(g)/s$, representa a área de superfície específica do EA. Como pode ser observado, existe uma relação linear entre as grandezas do eixo vertical e horizontal, com precisão expressa pelos coeficientes de correlação $R_2^S = R_2^R = 0.99989$ e $R_3^S = R_3^R = 0.99992$, para os dois regimes estudados. Uma vez que g é mantido constante para cada curva, $\phi(s, g)$ é independente das condições estática ou não-estática, o mesmo sendo válido para a variável plotada ao longo do eixo horizontal. O fator de escala S_0 do eixo vertical é independente da presença ou ausência de rotação. Portanto, se a Eq. 3.1 é válida para ambos os regimes, qualquer diferença entre os resultados poderá ser refletida somente pelo valor de A_g . Na derivação da expressão original

de KC, o valor de A_g é considerado dependente de outras características geométricas do meio, como, por exemplo, a tortuosidade das linhas de fluxo.

Para nos certificarmos de que os resultados obtidos pelo método numérico de integração das Eqs. 2.89 e 2.90 podem ser ajustados pela Eq. 3.1, utilizamos a técnica de ajuste por mínimos quadrados pelo software OringinPro 7.5. A função escolhida para os ajustes foi:

$$f(x) = P_1 \frac{(x - P_2)^{P_3}}{(P_4 + P_2 - x)^{P_5}} . \quad (3.2)$$

Esta função reproduz a Eq. 3.1 para $P_1 = A_g$, $P_2 = \phi(s = 1, g)$, $P_3 = 3$, $P_4 = 1$ e $P_5 = 2$. Na Fig. 22 apresentamos os ajustes por mínimos quadrados feitos para os dados apresentados na Fig. 21. Os valores obtidos para os coeficientes lineares A_g foram $A_2^S = 0.10261 \pm 0.00107$, $A_3^S = 0.09002 \pm 0.00126$, $A_2^R = 0.10128 \pm 0.00169$ e $A_3^R = 0.08884 \pm 0.00181$ para os casos em que os círculos estão parados e em movimento, respectivamente. Embora não seja possível discutir em detalhes todos os efeitos produzidos pela rotação dos discos, observa-se um valor menor de A_g^R , sugerindo assim uma pequena tortuosidade efetiva neste regime.

3.2 Dinâmica rotativa do empacotamento

3.2.1 Padrão da velocidade angular

Nesta seção vamos discutir as principais características do movimento dos discos devido à força de arrasto do fluido. Como indicado na seção 2.3, para facilitar a identificação dos discos, utilizaremos o símbolo $D_{\bar{g},j}$, onde o índice \bar{g} representa a geração em que o disco foi inserido no empacotamento e j a numeração do disco nesta geração, ver Fig. 13 na página 45. Qualquer grandeza X , por exemplo a velocidade angular Ω , quando estiver relacionada a um determinado disco, será identificada por três índices, como segue: $X_{\bar{g},j}^g$. O duplo índice inferior está relacionado com a identificação do disco, cuja explicação foi dada anteriormente. Já o índice superior g , representa a geração que está sendo analisada, por exemplo na Fig. 23 a velocidade angular do disco $D_{1,1}$ está sendo monitorada na geração $g = 2$, logo teremos $\Omega_{1,1}^2$.

Sendo assim, neste momento nos concentramos no comportamento da velocidade angular $\Omega_{\bar{g},j}^g$ do disco $D_{\bar{g},j}$ em função do tempo. Espera-se que todos os discos, que estão em repouso no instante $t = 0$ ($\Omega_{\bar{g},j}^g = 0, \forall j$), comecem a se movimentar assim que eles estiverem sobre a influência das forças de arrasto do fluido que está escoando. De maneira semelhante ao observado para os resultados do campo de pressão discutido na seção 3.1.1, as soluções das equações 2.89 e 2.90 sob a condição de escoamento transiente leva a uma velocidade angular com flutuações temporais. Apesar disso, é possível identificar que o movimento de quase todos os discos é caracterizado primeiro por uma fase transitória,

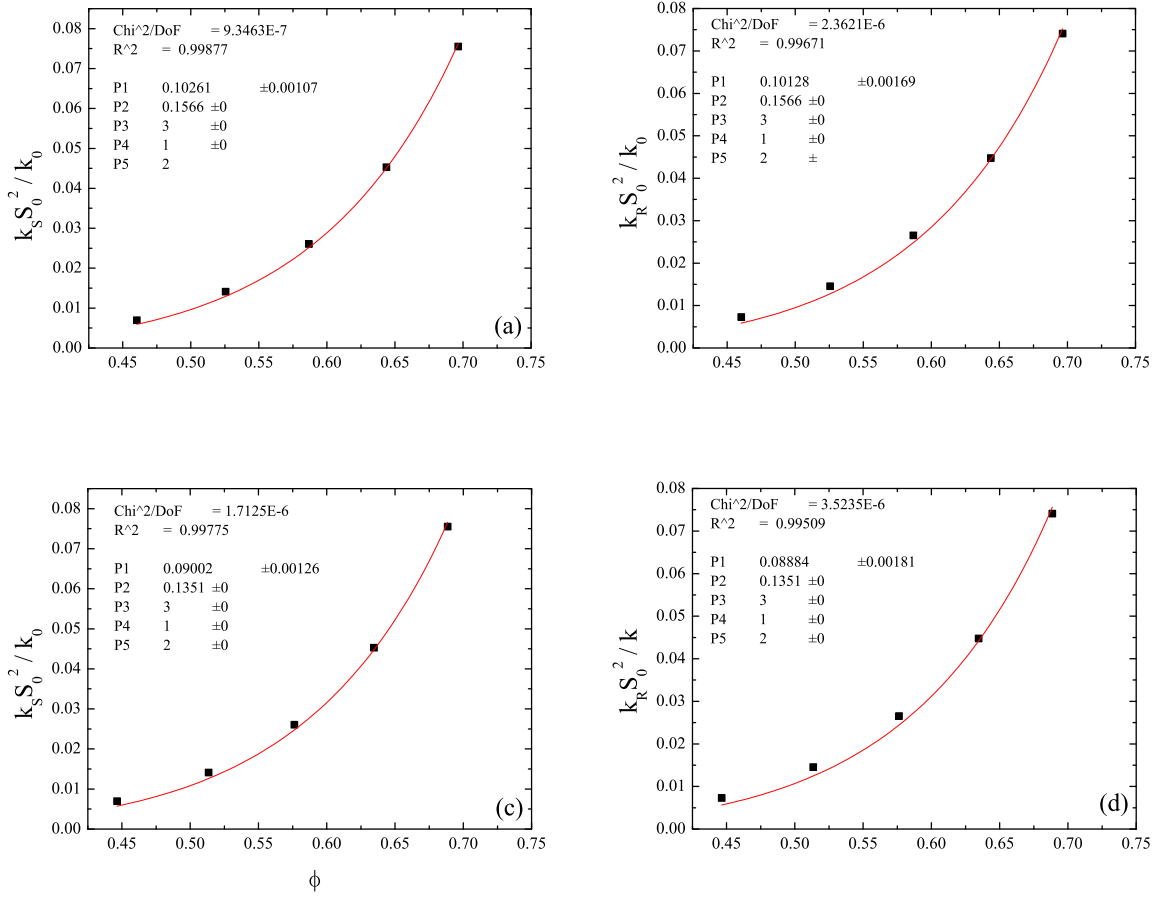


Figura 22 – Ajustes por mínimos quadrados feitos para a relação de KC modificada (Eq. 3.1, página 64) para os dados apresentados na Fig. 21 nas gerações $g = 2$ (painéis (a) e (b)) e $g = 3$ (painéis (c) e (d)). A função escolhida para os ajustes foi: $f(x) = P_1 \frac{(x-P_2)^{P_3}}{(P_4+P_2-x)^{P_5}}$. Esta função reproduz a Eq. 3.1 para $P_1 = A_g$, $P_2 = \phi(s = 1, g)$, $P_3 = 3$, $P_4 = 1$ e $P_5 = 2$.

seguida por um platô onde, dada uma tolerância pré-estabelecida para a flutuação, a média móvel $\langle \Omega_{g,j}^g \rangle$ se mantém estacionária.

Na Fig. 23 plotamos $\Omega_{g,j}^g$ e $\langle \Omega_{g,j}^g \rangle$ para dois dos principais discos ($D_{1,1}$ e $D_{1,2}$) quando $g = 2$, $s = 0.8$, e $Re = 0.559$. Valores positivos e negativos indicam a direção do movimento de rotação e, devido a inversão de simetria vertical, teremos $\langle \Omega_{1,4}^g \rangle = -\langle \Omega_{1,1}^g \rangle$ e $\langle \Omega_{1,2}^g \rangle = -\langle \Omega_{1,3}^g \rangle$. Relações similares são válidas para todos os pares de discos que estão localizados simetricamente acima e abaixo do centro do canal. Exceções são observadas para poucos discos localizados na região central do canal, pois a inversão vertical de simetria do EA em relação ao centro do canal faz com que as componentes do arrasto nas direções horária e anti-horária sejam, em média, iguais. Sendo assim, para estes discos, os valores de $\Omega_{g,j}^g$ serão caracterizados com flutuações em torno de zero, ou seja, $\langle \Omega_{g,j}^g \rangle = 0$.

Outra característica do escoamento que pode ser observada é o fato de que os discos do lado esquerdo do empacotamento giram mais rápidos que os discos localizados

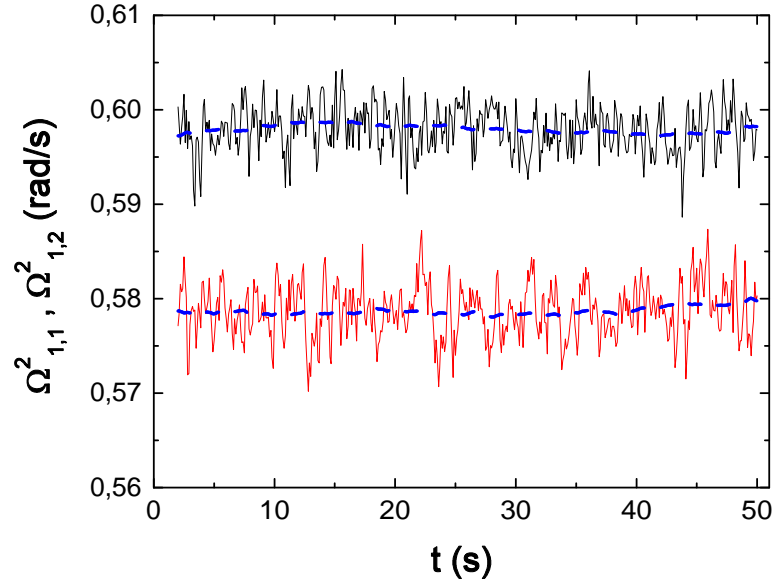


Figura 23 – Dependência de $\Omega_{g,j}^g$ (rad/s) com relação ao tempo para dois discos principais, $D_{1,1}$ (linha preta sólida) e $D_{1,2}$ (linha vermelha (cinza) sólida) quando $g = 2$, $s = 0.8$ e $Re = 5.6$. Os resultados da média móvel $\langle \Omega_{g,j}^g \rangle$, cuja largura da janela foi obtida com 100 pontos, estão indicados pelas linhas tracejadas sobrepostas.

simetricamente do lado direito, como ilustrado nas Figs. 23 e 24. Como discutido na subseção anterior, este comportamento está relacionado com as diferenças dos fluxos através dos canais próximos à entrada C_i e os próximos à saída \bar{C}_i . O arrasto sobre os discos do lado esquerdo do tampão é maior porque eles experimentam o primeiro contato com o fluido vindo do lado esquerdo, e também pelo fato de que os discos do meio do canal, que aparecem para $g \geq 2$, desviam parte do fluxo do canal C_2 para os canais das paredes \bar{C}_1 . Como discutido anteriormente, o efeito das alterações no perfil do escoamento tornam-se mais significativos para grandes valores de Re e provocam um aumento na resistência hidráulica.

Um resultado muito surpreendente da nossa investigação é a identificação de uma quebra espontânea de simetria no comportamento temporal de $\Omega_{g,j}^g$. O padrão consistindo de um platô estável com superposição de flutuações aleatórias, característico para todos discos de $g = 1$ e $g = 2$, é substituído por um comportamento oscilatório para quase todos os discos introduzidos no sistema em $g = 3$ e $g = 4$. Este fato é ilustrado na Fig. 25 na página 70, com resultados obtidos para $g = 3$. Observa-se que a evolução temporal de $\Omega_{3,j}^3$, quando $j = 1, 2, 5, 9$, $s = 0.8$, e $Re = 2.8, 5.6$ e 16.8 , apresenta uma fase de platô com oscilações senoidais bastante estáveis, que são qualitativamente reproduzidas para outros valores de s e Re . Estes padrões oscilatórios apresentam várias características interessantes, por exemplo, a frequência de oscilação e a amplitude dependem do valor do número de

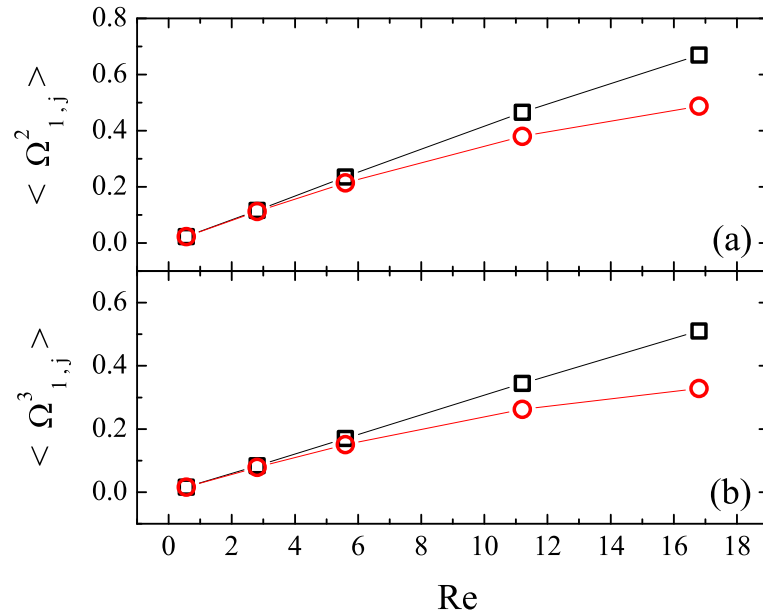


Figura 24 – Valor médio $\langle \Omega_{g,j}^g \rangle$ como função de Re para os discos $D_{1,1}$ (quadrado) e $D_{1,2}$ (círculo), quando $s = 0.8$ e $g = 2$ (a) e $g = 3$ (b). Isto indica que os disco próximos da entrada (quadrados pretos) giram com uma velocidade angular maior que os que estão próximos da saída (círculos vermelhos). Este comportamento está relacionado com o fato de que os fluxos nos canais das paredes \bar{C}_1 são maiores que C_1 , e que o fluxo através do canal \bar{C}_2 é menor que em C_2 .

Reynolds, enquanto alguns discos oscilam fora de fase, como é observado para os discos $D_{3,1}$ e $D_{3,2}$.

O comportamento oscilatório da velocidade angular, com condições independentes do tempo aplicadas na entrada e saída do canal, nos lembra típicas instabilidades hidrodinâmicas, tais como aquelas observadas no escoamento de Couette entre cilindros e em sistemas do tipo Rayleigh-Bénard. Nestes casos, as instabilidades se manifestam pelo surgimento de um (ou mais) modos de oscilação estacionários superpostos ao campo de velocidade independente do tempo, que era previamente estável. Estas instabilidades surgem depois que as forças que atuam no sistema atingem um determinado limite. A maior diferença entre as oscilações reportadas neste trabalho para os exemplos bem conhecidos citados aqui é o fato que, até onde foi possível analisar, o comportamento oscilatório está presente para qualquer valor de $Re > 0.11$. Como mencionado anteriormente, o regime de Reynolds extremamente baixo é muito difícil de ser analisado devido ao longo tempo de integração. Por isso, não foi possível encontrar precisamente se o regime oscilatório emerge em $Re = 0$ ou em um valor finito $Re_0 > 0$, o que seria mais similar as instabilidades já mencionadas.

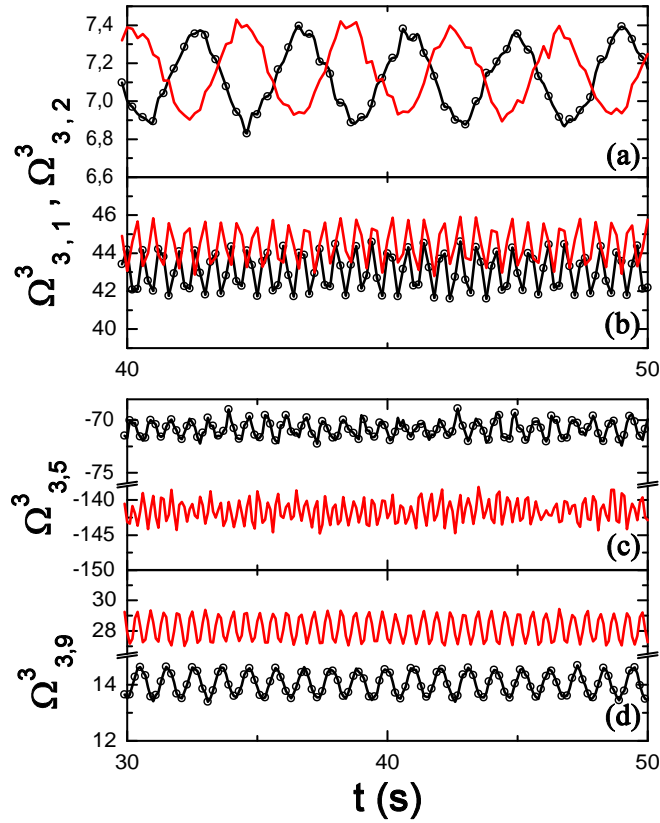


Figura 25 – Comportamento oscilatório de $\Omega_{g,j}^g$ ($\times 10^{-2}$ rad/s) com relação ao tempo para alguns discos introduzidos em $g = 3$. Nos painéis (a) e (b), círculos pretos ligados por traços e linhas vermelhas sólidas correspondem, respectivamente, aos discos $D_{3,1}$ e $D_{3,2}$, para $Re = 2.8$ (a) e $Re = 16.8$ (b). No painel (c), círculos pretos ligados por traços e linha vermelha sólida correspondem aos dados de $D_{3,5}$ para $Re = 2.8$ e 5.6 , respectivamente. O mesmo é válido para o comportamento de $D_{3,9}$ no painel (d). O fator de redução dos discos é $s = 0.8$.

Um segundo maior aspecto que se observa é o fato que os padrões oscilatórios parecem ser localizados. Uma vez que nem todos os discos oscilam (por exemplo, os adicionados em $g = 1$ e 2), em muitas regiões dentro do canal o fluido mantém o padrão observado para o regime estático. Apenas na vizinhança imediata dos discos oscilantes o fluido segue o mesmo padrão.

Como algumas velocidades angulares $\Omega(t)$ apresentam uma padrão senoidal, utilizamos a técnica de análise de sinais por transformada rápida de Fourier (FFT)³ para identificar as frequências relevantes de $\bar{\Omega}_{g,j}^g(f)$ na fase oscilatória, onde

$$\bar{\Omega}(f) = \frac{1}{2\pi} \int \Omega(t) e^{-2\pi i f t} dt$$

indica a transformada de Fourier de $\Omega(t)$. Resultados típicos são apresentados na Fig. 26, indicando que a componente dominante $f_{g,j}^g$ é maior do que todas as outras contribuições

³ Em inglês fast Fourier transform, ou FFT.

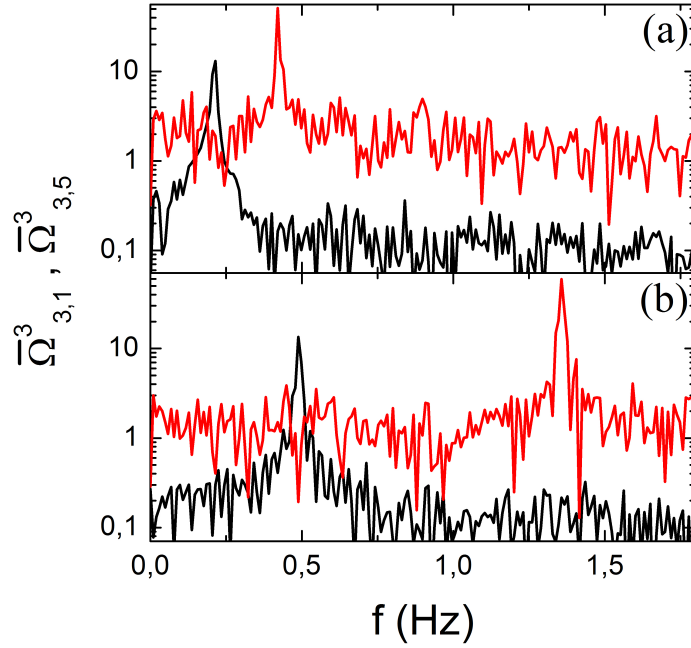


Figura 26 – Resultado da análise FFT de $\bar{\Omega}_{3,1}^3$ (linha preta) e $\bar{\Omega}_{3,5}^3$ (linha vermelha (cinza)), quando $g = 3$ e $Re = 2.8$ para $s = 0.6$ (a), e $s = 0.8$ (b). Todos os espectros são caracterizados por um único pico dominante, os quais apresentam pelo menos uma ordem de magnitude maior do que as outras contribuições espectrais.

espectrais. Cada painel corrobora a evidência da Fig. 24 que as frequências de oscilação dependem de cada disco. A comparação do espectro de potência nos painéis (a) e (b) revelam que $f_{g,j}^g$ aumenta com s dentro do limite investigado. Uma vez que todos os espectros foram obtidos para um valor fixo de Re e o fluxo global no canal se mantém constante, valores maiores de velocidades nos canais C_1 (\bar{C}_1) e C_2 (\bar{C}_2) quando s aumenta tem o mesmo efeito na frequência de oscilação que o aumento de velocidade mostrado na Fig. 24. De fato, na Fig. 27 nós plotamos curvas mostrando $f_{g,j}^g \times Re$, para alguns valores de j e s . Elas claramente indicam uma relação quase linear entre estas quantidades, e embora o coeficiente angular dependa de outras características, ainda é possível concluir que $f_{g,j}^g = f_{g,j}^g(s, Re)$.

Quando $g = 4$, o comportamento oscilatório dos discos introduzidos em $g = 3$ persiste. O mesmo tipo de padrão oscilatório também é observado para todos os novos discos introduzidos em $g = 4$, que não estão localizados no centro do canal. A comparação das frequências dos discos da geração 3 com suas respectivas frequências em $g = 4$, revela que $f_{3,j}^4 < f_{3,j}^3$. Observa-se também que a frequência de oscilação $f_{4,j}^4$ dos novos discos de $g = 4$ são geralmente menores que a frequência $f_{3,\ell}^4$ dos seus discos vizinhos introduzidos em $g = 3$. Aqui, nós entendemos que, se $s = 1$, os discos $D_{4,j}$ e $D_{3,\ell}$ são mutuamente tangentes. Então espera-se que comportamento semelhante prevalecerá para uma investigação com

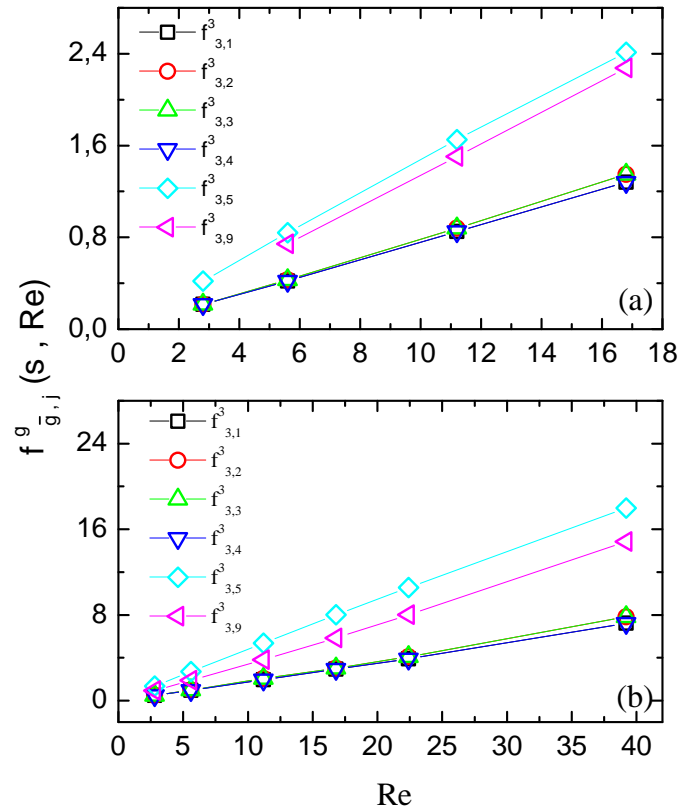


Figura 27 – Dependência de $f_{g,j}^g(s, Re)$ com relação a Re quando $g = 3$, $s = 0.6$ (a) e $s = 0.8$ (b) para alguns valores de j . Em todos os casos, uma dependência linear entre $f_{g,j}^g$ e Re é observada.

valores maiores de g .

Embora um grande intervalo de valores de Re tenha sido explorado, não foi possível detectar o surgimento de qualquer instabilidade secundária, com um pico significativo nos valores da frequência, que não sejam os $f_{g,j}^g$. Contudo, se levarmos em conta outros sistemas hidrodinâmicos caracterizados por uma série de instabilidades sucessivas, não podemos afirmar de que um padrão similar não pode existir nesse sistema.

3.2.2 Densidade dos discos e resposta transiente

Até aqui os resultados discutidos foram obtidos para o caso simples em que a densidade dos discos (ρ^D) e do fluido (ρ) são iguais. Um vez que esta condição não é a mais geral, realizamos uma investigação preliminar para um conjunto restrito de valores $\rho^D \neq \rho$, modificando o valor da densidade na Eq. 2.102 da página 51. Lembramos que a condição de discos estáticos pode ser interpretada como $\rho^D \rightarrow \infty$, ou seja, quando a inércia dos discos é tão grande que eles não giram.

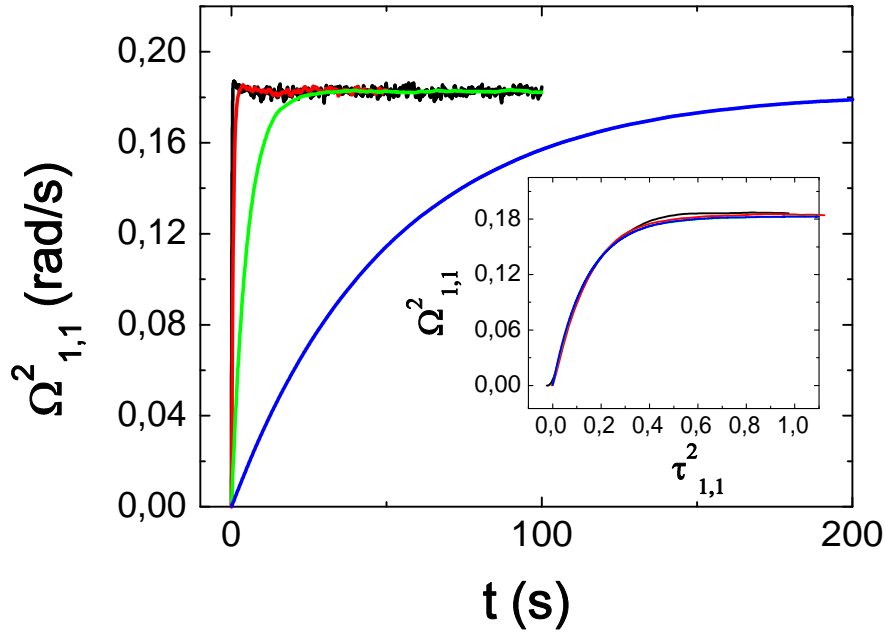


Figura 28 – Influência da densidade do disco (ρ^D) sobre a fase transitória do círculo $D_{1,1}$ para $g = 2$, $s = 0.7$ e $v = 0.5$ m/s (a). No painel (b), as curvas aparecem colapsadas por um reescalonamento do tempo $\tau_{1,1}^2$ definida pela Eq. 3.3. Linhas coloridas para $\rho^c = \rho, 10\rho, 100\rho, 1000\rho$ são, respectivamente, preta, vermelha, verde e azul.

Nossos resultados evidenciam que, enquanto ρ^D é finito e $g = 1$ e 2 , o sistema sempre evolui para uma mesma configuração de discos girantes, isto é, $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Omega_{\bar{g},j}^g \rangle$ não depende de ρ^D . Como consequência, os resultados obtidos para k e G , quando $\rho^D = \rho$, também são válidos para $0 < \rho^D < \infty$, desde que os coeficientes sejam avaliados após a fase do platô estacionário ter sido atingida.

O efeito de ρ^D na dinâmica dos discos pode ser observado, por exemplo, na fase transitória, quando a velocidade angular média ainda não é constante. Isto é ilustrado na Fig. 28, onde são plotados os dados da evolução temporal de $\Omega_{1,1}^2$ para três valores distintos de $\rho^D \neq \rho$. As curvas revelam que a duração da fase transitória aumenta conjuntamente com ρ^D e, ao mesmo tempo, confirma que as alturas dos platôs são coincidentes. Para este disco em particular, e alguns outros, é possível obter um colapso dos dados de $\Omega_{1,1}^2(\rho^D)$ se o tempo é escalado por

$$T_{1,1}^2 = \frac{t - 0.025}{\rho^D} A_{1,1}^2, \quad (3.3)$$

onde $A_{1,1}^2 = A_{1,1}^2(\rho^D)$ é uma função que depende de ρ^D . Foi adotado o mesmo sistema de identificação de três índices para $T_{1,1}^2$ e $A_{1,1}^2$. O colapso das curvas é mostrado no painel interno da Fig. 28 (página 73). Verificou-se que o mesmo escalonamento é observado para todos os discos inseridos em $g = 1$.

Os discos introduzidos no EA para outros valores de g seguem padrões transitórios

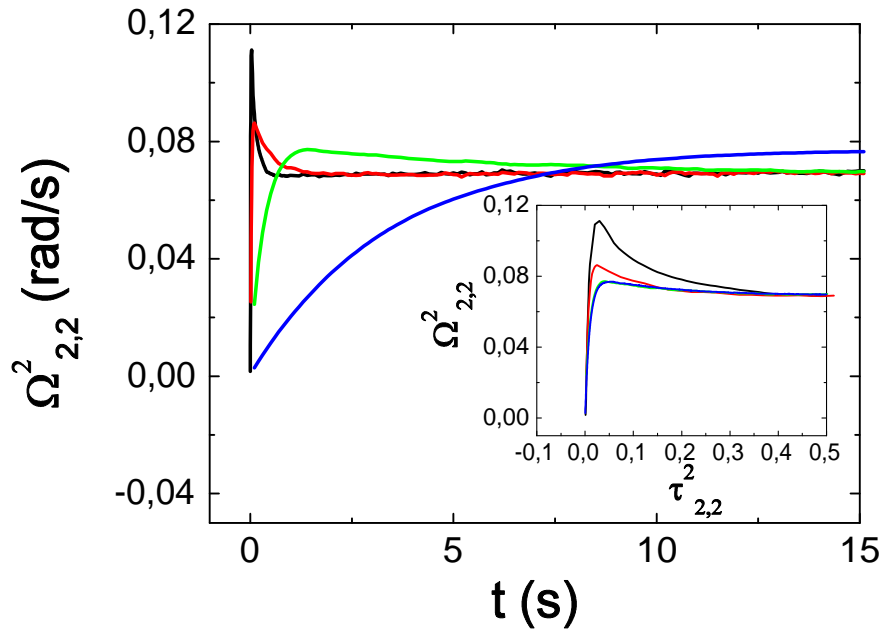


Figura 29 – Influência de ρ^D sobre a fase transiente do disco $D_{(2,1)}$ (a). Aqui $\Omega_{2,1}^2$ aumenta para além do valor estacionário, de modo que o reescalonamento usado para os discos de $g = 1$ não é mais válido. Este caso é mostrado no painel interno, onde a mesma suposição usada na Fig. 28 foi utilizada. As linhas coloridas para $\rho^D = \rho, 10\rho, 100\rho, 1000\rho$ são, respectivamente, preta, vermelha, verde e azul.

diferentes, como ilustrado na Fig. 29 (página 74) para o $\Omega_{2,2}^2(\rho^D)$. É bem evidente que as características relacionadas com a duração da fase transitória e com as alturas dos platôs, são praticamente as mesmas indicadas para o disco $D_{1,1}$. Entretanto, a passagem da fase transitória para o platô podem ser bem diferentes, indicando que o colapso das curvas nas partes transitórias pelo reescalonamento do tempo da Eq. 3.3, não seja mais válido (ver painel interno da Fig. 29). Sendo assim, não foi possível obter uma expressão geral para $A(\rho^D)$.

Um resultado de certa forma contra-intuitivo, refere-se à influência de ρ^D sobre f_0 . Todas as integrações numéricas indicam que o comportamento oscilatório de $\Omega_{g,j}^g$, para vários discos, é quase indiferente da escolha de ρ^D . Ou seja a resposta oscilatória dos discos não depende de sua inércia, mesmo em situações extremas onde $\rho^D/\rho = 100$.

4 Sistemas magnéticos

4.1 Modelo de Ising

Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising, este modelo tinha como objetivo estudar o fenômeno de ferromagnetismo [77]. O modelo inicial era bem simples, consistia de uma cadeia linear de átomos de um mesmo material magnético. Cada átomo da cadeia foi considerado com um spin eletrônico resultante \vec{S}_i e um *momentum* magnético $\vec{\mu}_i$, onde o *momentum* magnético de um átomo é relacionado com seu spin por $\vec{\mu}_i = g\mu_0\vec{S}_i$ ($\mu_0 = eh/(2mc)$ é o magneton de Bohr) [77, 78]. Na presença de um campo magnético \vec{H} aplicado externamente, os átomos da rede tenderão a se alinhar na direção do campo. Por simplicidade, consideremos o campo sendo aplicado na direção perpendicular ao eixo da cadeia, por exemplo na direção do eixo z ($\vec{H} = H_0\hat{z}$). O Hamiltoniano \mathcal{H}_0 que representa a interação dos átomos com o campo é dado por

$$\mathcal{H}_0 = -g\mu_0 \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{H}_0 = -g\mu_0 H_0 \sum_{i=1}^N S_{iz} \quad (4.1)$$

Da mecânica quântica sabe-se que cada S_{iz} deve assumir valores discretos expressos por

$$S_{iz} = m, \quad m = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S. \quad (4.2)$$

Para o caso especial de $S = 1/2$, a variável m poderá assumir os valores ± 1 . Sendo assim, pode-se utilizar uma variável $\sigma_i \pm 1$ para designar o estado do i -ésimo sítio da rede, sendo (+1) quando o *momentum* magnético estiver alinhado paralelamente ao campo (“para cima”), ou (-1) quando estiver antiparalelo (“para baixo”). Portanto,

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{g\mu_0 H_0}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (4.3)$$

Além da interação com o campo, os átomos de cada sítio poderão interagir com outros átomos situados na sua vizinhança. Esta interação não é devida a interação magnética dipolo-dipolo, pois em geral ela é muito fraca para produzir o fenômeno de magnetismo [78]. A proposta sugerida por Lenz (1920) e investigada por Ising (1925) é de que a interação deve ocorrer apenas entre primeiros vizinhos, chamada de interação de “troca”, e deve ser expressa pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}' = - \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (4.4)$$

A notação $\langle i, j \rangle$ representa a soma sobre os pares de primeiros vizinhos e $J_{i,j}$ é uma constante denominada de energia de troca (ou constante de troca), associada a interação

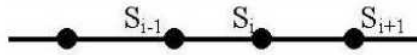


Figura 30 – Modelo de uma cadeia linear.

de troca entre dois spins situados nos sítios i e j . Quando $J_{i,j} > 0$, o estado de menor energia corresponderá à configuração em que os átomos interagentes apresentam orientação de spin paralela, ou seja, teremos sistemas ferromagnéticos. Para $J_{i,j} < 0$, o estado de menor energia será alcançado com o alinhamento antiparalelo dos spins, tendo assim um sistema antiferromagnético.

Levando-se em conta as interações de troca entre os átomos da rede e a interação com o campo magnético externo, teremos o Hamiltoniano de Ising para o sistema, dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (4.5)$$

onde h é uma constante proporcional ao campo magnético externo H , mas com unidade de energia (neste trabalho iremos denotar simplesmente como campo magnético externo). Tomando $J_{ij} = 0$ na Eq. 4.5, recupera-se o Hamiltoniano de um sólido paramagnético.

Em 1925 Ising mostrou, utilizando uma análise combinatória, que o seu modelo aplicado a uma cadeia linear não apresentava transição de fase para valores de temperatura diferentes de zero, ou seja, a magnetização espontânea não poderia ser explicada por este modelo unidimensional [77, 79]. Ising, erroneamente, também concluiu que o modelo em 2D e 3D também não apresentaria transição de fase [80]. No entanto, em 1936 Peierls mostrou que em duas dimensões deveria existir uma magnetização espontânea abaixo de uma temperatura finita [81]. Mas, foi somente em 1944 que Lars Onsager [82], aplicando o método de matriz de transferência, primeiramente introduzido por Kramers e Wannier em 1941 [83], obteve a primeira solução analítica para o modelo de Ising em uma rede bidimensional a campo nulo [77]. Muitos outros métodos de solução e generalização para o modelo de Ising foram obtidos e publicados. O leitor que tiver interesse poderá encontrá-los nas referências [77, 81, 84, 85]. No entanto, neste trabalho trataremos apenas da técnica de matrizes de transferência, por ser mais adequada ao estudo do modelo de Ising na rede apoloniana. A técnica de matrizes de transferência aplicada a redes homogêneas, que não é o caso da rede deste trabalho, pode ser facilmente encontrada nos livros básicos de física estatística, como por exemplo [77, 81, 84, 85]. Sendo assim, faremos uma breve discussão da técnica MT aplicada a uma rede unidimensional no Apêndice B.

4.2 Modelos de Ising em rede apoloniana

O processo de construção da rede apoloniana (RA) é baseado no empacotamento Apoloniano (ver Apêndice A), onde os nós são definidos pelas posições dos centros dos

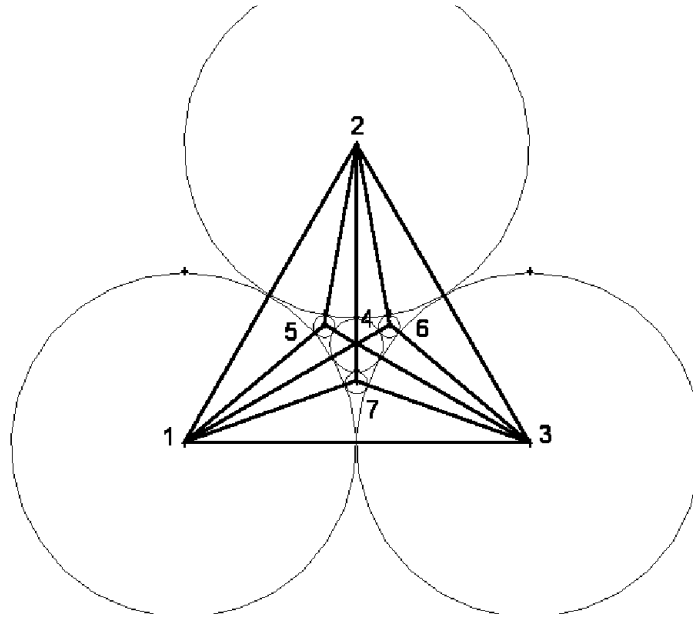


Figura 31 – Construção da RA a partir do EA. Neste caso $g = 3$.

círculos, e as arestas são desenhadas entre qualquer par de círculos tangentes [10]. Na Fig. 31 ilustramos o processo de construção para a rede com 7 nós, que corresponde a segunda geração $g = 2$ do modelo. O número de nós na rede $N(g)$ e arestas $B(g)$, aumentam com a geração e são expressos pelas seguintes relações [10, 17]

$$N(g) = \frac{3^g + 5}{2}, \quad B(g) = \frac{3^{g+1} + 3}{2}. \quad (4.6)$$

No limite de $g \rightarrow \infty$, teremos

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \frac{B(g)}{N(g)} = \frac{3^{g+1}}{3^g} = 3. \quad (4.7)$$

Já a distribuição de conectividade da rede apoloniana é [10]:

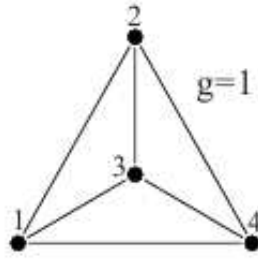
$$P(k) \propto k^{1-\gamma} \quad (4.8)$$

com $\gamma = \ln 3 / \ln 2 \approx 1.582$.

Um dos primeiros trabalhos a estudar modelos magnéticos sobre uma rede apoloniana foi publicado em 2005 pelos autores da referência [17]. Neste artigo foi considerado que a interação entre os spins é intermediada por uma constante de troca $J_{g,m}$, onde $m = 0, \dots, g$, introduzida na m -ésima geração no processo de construção da rede até a geração g . Por exemplo se $g = 1$ (Fig. 32), $J_{1,0}$ corresponderá a constante de interação entre os pares de nós externos (1,2; 2,4; 4,1), já $J_{1,1}$ a constante de interação entre o nós externos e o interno (1,3; 2,3; 4,3).

Os autores propuseram a seguinte expressão para $J_{g,m}$:

$$J_{g,m} = \frac{(\pm 1)^m J_0}{(g - m + 1)^\delta}, \quad (4.9)$$

Figura 32 – Rede apoloniana com $g = 1$.

onde o expoente δ controla como as interações decaem com $g - m$, garantindo que as interações mais fortes sejam aquelas que os spins estejam mais próximos [17]. Ao final do trabalho os pesquisadores não detectaram evidências de uma criticalidade assintótica que pudesse sugerir uma transição de fase com a variação da temperatura. Vale ressaltar que, se $\delta = 0$, $J_{g,m} = (\pm 1)^m J_0$, de forma que o modelo ferromagnético com interação constante é obtido quando o sinal $+$ é considerado.

Na tentativa de encontrar alguma evidência de criticalidade de modelos magnéticos aplicados à rede apoloniana, desde 2005 muitos pesquisadores passaram a investigar outros modelos físicos sobre a RA, dentre os quais podemos citar [21, 31, 34, 40]. No modelo proposto em [21], foi considerado o modelo de Ising sobre a RA com constante de troca entre dois spins (i, j) definida como uma função do grau da vizinhança dos dois sítios e expressa por

$$J_{i,j} = \frac{J_0}{(k_i k_j)^\mu}. \quad (4.10)$$

Aqui também se observa que, tomando-se $\mu = 0$, recupera-se o modelo uniforme no caso limite. No trabalho [31] os autores usaram técnicas de grupo de renormalização em sistemas de spin desordenados temperados e vidro de spin de Ising, ou seja, os $J_{i,j}$ foram distribuídos com uma distribuição de probabilidade $P(J_{i,j})$ desordenada temperada. Já em [34] com modelo ferromagnético de Potts onde consideraram $J_{i,j} = J$. Na referência [40] foi utilizado o modelo de Ising recozido. Apesar dos esforços destes pesquisadores, nenhum dos sistemas magnéticos estudados sobre a rede apoloniana apresentou uma temperatura de transição de fase. Em contraste, foi detectada para o modelo de voto de maioria¹ uma transição de fase de segunda ordem, em função de um parâmetro de ruído q , no trabalho [36].

A rede apoloniana não pode ser considerada como uma rede regular, pois os três nós externos não apresentam o mesmo grau de conectividade que os nós internos. Para contornar este fato, os autores dos trabalhos [86, 87] aplicaram o modelo de Ising em uma rede apoloniana regularizada², o que favoreceu uma solução exata via renormalização, e mostraram que, para alguns modelos antiferromagnéticos, existe transição de fase de ordem infinita. No entanto, eles também mostraram que sistemas ferromagnéticos e

¹ Em inglês, *majority vote model*.

² Em inglês, *regularized apollonian network*.

antiferromagnéticos ordinários (com constante de acoplamento $J_{ij} = \pm J$) não apresentam transição de fase. Vale salientar que transições de fase em redes apolonianas foram detectadas para uma série de diferentes modelos físicos. Por exemplo, a condensação de Bose-Einstein de um gás ideal [32, 33, 35, 37] e a transição entre um estado absorvente e um estado ativo de epidemias [38, 39]. Sendo assim, a busca por evidências de criticalidade de modelos magnéticos sobre a rede apoloniana é um problema aberto e devido às suas diversas aplicações precisa ser solucionado.

4.3 Modelo com interações dependentes das distâncias entre os sítios

Neste trabalho vamos considerar o modelo de Ising com spins $\sigma \pm 1$ alocados em cada sítio da rede apoloniana. Pares de spins (i, j) que são vizinhos na rede, interagem com uma constante de troca $J_{i,j}$. Diferentemente do caso [21], onde os autores consideram o grau da vizinhança na constante de troca, propomos definir a constante de troca como uma função da distância de separação entre os nós. A razão física para isto é que apesar da rede apoloniana ser muito importante para o estudo de empacotamento granulares e redes de força [38], os trabalhos anteriores não levaram em consideração o tamanho dos grãos ou a distância de separação dos vizinhos. Além disso, verifica-se que no problema do empacotamento Apoloniano (Apêndice A), o tamanho do raio depende tanto da localização como da vizinhança do círculo. Sendo assim, propomos definir a constante de troca entre dois sítios i e j pela seguinte expressão:

$$J_{ij} = \frac{J_0}{(r_i + r_j)^\alpha}, \quad (4.11)$$

onde r_i e r_j são os raios dos círculos tangentes, centrados nos sítios i e j , obtidos no processo de construção do empacotamento apoloniano (ver Apêndice A). A variável α é um fator para controlar o decaimento da interação. Assim como em [17, 21], quando $\alpha = 0$ na Eq. 4.11 o modelo para o caso uniforme é recuperado.

Portanto, o Hamiltoniano de Ising para o sistema poderá ser escrito por

$$\mathcal{H}_g = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (4.12)$$

onde J_{ij} será expresso pela Eq. 4.11. O índice g utilizado no Hamiltoniano representa a geração que está em análise. Por simplicidade, neste trabalho consideramos o sistema na ausência de um campo externo ($h = 0$), logo o Hamiltoniano de trabalho será

$$\mathcal{H}_g = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (4.13)$$

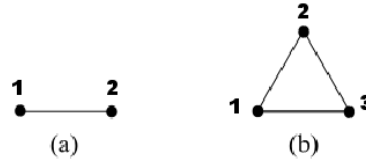


Figura 33 – Modelos simplificados para aplicação da técnica de MT: (a) cadeia linear com dois sítios e (b) cadeia com três sítios na forma triangular.

4.3.1 Técnica de matrizes de transferência na rede apoloniana

Vamos detalhar a aplicação da técnica de matrizes de transferência ao estudo do modelo de Ising com interações dependentes da distância entre os nós da rede apoloniana. Para ficar claro o processo de construção, consideremos inicialmente a ligação entre dois sítios 1 e 2, como mostrado na Fig. 33a. Consideremos que estes dois sítios estão ocupados por átomos de um mesmo material magnético, e seus *momenta* magnéticos só podem apontar em dois sentidos, para cima (+1) ou para baixo (−1). Neste caso podemos utilizar a variável $\sigma_i = \pm 1$ ($i = 1$ ou 2) para representar o sentido adotado pelo *momentum* magnético do átomo. Assumimos que a interação entre os sítios 1 e 2, representada por J_{12} , depende da distância entre eles através de uma lei de potência definida pela Eq. 4.11. Assim, o Hamiltoniano de Ising para este par de spins é

$$\mathcal{H}_{par} = -J_{12}\sigma_1\sigma_2 = J_0(r_1 + r_2)^{-\alpha}\sigma_1\sigma_2 \quad (4.14)$$

onde r_i é o raio do círculo i ($i = 1, 2$) e α um fator que controla o decaimento da interação. Para o cálculo da função de partição temos:

$$Z_{par} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \exp(\beta J_{12}\sigma_1\sigma_2) \quad (4.15)$$

$$= e^{\beta J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^+} + e^{\beta J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^-} + e^{\beta J_{12}\sigma_1^-\sigma_2^+} + e^{\beta J_{12}\sigma_1^-\sigma_2^-} \quad (4.16)$$

onde representamos por σ_i^+ o estado +1 do sítio i e σ_i^- o estado −1. As interações entre os sítios 1 e 2 podem ser expressas de uma maneira mais conveniente utilizando formalismo matricial, como segue:

$$A_{12}^{par} = \begin{bmatrix} e^{\beta J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^+} & e^{\beta J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^-} \\ e^{\beta J_{12}\sigma_1^-\sigma_2^+} & e^{\beta J_{12}\sigma_1^-\sigma_2^-} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \sigma_1^+ | A_{12}^{par} | \sigma_2^+ \rangle & \langle \sigma_1^+ | A_{12}^{par} | \sigma_2^- \rangle \\ \langle \sigma_1^- | A_{12}^{par} | \sigma_2^+ \rangle & \langle \sigma_1^- | A_{12}^{par} | \sigma_2^- \rangle \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

Definindo $p_{12} = e^{\beta J_{12}}$ e $q_{12} = e^{-\beta J_{12}}$, obtemos

$$A_{12}^{par} = \begin{bmatrix} p_{12} & q_{12} \\ q_{12} & p_{12} \end{bmatrix}, \quad (4.18)$$

onde a matriz A_{12}^{par} é denominada de matriz de transferência (MT- ver Apêndice B), e guarda as interações entre os átomos situados nos sítios 1 e 2. A partir deste ponto, vamos introduzir novos procedimentos para que o formalismo de MT possa ser aplicado. Com

efeito, no formalismo desenvolvido no Apêndice B, a propriedade fundamental que permite a obtenção de uma função de partição é a simetria de translação da cadeia linear. No caso de modelos em rede sem esta simetria, pode-se fazer uso de outras simetrias. Tal é o caso da rede apoloniana, onde a simetria de invariância de escala é invocada no desenvolvimento de um formalismo de MT que permite o cálculo numérico de Z em diversas situações. No caso do modelo tratado neste trabalho, é necessário o desenvolvimento de um novo formalismo, pois as interações entre os spins além de não serem uniformes, não dependem da geração quando a ligação é introduzida no modelo, e não dependem do grau do nó. Os três formalismos já desenvolvidos nos trabalhos [17, 21, 34], não são capazes de lidar com a dependência de J_{ij} com relação a distância entre os nós. Assim, para exemplificar este novo procedimento, consideremos a geometria da Fig. 33b, onde introduzimos um novo sítio. Agora as linhas que representam as interações entre dois sítios formam um triângulo com vértices (1, 2, 3). Mais adiante outros triângulos surgirão na geometria da rede. Para facilitar a identificação dos triângulos que ocupam a rede apoloniana, vamos utilizar uma variável inteira t , que para este caso terá o valor 1. Este triângulo foi originado pela união dos centros dos três círculos iniciais mutuamente tangentes, e nós consideramos este caso como a primeira geração ($g = 1$) do modelo. O Hamiltoniano dessa nova configuração é

$$\mathcal{H}_1^1 = -J_{13}\sigma_1\sigma_3 - J_{32}\sigma_3\sigma_2 - J_{12}\sigma_1\sigma_2, \quad (4.19)$$

e a função de partição é:

$$Z_1^1 = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \exp(\beta J_{13}\sigma_1\sigma_3) \exp(\beta J_{32}\sigma_3\sigma_2) \exp(\beta J_{12}\sigma_1\sigma_2).$$

Os índices inferior e superior utilizados em \mathcal{H}_1^1 e Z_1^1 indicam, respectivamente, que estamos analisando o triângulo $t = 1$ na geração $g = 1$. Efetuando a soma de Z_1^1 em σ_1 e em σ_2 temos:

$$\begin{aligned} Z_1^1 = \sum_{\sigma_3} & \left\{ \left[\left(e^{(\beta J_{13}\sigma_1^+\sigma_3)} e^{(\beta J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^+)} \right) + \left(e^{(\beta J_{13}\sigma_1^-\sigma_3)} e^{(\beta J_{12}\sigma_1^-\sigma_2^+)} \right) \right] e^{(\beta J_{32}\sigma_3\sigma_2^+)} + \right. \\ & \left. + \left[\left(e^{(\beta J_{13}\sigma_1^+\sigma_3)} e^{(\beta J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^-)} \right) + \left(e^{(\beta J_{13}\sigma_1^-\sigma_3)} e^{(\beta J_{12}\sigma_1^-\sigma_2^-)} \right) \right] e^{(\beta J_{32}\sigma_3\sigma_2^-)} \right\} \quad (4.20) \end{aligned}$$

Definindo genericamente $p_{uv} = (q_{uv})^{-1} = e^{\beta J_{uv}}$, obtemos

$$\begin{aligned} Z_1^1 &= (p_{13}p_{12} + q_{13}q_{12})p_{32} + (p_{13}q_{12} + q_{13}p_{12})q_{32} + (q_{13}p_{12} + p_{13}q_{12})q_{32} + (q_{13}q_{12} + p_{13}p_{12})p_{32} \\ &= (p_{13}p_{32} + q_{13}q_{32})p_{12} + (p_{13}q_{32} + q_{13}p_{32})q_{12} + (p_{13}q_{32} + q_{13}p_{32})q_{12} + (p_{13}p_{32} + q_{13}q_{32})p_{12}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Escrevendo os termos da função de partição na forma de uma matriz de transferência entre os sítios 1 e 2, representada por A_1^1 , onde utilizamos os mesmos índices do Hamiltoniano e da função de partição, temos:

$$A_1^1 = \begin{bmatrix} (p_{13}p_{32} + q_{13}q_{32})p_{12} & (p_{13}q_{32} + q_{13}p_{32})q_{12} \\ (p_{13}q_{32} + q_{13}p_{32})q_{12} & (p_{13}p_{32} + q_{13}q_{32})p_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{12}^1 & q_{12}^1 \\ q_{12}^1 & p_{12}^1 \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

Nota-se que os termos entre parênteses podem ser expressos como o resultado do produto de matrizes do tipo da expressão 4.18, mas para interações entre os sítios (1; 3) e (3; 2), que vamos representar respectivamente por A_{13}^{par} e A_{32}^{par} . Assim:

$$A_{13}^{par} A_{32}^{par} = \begin{bmatrix} p_{13} & q_{13} \\ q_{13} & p_{13} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{32} & q_{32} \\ q_{32} & p_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{13}p_{32} + q_{13}q_{32} & p_{13}q_{32} + q_{13}p_{32} \\ p_{13}q_{32} + q_{13}p_{32} & p_{13}p_{32} + q_{13}q_{32} \end{bmatrix}. \quad (4.23)$$

Utilizando álgebra de matrizes, podemos escrever os elementos dessa matriz produto como segue:

$$\langle 1|A_{13}^{par} A_{32}^{par}|2 \rangle = \sum_k \langle 1|A_{13}^{par}|3 \rangle \langle 3|A_{32}^{par}|2 \rangle. \quad (4.24)$$

Sendo assim, os elementos da matriz expressa em 4.22 podem ser obtidos pela seguinte relação:

$$\langle 1|A_1^1|2 \rangle = \sum_3 \langle 1|A_{13}^{par}|3 \rangle \langle 3|A_{32}^{par}|2 \rangle \langle 1|A_{12}^{par}|2 \rangle. \quad (4.25)$$

Uma outra forma de representar as interações entre os três sítios é definindo uma matriz $B_t^{s,g}$ de ordem 2×4 , para descrever as interações entre o sítio raiz 1 com os dois sítios 2 e 3. Nesta representação, o índice inferior e o duplo índice superior utilizados para identificar³ a matriz, indicam que estamos analisando o triângulo t , com geometria do tipo s na geração g . O tipo de geometria é definido pela quantidade de nós no interior do triângulo t , começando com $s = 1$ quando o interior está vazio. Como em $g = 1$ a geometria da rede consiste de um único triângulo de vértices (1, 2, 3), sem nó em seu interior, a matriz para esta geração é $B_1^{1,1}$. Esta matriz de ordem 2×4 , representa os termos da Eq. 4.20 organizados de forma a separar as possíveis combinações dos sítios 2 e 3 para cada valor do sítio 1, ou seja

$$\begin{array}{cccc} \sigma_1^+ : & \sigma_2^+ \sigma_3^+ & \sigma_2^+ \sigma_3^- & \sigma_2^- \sigma_3^+ & \sigma_2^- \sigma_3^- \\ \sigma_1^- : & \sigma_2^+ \sigma_3^+ & \sigma_2^+ \sigma_3^- & \sigma_2^- \sigma_3^+ & \sigma_2^- \sigma_3^- \end{array}.$$

Definindo os elementos da matriz $B_1^{1,1}$ por

$$\langle \sigma_1|B_1^{1,1}|\sigma_2\sigma_3 \rangle = \exp(\beta J_{13}\sigma_1\sigma_3) \exp(\beta J_{32}\sigma_3\sigma_2) \exp(\beta J_{12}\sigma_1\sigma_2), \quad (4.26)$$

a matriz $B_1^{1,1}$ fica com a seguinte estrutura:

$$B_1^{1,1} = \begin{bmatrix} \langle \sigma_1^+|B_1^{1,1}|\sigma_2^+\sigma_3^+ \rangle & \langle \sigma_1^+|B_1^{1,1}|\sigma_2^+\sigma_3^- \rangle \\ \langle \sigma_1^-|B_1^{1,1}|\sigma_2^+\sigma_3^+ \rangle & \langle \sigma_1^-|B_1^{1,1}|\sigma_2^+\sigma_3^- \rangle \\ \langle \sigma_1^+|B_1^{1,1}|\sigma_2^-\sigma_3^+ \rangle & \langle \sigma_1^+|B_1^{1,1}|\sigma_2^-\sigma_3^- \rangle \\ \langle \sigma_1^-|B_1^{1,1}|\sigma_2^-\sigma_3^+ \rangle & \langle \sigma_1^-|B_1^{1,1}|\sigma_2^-\sigma_3^- \rangle \end{bmatrix}. \quad (4.27)$$

³ A necessidade desta identificação ficará mais clara para o leitor para valores de $g \geq 2$.

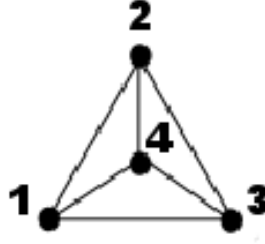


Figura 34 – Rede apoloniana com quatro sítios.

Utilizando a definição $p_{uv} = (q_{uv})^{-1} = e^{\beta J_{uv}}$, a matriz $B_1^{1,1}$ pode ser reescrita por

$$B_1^{1,1} = \begin{bmatrix} p_{12}p_{13}p_{32} & p_{12}q_{13}q_{32} & q_{12}p_{13}q_{32} & q_{12}q_{13}p_{32} \\ q_{12}q_{13}p_{32} & q_{12}p_{13}q_{32} & p_{12}q_{13}q_{32} & p_{12}p_{13}p_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^{1,1} & b_1^{1,1} & c_1^{1,1} & d_1^{1,1} \\ d_1^{1,1} & c_1^{1,1} & b_1^{1,1} & a_1^{1,1} \end{bmatrix}, \quad (4.28)$$

onde foram utilizados os mesmos índices de identificação da matriz $B_1^{1,1}$ nos seus elementos. Na Eq. 4.28, utilizamos o fato de que a campo nulo as seguintes relações são válidas:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{1,1} | \sigma_2^+ \sigma_3^+ \rangle &= a_1^{1,1} = \langle \sigma_1^- | B_1^{1,1} | \sigma_2^- \sigma_3^- \rangle \\ \langle \sigma_1^+ | B_1^{1,1} | \sigma_2^+ \sigma_3^- \rangle &= b_1^{1,1} = \langle \sigma_1^- | B_1^{1,1} | \sigma_2^- \sigma_3^+ \rangle \\ \langle \sigma_1^+ | B_1^{1,1} | \sigma_2^- \sigma_3^+ \rangle &= c_1^{1,1} = \langle \sigma_1^- | B_1^{1,1} | \sigma_2^+ \sigma_3^- \rangle \\ \langle \sigma_1^+ | B_1^{1,1} | \sigma_2^- \sigma_3^- \rangle &= d_1^{1,1} = \langle \sigma_1^- | B_1^{1,1} | \sigma_2^+ \sigma_3^+ \rangle \end{aligned} \quad (4.29)$$

Comparando $B_1^{1,1}$ com a matriz A_1^1 definida na Eq. 4.22, verifica-se que são válidas as seguintes relações entre os elementos destas matrizes:

$$\langle \sigma_1^+ | A_1^1 | \sigma_2^+ \rangle = \langle \sigma_1^+ | B_1^{1,1} | \sigma_2^+ \sigma_3^+ \rangle + \langle \sigma_1^+ | B_1^{1,1} | \sigma_2^+ \sigma_3^- \rangle \quad (4.30)$$

$$\langle \sigma_1^+ | A_1^1 | \sigma_2^- \rangle = \langle \sigma_1^+ | B_1^{1,1} | \sigma_2^- \sigma_3^+ \rangle + \langle \sigma_1^+ | B_1^{1,1} | \sigma_2^- \sigma_3^- \rangle \quad (4.31)$$

$$\langle \sigma_1^- | A_1^1 | \sigma_2^+ \rangle = \langle \sigma_1^- | B_1^{1,1} | \sigma_2^+ \sigma_3^+ \rangle + \langle \sigma_1^- | B_1^{1,1} | \sigma_2^+ \sigma_3^- \rangle \quad (4.32)$$

$$\langle \sigma_1^- | A_1^1 | \sigma_2^- \rangle = \langle \sigma_1^- | B_1^{1,1} | \sigma_2^- \sigma_3^+ \rangle + \langle \sigma_1^- | B_1^{1,1} | \sigma_2^- \sigma_3^- \rangle. \quad (4.33)$$

De uma forma mais compacta temos:

$$\langle \sigma_1 | A_1^1 | \sigma_2 \rangle = \sum_{\sigma_3} \langle \sigma_1 | B_1^{1,1} | \sigma_2 \sigma_3 \rangle. \quad (4.34)$$

Portanto,

$$A_1^1 = \begin{bmatrix} a_1^{1,1} + b_1^{1,1} & c_1^{1,1} + d_1^{1,1} \\ c_1^{1,1} + d_1^{1,1} & a_1^{1,1} + b_1^{1,1} \end{bmatrix}. \quad (4.35)$$

Assim, a função de partição pode ser expressa em função dos elementos de $B_1^{1,1}$ ou A_1^1 .

Vamos agora avançar e introduzir um sítio na região central da rede. Esta nova configuração, ilustrada pela Fig 34, representa a segunda geração do nosso modelo ($g = 2$). O Hamiltoniano do sistema é descrito por:

$$\mathcal{H}_1^2 = -J_{12}\sigma_1\sigma_2 - J_{13}\sigma_1\sigma_3 - J_{32}\sigma_3\sigma_2 - J_{14}\sigma_1\sigma_4 - J_{43}\sigma_4\sigma_3 - J_{42}\sigma_4\sigma_2. \quad (4.36)$$

Na Fig 34 observa-se que, com a inserção do novo sítio, o triângulo da geração $g = 1$ foi dividido em três triângulos menores com vértices $(1, 2, 4)$, $(2, 3, 4)$ e $(3, 1, 4)$. Para facilitar a identificação, vamos numerar estes novos triângulos por 2, 3 e 4, respectivamente. Sendo assim, podemos reescrever o hamiltoniano para esta geração em termos destes novos triângulos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1^2 &= \frac{1}{2} [(-2J_{12}\sigma_1\sigma_2 - J_{24}\sigma_2\sigma_4 - J_{41}\sigma_4\sigma_1) + (-2J_{23}\sigma_2\sigma_3 - J_{34}\sigma_3\sigma_4 - J_{42}\sigma_4\sigma_2) + \\ &\quad + (-2J_{31}\sigma_3\sigma_1 - J_{14}\sigma_1\sigma_4 - J_{43}\sigma_4\sigma_3)] \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$= \mathcal{H}_2^2 + \mathcal{H}_3^2 + \mathcal{H}_4^2 . \quad (4.38)$$

Na Eq. 4.37 consideramos que $J_{24} = J_{42}$, $J_{34} = J_{43}$ e $J_{14} = J_{41}$ (vide Eq. 4.11), ou seja, as arestas internas são compartilhadas por dois triângulos. Sendo assim, para manter a equivalência entre as equações 4.36 e 4.37 o Hamiltoniano \mathcal{H}_1^2 deve mostrar explicitamente a contribuição vinda de cada triângulo, e por isso a constante de acoplamento é dividida por 2. Entretanto, as interações que ocorrem entre os sítios externos (J_{12} , J_{23} e J_{31}) não são compartilhadas e aparecem multiplicadas por um fator 2, mas para grandes valores de g este fator pode ser retirado, pois, no limite termodinâmico as contribuições destas interações são desprezíveis. A função de partição para o Hamiltoniano \mathcal{H}_1^2 é:

$$Z_1^2 = \sum_{\{\sigma\}} e^{[\frac{\beta}{2}(2J_{12}\sigma_1\sigma_2 + J_{24}\sigma_2\sigma_4 + J_{41}\sigma_4\sigma_1)]} e^{[\frac{\beta}{2}(2J_{23}\sigma_2\sigma_3 + J_{34}\sigma_3\sigma_4 + J_{42}\sigma_4\sigma_2)]} e^{[\frac{\beta}{2}(2J_{31}\sigma_3\sigma_1 + J_{14}\sigma_1\sigma_4 + J_{43}\sigma_4\sigma_3)]} . \quad (4.39)$$

Assim como feito com a função de partição Z_1^1 , expressa na Eq. 4.20, podemos escrever os termos da função de partição Z_1^2 utilizando uma matriz de transferência $B_t^{s,g}$. Para este caso temos $t = 1$, $g = 2$ e geometria do tipo $s = 2$, pois nesta geração o triângulo apresenta-se com um sítio em seu interior. O primeiro elemento da matriz $B_1^{2,2}$ será:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{2,2} | \sigma_2^+ \sigma_3^+ \rangle &= e^{[\frac{\beta}{2}(J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^+ + J_{24}\sigma_2^+\sigma_4^+ + J_{41}\sigma_4^+\sigma_1^+)]} \cdot e^{[\frac{\beta}{2}(J_{23}\sigma_2^+\sigma_3^+ + J_{34}\sigma_3^+\sigma_4^+ + J_{42}\sigma_4^+\sigma_2^+)]} \cdot \\ &\quad \cdot e^{[\frac{\beta}{2}(J_{31}\sigma_3^+\sigma_1^+ + J_{14}\sigma_1^+\sigma_4^+ + J_{43}\sigma_4^+\sigma_3^+)]} + \\ &\quad + e^{[\frac{\beta}{2}(J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^+ + J_{24}\sigma_2^+\sigma_4^- + J_{41}\sigma_4^-\sigma_1^+)]} \cdot e^{[\frac{\beta}{2}(J_{23}\sigma_2^+\sigma_3^+ + J_{34}\sigma_3^+\sigma_4^- + J_{42}\sigma_4^-\sigma_2^+)]} \cdot \\ &\quad \cdot e^{[\frac{\beta}{2}(J_{31}\sigma_3^+\sigma_1^+ + J_{14}\sigma_1^+\sigma_4^+ + J_{43}\sigma_4^+\sigma_3^+)]} \\ &= \sum_{\sigma_4} \{ e^{[\frac{\beta}{2}(J_{12}\sigma_1^+\sigma_2^+ + J_{24}\sigma_2^+\sigma_4 + J_{41}\sigma_4\sigma_1^+)]} \cdot e^{[\frac{\beta}{2}(J_{23}\sigma_2^+\sigma_3^+ + J_{34}\sigma_3^+\sigma_4 + J_{42}\sigma_4\sigma_2^+)]} \cdot \\ &\quad \cdot e^{[\frac{\beta}{2}(J_{31}\sigma_3^+\sigma_1 + J_{14}\sigma_1^+\sigma_4 + J_{43}\sigma_4\sigma_3^+)]} \} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Os demais elementos podem ser obtidos com o auxílio da Tab. 4, onde expressamos compactamente todas as configurações possíveis dos quatro sítios.

Comparando as exponenciais que aparecem na Eq. 4.40 com a expressão da Eq. 4.26, que foi obtida para o caso de $g = 1$, observa-se que elas apresentam a mesma estrutura.

σ_1	σ_2	σ_3	σ_4
+	+	+	+
+	+	+	-
+	+	-	+
+	+	-	-
+	-	+	+
+	-	+	-
+	-	-	+
+	-	-	-
-	+	+	+
-	+	+	-
-	+	-	+
-	+	-	-
-	-	+	+
-	-	+	-
-	-	-	+
-	-	-	-

Tabela 4 – Configurações possíveis dos quatro sítios que formam a RA com $g = 2$.

Este fato indica que é possível reescrever estas exponenciais utilizando procedimento análogo ao feito com os elementos da matriz expressa na Eq. 4.25. Mas agora, ao invés de olhar o triângulo formado pelos vértices $(1, 2, 3)$, temos que analisar os triângulos com vértices $(1, 2, 4)$, $(2, 3, 4)$ e $(3, 1, 4)$, ou melhor, os triângulos 2, 3 e 4. Assim, para cada um destes novos triângulos, é possível escrever uma matriz de transferência $B_t^{s,g}$. Uma vez que não existe sítio central no interior deles, suas geometrias são do tipo $s = 1$. Portanto, os elementos das MTs de cada um desses novos triângulos podem ser obtidos por:

$$\langle \sigma_1 | B_2^{1,2} | \sigma_2 \sigma_4 \rangle = e^{[\frac{\beta}{2}(J_{12}\sigma_1\sigma_2 + J_{24}\sigma_2\sigma_4 + J_{41}\sigma_4\sigma_1)]}, \quad (4.41)$$

$$\langle \sigma_2 | B_3^{1,2} | \sigma_3 \sigma_4 \rangle = e^{[\frac{\beta}{2}(J_{23}\sigma_2\sigma_3 + J_{34}\sigma_3\sigma_4 + J_{42}\sigma_4\sigma_2)]}, \quad (4.42)$$

$$\langle \sigma_3 | B_4^{1,2} | \sigma_1 \sigma_4 \rangle = e^{[\frac{\beta}{2}(J_{31}\sigma_3\sigma_1 + J_{14}\sigma_1\sigma_4 + J_{43}\sigma_4\sigma_3)]}. \quad (4.43)$$

Usando a definição $p_{uv} = (q_{uv})^{-1} = e^{\frac{\beta}{2}J_{uv}}$, as matrizes $B_2^{1,2}$, $B_3^{1,2}$ e $B_4^{1,2}$ são expressas por:

$$B_2^{1,2} = \begin{bmatrix} p_{12}p_{14}p_{24} & p_{12}q_{14}q_{24} & q_{12}p_{14}q_{24} & q_{12}q_{14}p_{24} \\ q_{12}q_{14}p_{24} & q_{12}p_{14}q_{24} & p_{12}q_{14}q_{24} & p_{12}p_{14}p_{24} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_2^{1,2} & b_2^{1,2} & c_2^{1,2} & d_2^{1,2} \\ d_2^{1,2} & c_2^{1,2} & b_2^{1,2} & a_2^{1,2} \end{bmatrix}, \quad (4.44)$$

$$B_3^{1,2} = \begin{bmatrix} p_{23}p_{24}p_{34} & p_{23}q_{24}q_{34} & q_{23}p_{24}q_{34} & q_{23}q_{24}p_{34} \\ q_{23}q_{24}p_{34} & q_{23}p_{24}q_{34} & p_{23}q_{24}q_{34} & p_{23}p_{24}p_{34} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_3^{1,2} & b_3^{1,2} & c_3^{1,2} & d_3^{1,2} \\ d_3^{1,2} & c_3^{1,2} & b_3^{1,2} & a_3^{1,2} \end{bmatrix}, \quad (4.45)$$

$$B_4^{1,2} = \begin{bmatrix} p_{31}p_{34}p_{14} & p_{31}q_{34}q_{14} & q_{31}p_{34}q_{14} & q_{31}q_{34}p_{14} \\ q_{31}q_{34}p_{14} & q_{31}p_{34}q_{14} & p_{31}q_{34}q_{14} & p_{31}p_{34}p_{14} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_4^{1,2} & b_4^{1,2} & c_4^{1,2} & d_4^{1,2} \\ d_4^{1,2} & c_4^{1,2} & b_4^{1,2} & a_4^{1,2} \end{bmatrix}. \quad (4.46)$$

Assim, da Eq. 4.40, os elementos da matriz de transferência $B_1^{2,2}$ podem ser obtidos pela seguinte relação:

$$\langle \sigma_1 | B_1^{2,2} | \sigma_2 \sigma_3 \rangle = \sum_{\sigma_4} \langle \sigma_1 | B_2^{1,2} | \sigma_2 \sigma_4 \rangle \langle \sigma_2 | B_3^{1,2} | \sigma_3 \sigma_4 \rangle \langle \sigma_3 | B_4^{1,2} | \sigma_1 \sigma_4 \rangle \quad (4.47)$$

Ou seja,

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{2,2} | \sigma_2^+ \sigma_3^+ \rangle &= \langle \sigma_1^+ | B_2^{1,2} | \sigma_2^+ \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_2^+ | B_3^{1,2} | \sigma_3^+ \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_3^+ | B_4^{1,2} | \sigma_1^+ \sigma_4^+ \rangle + \\ &\quad + \langle \sigma_1^+ | B_2^{1,2} | \sigma_2^+ \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_2^+ | B_3^{1,2} | \sigma_3^+ \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_3^+ | B_4^{1,2} | \sigma_1^+ \sigma_4^- \rangle \\ &= a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2} + b_2^{1,2} b_3^{1,2} b_4^{1,2} = a_1^{2,2} \end{aligned} \quad (4.48)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{2,2} | \sigma_2^+ \sigma_3^- \rangle &= \langle \sigma_1^+ | B_2^{1,2} | \sigma_2^+ \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_2^+ | B_3^{1,2} | \sigma_3^- \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_3^- | B_4^{1,2} | \sigma_1^+ \sigma_4^+ \rangle + \\ &\quad + \langle \sigma_1^+ | B_2^{1,2} | \sigma_2^+ \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_2^+ | B_3^{1,2} | \sigma_3^- \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_3^- | B_4^{1,2} | \sigma_1^+ \sigma_4^- \rangle \\ &= a_2^{1,2} c_3^{1,2} a_4^{1,2} + b_2^{1,2} d_3^{1,2} c_4^{1,2} = b_1^{2,2} \end{aligned} \quad (4.49)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{2,2} | \sigma_2^- \sigma_3^+ \rangle &= \langle \sigma_1^+ | B_2^{1,2} | \sigma_2^- \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_2^- | B_3^{1,2} | \sigma_3^+ \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_3^+ | B_4^{1,2} | \sigma_1^+ \sigma_4^+ \rangle + \\ &\quad + \langle \sigma_1^+ | B_2^{1,2} | \sigma_2^- \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_2^- | B_3^{1,2} | \sigma_3^+ \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_3^+ | B_4^{1,2} | \sigma_1^+ \sigma_4^- \rangle \\ &= c_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2} + d_2^{1,2} c_3^{1,2} b_4^{1,2} = c_1^{2,2} \end{aligned} \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{2,2} | \sigma_2^- \sigma_3^- \rangle &= \langle \sigma_1^+ | B_2^{1,2} | \sigma_2^- \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_2^- | B_3^{1,2} | \sigma_3^- \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_3^- | B_4^{1,2} | \sigma_1^+ \sigma_4^+ \rangle + \\ &\quad + \langle \sigma_1^+ | B_2^{1,2} | \sigma_2^- \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_2^- | B_3^{1,2} | \sigma_3^- \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_3^- | B_4^{1,2} | \sigma_1^+ \sigma_4^- \rangle \\ &= c_2^{1,2} b_3^{1,2} d_4^{1,2} + d_2^{1,2} a_3^{1,2} c_4^{1,2} = d_1^{2,2} . \end{aligned} \quad (4.51)$$

Organizando matricialmente, temos

$$B_1^{2,2} = \begin{bmatrix} a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2} + b_2^{1,2} b_3^{1,2} b_4^{1,2} & a_2^{1,2} c_3^{1,2} d_4^{1,2} + b_2^{1,2} d_3^{1,2} c_4^{1,2} \\ c_2^{1,2} b_3^{1,2} d_4^{1,2} + d_2^{1,2} a_3^{1,2} c_4^{1,2} & c_2^{1,2} d_3^{1,2} a_4^{1,2} + d_2^{1,2} c_3^{1,2} b_4^{1,2} \\ c_2^{1,2} d_3^{1,2} a_4^{1,2} + d_2^{1,2} c_3^{1,2} b_4^{1,2} & c_2^{1,2} b_3^{1,2} d_4^{1,2} + d_2^{1,2} a_3^{1,2} c_4^{1,2} \\ a_2^{1,2} c_3^{1,2} d_4^{1,2} + b_2^{1,2} d_3^{1,2} c_4^{1,2} & a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2} + b_2^{1,2} b_3^{1,2} b_4^{1,2} \end{bmatrix} . \quad (4.52)$$

Ou de forma mais compacta,

$$B_1^{2,2} = \begin{bmatrix} a_1^{2,2} & b_1^{2,2} & c_1^{2,2} & d_1^{2,2} \\ d_1^{2,2} & c_1^{2,2} & b_1^{2,2} & a_1^{2,2} \end{bmatrix} . \quad (4.53)$$

Observa-se pela Eq. 4.47 (ou Eq. 4.52) que, para obter a matriz de transferência da rede formada na geração $g = 2$ (Fig. 34), é preciso primeiro conhecer as interações mais internas, que foram formadas com a introdução do sítio central. Estas novas interações podem ser representadas por matrizes de transferência intermediárias dos triângulos 2, 3 e 4 que estão contidos no interior do triângulo 1.

Para obter a MT quadrada desta geração, denotada por A_1^2 , faremos uma operação similar à da Eq. 4.34. Com isso, os elementos de A_1^2 podem ser obtidos pela seguinte

relação:

$$\langle \sigma_1 | A_1^2 | \sigma_2 \rangle = \sum_{\sigma_3} \langle \sigma_1 | B_1^{2,2} | \sigma_2 \sigma_3 \rangle .$$

Portanto,

$$A_1^2 = \begin{bmatrix} p_1^2 & q_1^2 \\ q_1^2 & p_1^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^{2,2} + b_1^{2,2} & c_1^{2,2} + d_1^{2,2} \\ c_1^{2,2} + d_1^{2,2} & a_1^{2,2} + b_1^{2,2} \end{bmatrix} , \quad (4.54)$$

e Z_1^2 pode ser escrita como função dos elementos de A_1^2 ou $B_1^{2,2}$.

A próxima geração do modelo é obtida fazendo $g = 3$, cuja geometria está ilustrada na Fig. 31. Comparando a geometria dessa nova geração com a Fig. 34 de $g = 2$, observa-se que os triângulos 2, 3 e 4 de vértices (1, 2, 4), (2, 3, 4), (3, 1, 4), respectivamente, têm em seu interior três triângulos menores. No triângulo 2 temos os triângulos com vértices (1, 2, 5), (2, 4, 5) e (4, 1, 5), que são denominados triângulos 5, 6 e 7, respectivamente. Para o triângulo 3 temos os triângulos com vértices (2, 3, 6), (3, 4, 6) e (4, 2, 6), são chamados de 8, 9 e 10. E o triângulo 4 terá no seu interior os triângulos com vértices, (3, 1, 7), (1, 4, 7) e (4, 3, 7), identificados por 11, 12 e 13.

Com essa nova estrutura, diferentemente do que ocorreu em $g = 2$, o triângulo 1, de vértices (1, 2, 3), agora foi dividido em três triângulos com geometria análoga a da Fig. 34, ou seja, triângulos do tipo $s = 2$. Para ficar mais claro, vamos escrever o Hamiltoniano para esta geração da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1^3 &= \frac{1}{2} \{ [(-2J_{12}\sigma_1\sigma_2 - J_{25}\sigma_2\sigma_5 - J_{51}\sigma_5\sigma_1) + (-J_{24}\sigma_2\sigma_4 - J_{45}\sigma_4\sigma_5 - J_{52}\sigma_5\sigma_2) + \\ &+ (-J_{41}\sigma_4\sigma_1 - J_{15}\sigma_1\sigma_5 - J_{54}\sigma_5\sigma_4)] + [(-2J_{23}\sigma_2\sigma_3 - J_{36}\sigma_3\sigma_6 - J_{62}\sigma_6\sigma_2) + \\ &+ (-J_{34}\sigma_3\sigma_4 - J_{46}\sigma_4\sigma_6 - J_{63}\sigma_6\sigma_3) + (-J_{42}\sigma_4\sigma_2 - J_{26}\sigma_2\sigma_6 - J_{64}\sigma_6\sigma_4)] + \\ &+ [(-2J_{31}\sigma_3\sigma_1 - J_{17}\sigma_1\sigma_7 - J_{73}\sigma_7\sigma_3) + (-J_{14}\sigma_1\sigma_4 - J_{47}\sigma_4\sigma_7 - J_{71}\sigma_7\sigma_1) + \\ &+ (-J_{43}\sigma_4\sigma_3 - J_{37}\sigma_3\sigma_7 - J_{74}\sigma_7\sigma_4)] \} \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$= \mathcal{H}_2^3 + \mathcal{H}_3^3 + \mathcal{H}_4^3 . \quad (4.56)$$

Verifica-se que os termos no interior dos três colchetes de \mathcal{H}_1^3 apresentam a mesma estrutura do Hamiltoniano \mathcal{H}_1^2 . Após substituição deste Hamiltoniano na função de partição, e efetuado a soma sobre os possíveis valores dos sítios, aparecem termos que podem ser agrupados na forma da Eq. 4.40, mas com somatórios sobre os sítios 5, 6 e 7. Ratificando assim a conclusão obtida pela análise geométrica de que a rede em $g = 3$ é formada por uma geometria composta de três triângulos do tipo $s = 2$. Portanto, por analogia, podemos utilizar a Eq. 4.47 para obter os elementos da matriz de transferência $B_1^{3,3}$ para $g = 3$, e encontrar a seguinte relação:

$$\langle \sigma_1 | B_1^{3,3} | \sigma_2 \sigma_3 \rangle = \sum_{\sigma_4} \langle \sigma_1 | B_2^{2,3} | \sigma_2 \sigma_4 \rangle \langle \sigma_2 | B_3^{2,3} | \sigma_3 \sigma_4 \rangle \langle \sigma_3 | B_4^{2,3} | \sigma_1 \sigma_4 \rangle \quad (4.57)$$

Note que apesar da Eq. 4.57 ter a mesma estrutura da Eq. 4.47, agora, diferentemente do caso em $g = 2$, as MTs intermediárias dos triângulos 2, 3 e 4 são obtidas de

triângulos com geometria do tipo $s = 2$, análogos ao da Fig. 34. Sendo assim, aplicando a Eq. 4.57 para os triângulos 2, 3 e 4, em conjunto com a numeração dos triângulos internos definida acima, os elementos das MTs intermediárias são obtidos por:

$$\langle \sigma_1 | B_2^{2,3} | \sigma_2 \sigma_4 \rangle = \sum_{\sigma_5} \langle \sigma_1 | B_5^{1,3} | \sigma_2 \sigma_5 \rangle \langle \sigma_2 | B_6^{1,3} | \sigma_4 \sigma_5 \rangle \langle \sigma_4 | B_7^{1,3} | \sigma_1 \sigma_5 \rangle \quad (4.58)$$

$$\langle \sigma_2 | B_3^{2,3} | \sigma_3 \sigma_4 \rangle = \sum_{\sigma_6} \langle \sigma_2 | B_8^{1,3} | \sigma_3 \sigma_6 \rangle \langle \sigma_3 | B_9^{1,3} | \sigma_4 \sigma_6 \rangle \langle \sigma_4 | B_{10}^{1,3} | \sigma_2 \sigma_6 \rangle \quad (4.59)$$

$$\langle \sigma_3 | B_4^{2,3} | \sigma_1 \sigma_4 \rangle = \sum_{\sigma_7} \langle \sigma_3 | B_{11}^{1,3} | \sigma_1 \sigma_7 \rangle \langle \sigma_1 | B_{12}^{1,3} | \sigma_4 \sigma_7 \rangle \langle \sigma_4 | B_{13}^{1,3} | \sigma_3 \sigma_7 \rangle \quad (4.60)$$

onde as matrizes $B_2^{2,3}$, $B_3^{2,3}$ e $B_4^{2,3}$ são:

$$B_2^{2,3} = \begin{bmatrix} a_2^{2,3} & b_2^{2,3} & c_2^{2,3} & d_2^{2,3} \\ d_2^{2,3} & c_2^{2,3} & b_2^{2,3} & a_2^{2,3} \end{bmatrix}, \quad B_3^{2,3} = \begin{bmatrix} a_3^{2,3} & b_3^{2,3} & c_3^{2,3} & d_3^{2,3} \\ d_3^{2,3} & c_3^{2,3} & b_3^{2,3} & a_3^{2,3} \end{bmatrix},$$

$$B_4^{2,3} = \begin{bmatrix} a_4^{2,3} & b_4^{2,3} & c_4^{2,3} & d_4^{2,3} \\ d_4^{2,3} & c_4^{2,3} & b_4^{2,3} & a_4^{2,3} \end{bmatrix}. \quad (4.61)$$

Portanto, da Eq. 4.57 os elementos de $B_1^{3,3}$ são:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{3,3} | \sigma_2^+ \sigma_3^+ \rangle &= \langle \sigma_1^+ | B_2^{2,3} | \sigma_2^+ \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_2^+ | B_3^{2,3} | \sigma_3^+ \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_3^+ | B_4^{2,3} | \sigma_1^+ \sigma_4^+ \rangle + \\ &+ \langle \sigma_1^+ | B_2^{2,3} | \sigma_2^+ \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_2^+ | B_3^{2,3} | \sigma_3^+ \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_3^+ | B_4^{2,3} | \sigma_1^+ \sigma_4^- \rangle \\ &= a_2^{2,3} a_3^{2,3} a_4^{2,3} + b_2^{2,3} b_3^{2,3} b_4^{2,3} = a_1^{3,3} \end{aligned} \quad (4.62)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{3,3} | \sigma_2^+ \sigma_3^- \rangle &= \langle \sigma_1^+ | B_2^{2,3} | \sigma_2^+ \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_2^+ | B_3^{2,3} | \sigma_3^- \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_3^- | B_4^{2,3} | \sigma_1^+ \sigma_4^+ \rangle + \\ &+ \langle \sigma_1^+ | B_2^{2,3} | \sigma_2^+ \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_2^+ | B_3^{2,3} | \sigma_3^- \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_3^- | B_4^{2,3} | \sigma_1^+ \sigma_4^- \rangle \\ &= a_2^{2,3} c_3^{2,3} d_4^{2,3} + b_2^{2,3} d_3^{2,3} c_4^{2,3} = b_1^{3,3} \end{aligned} \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{3,3} | \sigma_2^- \sigma_3^+ \rangle &= \langle \sigma_1^+ | B_2^{2,3} | \sigma_2^- \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_2^- | B_3^{2,3} | \sigma_3^+ \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_3^+ | B_4^{2,3} | \sigma_1^+ \sigma_4^+ \rangle + \\ &+ \langle \sigma_1^+ | B_2^{2,3} | \sigma_2^- \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_2^- | B_3^{2,3} | \sigma_3^+ \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_3^+ | B_4^{2,3} | \sigma_1^+ \sigma_4^- \rangle \\ &= c_2^{2,3} d_3^{2,3} a_4^{2,3} + d_2^{2,3} c_3^{2,3} b_4^{2,3} = c_1^{3,3} \end{aligned} \quad (4.64)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^+ | B_1^{3,3} | \sigma_2^- \sigma_3^- \rangle &= \langle \sigma_1^+ | B_2^{2,3} | \sigma_2^- \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_2^- | B_3^{2,3} | \sigma_3^- \sigma_4^+ \rangle \langle \sigma_3^- | B_4^{2,3} | \sigma_1^+ \sigma_4^+ \rangle + \\ &+ \langle \sigma_1^+ | B_2^{2,3} | \sigma_2^- \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_2^- | B_3^{2,3} | \sigma_3^- \sigma_4^- \rangle \langle \sigma_3^- | B_4^{2,3} | \sigma_1^+ \sigma_4^- \rangle \\ &= c_2^{2,3} b_3^{2,3} d_4^{2,3} + d_2^{2,3} a_3^{2,3} c_4^{2,3} = d_1^{3,3}. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Organizando $B_1^{3,3}$ matricialmente, obtemos:

$$B_1^{3,3} = \begin{bmatrix} a_2^{2,3} a_3^{2,3} a_4^{2,3} + b_2^{2,3} b_3^{2,3} b_4^{2,3} & a_2^{2,3} c_3^{2,3} d_4^{2,3} + b_2^{2,3} d_3^{2,3} c_4^{2,3} \\ c_2^{2,3} b_3^{2,3} d_4^{2,3} + d_2^{2,3} a_3^{2,3} c_4^{2,3} & c_2^{2,3} d_3^{2,3} a_4^{2,3} + d_2^{2,3} c_3^{2,3} b_4^{2,3} \\ c_2^{2,3} d_3^{2,3} a_4^{2,3} + d_2^{2,3} c_3^{2,3} b_4^{2,3} & c_2^{2,3} b_3^{2,3} d_4^{2,3} + d_2^{2,3} a_3^{2,3} c_4^{2,3} \\ a_2^{2,3} c_3^{2,3} d_4^{2,3} + b_2^{2,3} d_3^{2,3} c_4^{2,3} & a_2^{2,3} a_3^{2,3} a_4^{2,3} + b_2^{2,3} b_3^{2,3} b_4^{2,3} \end{bmatrix}. \quad (4.66)$$

Introduzindo os elementos $a_1^{3,3}, b_1^{3,3}, c_1^{3,3}, d_1^{3,3}$, chegamos a

$$B_1^{3,3} = \begin{bmatrix} a_1^{3,3} & b_1^{3,3} & c_1^{3,3} & d_1^{3,3} \\ d_1^{3,3} & c_1^{3,3} & b_1^{3,3} & a_1^{3,3} \end{bmatrix}. \quad (4.67)$$

Podemos fazer novamente a compactação da matriz $B_1^{3,3}$, similar a da Eq. 4.34 e geração $g = 2$. Dessa forma se obtém uma matriz de transferência quadrada para $g = 3$, que vamos denotar por A_1^3 . Com isso, os elementos de A_1^3 são obtidos por:

$$\langle \sigma_1 | A_1^3 | \sigma_2 \rangle = \sum_{\sigma_3} \langle \sigma_1 | B_1^{3,3} | \sigma_2 \sigma_3 \rangle. \quad (4.68)$$

Portanto,

$$A_1^3 = \begin{bmatrix} p_1^3 & q_1^3 \\ q_1^3 & p_1^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^{3,3} + b_1^{3,3} & c_1^{3,3} + d_1^{3,3} \\ c_1^{3,3} + d_1^{3,3} & a_1^{3,3} + b_1^{3,3} \end{bmatrix}, \quad (4.69)$$

como no casos anteriores, Z_1^3 é escrita em função dos elementos de A_1^3 ou $B_1^{3,3}$.

Verifica-se, como no caso anterior de $g = 2$, que para obter a MT da geração com $g = 3$, é preciso primeiro conhecer as interações dos sítios mais internos. Ou seja, para determinar a matriz de transferência $B_1^{3,3}$, primeiro deve-se encontrar às matrizes $B_2^{2,3}$, $B_3^{2,3}$ e $B_4^{2,3}$ (ver Eq. 4.57). Mas de acordo com as Eqs. 4.58, 4.59 e 4.60, cada MT dessa é obtida pela combinação de três triângulos. Portanto, em uma determinada geração g , faz-se necessário o mapeamento dos triângulos que possuem em seu interior triângulos menores. Como alternativa, para cada geração $g \geq 2$, pode-se utilizar uma tabela auxiliar (ou tabela de indexação) T_g com o único fim de armazenamento destas informações. O primeiro elemento de cada linha de T_g conterà a identificação t do triângulo, o segundo o tipo s da geometria e nos demais elementos, dessa mesma linha, a numeração dos triângulos que estão no seu interior. Por exemplo, para os casos de $g = 2, 3$ e 4 as tabelas T_2, T_3 e T_4 são:

$$T_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix}, T_3 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 5 & 6 & 7 \\ 3 & 1 & 8 & 9 & 10 \\ 4 & 1 & 11 & 12 & 13 \end{bmatrix}, T_4 = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 2 & 5 & 6 & 7 \\ 3 & 2 & 8 & 9 & 10 \\ 4 & 2 & 11 & 12 & 13 \\ 5 & 1 & 14 & 15 & 16 \\ 6 & 1 & 17 & 18 & 19 \\ 7 & 1 & 20 & 21 & 22 \\ 8 & 1 & 23 & 24 & 25 \\ 9 & 1 & 26 & 27 & 28 \\ 10 & 1 & 29 & 30 & 31 \\ 11 & 1 & 32 & 33 & 34 \\ 12 & 1 & 35 & 36 & 37 \\ 13 & 1 & 38 & 39 & 40 \end{bmatrix} \quad (4.70)$$

Podemos agora generalizar e obter, em uma geração g qualquer, os elementos da matriz de transferência $B_t^{s,g}$ para um certo triângulo t de vértices (i, j, k) . Vimos que a partir de $g \geq 2$ os elementos da MT de qualquer triângulo, independente do tipo s da geometria, são obtidos efetuando uma soma sobre um sítio central, vamos representar genericamente este sítio central por l . Como o tipo s da geometria do triângulo na geração g depende do número de nós em seu interior, podemos definir $s = n + 1$ (onde $n \geq 0$ é inteiro e representa o número de nós no interior do triângulo). Analisando-se as Eq. 4.52 e Eq. 4.61, nota-se que elas apresentam a mesma estrutura, mudando apenas os índices nas expressões. Sendo assim, os elementos da matriz de transferência $B_t^{s,g}$, podem ser obtidos genericamente pela seguinte relação:

$$\langle \sigma_i | B_t^{s,g} | \sigma_j \sigma_k \rangle = \sum_{\sigma_l} \langle \sigma_i | B_{T_g(t,3)}^{s-1,g} | \sigma_j \sigma_l \rangle \langle \sigma_j | B_{T_g(t,4)}^{s-1,g} | \sigma_k \sigma_l \rangle \langle \sigma_k | B_{T_g(t,5)}^{s-1,g} | \sigma_l \sigma_i \rangle , \quad (4.71)$$

onde $T(t, 3)$, $T(t, 4)$ e $T(t, 5)$ são elementos da tabela T_g detalhada acima. Comparando os elementos da matriz 4.52 com os elementos de 4.66, obtemos as seguintes relações de recorrência:

$$a_t^{s,g} = a_{T(t,3)}^{s-1,g} a_{T(t,4)}^{s-1,g} a_{T(t,5)}^{s-1,g} + b_{T(t,3)}^{s-1,g} b_{T(t,4)}^{s-1,g} b_{T(t,5)}^{s-1,g} \quad (4.72)$$

$$b_t^{s,g} = a_{T(t,3)}^{s-1,g} c_{T(t,4)}^{s-1,g} d_{T(t,5)}^{s-1,g} + b_{T(t,3)}^{s-1,g} d_{T(t,4)}^{s-1,g} c_{T(t,5)}^{s-1,g} \quad (4.73)$$

$$c_t^{s,g} = c_{T(t,3)}^{s-1,g} d_{T(t,4)}^{s-1,g} a_{T(t,5)}^{s-1,g} + d_{T(t,3)}^{s-1,g} c_{T(t,4)}^{s-1,g} b_{T(t,5)}^{s-1,g} \quad (4.74)$$

$$d_t^{s,g} = c_{T(t,3)}^{s-1,g} b_{T(t,4)}^{s-1,g} d_{T(t,5)}^{s-1,g} + d_{T(t,3)}^{s-1,g} a_{T(t,4)}^{s-1,g} c_{T(t,5)}^{s-1,g} . \quad (4.75)$$

Os elementos da matriz de transferência quadrada A_t^g são obtidos por

$$\langle \sigma_i | A_t^g | \sigma_j \rangle = \sum_{\sigma_k} \langle \sigma_i | B_t^{s,g} | \sigma_j \sigma_k \rangle . \quad (4.76)$$

Assim, a matriz A_t^g pode ser escrita por

$$A_t^g = \begin{bmatrix} p_t^g & q_t^g \\ q_t^g & p_t^g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_t^{s,g} + b_t^{s,g} & c_t^{s,g} + d_t^{s,g} \\ c_t^{s,g} + d_t^{s,g} & a_t^{s,g} + b_t^{s,g} \end{bmatrix} . \quad (4.77)$$

Uma vez conhecida a matriz de transferência de uma geração, todas as propriedades termodinâmicas desta geração podem ser calculadas através da função de partição Z . No caso de redes com propriedades de simetria de translação é muito importante expressar Z em função do maior autovalor da matriz de transferência correspondente. No presente problema, vamos também escrever Z_t^g em termos dos autovalores da matriz de transferência. Sendo assim, a diagonalização da matriz A_t^g é trivial e teremos os autovalores η_t^g e ε_t^g dados por:

$$\eta_t^g = p_t^g + q_t^g \quad (4.78)$$

$$\varepsilon_t^g = p_t^g - q_t^g \quad (4.79)$$

A energia livre de Helmholtz é obtida por

$$f_t^{s,g} = -\frac{T}{N_t^g} \ln(\eta_t^g + \varepsilon_t^g), \quad (4.80)$$

onde N_t^g representa o número de sítios da geração g que estão contidos no triângulo t . Para obter a energia livre no limite termodinâmico ($N_t^g \rightarrow \infty$), vamos escrever

$$f_t^{s,g} = -\frac{T}{N_t^g} \left[\ln(\eta_t^g) + \ln \left(1 + \frac{\varepsilon_t^g}{\eta_t^g} \right) \right] \quad (4.81)$$

Como $\eta_t^g > \varepsilon_t^g$, no limite termodinâmico teremos

$$\lim_{N_t^g \rightarrow \infty} \left(\frac{\varepsilon_t^g}{\eta_t^g} \right) \rightarrow 0 \quad (4.82)$$

Assim

$$\lim_{N_t^g \rightarrow \infty} f_t^g \approx -\frac{T}{N_t^g} \ln(\eta_t^g). \quad (4.83)$$

Portanto, verifica-se que no limite termodinâmico quem determina a maioria das propriedades físicas do sistema é o maior autovalor. Uma vez que η_t^g é obtido pela Eq. 4.79 e todas as interações são ferromagnéticas, é razoável pensar que no limite termodinâmico o termo p_t^g assumirá um papel mais importante que q_t^g , pois:

$$p_t^g = a_t^{s,g} + b_t^{s,g} > q_t^g = c_t^{s,g} + d_t^{s,g}. \quad (4.84)$$

Por outro lado, da Eq. 4.75 pode-se afirmar que nesse mesmo limite o elemento $a_t^{s,g}$ é maior que o elemento $b_t^{s,g}$. Assim podemos, sem perda de generalidade, utilizar o maior elemento da matriz $B_t^{s,g}$ no lugar do autovalor η_t^g . Por exemplo, para $g = 2$ temos

$$f_1^{2,2} = -\frac{T}{N_1^2} \ln(p_1^2) = -\frac{T}{N_1^2} \ln(a_1^{2,2} + b_1^{2,2}) \quad (4.85)$$

Mas

$$a_1^{2,2} = a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2} + b_2^{1,2} b_3^{1,2} b_4^{1,2} \quad (4.86)$$

$$b_1^{2,2} = a_2^{1,2} c_3^{1,2} d_4^{1,2} + b_2^{1,2} d_3^{1,2} c_4^{1,2}. \quad (4.87)$$

Considerando só o primeiro elemento, temos

$$f_1^{2,2} = -\frac{T}{N_1^2} \ln(a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2} + b_2^{1,2} b_3^{1,2} b_4^{1,2}) \quad (4.88)$$

$$= -\frac{T}{N_1^2} \left[\ln(a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2}) + \ln \left(1 + \frac{b_2^{1,2} b_3^{1,2} b_4^{1,2}}{a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2}} \right) \right] \quad (4.89)$$

$$= -\frac{T}{N_1^2} \left[\ln(a_2^{1,2}) + \ln(a_3^{1,2}) + \ln(a_4^{1,2}) + \ln \left(1 + \frac{b_2^{1,2} b_3^{1,2} b_4^{1,2}}{a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2}} \right) \right] \quad (4.90)$$

Assumindo que para os triângulos 2, 3 e 4 foram feitos cálculos parciais da energia, temos para cada um deles as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} f_2^{1,2} &= -\frac{T}{N_2^2} \ln(a_2^{1,2}) \\ f_3^{1,2} &= -\frac{T}{N_3^2} \ln(a_3^{1,2}) \\ f_4^{1,2} &= -\frac{T}{N_4^2} \ln(a_4^{1,2}) \end{aligned}$$

Mas $N_2^2 = N_3^2 = N_4^2 = 3 = N_1^1$. Assim temos

$$f_1^{2,2} = -\frac{N_1^1}{N_1^2} [f_2^{1,2} + f_3^{1,2} + f_4^{1,2}] - \frac{T}{N_1^2} \left[\ln \left(1 + \frac{b_2^{1,2} b_3^{1,2} b_4^{1,2}}{a_2^{1,2} a_3^{1,2} a_4^{1,2}} \right) \right] \quad (4.91)$$

Generalizando para uma geração $g \geq 2$, temos

$$f_1^{s,g} = -\frac{N_1^{g-1}}{N_1^g} [f_2^{s-1,g} + f_3^{s-1,g} + f_4^{s-1,g}] - \frac{T}{N_1^g} \left[\ln \left(1 + \frac{b_2^{s-1,g} b_3^{s-1,g} b_4^{s-1,g}}{a_2^{s-1,g} a_3^{s-1,g} a_4^{s-1,g}} \right) \right] \quad (4.92)$$

Com

$$f_2^{s-1,g} = -\frac{T}{N_1^g} \ln(a_2^{s-1,g}) , \quad (4.93)$$

$$f_3^{s-1,g} = -\frac{T}{N_1^g} \ln(a_3^{s-1,g}) , \quad (4.94)$$

$$f_4^{s-1,g} = -\frac{T}{N_1^g} \ln(a_4^{s-1,g}) . \quad (4.95)$$

5 Resultados e Discussões: Rede apoloniana

5.1 Propriedades termodinâmicas

Como discutido na seção anterior, para obter os resultados de uma determinada geração g é preciso conhecer, para cada sítio, seus vizinhos e a distância de separação para os mesmos. Sendo assim, de forma a otimizar o processo de cálculo das propriedades termodinâmicas, foi feita a opção de se determinar e armazenar inicialmente todos os dados referentes à geometria do modelo. Em seguida, estes dados são lidos nos arquivos específicos, que aumentam de tamanho com a geração, por exemplo, para $g = 15$ as informações estavam contidas em um arquivo com 2GB de dados e com $g = 16$ em 3.4GB. Essa necessidade de uma grande quantidade de alocação de memória gerou dificuldades técnicas, o que nos obrigou a adotar $g = 15$ como a geração máxima para os estudos deste trabalho.

Nesta seção serão apresentados os resultados obtidos para redes apolonianas com $g = 5, 7, 10, 12, 14$, e 15 , correspondendo a redes com 1.240×10^2 , 1.096×10^3 , 2.953×10^4 , 2.657×10^5 , 2.391×10^6 e 7.174×10^6 sítios, respectivamente. Uma vez que os cálculos numéricos realizados na avaliação da energia livre $f(T)$ em cada geração foram feitos com precisão dupla, foi possível obter, utilizando derivada numérica, a entropia $s(T)$ e o calor específico $c(T)$. Sabe-se que uma outra grandeza muito importante no estudo de transição de fase é o comprimento de correlação ξ , que é uma medida das distâncias sobre as quais as correlações spin-spin no sistema se estendem. Nas proximidades do estado crítico, o sistema se torna altamente correlacionado e ξ cresce e diverge na temperatura crítica. Para modelos que utilizam redes euclidianas (por exemplo, Ising na cadeia linear - ver Apêndice B) e hierárquicas, é possível mostrar que o comprimento de correlação se relaciona com os autovalores da matriz de transferência, λ_1 e λ_2 (com $\lambda_1 \geq \lambda_2$), por: $\xi \sim 1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$. No entanto, na rede Apoloniana a distância entre dois nós externos é sempre a mesma em qualquer geração, ou seja, as correlações spin-spin para estes sítios não devem se alterar na proximidade da temperatura crítica. Portanto, na rede Apoloniana, não podemos afirmar que a conexão entre ξ e $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ é tão simples. Sendo assim, seguindo a sugestão da referência [21], neste trabalho o comportamento de $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ será discutido, mas iremos nos abster de chamá-lo de comprimento de correlação ξ .

Na Fig. 35 (página 94), mostra-se o comportamento da energia livre por spin, f , e da entropia por spin, s , em função da temperatura T para $g = 5, 7, 10, 12, 14$, e 15 com $\alpha = 0.5$ e 0.8 . O gráfico da energia reflete a imposição feita para o valor escolhido de J_0 . Para possibilitar a comparação dos resultados das grandezas termodinâmicas em função da temperatura para diferentes valores de g e α , escolhemos um valor de J_0 de tal forma

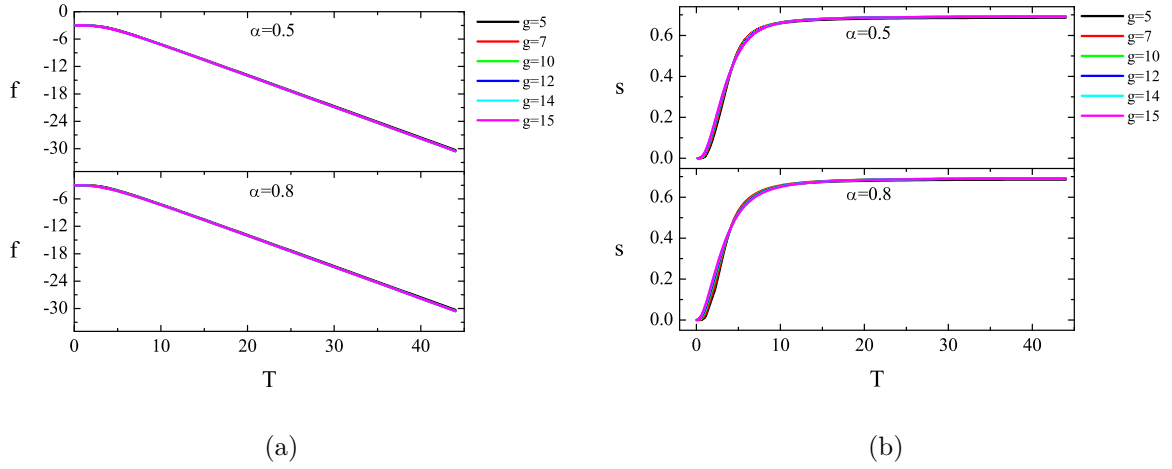


Figura 35 – Comportamento da energia (painel a) e entropia (painel b) em função da temperatura para as gerações $g = 5, 7, 10, 12, 14$ e 15 . Para possibilitar a comparação dos resultados o valor de J_0 foi definido de tal forma que a energia em $T = 0, f_0 = f(T = 0)$, fosse sempre igual a -3 . No limite de altas temperaturas, onde $s \simeq \ln 2$, ocorre sempre em uma mesma região de valores de T para todos os valores de g e α .

que a energia em $T = 0, f_0$, fosse sempre igual a -3 . Através do gráfico da entropia é possível verificar claramente a consistência do método adotado para estudar o modelo, uma vez que no limite de altas temperaturas, onde $s \simeq \ln 2$, ocorre sempre em uma mesma região de valores de T para todos os valores de g e α .

Continuando a investigação, na Fig. 36 (página 95) é apresentado o comportamento do calor específico c em função da temperatura T para diferentes valores de g , sendo que em (a) $\alpha = 0.5$ e em (b) $\alpha = 0.8$. Como pode ser observado, as curvas que descrevem o comportamento de c tendem a zero nas regiões de baixas ou altas temperaturas e apresentam um máximo suave, ou seja, seguem o padrão de um perfil *Schottky*, e também ocorrem em uma mesma faixa de temperatura. Este resultado indica que o sistema se mantém na fase ferromagnética ($J_0 > 0$), pois o calor específico não apresenta nenhuma evidência de divergência, fato que esperado para uma transição de fase e verificada em outros tipos de rede, como por exemplo as livres de escala do tipo Barabasi-Albert (com expoente da função distribuição das conexões da rede $\gamma = 3$) estudadas no trabalho da referência [88]. É possível notar a partir da Fig. 36 que o valor de c máximo aumenta na medida que o valor de α diminui, diferentemente do que foi observado em [21].

Apesar das curvas do calor específico não terem apresentado nenhum sinal de divergência, ainda é possível avaliar a existência de algum comportamento crítico pela divergência numérica (valores maiores que 10^{20}) de $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$. Na Fig. 37 (página 95) mostramos o comportamento de $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ em função da temperatura para $g = 5, 7, 10, 12, 14$ e 15 , com $\alpha = 0.5$ e 0.87 . Observa-se que, para $\alpha = 0.5$, esta variável diverge

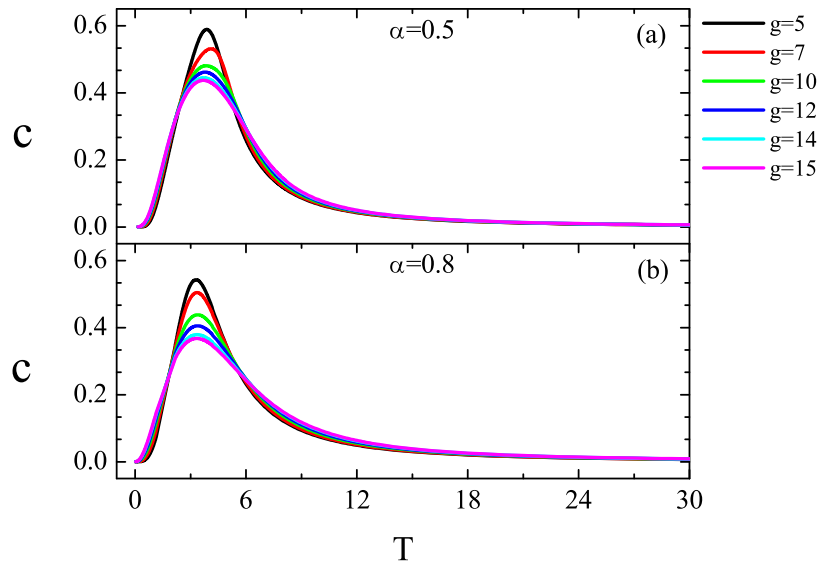


Figura 36 – Comportamento do calor específico c em função da temperatura T para diferentes valores de g , sendo que em (a) $\alpha = 0.5$ e em (b) $\alpha = 0.8$. Curvas seguem o padrão de um perfil *Schottky*, e também ocorrem em uma mesma faixa de temperatura. Indicação de ausência de transição de fase para uma temperatura finita.

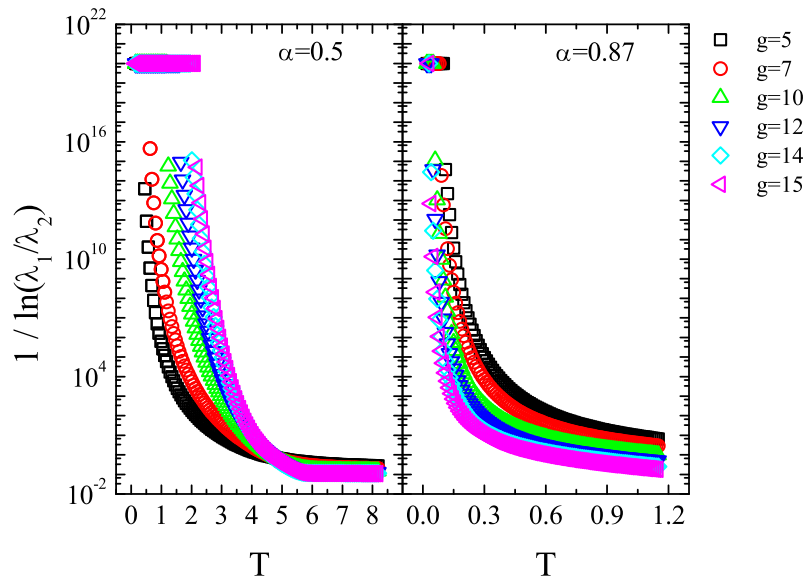


Figura 37 – Comportamento de $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ em função da temperatura para $g = 5, 7, 10, 12, 14$ e 15 , com $\alpha = 0.5$ e 0.87 .

numericamente, caracterizado pela formação do platô em 10^{20} , para uma temperatura não nula $T_d(g)$ que aumenta com a geração g . No entanto, para $\alpha = 0.87$ nota-se uma

mudança no padrão, uma vez que T_d diminui com g .

Para avaliar com mais detalhes essa mudança no padrão, investigamos a variação de T_d com g , para alguns valores de α , como pode ser observado na Tabela 5 (página 96) e na Figura 38 (página 97). Verificou-se que para $0 < \alpha \leq 0.74$ os valores de T_d , para $g \geq 8$, crescem linearmente com a geração g , como ocorre para o modelo onde as interações são dadas pela Eq. 4.9, com $\delta = 0$ e $J_0 > 0$, e também para o modelo da Eq. 4.10, com $0 < \mu < 1$ [21]. Vale salientar que os autores de [17] encontraram um comportamento que sugere uma lei de potência do tipo $T_d(g) \sim g^{\tau(\delta)}$, com τ variando continuamente de $\tau(\delta = 0) = 1$ até $\tau(\delta = \infty) = 1/2$. No entanto, para o caso em estudo, se escrevermos $T_d \sim A(\alpha)g$, observa-se, pela Fig. 38a, que $A(\alpha)$ decresce com α , fato que também foi observado pelo autores de [21] para $0 < \mu < 1$. Um dos possíveis fatores que influenciam o comportamento não linear para gerações com $g < 8$, no caso em estudo, é o efeito de tamanho finito da rede.

g	T_d			
	$\alpha = 0.7$	$\alpha = 0.74$	$\alpha = 0.75$	$\alpha = 0.8$
5	0.194	0.168	0.162	0.135
6	0.203	0.169	0.162	0.128
7	0.213	0.171	0.162	0.123
8	0.223	0.173	0.162	0.117
9	0.234	0.174	0.162	0.112
10	0.245	0.176	0.162	0.106
11	0.255	0.177	0.161	0.101
12	0.266	0.178	0.161	0.097
13	0.277	0.179	0.160	0.092
14	0.287	0.179	0.159	0.088
15	0.297	0.180	0.158	0.083

Tabela 5 – Valores da temperatura em que a variável $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ diverge numericamente para diferentes valores de α . Representamos esta temperatura de divergência por T_d .

Pela Tabela 5 verifica-se também que, para $\alpha = 0.75$, ocorre um decréscimo em T_d de $g = 14$ para $g = 15$, $T_d(g = 14) > T_d(g = 15)$. Este fato indica uma mudança no padrão, como pode ser observado na Fig. 38b. O valor de α que determina esta mudança no comportamento do sistema depende da precisão numérica utilizada para a temperatura. Com quatro casas decimais, encontra-se $\alpha = 0.743$ como o expoente máximo para o qual a T_d tem o comportamento crescente com a geração g . No trabalho [21] foi verificado comportamento qualitativamente semelhante, mas para $\mu = 1$, sendo que, acima deste valor, a temperatura T_d decresce com a geração g . Este decaimento é observado com o nosso modelo para valores de $\alpha > 0.743$, onde verifica-se que a temperatura de divergência decresce exponencialmente com a geração g , sendo que a taxa de decaimento cresce com α (Figura 38b). Para $\alpha \geq 0.88$ não foi possível estimar T_d para todas as gerações, pois o platô

de divergência de $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ não era alcançado, devido ao baixo valor das temperaturas (por exemplo, com $\alpha \geq 0.88$ a $T_d < 0.03$ para $g = 15$).

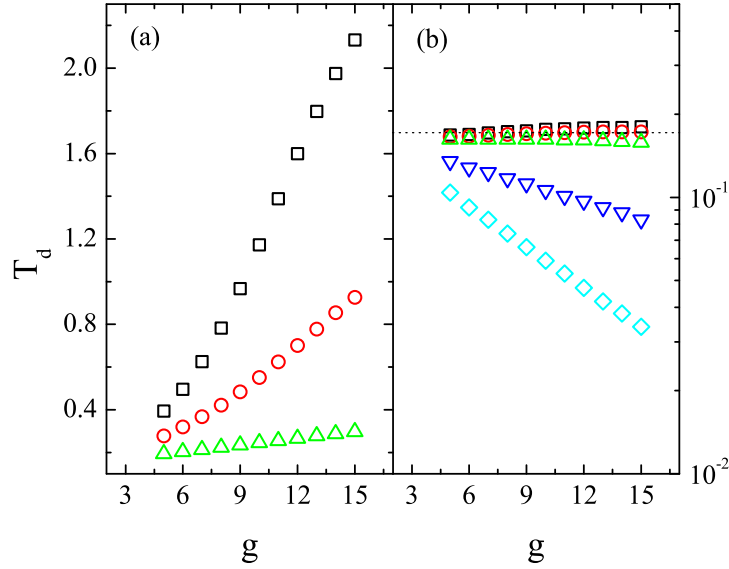


Figura 38 – Comportamento de T_d em função da geração para diferentes valores de α . No painel (a), temos $\alpha = 0.5, 0.6$ e 0.7 , identificados por quadrado, círculo e triângulo para cima, respectivamente; observa-se que T_d tem o comportamento crescente com a geração g . No painel (b), $\alpha = 0.74, 0.743, 0.75, 0.8$ e 0.87 identificados por quadrado, círculo, triângulo para cima, triângulo para baixo e losango; observa-se que para $\alpha = 0.8$ e 0.87 o comportamento de T_d é completamente decrescente com a geração g .

Portanto, $\alpha = 0.743$ representa o limiar para a mudança de comportamento de $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$. Observa-se pela Fig. 38 que a temperatura T_d para este caso é quase constante, ou seja, torna-se independente da geração g (ou do tamanho do sistema). Apesar disto, verifica-se pela Fig. 39 (página 98) que este valor de T_d está bem abaixo do ponto de máximo do calor específico, c , e nenhuma mudança é observada no padrão *Schottky* do calor específico.

Apesar dos cálculos para a magnetização não terem sido realizados para o modelo deste trabalho, pois os efeitos do campo externo não foram considerados, pode-se fazer um paralelo com os dados obtidos no artigo [21], pois o comportamento da temperatura de divergência T_d com g e α é qualitativamente semelhante aos resultados apresentados pelos autores para as variações de T_d com g e μ (vide Eq. 4.10 na página 78), fato que pode ser observado comparando a Fig. 38, do nosso trabalho, com a Fig. 4 do artigo [21].

No trabalho [21], foi observado pelos autores que o comportamento da magnetização m também depende de μ . Para valores de $\mu < 1$ a temperatura T_d aumenta com a geração, e a magnetização apresenta um platô estável em $m = 1$ para um intervalo finito de temperatura, independente da geração, e que persiste até $\mu = 1$. Este comportamento

indica que existe uma magnetização espontânea, ou seja, o sistema será encontrado apenas em uma fase ordenada, que, neste caso, corresponde a fase ferromagnética ($J > 0$). Já em $\mu > 1$, o platô desaparece e na medida que a geração cresce a magnetização se anula mais rapidamente para qualquer $T > 0$, este fato sugere que, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), a magnetização será nula para qualquer $T > 0$. Ou seja, a região de $\mu > 1$ revela um comportamento que é característico de sistemas paramagnéticos. Portanto, comparativamente, os nossos dados sugerem que, apesar de não ocorrer um comportamento crítico com a variação da temperatura, o sistema exhibe uma mudança de padrão com o fator α . Para valores de $\alpha > 0.743$ o sistema será encontrado em um estado com característica de um paramagneto e para $\alpha < 0.743$ em uma fase ferromagnética.

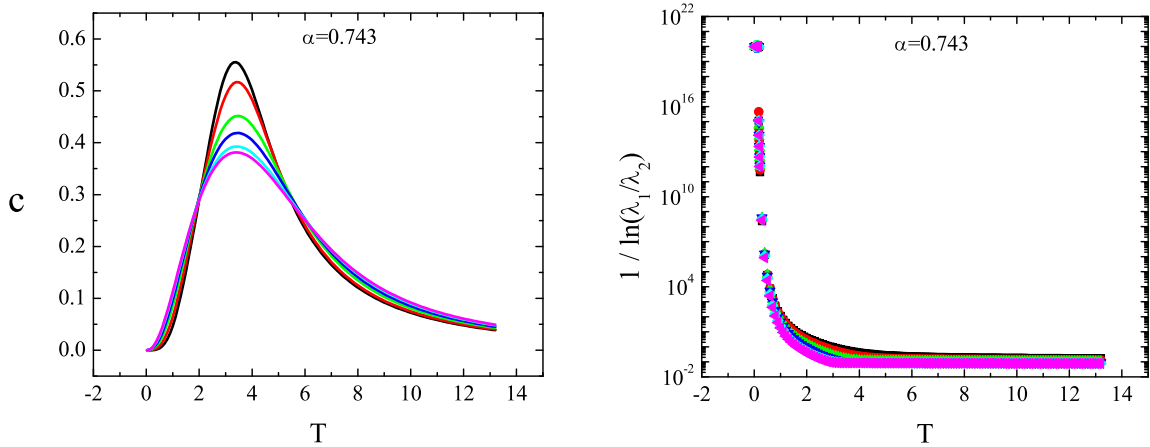


Figura 39 – Comportamento do calor específico, c , e da variável $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ em função da temperatura para as gerações $g = 5, 7, 10, 12, 14$ e 15 , com $\alpha = 0.743$.

5.2 Propriedades geométricas do modelo

Para entender melhor a mudança de padrão do sistema com a variável α , estudamos a distribuição de J_{ij} e dos raios R_i . No entanto, devido ao grande espaçamento entre os tamanhos dos raios, utilizamos na análise o logaritmo dos raios e da constante de troca. Na figura Fig. 40a temos o histograma do $\log(R_i + R_j)$ para a geração $g = 12$. Na Fig. 40b temos o histograma do $\log(J_{ij})$ para a geração $g = 12$ com $\alpha = 1$, o que equivale tomar o inverso do $\log(R_i + R_j)$. Estes dois histogramas foram obtidos com 580 *bins*. Já na Fig. 40c apresentamos o histograma do $\log(R_i)$ para $g = 15$, com número de *bins* igual a 733. Observa-se que a forma do histograma do $\log(J_{ij})$ é bem complicada e de difícil ajuste, pois temos a formação de grupos em torno dos discos de mesmo raio. No entanto, o histograma do $\log(R_i)$ se apresenta mais simples, sendo possível buscar uma função de distribuição que se ajuste aos dados.

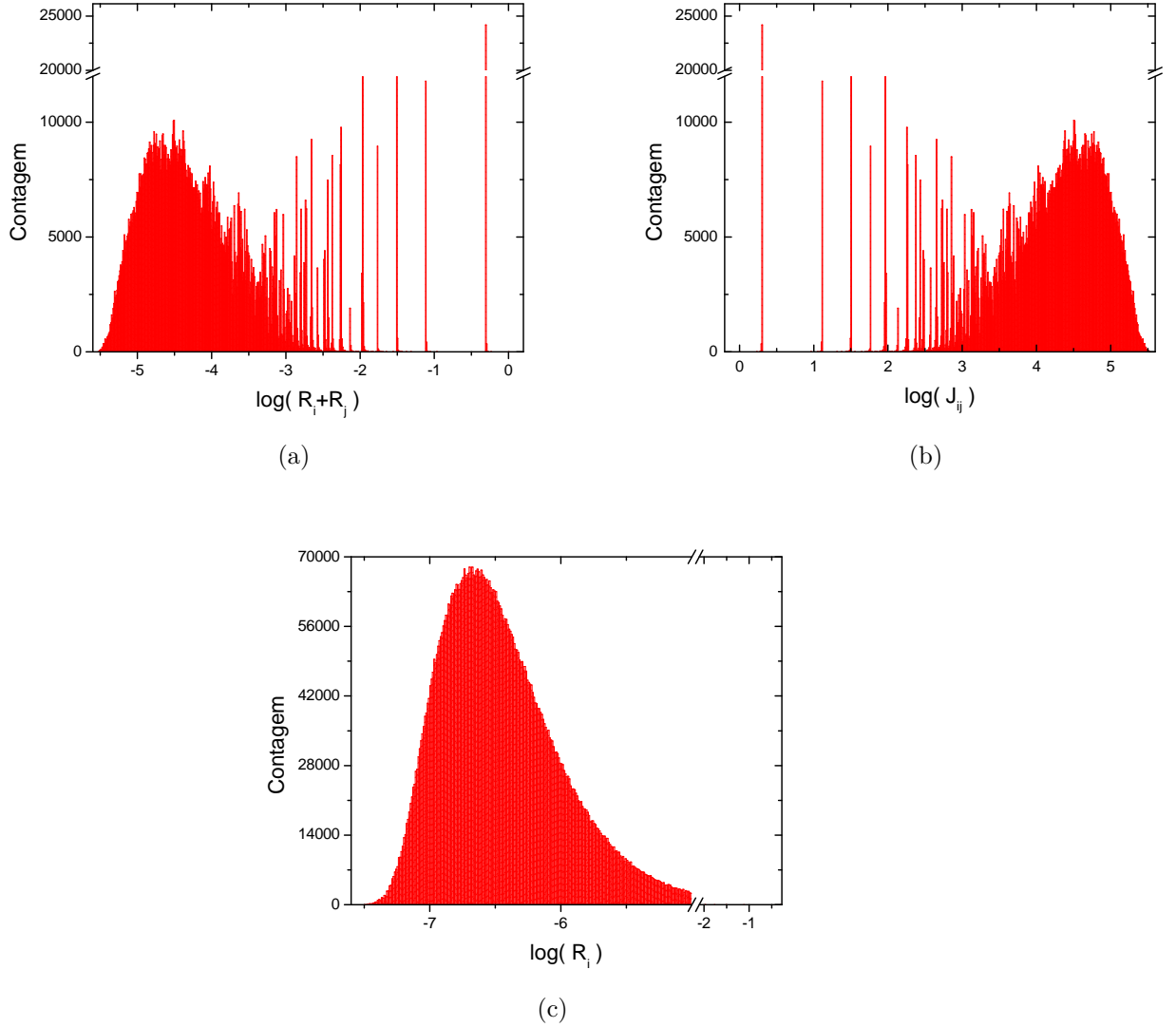


Figura 40 – Histogramas para $g = 12$ e $\alpha = 1$, com 580 bins, do $\log(R_i + R_j)$ (a) e $\log(J_{ij})$ (b). Em (c) temos o histograma do $\log(R_i)$ para $g = 15$ com 733 bins.

Para verificarmos o tipo de distribuição do $\log(R_i)$, fizemos ajustes de dados pelo software Origin para $g = 12$ (Fig. 41a) e $g = 15$ (Fig. 41b), onde utilizamos os dados da frequência relativa. Verificamos que a distribuição Gaussiana (curva vermelha) e a Lorentziana (curva verde) foram as distribuições que melhor se ajustaram aos dados do $\log(R_i)$. No entanto, sendo a Gaussiana expressa por:

$$f_g(x) = y_0 + \frac{A}{\sigma\sqrt{\pi/2}} \exp\left[-\frac{2(x - x_c)^2}{\sigma^2}\right], \quad (5.1)$$

mas no ajuste consideramos $x = \log R_i$. E a distribuição Log-Normal expressa por:

$$f_{LN}(x) = y_0 + \frac{A}{\sigma x \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\log(x) - \log(x_c))^2}{2\sigma^2}\right]. \quad (5.2)$$

Podemos considerar, pelo ajuste da Gaussiana, que a distribuição dos R_i 's é aproximadamente

$$P(R_i) \approx R_i f_{LN}(R_i). \quad (5.3)$$

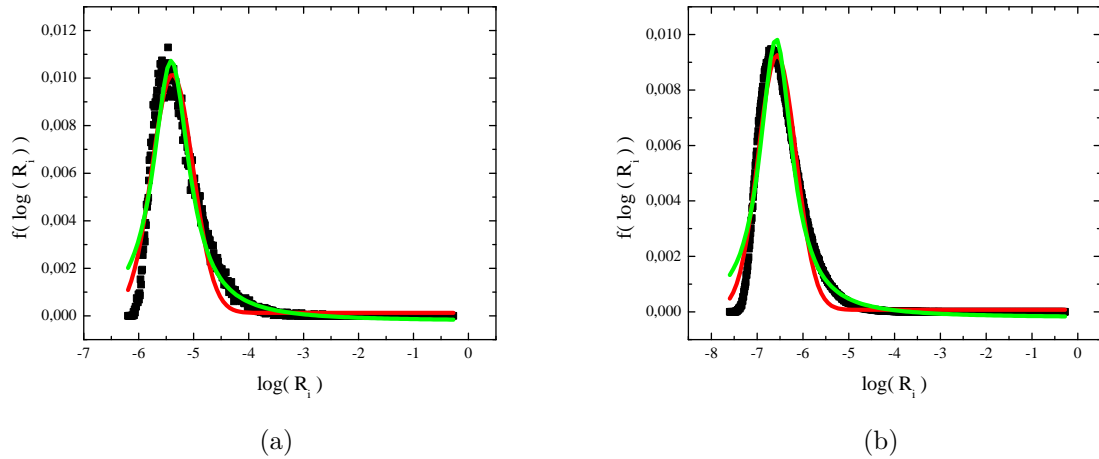


Figura 41 – Distribuição do $\log(R_i)$ (pontos pretos) e ajustes pela distribuição Gaussiana (curva vermelha) e Lorentziana (curva verde) para a geração $g = 12$ (a) e $g = 15$ (b).

Uma vez que não foi possível estabelecer uma expressão analítica para a distribuição de probabilidade da contante de troca J_{ij} para o caso mais simples de $\alpha = 1$, a busca por uma compreensão da mudança de padrão do sistema com a variável α torna-se ainda mais difícil.

6 Conclusões

6.1 Empacotamento Apoloniano como meio poroso não homogêneo e não estacionário

Nesta parte do trabalho nós reportamos resultados de uma exaustiva investigação sobre a simulação computacional do escoamento de um fluido newtoniano em um canal bidimensional preenchido com discos de diferentes tamanhos, sujeitos a uma condição de contorno não estacionária. Nós discutimos e caracterizamos um grande número de mudanças no escoamento induzidas pela rotação dos discos, sendo este o primeiro efeito das forças de arrasto do fluido sobre os mesmos. Os centros e os raios dos discos foram determinados pelo empacotamento Apoloniano que já tinha sido utilizado como modelo de meio poroso.

Os resultados obtidos revelam propriedades globais do escoamento, assim como detalhes dos movimentos dos discos. O primeiro grupo de resultados foi obtido comparando a resistência hidráulica, G , do canal para o caso dos discos girantes (G^R) com os valores correspondentes para os discos estáticos (G^S). Nossos resultados indicam uma mudança $\lesssim 5\%$ no valor de G , dependendo do fator de escala (s) e do número de Reynolds (Re): para um dado valor de Re fixo, a razão G^R/G^S diminui quando s cresce, enquanto a razão cresce com Re para um valor fixo de s . O padrão local de escoamento foi caracterizado em termos do fluxo em quatro canais principais do empacotamento. A maior mudança provocada pela condição de rotação dos discos é o aumento do fluxo através do canal central e a diminuição do fluxo dos canais próximos as paredes, isto é, $\bar{\varphi}_2^R, \varphi_2^R > \bar{\varphi}_2^S, \varphi_2^S$ e $(\bar{\varphi}_1^R, \varphi_1^R < \bar{\varphi}_1^S, \varphi_1^S)$. Uma análise mais detalhada dos resultados mostra que a intensidade das mudanças nos canais próximos da entrada do escoamento (C_1 and C_2) é maior que a observada para os canais próximos da saída do fluxo. Este efeito, que pode ser monitorado pelo desvio de parte dos fluidos que escoam através de C_2 para os canais da parede \bar{C}_1 devido aos discos localizados no centro do tampão, tornam-se mais significantes quando Re aumenta. Estas mudanças no padrão do escoamento necessitam de diferentes gradientes de pressão para manter a mesma velocidade, o que explica o fato de G^R ser maior ou menor que G^S , dependendo dos valores de s e Re . Como uma última análise para as propriedades gerais do escoamento, nós observamos que a relação de KC modificada para a região linear da permeabilidade, a qual foi verificada em [11], é também satisfeita para o regime de obstáculos não estacionários.

No processo de integração do sistema de equações foi considerado como condição inicial que todos os discos estão em repouso. As integrações foram realizadas assumindo,

principalmente, que a densidade do fluido (ρ) e dos discos (ρ^D) são iguais. Com exceção dos discos com centro no meio do canal, todos os outros atingiram uma velocidade angular estacionária (Ω) que aumentava com Re . A influência da adição de novos discos em novas gerações sobre os discos previamente introduzidos é pequena. Como pode ser observado no comportamento dos quatro maiores discos introduzidos em $g = 1$. A característica mais inesperada é o surgimento de um padrão oscilatório estável sobrepondo-se ao valor estacionário de Ω para alguns discos que são introduzidos em gerações $g \geq 3$. Estas oscilações tem uma forma quase senoidal, caracterizada por um pico na transformada de Fourier. A frequência do pico dominante depende da geometria (s, g), assim como de Re e sobre o disco em particular.

Simulações de alguns casos de discos com densidade (ρ^D) maior que a do fluido (ρ) foram realizadas para $g = 1$ e 2 , os resultados para estes casos mostram que enquanto ρ^D é finito, o sistema sempre evolui para uma mesma configuração de discos girantes, isto é, $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Omega_{g,j}^g \rangle$ não depende de ρ^D . Entretanto, observa-se que enquanto a velocidade angular média ainda não é constante a densidade ρ^D altera a dinâmica dos discos, pois os dados revelam que a duração da fase transitória aumenta com ρ^D . Foram feitas análises para encontrar uma relação entre o tempo de duração do regime transiente e a densidade ρ^D para diferentes discos, mas não foi possível obter uma expressão geral para todos os discos. Os resultados também sugerem que os estados estacionários do padrão oscilatório não são influenciados por ρ^D .

Apesar da grande quantidade de resultados relatados, este trabalho mostra que o assunto discutido pode ser estendido em muitas direções diferentes. Várias perguntas podem ser formuladas e investigadas em detalhes, como a influência de escolher um fator de redução não uniforme para os discos, ou manter fixo para alguns dos discos. Finalmente, a possibilidade de permitir o movimento de translação de alguns dos discos é um outro campo que pode ser explorado com as ferramentas de movimento de fronteiras em DFC, como as usadas neste trabalho.

6.2 Modelo de Ising com interações dependentes da distância entre os nós da rede apoloniana

Nós estudamos o modelo de Ising com spins $\sigma \pm 1$ alocados em cada sítio da rede apoloniana. Pares de spins (i, j) que são vizinhos na rede, interagem com uma constante de troca $J_{i,j}$ que é definida como uma função da distância de separação entre os nós. A técnica de matrizes de transferência foi utilizada como método de solução. Os resultados obtidos para o comportamento magnético deste modelo revelam informações interessantes, embora não se tenha identificado comportamento crítico para uma temperatura finita. A aplicação do método MT permitiu a obtenção da energia livre $f(T)$ com uma boa precisão

numérica o que possibilitou a derivação numérica da entropia e do calor específico. Os resultados obtidos para $s(T)$ evidenciam a consistência do método, uma vez que $s \simeq \ln 2$ no limite de altas temperaturas é obtido para uma mesma região de valores de T para qualquer g e α .

O comportamento das curvas para o calor específico seguem o padrão de um perfil *Schottky* e a dependência com g indica uma convergência para um valor bem definido no limite termodinâmico, fato que indica a ausência de comportamento crítico com a temperatura. No entanto, a partir do comportamento da grandeza $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ em função de T , foi possível identificar mudanças de comportamento do sistema com os valores de α . Verificou-se que $\alpha = 0.743$ representa o limiar para a mudança de comportamento do sistema, abaixo deste valor de α observa-se que a grandeza $1/\ln(\lambda_1/\lambda_2)$ diverge para uma temperatura não nula $T_d(g)$ que aumenta com a geração. Este comportamento é característico do caso em que as interações são uniformes ($\alpha = 0$), como apontado inicialmente no artigo [17]. Já para $\alpha > 0.743$, nota-se que $T_d(g)$ decresce com g .

Um fato interessante que surgiu na análise dos dados, foi que o comportamento da temperatura de divergência T_d com g e α é qualitativamente semelhante aos resultados apresentados pelos autores de [21] para as variações de T_d com g e μ , como pode ser observado comparando a Fig. 38 com a Fig. 4 de [21]. Sendo assim, apesar dos cálculos para a magnetização não terem sido realizados para o modelo deste trabalho, um paralelo com os dados obtidos no artigo [21] pode ser feito. Após comparação, pode-se afirmar que os nossos dados sugerem que, apesar de não ocorrer um comportamento crítico com a variação da temperatura, o sistema exibe uma mudança de padrão com o fator α . Para valores de $\alpha > 0.743$ o sistema será encontrado em um estado com característica de um paramagneto e para $\alpha < 0.743$ em uma fase ferromagnética, independentemente do valor de T .

Visando compreender melhor a mudança de padrão do sistema com a variável α , estudamos a distribuição de J_{ij} e dos raios R_i . Neste último caso, foi possível identificar que a lei de distribuição pode ser aproximada por uma função log-normal. É importante observar que, devido ao grande espaçamento entre os tamanhos dos raios, utilizamos na análise o logaritmo dos raios e da constante de troca. Entretanto, não foi possível proceder da mesma maneira e estabelecer uma expressão analítica aproximada para a distribuição de probabilidade para o conjunto de J_{ij} . Note que, devido ao resultado anterior, buscou-se também estudar a distribuição do $\log(J_{ij})$, mas a sua distribuição se apresentou bem complicada e de difícil ajuste, devido à formação de grupos em torno dos discos de mesmo raio. Resumindo, verificamos apenas que a distribuição dos R_i 's pode ser aproximada por $P(R_i) \approx R_i f_{LN}(R_i)$.

Como perspectiva futura para este trabalho, estudos como a aplicação de um campo externo homogêneo e também aleatório podem ser incluídos nos cálculos para verificar o

comportamento das grandezas termodinâmicas e uma possível transição de fase para uma temperatura finita.

Referências

- [1] A. E. Scheidegger, *The Physics of Flow through Porous Media*, 3rd ed. Toronto: Univ. Toronto Press, 1974.
- [2] J. Bear, *Dynamics of Fluids in Porous Media*. New York: Dover, 1988.
- [3] F. A. L. Dullien, *Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure*, 2nd ed. New York: Academic Press, 1991.
- [4] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 2001.
- [5] M. L. Rosinberg, “Liquid State Methods for Disordered Systems,” in *New Approaches to Problems in Liquid State Theory*, ser. NATO Science Series, C. Caccamo *et al.*, Eds. Springer Netherlands, 1999, vol. 529, pp. 245–278. [Online]. Available: http://dx.doi.org/10.1007/978-94-011-4564-0_13
- [6] N. A. M. Araújo, H. Seybold, R. M. Baram, H. J. Herrmann, and J. S. Andrade, “Optimal synchronizability of bearings,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 064106, Feb 2013. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.064106>
- [7] S. L. Bryant, D. W. Mellor, and C. A. Cade, “Physically representative network models of transport in porous media,” *AIChE Journal*, vol. 39, no. 3, pp. 387–396, 1993. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1002/aic.690390303>
- [8] J. Dodds, “The porosity and contact points in multicomponent random sphere packings calculated by a simple statistical geometric model,” *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 77, no. 2, pp. 317 – 327, 1980. [Online]. Available: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021979780903021>
- [9] H. J. Herrmann, G. Mantica, and D. Bessis, “Space-filling bearings,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 3223–3226, Dec 1990. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.65.3223>
- [10] J. S. Andrade, H. J. Herrmann, R. F. S. Andrade, and L. R. da Silva, “Apollonian Networks: Simultaneously Scale-Free, Small World, Euclidean, Space Filling, and with Matching Graphs,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 018702, Jan 2005. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.018702>
- [11] R. S. Oliveira, J. S. Andrade, and R. F. S. Andrade, “Fluid flow through apollonian packings,” *Phys. Rev. E*, vol. 81, p. 047302, Apr 2010. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.81.047302>

- [12] —, “Fluid flow through packings of rotating obstacles,” *Phys. Rev. E*, vol. 91, p. 033002, Mar 2015. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.033002>
- [13] A. S. S. Paiva, R. S. Oliveira, and R. F. S. Andrade, “Two-phase fluid flow in geometric packing,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 373, no. 2056, 2015. [Online]. Available: <http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/373/2056/20150111>
- [14] H. S. M. Coxeter, “The Problem of Apollonius,” *The American Mathematical Monthly*, vol. 75, no. 1, pp. pp. 5–15, 1968. [Online]. Available: <http://www.jstor.org/stable/2315097>
- [15] H. J. Herrmann, G. Mantica, and D. Bessis, “Space-filling bearings,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 3223–3226, Dec 1990. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.65.3223>
- [16] J. C. Lagarias, C. L. Mallows, and A. R. Wilks, “Beyond the Descartes Circle Theorem,” *The American Mathematical Monthly*, vol. 109, no. 4, pp. pp. 338–361, 2002. [Online]. Available: <http://www.jstor.org/stable/2695498>
- [17] R. F. S. Andrade and H. J. Herrmann, “Magnetic models on Apollonian networks,” *Phys. Rev. E*, vol. 71, p. 056131, May 2005. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.71.056131>
- [18] R. S. Oliveira, “Propriedades de escala no escoamento de fluido em meio poroso modelado por empacotamento apoloniano,” Mestrado, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, 2009.
- [19] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. England: Longman Scientific & Technical, 1995.
- [20] D. Tiab and E. C. Donaldson, *Petrophysics: theory and practice of measuring reservoir rock and fluid transport properties*, 2nd ed. Burlington, USA: Gulf Professional Publishing, 2004.
- [21] R. F. S. Andrade, J. S. Andrade, and H. J. Herrmann, “Ising model on the Apollonian network with node-dependent interactions,” *Phys. Rev. E*, vol. 79, p. 036105, Mar 2009. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.79.036105>
- [22] F. Brochard and P. G. de Gennes, “Phase transitions of binary mixtures in random media,” *Journal de Physique Lettres*, vol. 44, no. 18, pp. 785–791, 1983. [Online]. Available: <https://hal.archives-ouvertes.fr/jpa-00232263>

- [23] P. G. de Gennes, “Liquid-Liquid Demixing inside a Rigid Network. Qualitative Features,” *J. Phys. Chem*, vol. 88, pp. 6469–6472, 1984.
- [24] A. Maritan, M. R. Swift, M. Cieplak, M. H. W. Chan, M. W. Cole, and J. R. Banavar, “Ordering and Phase Transitions in Random-Field Ising Systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 67, no. 14, pp. 1821–1824, 1991.
- [25] M. Y. Lin, S. K. Sinha, J. M. Drake, P. Thiyagarajan, X. L. Wu, and H. B. Stanley, “SANS studies of fluid phase transitions in porous media,” *Journal de Physique IV*, vol. 03(C8), pp. C8–109–C8–115, 1993. [Online]. Available: <https://hal.archives-ouvertes.fr/jpa-00252252>
- [26] T. Nattermann, “Theory of the Random Field Ising Model,” in *Spin Glasses and Random Fields*, A. Young, Ed. World Scientific, 1997, pp. 277–298.
- [27] D. Stauffer and R. B. Pandey, “Simulation of demixing transition for binary fluid within a gel,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 25, no. 17, p. L1079, 1992. [Online]. Available: <http://stacks.iop.org/0305-4470/25/i=17/a=011>
- [28] J. C. Lee, “Ordering processes in porous media,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, pp. 3599–3602, Jun 1993. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.70.3599>
- [29] T. MacFarland, G. T. Barkema, and J. F. Marko, “Equilibrium phase transitions in a porous medium,” *Phys. Rev. B*, vol. 53, pp. 148–158, Jan 1996. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.53.148>
- [30] K. Uzelac, A. Hasmy, and R. Jullien, “Numerical Study of Phase Transitions in the Pores of an Aerogel,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 74, pp. 422–425, Jan 1995. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.74.422>
- [31] C. N. Kaplan, M. Hinczewski, and A. N. Berker, “Infinitely robust order and local order-parameter tulips in Apollonian networks with quenched disorder,” *Phys. Rev. E*, vol. 79, p. 061120, Jun 2009. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.79.061120>
- [32] Cardoso, A. L. and Andrade, R. F. S. and Souza, A. M. C., “Localization properties of a tight-binding electronic model on the Apollonian network,” *Phys. Rev. B*, vol. 78, p. 214202, Dec 2008. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.214202>
- [33] de Oliveira, I. N. and de Moura, F. A. B. F. and Lyra, M. L. and Andrade, J. S. and Albuquerque, E. L., “Free-electron gas in the Apollonian network: Multifractal energy spectrum and its thermodynamic fingerprints,” *Phys. Rev. E*, vol. 79, p. 016104, Jan 2009. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.79.016104>

- [34] N. A. M. Araújo, R. F. S. Andrade, and H. J. Herrmann, “ q -State Potts model on the Apollonian network,” *Phys. Rev. E*, vol. 82, p. 046109, Oct 2010. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.046109>
- [35] I. N. de Oliveira, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, J. S. Andrade, and E. L. Albuquerque, “Bose-Einstein condensation in the Apollonian complex network,” *Phys. Rev. E*, vol. 81, p. 030104, Mar 2010. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.81.030104>
- [36] Lima, F. W. S. and Moreira, André A. and Araújo, Ascânio D., “Nonequilibrium model on Apollonian networks,” *Phys. Rev. E*, vol. 86, p. 056109, Nov 2012. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.056109>
- [37] I. N. de Oliveira, T. B. dos Santos, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, and M. Serva, “Critical behavior of the ideal-gas bose-einstein condensation in the apollonian network,” *Phys. Rev. E*, vol. 88, p. 022139, Aug 2013. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.88.022139>
- [38] L.F. da Silva and R.N. Costa Filho and D.J.B. Soares and A. Macedo-Filho and U.L. Fulco and E.L. Albuquerque, “Critical properties of contact process on the Apollonian network,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 392, no. 6, pp. 1532 – 1537, 2013. [Online]. Available: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437112009995>
- [39] L F da Silva and R N Costa Filho and A R Cunha and A Macedo-Filho and M Serva and U L Fulco and E L Albuquerque, “Critical properties of the SIS model dynamics on the Apollonian network,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2013, no. 05, p. P05003, 2013. [Online]. Available: <http://stacks.iop.org/1742-5468/2013/i=05/a=P05003>
- [40] V. S. T. Silva, R. F. S. Andrade, and S. R. Salinas, “Annealed Ising model with site dilution on self-similar structures,” *Phys. Rev. E*, vol. 90, p. 052112, Nov 2014. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.052112>
- [41] F. M. White, *Fluid mechanics*, 4th ed. Mcgraw-Hill series in mechanical engineering, 1998.
- [42] J. H. Spurk and N. Aksel, *Fluid mechanics*, 2nd ed. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [43] B. R. Munson, D. F. Young, and T. H. Okiishi, *Fundamentals of fluid mechanics*, 5th ed. New York: John Wiley & Sons, 2006.
- [44] K. R. Symon, *Mechanics*, 2nd ed. Massachusetts, USA: Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1960.

- [45] A. O. Fortuna, *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. Editora da Universidade de São Paulo, 2000.
- [46] J. Tu, G. H. Yeoh, and C. Liu, *Computational Fluid Dynamics: A practical Approach*. New York: Elsevier Science & Technology, 2008.
- [47] J. F. Wendt, Ed., *Computational Fluid Dynamics: An Introduction*, 3rd ed. Springer, 2009.
- [48] R. F. Andrade, “Investigations on the laminar-turbulent transition by means of linear and non-linear methods,” Doktorgrades der Naturwissenschaften (Dr.rer.nat), Fakultät für Physik der Universität Regensburg, 1981.
- [49] T. Ahmed, *Working Guide to Reservoir Rock Properties and Fluid Flow*. Gulf Professional Publishing, 2009.
- [50] B. B. Holzberg, “Previsão probabilística de pressão de poros em rochas-reservatório através de velocidades compressoriais e cisalhantes.” Doutorado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil., 2005.
- [51] A. Corey, *Mechanics of Immiscible Fluids in Porous Media*. Water Resources Publications, 1994.
- [52] J. S. I. Souza, A. M. Peixoto, and F. F. de Toledo, *Enciclopédia agrícola brasileira: A-B*, ser. Enciclopédia agrícola brasileira. Edusp, 1995.
- [53] E. E. Underwood, *Quantitative stereology*, ser. Addison-Wesley series in metallurgy and materials. Addison-Wesley Pub. Co., 1970.
- [54] P. C. Carman, “Determination of the specific surface of powders. I,” *Journal of the Society of Chemical Industry. Transactions and communications*, vol. 57, no. 27, p. 225, 1938. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1002/jctb.5000572706>
- [55] D. A. Nield and A. Bejan, *Convection in porous media*. Springer New York, 2006.
- [56] M. Honarpour, L. Koederitz, and A. Harvey, *Relative permeability of petroleum reservoirs*. CRC Press Inc, 1986.
- [57] J. S. Andrade, Jr., A. D. Araújo, F. A. Oliveira, and A. Hansen, “Flow in rough self-affine fractures joints,” *eprint arXiv:cond-mat/0608654*, Aug. 2006.
- [58] P. Adler, *Porous Media: Geometry and Transports*. Stoneham, Massachusetts, USA: Butterworth-Heinemann Limited, 1992.
- [59] J. Kozeny, “Über Grundwasserbewegung,” *Wusserkraft und Wusserwirtschaft*, vol. 22, pp. 67–86, 1927.

- [60] P. C. Carman, “Fluid flow through a granular bed,” *Trans. Inst. Chem. Eng.*, vol. 15, p. 150, 1937. [Online]. Available: <http://archive.icheme.org>
- [61] ———, *Flow of Gases through Porous Media*. London: Butterworths, 1956.
- [62] C. Schaschke, *A Dictionary of Chemical Engineering*, ser. Oxford Quick Reference. OUP Oxford, 2014.
- [63] P. C. Carman, “Permeability of saturated sands, soils and clays,” *The Journal of Agricultural Science*, vol. 29, pp. 262–273, 4 1939.
- [64] J. G. Berryman, “Elastic wave propagation in fluid-saturated porous media,” *The Journal of the Acoustical Society of America*, vol. 69, no. 2, pp. 416–424, 1981.
- [65] T. Bourbie and B. Zinszner, “Hydraulic and acoustic properties as a function of porosity in Fontainebleau sandstone,” *Journal of Geophysical Research: Solid Earth (1978–2012)*, vol. 90, no. B13, pp. 11 524–11 532, 1985.
- [66] A. Koponen, M. Kataja, and J. Timonen, “Permeability and effective porosity of porous media,” *Phys. Rev. E*, vol. 56, pp. 3319–3325, Sep 1997. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.56.3319>
- [67] G. Mavko and A. Nur, “The effect of a percolation threshold in the Kozeny-Carman relation,” *GEOPHYSICS*, vol. 62, no. 5, pp. 1480–1482, 1997. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1190/1.1444251>
- [68] G. V. C. Hilmi S. Salem, “Influence of Porosity and Direction of Flow on Tortuosity in Unconsolidated Porous Media,” *Energy Sources*, vol. 22, no. 3, pp. 207–213, 2000. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1080/00908310050013992>
- [69] A. Rabbani and S. Jamshidi, “Specific surface and porosity relationship for sandstones for prediction of permeability,” *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, vol. 71, pp. 25 – 32, 2014. [Online]. Available: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1365160914001609>
- [70] FLUENT, *ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide*, ANSYS Inc., Centerra Resource Park, 10 Cavendish Court, Lebanon, NH 03766, USA, 2009, fLUENT is a commercial package for computational fluid dynamics – CDF.
- [71] GAMBIT, *GAMBIT user manual*, ANSYS Inc., Centerra Resource Park, 10 Cavendish Court, Lebanon, NH 03766, USA, gAMBIT is a software package designed to help analysts and designers build and mesh models for computational fluid dynamics (CFD) and other scientific applications.

- [72] J. T. Batina, “Unsteady Euler airfoil solutions using unstructured dynamic meshes,” *AIAA Journal*, vol. 28, no. 8, pp. 1381–1388, 1990. [Online]. Available: <http://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/3.25229>
- [73] F. J. Blom, “Considerations on the spring analogy,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 32, no. 6, pp. 647–668, 2000. [Online]. Available: [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0363\(20000330\)32:6<647::AID-FLD979>3.0.CO;2-K](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-0363(20000330)32:6<647::AID-FLD979>3.0.CO;2-K)
- [74] D. O. Snyder, E. K. Koutsavdis, and J. S. Anttonen, “Transonic store separation using unstructured cfd with dynamic meshing,” *AIAA Paper*, vol. 3919, 2003.
- [75] A. Shabana, *Computational Dynamics*, 3rd ed. Wiley, 2009.
- [76] OriginLab, *Manual do Origin*, OriginLab, Centerra, 2009.
- [77] R. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2nd ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1996.
- [78] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics*. New York: McGraw-Hill., 1965.
- [79] B. A. Cipra, “An introduction to the Ising model,” *American Mathematical Monthly*, vol. 94, no. 10, pp. 937–959, 1987.
- [80] S. Kobe, “Ernst Ising 1900-1998,” *Brazilian Journal of Physics*, vol. 30, pp. 649 – 654, 12 2000.
- [81] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1987.
- [82] L. Onsager, “Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition,” *Phys. Rev.*, vol. 65, pp. 117–149, Feb 1944. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>
- [83] H. A. Kramers and G. H. Wannier, “Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I,” *Phys. Rev.*, vol. 60, pp. 252–262, Aug 1941. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.60.252>
- [84] M. Plischke and M. Bergersen, *Equilibrium statistical physics*, 3rd ed. Singapore: World Scientific, 2006.
- [85] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. New York: Academic Press, 1982.
- [86] M. Serva, U. L. Fulco, and E. L. Albuquerque, “Ising models on the regularized Apollonian network,” *Phys. Rev. E*, vol. 88, p. 042823, Oct 2013. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.88.042823>

-
- [87] —, “Exact solutions and infinite-order phase transitions for a general class of Ising models on the regularized Apollonian network,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2014, no. 1, p. P01010, 2014. [Online]. Available: <http://stacks.iop.org/1742-5468/2014/i=1/a=P01010>
- [88] C. V. Giuraniuc, J. P. L. Hatchett, J. O. Indekeu, M. Leone, I. Pérez Castillo, B. Van Schaeybroeck, and C. Vanderzande, “Trading Interactions for Topology in Scale-Free Networks,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 098701, Aug 2005. [Online]. Available: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.098701>
- [89] R. L. Graham, J. C. Lagarias, C. L. Mallows, A. R. Wilks, and C. H. Yan, “Apollonian circle packings: number theory,” *Journal of Number Theory*, vol. 100, no. 1, pp. 1 – 45, 2003. [Online]. Available: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022314X03000155>

Apêndices

APÊNDICE A – Empacotamento Apoloniano e os Teoremas de Descartes

Empacotamento Apoloniano¹ foi um problema proposto pelo matemático Apolônio de Perga (262-190 a.C.) e sua solução consta no tratado *Tangências* [14]. O objetivo de Apolônio era: i) encontrar um círculo tangente a três outros círculos, podendo estes ser degenerados em retas (círculos de raio infinito) ou pontos (círculos de raio zero), ii) determinar o empacotamento ótimo, isto é, aquele com o menor número de círculos (em 2D) ou esferas (em 3D) para ocupar uma região finita ao espaço.

Desde o trabalho de Apolônio até os dias atuais, diversos matemáticos têm se empenhado na busca de soluções para o problema proposto. As abordagens dadas ao problema estão ligadas principalmente ao instrumental matemático disponível em cada época. Dentre os vários trabalhos, pode-se citar o realizado por Descartes (1643), nos seus dois teoremas (*Teorema dos Círculos de Descartes e Teorema de Descartes Complexo*)² em que ele encontra relações para o raio e o centro de cada círculo.

Teorema dos Círculos de Descartes

Uma *configuração de Descartes* é uma configuração de quatro círculos mutuamente tangentes, em pontos diferentes, no plano. As possíveis formas de arrumação dos círculos aparecem na Fig. 42.

Dados três círculos mutuamente tangentes entre si, em três pontos distintos, com curvaturas³ b_1 , b_2 e b_3 , segundo o Teorema dos Círculos de Descartes existirá exatamente dois outros círculos que serão tangentes a cada um deles e as curvaturas destes dois novos círculos serão as raízes da seguinte equação:

$$\sum_{j=1}^4 b_j^2 = \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^4 b_j \right)^2. \quad (\text{A.1})$$

Expandindo a expressão (A.1) e por conveniência substituindo b_1, b_2, b_3 e b_4 por a, b, c e d , respectivamente, obtém-se:

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = \frac{1}{2}(a + b + c + d)^2$$

¹ Apollonian Packing, em inglês.

² Em inglês, Descartes Circle Theorem e Complex Descartes Theorem [16].

³ A curvatura b_j é definida como o inverso do raio r_j , ou seja, $b_j = \frac{1}{r_j}$.

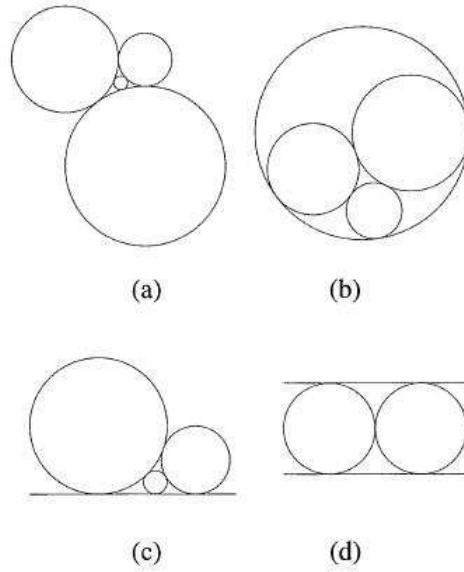


Figura 42 – Configuração de Descartes. Figura retirada da referência [89].

$$\begin{aligned}
 2(a^2 + b^2 + c^2 + d^2) &= a^2 + 2a(b + c + d) + (b + c + d)^2 \\
 2(a^2 + b^2 + c^2 + d^2) &= a^2 + b^2 + 2a(b + c + d) + 2b(c + d) + (c + d)^2 \\
 a^2 + b^2 + c^2 + d^2 &= 2(ab + ac) + 2ad + abc + 2bd + 2cd \\
 d^2 - 2(a + b + c)d + a^2 + b^2 + c^2 - 2(ab + ac + bc) &= 0.
 \end{aligned}$$

Agora é só resolver a equação de segundo grau,

$$\Delta = 4(a + b + c)^2 - 4[a^2 + b^2 + c^2 - 2(ab + ac + bc)]$$

$$\Delta = 16(ab + ac + bc)$$

$$d = \frac{2(a + b + c) \pm 4\sqrt{ab + ac + bc}}{2}.$$

Como era esperado temos duas soluções, d_1 e d_2 :

$$d_1 = a + b + c + 2\sqrt{ab + ac + bc} \quad (\text{A.2})$$

e

$$d_2 = a + b + c - 2\sqrt{ab + ac + bc} \quad (\text{A.3})$$

$$d_1 + d_2 = 2(a + b + c). \quad (\text{A.4})$$

A Eq. A.1 se aplica a todos os tipos de configurações de Descartes (a)–(d) da Figura (42), desde que as curvaturas tenham sinais adequados, como segue. Um *círculo orientado* é um círculo com um sentido atribuído na direção do vetor normal, que pode apontar para dentro ou para fora. Se ele tem raio r então a orientação do raio será r para a normal apontando para dentro e $-r$ para a normal apontando para fora. Por convenção, para os

círculos do interior a normal aponta para dentro, sendo assim o círculo externo terá normal apontando para fora, logo sua curvatura será negativa. Desta forma, o círculo interno da Fig. 42a tem curvatura positiva e o círculo externo da Fig. 42b curvatura negativa.

Teorema de Descartes Complexo

O Teorema de Descartes Complexo diz que qualquer configuração de Descartes de quatro círculos mutuamente tangentes com curvaturas b_j e centros $z_j = x_j + iy_j$ satisfazem a seguinte relação:

$$\sum_{j=1}^4 (b_j z_j)^2 = \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^4 b_j z_j \right)^2. \quad (\text{A.5})$$

Realizando um processo análogo ao feito com a Equação (A.1) para a expressão (A.5) obtém-se relações semelhantes a (A.2), (A.3) e (A.4) que conectam os centros dos dois novos círculos com os outros três tangentes:

$$d_1 z_1 = a z_1 + b z_2 + c z_3 + 2\sqrt{abz_1 z_2 + acz_1 z_3 + bcz_2 z_3} \quad (\text{A.6})$$

$$d_2 z'_1 = a z_1 + b z_2 + c z_3 - 2\sqrt{abz_1 z_2 + acz_1 z_3 + bcz_2 z_3} \quad (\text{A.7})$$

$$d_1 z_1 + d_2 z'_1 = 2(b_1 z_1 + b_2 z_2 + b_3 z_3). \quad (\text{A.8})$$

Com o uso combinado das Equações (A.4) e (A.8), pode-se gerar empacotamentos Apolonianos como os mostrados nas Figuras (43) e (44).

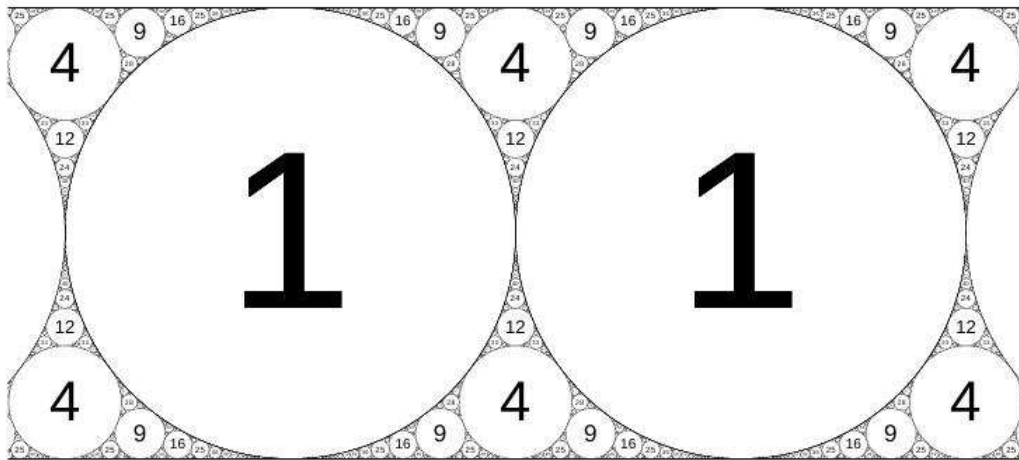


Figura 43 – Empacotamento Apoloniano com curvaturas iniciais (0,0,1,1). Figura retirada da referência [16].

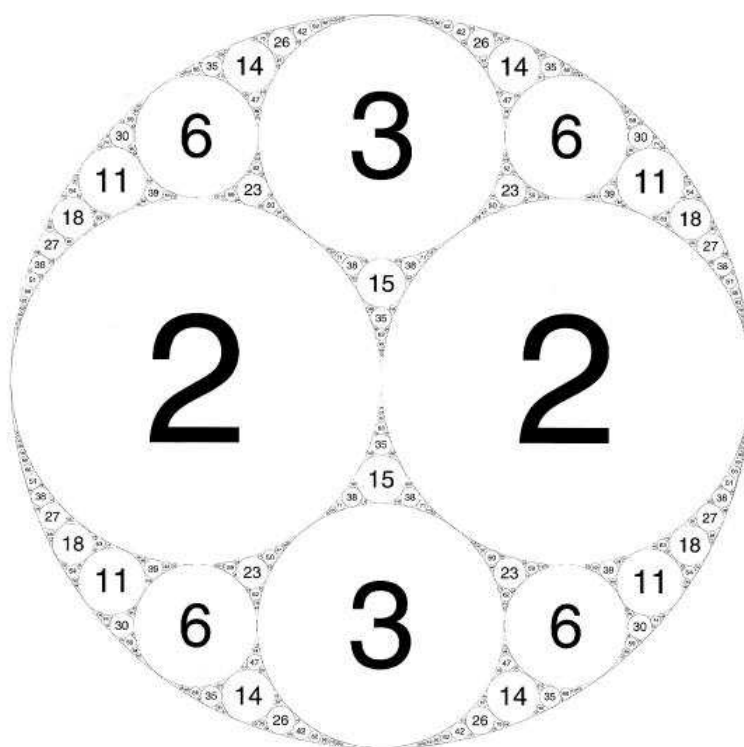


Figura 44 – Empacotamento Apoloniano com curvaturas iniciais $(-1,2,2,3)$. Figura retirada da referência [89].

APÊNDICE B – Matrizes de Transferência

Como mencionado na Seção 4.1 deste trabalho, a técnica de matrizes de transferência foi apresentada pela primeira vez por Kramers e Wannier em 1941 [83] para estudar o modelo de Ising bidimensional. O método desenvolvido pelos autores consiste basicamente em escrever a função de partição em termos de uma matriz finita e obter as propriedades termodinâmicas a partir do maior autovalor desta matriz. No caso unidimensional, a matriz é muito simples e os autores reproduziram com sucesso os resultados de Ising. No entanto para o caso de uma rede quadrada bidimensional a matriz obtida por eles era infinita, de forma que a solução não era tão simples. Este método passa a ganhar maior notoriedade com a publicação do trabalho de Lars Onsager [82] e torna-se o primeiro método a tratar com sucesso o modelo de Ising bidimensional a campo nulo [77]. Hoje a técnica de matrizes de transferência se estabeleceu como uma ferramenta poderosa na investigação de modelos estatísticos, possibilitando soluções analíticas e numéricas [17, 21, 31, 34, 40].

A técnica de matrizes de transferência aplicada ao modelo de Ising em uma cadeia linear tornou-se um exemplo clássico e pode ser encontrado facilmente em livros sobre física estatística, por exemplo [77, 81, 84]. Sendo assim, abordaremos de maneira bem resumida as principais características desta técnica aplicada ao modelo de Ising para uma rede unidimensional seguindo os passos das referências [77, 79, 84]. Consideremos que no Hamiltoniano de Ising da Eq. 4.5 (página 76), as constantes de troca são $J_{ij} = J$ para todas as interações, temos

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (\text{B.1})$$

Para aplicar o método em uma cadeia linear como a da Fig. 30 (página 76), primeiro vamos aplicar condições periódicas de contorno (CPC) e substituí-la por uma curva de tal forma que o N -ésimo termo seja vizinho do primeiro. A vantagem dessa substituição é que podemos escrever o Hamiltoniano de Ising de uma forma mais simétrica. Como um simples exemplo para deixar claro este procedimento, consideremos uma rede unidimensional muito pequena, consistindo de $N = 3$ sítios sem CPC (Fig. 45a) e com CPC (Fig. 45b). Os Hamiltonianos de Ising para estes dois casos são:

$$\mathcal{H}_{3a} = -J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3) - h(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad (\text{B.2})$$

$$\mathcal{H}_{3b} = -J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1) - h(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad (\text{B.3})$$

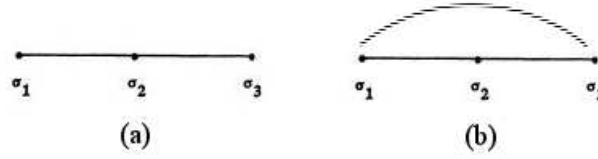


Figura 45 – (a) Cadeia linear com três sítios sem condição de contorno periódica. (b) Cadeia linear com três sítios com condição de contorno periódica.

Observa-se que é possível escrever \mathcal{H}_{3b} simetricamente da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_{3b} = -J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1) - \frac{1}{2}h(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_3 + \sigma_1) \quad (\text{B.4})$$

$$= -J \sum_{i=1}^3 (\sigma_i \sigma_{i+1}) - \frac{h}{2} \sum_{i=1}^3 (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (\text{B.5})$$

$$= - \sum_{i=1}^3 \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right], \quad (\text{B.6})$$

onde consideramos $\sigma_4 = \sigma_1$. Generalizando para uma cadeia com N sítios, temos

$$\mathcal{H}_N = - \sum_{i=1}^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (\text{B.7})$$

onde $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

A função canônica de partição para o Hamiltoniano da Eq. B.7 é

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right] \quad (\text{B.8})$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdot \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left[\beta J \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (\text{B.9})$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{[\beta J \sigma_1 \sigma_2 - \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_2)]} \cdots e^{[\beta J \sigma_N \sigma_1 - \frac{h}{2} (\sigma_N + \sigma_1)]} \quad (\text{B.10})$$

Observa-se na Eq. B.10 que as exponenciais dependem dos valores dos pares (σ_i, σ_{i+1}) . Sendo assim, após efetuada a soma sobre os possíveis estados dos sítios, cada exponencial dará origem a outras quatro. Por exemplo, se $N=2$, temos:

$$Z_2 = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdot \sum_{\sigma_2=\pm 1} e^{[\beta J \sigma_1 \sigma_2 - \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_2)]} e^{[\beta J \sigma_1 \sigma_2 - \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_2)]} \quad (\text{B.11})$$

$$= e^{2[\beta J \sigma_1^+ \sigma_2^+ - \frac{h}{2} (\sigma_1^+ + \sigma_2^+)]} + e^{2[\beta J \sigma_1^+ \sigma_2^- - \frac{h}{2} (\sigma_1^+ + \sigma_2^-)]} + e^{2[\beta J \sigma_1^- \sigma_2^+ - \frac{h}{2} (\sigma_1^- + \sigma_2^+)]} + e^{2[\beta J \sigma_1^- \sigma_2^- - \frac{h}{2} (\sigma_1^- + \sigma_2^-)]} \quad (\text{B.12})$$

$$= e^{2\beta(J+h)} + e^{(-2\beta J)} + e^{(-2\beta J)} + e^{2\beta(J-h)}, \quad (\text{B.13})$$

onde consideramos $\sigma_i^+ = +1$ e $\sigma_i^- = -1$. Sendo assim, é conveniente definir uma matriz M de ordem 2×2 , denominada de matriz de transferência, cujos elementos são obtidos por

$$M(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp \left[\beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (\text{B.14})$$

de forma que

$$M = \begin{bmatrix} M(+1, +1) & M(+1, -1) \\ M(-1, +1) & M(-1, -1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{(-\beta J)} \\ e^{(-\beta J)} & e^{\beta(J-h)} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.15})$$

Utilizando a matriz de transferência M podemos reescrever a Eq. B.10 por

$$Z_N = \sum_{\sigma_1} \cdot \sum_{\sigma_2} \cdots \sum_{\sigma_N} M(\sigma_1, \sigma_2) \cdot M(\sigma_2, \sigma_3) \cdots M(\sigma_N, \sigma_1) \quad (\text{B.16})$$

$$= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N M(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \quad (\text{B.17})$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} [M(\sigma_1, \sigma_1)]^N \quad (\text{B.18})$$

Mas das propriedades de álgebra de matrizes, verifica-se que a Eq. B.18 representa o traço da matriz M , sendo assim, temos

$$Z_N = \text{Tr}(M^N). \quad (\text{B.19})$$

Vamos utilizar dois resultados importantes da álgebra linear. O primeiro resultado nos diz que o traço de uma matriz é independente da representação da matriz e é igual a soma dos seus autovalores. O segundo resultado nos diz que, se λ_1 e λ_2 são autovalores de uma matriz M , então λ_1^N e λ_2^N são autovalores de uma matriz M^N . Sendo assim,

$$Z_N = \text{Tr}(M^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (\text{B.20})$$

Com a função de partição em mãos, podemos obter a conexão com a termodinâmica utilizando a energia livre de Helmholtz por sítio, f , dada pela seguinte relação [77, 84]

$$f_N = -\frac{k_B T}{N} \ln Z_N = -\frac{k_B T}{N} \ln (\lambda_1^N + \lambda_2^N), \quad (\text{B.21})$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura do sistema e N o número de sítios da rede.

Vamos agora estudar a energia livre no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Aplicando a equação de autovalores na matriz M , encontramos os seguintes autovalores:

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{-2\beta J} + e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h)}. \quad (\text{B.22})$$

Observa-se que esses autovalores são sempre positivos e que $\lambda_1 > \lambda_2$. Reescrevendo f_N por

$$F_N = N f_N = -k_B T N \ln \lambda_1 + \ln 1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N. \quad (\text{B.23})$$

No limite termodinâmico temos

$$f_N = -k_B T \ln (\lambda_1). \quad (\text{B.24})$$

Portanto, o maior autovalor é quem determina a maioria das propriedades físicas do sistema no limite termodinâmico. Pois, sendo a energia livre uma função analítica, é possível obter a partir dela outras propriedades do sistema, por exemplo, a magnetização por partícula e o calor específico.

A magnetização para o modelo de Ising unidimensional é obtida por

$$m(T, h) = - \left(\frac{\partial g}{\partial h} \right)_T . \quad (\text{B.25})$$