

HÉRICA SANTOS DA SILVA

**Propriedades multifractais do modelo microscópico
estocástico para crescimento de agregados em diferentes
grades**

RECIFE-PE – FEV/2015.



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOMETRIA E ESTATÍSTICA APLICADA

**Propriedades multifractais do modelo microscópico
estocástico para crescimento de agregados em diferentes
grades**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Biometria e Estatística Aplicada como exigência parcial à obtenção do título de Mestre.

Área de Concentração: **Modelagem e Métodos Computacionais**

Orientador: Prof. Dr. Paulo José Duarte Neto

RECIFE-PE – FEV/2015.

Ficha Catalográfica

S586p Silva, Hérica Santos da
Propriedades multifractais do modelo microscópico
estocástico para crescimento de agregados em diferentes
grades / Hérica Santos da Silva. – Recife, 2015.
61 f.: il.

Orientador(a): Paulo José Duarte Neto..
Dissertação (Programa de Pós-graduação em Biometria e
Estatística Aplicada) – Universidade Federal Rural de
Pernambuco, Departamento de Estatística e Informática, Recife,
2015.

Referências.

1. DLA 2. Grade 3. “Traveling Observer” Multifractal
Detrended Fluctuation Analysis 4. Transição de fase
5. Parâmetro de ordem I. Duarte Neto, Paulo José, orientador
II. Título

CDD 574.018

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOMETRIA E ESTATÍSTICA APLICADA

PROPRIEDADES MULTIFRACTAIS DO MODELO MICROSCÓPICO ESTOCÁSTICO
PARA CRESCIMENTO DE AGREGADOS EM DIFERENTES GRADES

Hérica Santos da Silva

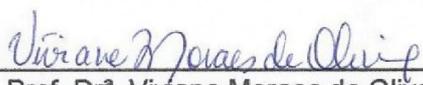
Dissertação julgada adequada para obtenção do
título de mestre em Biometria e Estatística
Aplicada, defendida e aprovada por unanimidade
em 26/02/2015 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

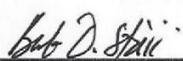


Prof. Dr. Paulo José Duarte Neto
Universidade Federal Rural de Pernambuco

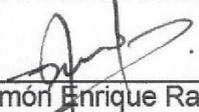
Banca Examinadora:



Prof. Dr.ª Viviane Moraes de Oliveira
Universidade Federal Rural de Pernambuco



Prof. Dr. Borko D. Stosic
Universidade Federal Rural de Pernambuco



Prof. Dr. Ramón Enrique Ramayo González
Universidade Federal Rural de Pernambuco

Dedico aos meus pais, José Antônio e Helenice.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus, que me deu forças em todos os momentos de minha vida.

Aos meus pais, José Antônio e Helenice, pela confiança, compreensão, carinho, apoio, pelas cobranças e pelos exemplos ao longo de toda minha vida. Sem os quais, esse momento não seria possível. Tudo que sou devo a eles. Ao meu irmão Hérico pela torcida em todos os momentos. Amo vocês!!!!

Ao meu companheiro Rodrigo Silva pelo carinho, apoio e pela paciência. Mesmo com muitos contratempos, sempre esteve presente, fazendo a minha vida mais feliz. Você foi fundamental para que eu chegasse aqui. Te adoro!!!!

Meus sinceros agradecimentos ao professor Paulo Duarte pela paciência com que me orientou, disponibilidade em auxiliar-me, pelas críticas e sugestões.

A todos os colegas da Biometria, em especial, André, Ewerton, Edneide, Karla, Rivelino, Henrique, Augusto, Vitória, Ricardo, Thaize, Leila, Luiz Henrique, Wesley, Carlos Renato, Cléo, Gutenberg, Isaac pelo companheirismo, estudo, amizade e momentos de alegria.

A todos os professores do Programa de Pós-Graduação em Biometria e Estatística Aplicada, em especial, aos professores Dr. Borko Stosic e Dr^a. Tatijana Stosic pela grande contribuição no meu conhecimento.

A Evelyn e a Lêda pelos anos de convivência desde a graduação, pelo companheirismo, amizade e momentos de alegria.

A Alessandro Henrique, “vida boa”, amigo para todas as horas, uma pessoa muito especial desde a UFS e que me incentivou a fazer o mestrado e meus passos seguintes. Agradeço por tudo que fez por mim e continua fazendo.

Aos “venenos”, Rose e Raquel, ao “clube da Luluzinha”, Marcelly e Monique, que mesmo distantes sempre mim apoiaram e estiveram presentes em todos os momentos da minha vida de alguma forma.

À CAPES pelo apoio financeiro. Ao secretário Marcos, sempre pronto a ajudar, minha gratidão e reconhecimento.

Às Universidades Federal de Sergipe e Rural de Pernambuco pela oportunidade de adquirir e ampliar meus conhecimentos.

A todos, que direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho. Muito obrigada!

“O sábio nunca diz tudo o que pensa,
mas pensa sempre tudo o que diz”

Aristóteles

Resumo

O objetivo desse estudo foi avaliar as propriedades multifractais de estruturas obtidas pela generalização do modelo DLA, levando em consideração a probabilidade de agregação em diferentes grades (grade triangular e off-lattice). Cada condição de crescimento foi repetida 20 vezes para minimizar as variações devido a um erro aleatório, totalizando 3000 simulações. Para cada agregado obtido foi extraída do contorno uma matriz com informações das partículas. A partir dessas informações obtivemos o espectro multifractal, bem como os parâmetros multifractais de cada agregado para as diferentes grades e valores de α_p (tensão superficial), utilizando a técnica de "Traveling Observer" Multifractal Detrended Análise Flutuação. Observou-se que, independentemente do tipo de grade utilizada nas simulações, os agregados obtidos a partir de uma baixa probabilidade de agregação são mais compactos e, à medida que aumenta a probabilidade, as estruturas tornam-se mais onduladas e mais ramificadas. As flutuações de contorno dos agregados obtidos pelas diferentes grades possuem comportamento multifractal, e essa multifractalidade depende da probabilidade de agregação. Verificamos que, independente da maneira com que a partícula realiza seu passeio aleatório (contínuo, fora ou dentro de uma grade), o comportamento dos parâmetros multifractais será semelhante. Como observado anteriormente, em estudo utilizando a grade quadrada, os parâmetros multifractais demonstra forte semelhança com transições de fase clássicas em outros sistemas da física estatística, mostrando propriedades ainda não observadas para um modelo de agregação microscópico em diferentes lattices.

Palavras-chave: DLA, grade, "Traveling Observer" Multifractal Detrended Fluctuation Analysis, transição de fase, parâmetro de ordem.

Abstract

The objective of this study was to evaluate the multifractal properties of structures obtained by the generalization of the DLA model, which takes into account the local aggregation probability for different lattices (triangular lattice and off-lattice). Each growth condition was repeated 20 times to minimize variations due to a random error, totaling 3000 simulations. For each aggregate a matrix of pixels was obtained with information extracted from the contour of the structure. From this information we obtained the singularity spectrum and the multifractal parameters of each aggregate for different lattices and α_p (surface tension) using the technique "Traveling Observer" Multifractal Detrended Fluctuation Analysis. We observed that, independently of the lattice used in simulations, the aggregates obtained from a low aggregation probability were more compact and, as the probability increases, the structures became more branched and more corrugated. The contour fluctuations of aggregates obtained by different lattices have multifractal behavior, and this multifractality depends on the aggregation probability. We find that, independently of the manner in which the particle realized your random walk (continuous, outside or inside of a grid), the behavior of the multifractal parameters were similar. As observed in previously study using a square lattice, the multifractal parameters presented strong similarity to classical phase transitions in other systems of the physic statistic, showing properties not yet observed for a model of aggregation microscopic for different lattices.

Keyword: DLA, lattice, Traveling Observer" Multifractal Detrended Fluctuation Analysis, phase transition, order parameter.

Lista de Figuras

Figura 1.1: Diagrama morfológico de agregados com 50.000 partículas na rede quadrada com diferentes αp ("tensão superficial").	4
Figura 1.2: (A) O q-ésimo momento versus o expoente generalizado $h(q)$, (B) q-ésimo momento versus o expoente multifractal $\tau(q)$, e (C) o espectro desingularidade $f\alpha$ para diferentes valores de αp .	5
Figura 1.3: Variação dos parâmetros multifractais como uma função do parâmetro αp "tensão superficial". Os círculos abertos correspondem aos valores médios e as barras \pm desvio padrão.	5
Figura 3.1: Ilustração de fractais naturais. (A) árvore, (B) samambaia, (C) brócolis e (D) nuvens.	9
Figura 3.2: Ilustração de fractal determinístico o tapete de Sierpinski. Para se obter o tapete de Sierpinski, divide-se um quadrado em 9 partes iguais e retira-se o quadrado central. Repete-se a operação em cada um dos 8 quadrados restantes até o infinito.	9
Figura 3.3: Exemplo de um DLA	15
Figura 3.4: Representação esquemática de um processo de agregação limitada por difusão.	16
Figura 3.5: Representação gráfica do espaçamento da grade quadrada.	17
Figura 3.6: Representação gráfica da Distorção da rede triangular para efeitos das simulações.	18
Figura 3.7: Diagrama de fases, em termos de pressão contra temperatura, de um fluido simples. Neste diagrama, as curvas SV, LV e SL representam condições de pressão e temperatura para as quais existe transição de fase. A curva SV representa os estados de equilíbrio em que a fase sólida coexiste com a fase de vapor, a curva LV representa os estados de equilíbrio em que a fase líquida coexiste com a fase de vapor e a curva SL representa os estados de equilíbrio em que a fase sólida coexiste com a fase líquida. Além disso, PC é o ponto crítico e PT é o ponto triplo. O ponto triplo representa o estado da substância em que coexistem, em equilíbrio, as fases sólida, líquida e gasosa. A linha tracejada representa a curva de coexistência das fases sólida e líquida para a água, que tem um comportamento anômalo.	21
Figura 4.1: Em (A), imagem obtida pela generalização do modelo DLA off-lattice 4 vizinhos com 50.000 partículas e $\alpha p = 0,11$. Em (B), representação de seu contorno que serve para definir a série periódica do contorno de flutuações.	25
Figura 4.2: Representação esquemática dos parâmetros multifractais extraídos a partir do espectro singularidade.	27

Figura 5.2: Diagrama morfológico de agregados com 50 mil partículas com diferentes probabilidades de agregação, (off-lattice DLA com 8 vizinhos).	32
Figura 5.3: Diagrama morfológico de agregados com 50 mil partículas com diferentes probabilidades de agregação, (off-lattice DLA com 8 vizinhos).	33
Figura 5.4: Diagrama morfológico de agregados com 50 mil partículas com diferentes probabilidades de agregação, (DLA grade triangular).	34
Figura 5.5: (A) O q -ésimo momento versus o expoente generalizado $h(q)$, (B) q -ésimo momento versus o expoente multifractal $\tau(q)$, e (C) o espectro de singularidade $f\alpha$ para diferentes valores de αp (Off-lattice com 4 vizinhos). ...	36
Figura 5.6: (A) O q -ésimo momento versus o expoente generalizado $h(q)$, (B) q -ésimo momento versus o expoente multifractal $\tau(q)$ e, (C) o espectro de singularidade $f\alpha$ para diferentes valores de αp (Off-lattice com 8 vizinhos). ...	36
Figura 5.7: (A) O q -ésimo momento versus o expoente generalizado $h(q)$, (B) q -ésimo momento versus o expoente multifractal $\tau(q)$, e (C) o espectro de singularidade $f\alpha$ para diferentes valores de αp (Grade Triangular).	37
Figura 5.8: Variação dos parâmetros multifractais como uma função da "tensão superficial" (αp). (Off-lattice com 4 vizinhos).	38
Figura 5.9: Variação dos parâmetros multifractais como uma função da "tensão superficial" (αp). (Off-lattice com 8 vizinhos)	39
Figura 5.10: Variação dos parâmetros multifractais como uma função da "tensão superficial" (αp). (Triangular lattice)	39
Figura 5.11: Valores médios dos parâmetros multifractais como uma função da tensão superficial (αp) para diferentes grades.	41

Sumário

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. OBJETIVOS.....	7
2.1. Geral	7
2.2. Específicos.....	7
3. REVISÃO DE LITERATURA.....	8
3.1. Fractal	8
3.2. Multifractal.....	11
3.2.1. Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF-DFA)	13
3.2.2. “Traveling Observer” Multifractal Detrended Fluctuation Analysis ...	13
3.3. Diffusion-Limited Aggregation (DLA).....	14
3.4. Análise multifractalno modelo DLA.....	18
3.5. Transição de fase.....	20
3.6. Tensão Superficial.....	22
4. METODOLOGIA	23
4.1. Diffusion-Limited Aggregation (DLA).....	23
4.1.2. Grade Triangular.....	23
4.1.3. Off-Lattice	23
4.2. “Traveling Observer” Multifractal Detrended Fluctuation Analysis.....	24
4.2.2. Sériede dados.....	24
4.2.3. Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF- DFA)	25
4.3. Simulações.....	28
5. RESULTADOSE DISCUSSÕES.....	30
6. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	42
7. REFERÊNCIAS	43

1. INTRODUÇÃO

Processos de crescimento naturais podem levar a estruturas bastante complexas, que possuem irregularidades em diferentes escalas de observação. Tais processos, em sua maioria fora do equilíbrio, são encontrados nos mais diferentes fenômenos físicos e até biológicos. Como exemplos, podemos citar crescimento de colônias de bactérias (MATSUSHITA; FUJIKAWA, 1990), crescimento de neurônios (CASERTA et al., 1990), otólitos (estruturas encontradas no ouvido interno dos peixes) (Duarte-Neto et al. 2014a), crescimento de corais (MEAKIN, 1995; MERKS et al., 2003), formação de cristais (BANFIELD et al., 2000), eletro de posições (MATSUSHITA et al., 1984).

Em alguns processos de crescimento, podemos encontrar estruturas que apresentam a propriedade de auto-similaridade em todas as escalas. Estruturas com essa propriedade são conhecidas como objetos fractais e suas características podem ser estudadas usando a geometria fractal. No entanto, muitos fenômenos da natureza investigados pela análise fractal apresentam diversos componentes com diferentes propriedades fractais. Diante desta complexidade do comportamento desses fenômenos, um outro conceito na análise fractal parece descrever melhor esses tipos de fenômenos: multifractalidade. Desse modo, um sistema multifractal é uma generalização do sistema fractal em que um único expoente (dimensão fractal) não é o bastante para descrever sua dinâmica, sendo necessário um conjunto de expoentes para descrever esses fenômenos (FEDER, 1988; VICSEK, 1989).

Os modelos de simulação de crescimento são amplamente utilizados para descrever diferentes estruturas de crescimento natural (VICSEK, 1989). Simulações de um modelo de crescimento representam um importante passo para explicar o crescimento de um dado fenômeno, objetivando identificar o conjunto mínimo de fatores que governam o processo de crescimento por agregação de partículas na natureza e a relevância de cada um destes fatores.

Entre os muitos modelos microscópicos de crescimento propostos para descrever estruturas fractais, tais como o Modelo Eden (EDEN, 1961) e a agregação balística (VICSEK, 1985; MEAKIN, 1998), uma atenção especial tem sido dada ao modelo Agregação por Difusão Limitada (DLA) (WITTEN; SANDER, 1981), devido à simplicidade de seu algoritmo. O DLA tornou-se um

paradigma importante para a formação de estruturas longe de equilíbrio e fornece uma base para a compreensão de diversos processos naturais (MEAKIN, 1995), e tem sido frequentemente usado e generalizado para simular o crescimento de estruturas naturais por décadas. Portanto, o modelo DLA padrão é um dos modelos mais importantes do crescimento fractal, produzindo formas ramificadas que ocorrem com frequência na natureza.

Uma diversidade de materiais e estruturas biológicas encontradas na natureza são formadas através da agregação (BARABÁSI; STANLEY, 1995), em um processo em que partículas idênticas são unidas em grupos de acordo com alguma regra. Experimentos numéricos concebidos para simular esses fenômenos são geralmente realizados em reticulados regulares, em que o diâmetro das partículas é feita para corresponder o espaçamento de rede e as características da trajetória da entrada dessas partículas, desempenhando um papel decisivo na formação resultante e na forma do agregado (MEAKIN et al., 1987; VICSEK, 1989).

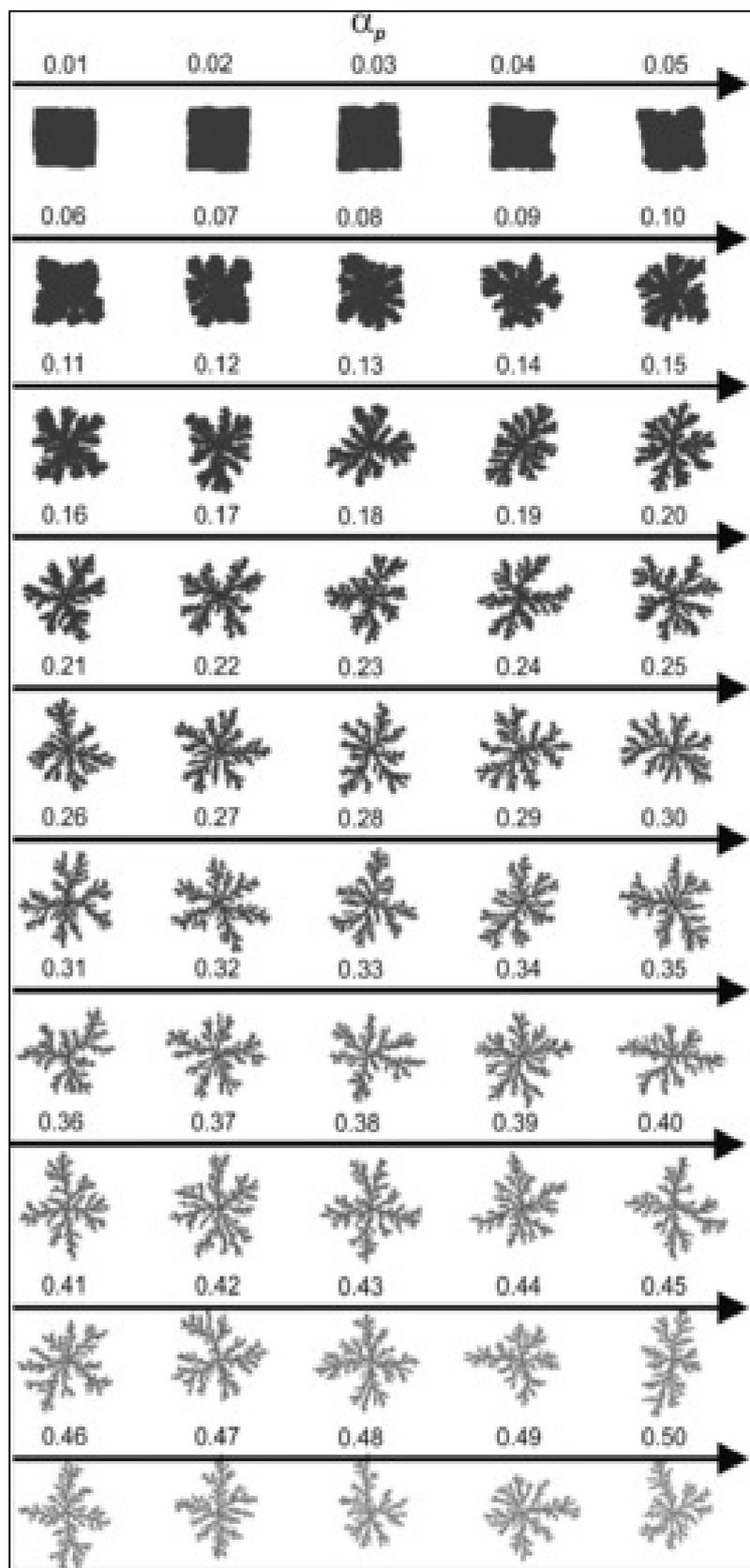
Com o objetivo de compreender melhor os fenômenos, diversas generalizações do modelo DLA padrão foram propostas, considerando, por exemplo, mudanças na densidade da partícula (MEAKIN; DEUTCH, 1984; VOSS, 1984), na tensão superficial (BATCHELOR et al., 1993), ou de fluxo de partícula (MEAKIN, 1983b; NAGATANI; SAGUÉS, 1991).

Recentemente, Duarte-Neto et al. (2014) usaram o modelo DLA generalizado proposto por Batchelor e Henry (1993) que leva em consideração a tensão superficial ($\alpha_p, 0 < \alpha_p < 1$) para gerar estruturas baseadas em agregação, utilizando diferentes grades (grade quadrada, grade triangular, off-lattice com 4 e 8 vizinhos) a fim de avaliar a combinação da tensão superficial e o fluxo da partícula, bem como diferentes propriedades do confinamento e as condições de contorno. Duarte-Neto (2012) usou essa generalização do modelo DLA para gerar estruturas baseadas na rede quadrada (Figura 1.1). Em seguida, para cada agregado foi feita a detecção do contorno e a análise multifractal do contorno a partir da técnica "Traveling Observer" Multifractal Detrended Fluctuation Analysis ("Traveling Observer" MF-DFA) (DUARTE-NETO et al., 2014), a fim de avaliar as propriedades multifractais das flutuações do contorno desses agregados. Desse modo, para cada agregado foi obtido uma matriz com

informações das partículas extraída do contorno e com base nessas informações obteve o expoente generalizado de Hurst $h(q)$, expoente de Rényi $\tau(q)$ e o espectro multifractal $f(\alpha)$. Se $h(q)$ diminui com o aumento de q , em que q pode assumir qualquer valor real, exceto 0, esse comportamento indica que a série é multifractal. O expoente de Rényi avalia também se existe ou não um comportamento multifractal nas séries temporais. Se $\tau(q)$ é uma função linear de q , a série é dita monofractal e, se $\tau(q)$ é uma função não-linear, a série é dita multifractal. Se o espectro multifractal é representado por apenas um ponto, a série temporal é monofractal, já se for representado por uma função côncava para baixo, a série é multifractal. A partir do espectro multifractal, foi extraído um conjunto de parâmetros para a caracterização da complexidade da forma do contorno, tais como: α_0 , $\Delta\alpha$, $\Delta\alpha -$ e $\Delta\alpha +$. O parâmetro α_0 , a posição do máximo de $f(\alpha)$, que corresponde ao ponto em que $q \rightarrow 0$. O $\Delta\alpha$ mede a largura do espectro multifractal, quanto maior a amplitude, mais forte a multifractalidade. Os parâmetros $\Delta\alpha -$ e $\Delta\alpha +$ representam a contribuição da parte negativa e positiva de q no espectro multifractal, respectivamente.

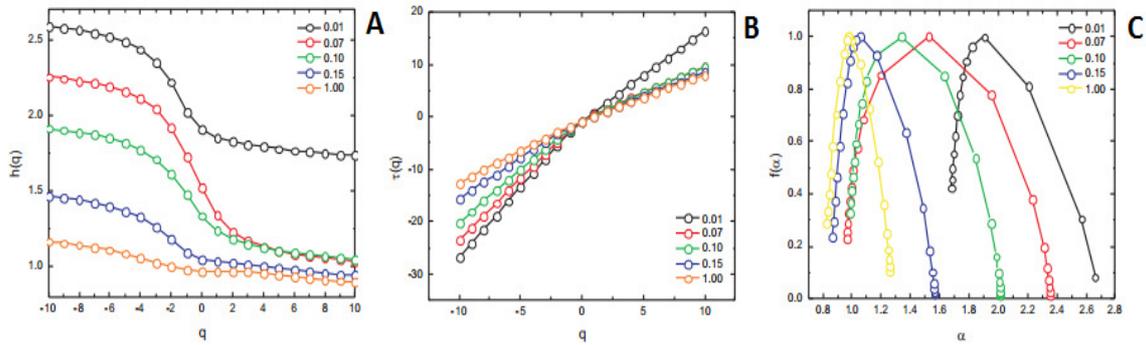
Em resultados encontrados por Duarte-Neto (2012) para a rede quadrada (Figura 1.2), verificou-se que a multifractalidade dos agregados depende da tensão superficial α_p ($0 < \alpha_p < 1$), tornando-se mais fraco no limite para o DLA padrão ($\alpha_p = 1$), a multifractalidade mais forte foi observada para $\alpha_p = 0,07$ e os picos observados para $\Delta\alpha$, $\Delta\alpha -$ e $\Delta\alpha +$ correspondem a esse valor (Figura 1.3). Conforme o autor, os resultados sugerem que $\alpha_p = 0,07$ seja um ponto crítico, apresentando uma transição de fase entre uma fase "ordenada" e uma fase "desordenada". Os resultados obtidos indicam que a formação de ramificação nos agrupamentos simulados depende principalmente da tensão superficial. O parâmetro α_0 funcionou como um parâmetro de ordem e o $\Delta\alpha$ funcionou como uma função resposta de α_0 .

Figura 1.1: Diagrama morfológico de agregados com 50.000 partículas na rede quadrada com diferentes α_p (“tensão superficial”).



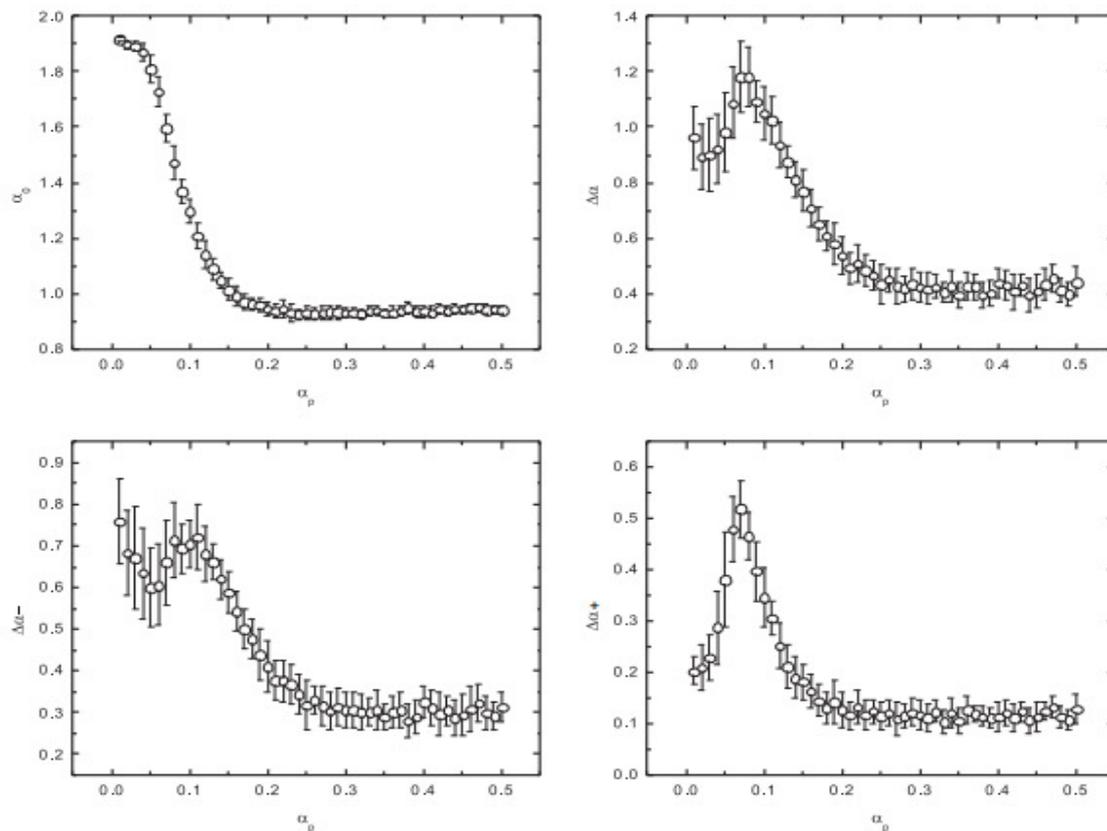
Fonte: Duarte-Neto et al. (2014)

Figura 1.2: (A) O q -ésimo momento versus o expoente generalizado $h(q)$, (B) q -ésimo momento versus o expoente multifractal $\tau(q)$, e (C) o espectro desingularidade $f(\alpha)$ para diferentes valores de α_p .



Fonte: Duarte-Neto (2012)

Figura 1.3: Variação dos parâmetros multifractais como uma função do parâmetro α_p "tensão superficial". Os círculos abertos correspondem aos valores médios e as barras \pm desvio padrão.



Fonte: Duarte-Neto (2012)

Nesse contexto, o objetivo desse estudo é avaliar as propriedades multifractais de estruturas obtidas pela generalização do modelo DLA em diferentes grades (grade triangular, off-lattice), a partir da técnica "Traveling

Observer” MF-DFA, a fim de verificar se o padrão obtido por Duarte-Neto (2012) para a rede quadrada se mantém para diferentes grades. Na grade triangular, a partícula se move aleatoriamente e, na off-lattice DLA, a partícula usa um passeio aleatório fora da grade, em vez de um passeio em uma grade. Modificamos a restrição do número de possíveis direções para o passeio aleatório e o número de sítios vizinhos vistos pelas partículas de entrada.

Esta dissertação está organizada da seguinte maneira: No Capítulo 2, apresentamos os objetivos a serem alcançados com esse estudo. No Capítulo 3, os fundamentos teóricos, que serviram de base para o desenvolvimento do trabalho, são apresentados. Abordamos conceitos sobre fractais e multifractais. Além destas definições, mostramos os conceitos básicos das metodologias utilizadas neste trabalho (Multifractal Detrended Fluctuation Analysis, Diffusion-limite da aggregation e “Traveling Observer” Multifractal Detrended Fluctuation Analysis). Junto com essas definições, fez-se uma revisão de literatura com uso dessas metodologias. No Capítulo 4, descrevemos as metodologias utilizadas para a realização das análises e como as simulações foram realizadas. Os resultados e as discussões do trabalho são apresentados no Capítulo 5. As considerações finais de toda discussão, apresentadas no Capítulo 5, são apresentadas no Capítulo 6.

2. OBJETIVOS

2.1. Geral

Avaliar as propriedades multifractais de estruturas obtidas pela generalização do modelo DLA em diferentes grades, a partir técnica "Traveling Observer" MF-DFA.

2.2. Específicos

- Avaliar o comportamento multifractal das estruturas obtidas em diferentes grades, considerando diferentes valores de α_p (tensão superficial);
- Avaliar a relação entre a tensão superficial e os parâmetros multifractais em diferentes grades;
- Avaliar se o padrão obtido por Duarte-Neto (2012) para grade quadrada se mantém em diferentes grades;
- Verificar a existência de ponto crítico (transição de fase) e comparar aos resultados obtidos para grade quadrada.

3. REVISÃO DE LITERATURA

3.1. Fractal

Durante as últimas décadas, a geometria fractal vem se consolidando com o desenvolvimento da tecnologia computacional e com o auxílio de novas teorias em diferentes áreas da física, biologia e astronomia, que buscam entender o comportamento de sistemas naturais simples, tais como: estruturas moleculares e fenômenos complexos, como terremotos.

Em 1975, o matemático Benoit Mandelbrot popularizou o conceito de geometria fractal, mas somente em 1977 publicou seu primeiro trabalho sobre esse tema (MANDELBROT, 1977), permitindo a representação de certos elementos naturais que possuem características irregulares. Com essa nova geometria, tornou-se possível a criação de modelos mais próximos da realidade. Fractais são objetos complexos que possuem duas propriedades características: auto similaridade (pedaços do objeto assemelham-se ao todo) e tem a dimensão não é necessariamente uma quantidade inteira, menor que a dimensão do espaço euclidiano, no qual se encontra o fractal (FEDER, 1988).

O termo fractal vem a partir do adjetivo em Latim *fractus*, do verbo latino correspondente *frangere* que significa “quebrar”. Assim, o termo fractal aplica-se a objetos encontrados na natureza e a objetos que podem ser obtidos geometricamente, aleatoriamente ou através de processos iterativos, possuindo propriedade que não são comuns na natureza. Uma característica comum em objetos fractais é o fato de serem auto similares, ou seja, são invariantes segundo uma transformação de escala.

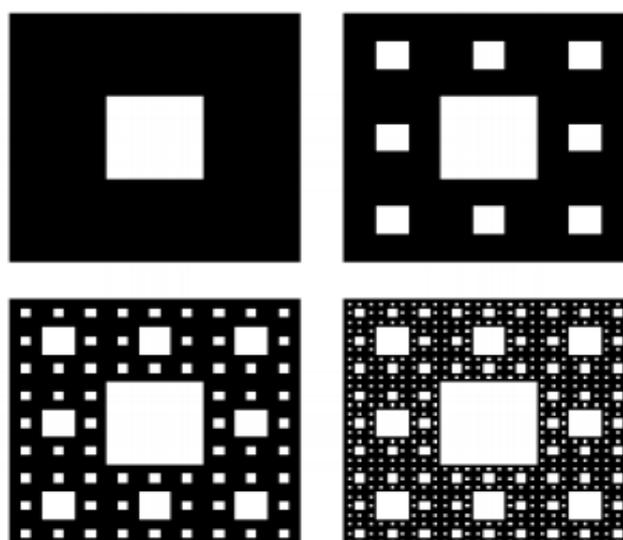
Exemplos de fractais naturais: árvore, couve-flor, nuvens, neurônios, ramificações de músculos cardíacos, raios (MANDELBROT, 1982; FEDER, 1988), a Figura 3.1 ilustra alguns exemplos de objetos fractais.

Figura 3.1: Ilustração de fractais naturais. (A) árvore, (B) samambaia, (C) brócolis e (D) nuvens.



Esses exemplos pertencem a classe dos fractais aleatórios gerados por processos estocásticos que possuem a propriedade de auto similaridade em sentido estatístico, ou seja, possuem medidas numéricas ou estatísticas que são preservadas em diferentes escalas. Uma outra classe são os fractais determinísticos que podem ser construídos utilizando um processo iterativo e possuem propriedade de auto similaridade em todas as escalas (FEDER, 1988), tendo como exemplo o tapete de Sierpinski (MANDELBROT, 1982) (Figura 3.2).

Figura 3.2: Ilustração de fractal determinístico o tapete de Sierpinski. Para se obter o tapete de Sierpinski, divide-se um quadrado em 9 partes iguais e retira-se o quadrado central. Repete-se a operação em cada um dos 8 quadrados restantes até o infinito.



Fonte: Mandelbrot (1982)

Dentre as características que definem um fractal, a mais importante é a dimensão dos fractais, sendo uma ferramenta útil na comparação de duas formas fractais (COSTA; CESAR JR., 2000). Diferente do que acontece com a geometria Euclidiana, em que o valor da dimensão representa a dimensionalidade do espaço em que um certo objeto está inserido, a dimensão fractal representa o nível de irregularidade de um fractal e não é necessariamente uma quantidade inteira, podendo ser uma quantidade fracionária (MANDELBROT, 1983; FEDER, 1988).

Em fractais determinísticos, a dimensão fractal pode ser obtida usando o procedimento seguinte: se $N(l)$ é o número de unidades da estrutura (ex. quadrados no caso do fractal tapete Sierpinski como mostrado na Figura 3.2) em escala l a diminuição da escala b vezes gera um novo número de unidades estruturais,

$$N\left(\frac{l}{b}\right) = N(l)b^{D_f} \quad (3.1)$$

e a dimensão fractal D_f pode ser calculada usando a expressão

$$D_f = \frac{\log \frac{N(\frac{l}{b})}{N(l)}}{\log b} \quad (3.2)$$

No exemplo do fractal geométrico tapete Sierpinski, ilustrado na Figura 3.2, a sua dimensão fractal é dada por

$$D_f = \frac{\log 8}{\log 3} \approx 1,89 \quad (3.3)$$

Em fractais estocásticos, a dimensão fractal pode ser obtida pela expressão:

$$V(R) \propto R^{D_f} \quad (3.4)$$

onde $V(R)$ é o volume da região de dimensão linear R e D_f a dimensão fractal, um número não inteiro e menor do que a dimensão euclidiana D do espaço em que o fractal se encontra ($D_f < D$) (VICSEK, 1989).

O conceito de fractal em séries temporais pode ser estendido como flutuações em múltiplas escalas de tempo. Essas flutuações temporais são caracterizadas pela auto-similaridade estatística da mesma maneira em que os objetos fractais possuem a auto-similaridade nas várias escalas espaciais. Têm-

se como exemplos de processos fractais os intervalos de batimentos cardíacos (PERKIÖMÄKI et al., 1993; MEYER; STIEDL, 2003), dados climáticos (OÑATE RUBALCABA, 1997; BENICIO et al., 2013).

Uma série temporal $y(t)$ possui auto-similaridade com parâmetro α se

$$y(t) = b^\alpha y\left(\frac{t}{b}\right), \quad (3.5)$$

onde “=” significa a igualdade de propriedades estatísticas. Essa igualdade surge após mudanças de escalas de t e $y(t)$ usando fatores diferentes: b para t ($t \rightarrow \frac{t}{b}$) e b^α para $y(t)$ ($y(t) \rightarrow b^\alpha y(t)$). O expoente α chama-se parâmetro de auto-similaridade (VICSEK, 1989).

3.2. Multifractal

Multifractal pode ser visto como uma extensão dos fractais (LOPES; BETROUNI, 2009). Em um sistema fractal, um único expoente (dimensão fractal) é suficiente para descrever a sua dinâmica. No entanto, em um sistema multifractal, é necessário um conjunto de expoentes (HARTE, 2001). Assim, o objeto multifractal é caracterizado pelas diferentes dimensões fractais. Para testar se um objeto geométrico deve ser tratado como um multifractal, o primeiro passo é calcular a dimensão de capacidade (calculada usando o método contagem de caixas) (VOSS, 1986) e a dimensão de correlação (calculada usando o método de função e correlação) (GRASSBERGER; PROCACCIA, 1983a, 1983b), e se essas dimensões forem distintas, deve-se realizar a análise multifractal usando o cálculo de espectro multifractal para descrever as propriedades geométricas do objeto.

Nas últimas décadas, a análise multifractal tem sido aplicada com sucesso para caracterizar complexa organização temporal e espacial de diversos fenômenos naturais, por exemplo: marcha humana (WEST; SCAFETTA, 2005), fluxo sanguíneo cerebral (WEST et al., 2003), dinâmica de pulsação (IVANOV et al., 1999), contorno das partículas de cinzas vulcânicas (DELLINO; LIOTINO, 2002), distribuição de probabilidade de crescimento durante o processo de DLA (HAYAKAWA et al., 1987; NITTMANN; STANLEY, 1987).

A formação de estruturas por meio de modelos de crescimento é amplamente utilizada para modelar fenômenos fora de equilíbrio em que suas propriedades fractais são frequentemente medidas pela quantidade de massa M_0 dentro de uma caixa de tamanho linear L (TEL; VICSEK, 1987). Levando em consideração a distribuição de massa observada para diferentes grades de tamanho ℓ , de tal forma que um $\alpha \ll \ell \ll L$ (em que α é a constante da grade e L é a dimensão linear do sistema). A dimensão generalizada D_q para distribuição de massa é definida por (TÉL et al., 1989; VICSEK, 1990)

$$\sum_i \left(\frac{M_i}{M_0} \right)^q \sim \left(\frac{\ell}{L} \right)^{(q-1)D_q} \quad (3.6)$$

onde, q é uma variável contínua que torna possível enfatizar as propriedades fractais em diferentes escalas, M_0 é a massa total e M_i é a massa (número de pixel) dentro da i -ésima caixa. As dimensões generalizadas D_0 , D_1 e D_2 representam a dimensão de capacidade (ou contagem de caixas), a dimensão de informação e a dimensão de correlação, respectivamente. Finalmente, $D_{-\infty}$ e $D_{+\infty}$ representam os limites do espectro de dimensões generalizadas, onde a medida de interesse é a mais diluída e mais densa, respectivamente. Em monofractais, todas as dimensões generalizadas são iguais, dando um único valor de dimensão fractal, ou seja, a dimensão fractal é independente de q .

A relação entre a função $D(q)$ e o espectro $f(\alpha)$ é feita via transformação de Legendre:

$$f[\alpha(q, \ell)] = q\alpha(q) - \tau(q) \quad (3.7)$$

em que

$$\alpha(q) = \frac{\partial \tau(q)}{\partial q} \quad (3.8)$$

e

$$\tau(q) \equiv (1 - q)D_q \quad (3.9)$$

No caso de monofractal, a dimensão fractal não depende de q , $D_q \equiv D$ e usando as equações (3.8) e (3.9) tem-se $f(\alpha) = D$ e o espectro $f(\alpha)$ consiste em um único ponto, onde $f(\alpha)$ é igual à dimensão fractal do sistema. Em

estruturas multifractais são caracterizadas por um espectro $f(\alpha)$ e esse espectro pode ser entendida como a dimensão fractal.

3.2.1. Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF-DFA)

Nas últimas décadas, vários métodos foram desenvolvidos para analisar as propriedades multifractais de séries temporais não estacionárias, a fim de remover as tendências e se concentrar na análise das flutuações (OSWIECIMKA et al., 2006), incluindo Wavelet Transform Modulus Maxima (WTMM) (MUZY et al., 1991), Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF-DFA) (KANTEHARDT et al., 2002) e Multifractal Detrending Moving Average Analysis (MF-DMA) (GU; ZHOU, 2010).

O método Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF-DFA) que foi introduzido por Kantelhardt (KANTEHARDT et al., 2002), e é uma generalização do Detrended Fluctuation Analysis (DFA), é um algoritmo que consiste de cinco etapas, que serão apresentadas no Capítulo 4.

Alguns autores mostraram que o método MF-DFA produz resultados mais fiáveis do que o método WTMM e sua implementação é bem mais simples (OSWIECIMKA et al., 2006; SCHUMANN; KANTEHARDT, 2011). O MF-DFA tem sido utilizado para analisar sinais fisiológicos (SHIMIZU et al., 2002; FIGLIOLA et al., 2007; DUTTA, 2010), dados geofísicos (CURRENTI et al., 2005; TELESKA; LAPENNA, 2006), registros da velocidade do vento (KAVASSERI; NAGARAJAN, 2005; TELESKA; LOVALLO, 2011), registros hidrológicos (KANTEHARDT et al., 2006; ZHANG et al., 2008) e séries temporais financeiras (LIM et al., 2007; DU; NING, 2008; YUAN et al., 2009; WANG et al., 2009).

3.2.2. “Traveling Observer” Multifractal Detrended Fluctuation Analysis

Duarte-Neto et al. (2014) propuseram uma nova técnica robusta, "Traveling Observer" Multifractal Detrended Fluctuation Analysis, que faz a ponte entre os métodos usados para fractais geométricos e os utilizados para a série temporal, para a análise de estruturas quase unidimensionais. Quando assumimos uma forma de contorno como um monofractal, temos apenas um

único expoente (dimensão fractal), que muitas vezes não podem descrever adequadamente a complexidade de contorno.

Essa técnica combina Análise de Fourier Regular (RFA) (CHRISTOPHER; WATERS, 1974) e a MF-DFA, para preencher a lacuna entre os métodos utilizados para fractais geométricos e aqueles usados para séries temporais, reduzindo as limitações apresentadas em técnicas existentes, para analisar contornos de estruturas multifractais.

Através da RFA é feito o mapeamento do contorno para uma "série temporal" de distâncias do percurso central (definida pelo termo da harmônica nula), em uma velocidade angular constante. As flutuações do caminho central do perímetro de contorno são registradas como "séries temporais", e o MF-DFA é, então, implementada para quantificar as correlações temporais desta série.

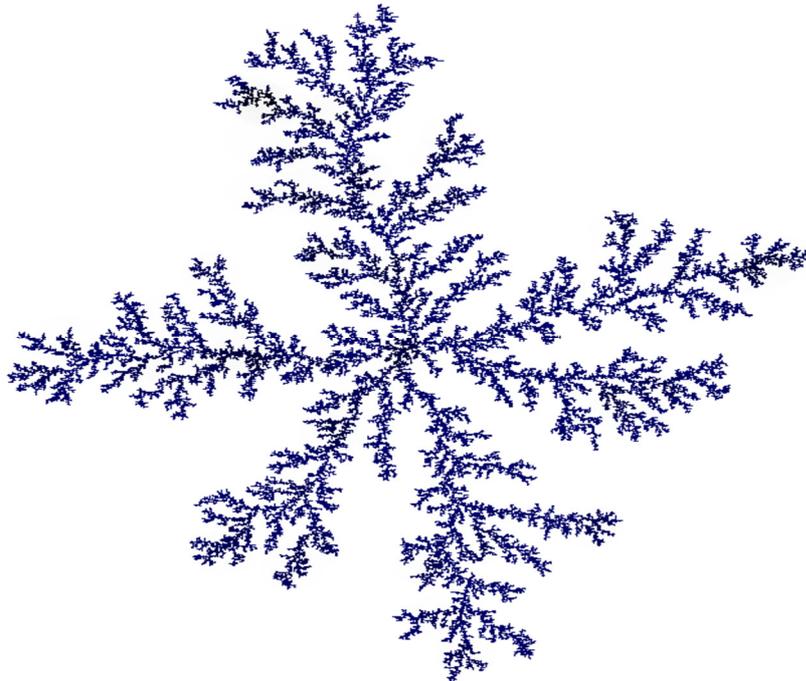
Duarte-Neto et al. (2014) demonstraram a capacidade da "Traveling Observer" Multifractal Detrended Fluctuation Analysis na análise multifractal das flutuações de contorno em revelar informações significativas em estruturas naturais. Nesse estudo, são analisadas as flutuações de contorno de otólitos de peixes, a fim de analisar o comportamento multifractal de otólitos durante a vida dos peixes e, em seguida, a existência de diferentes padrões de multifractalidade entre as espécies de peixe e, a capacidade de parâmetros multifractais para classificar otólitos de diferentes espécies. Duarte-Neto (2012) analisou o processo de crescimento por agregação microscópica sob diferentes condições de crescimento, considerando tanto as alterações morfológicas nos agregados e a multifractalidade de suas flutuações.

3.3. Diffusion-Limited Aggregation (DLA)

O modelo DLA foi introduzido por Witten e Sander (1981) para descrever processos como a deposição dos íons nos eletrodos e descargas elétricas (raios) (VICSEK, 1989). Esse modelo é aplicável a agregação de qualquer sistema onde a difusão é o meio primário de transporte. Em uma aproximação discreta, pode-se pensar que as partículas são pequenos quadrados que se deslocam em uma rede quadrada cuja constante de rede é igual às arestas do quadrado, tal que as

partículas preenchem a rede à medida que se chocam, agregando-se, resultando em uma estrutura ramificada mostrada na Figura 3.3.

Figura 3.3: Exemplo de um DLA



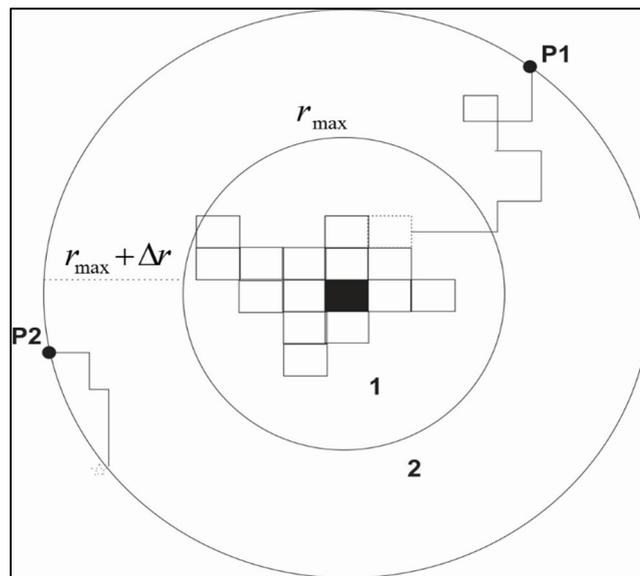
O modelo DLA padrão é baseado nos seguintes passos (Figura 3.4):

Passo 1: uma partícula que dará início ao agregado é chamada de semente, colocada inicialmente no centro de um círculo (pixel preto) e outra partícula é liberada de uma posição aleatória, longe da semente (na borda do círculo), escolhida uniformemente a partir de um círculo distante da semente com um raio máximo (r_{max}). A partícula liberada caminhará de acordo com uma trajetória Browniana, em que numa rede quadrada a partícula move-se para esquerda, direita, cima ou baixo, até atingir uma das 4 vizinhanças mais próximas da semente, quando ela se fixa, formando um cluster (pixel branco), no qual esse processo é realizado repetidamente (como mostra pra P1). Se a partícula em movimento anda muito longe a partir da semente, que cai para fora da borda do círculo (como mostra para P2), outra partícula é lançada.

Passo 2: Um Δr é adicionado ao raio inicial, com o objetivo de manter uma distância constante entre a posição inicial da nova partícula e o aglomerado de

partículas durante o processo de agregação, ou seja, cada vez que uma partícula se agrega a estrutura, o tamanho do raio da estrutura é comparado com o raio do círculo de lançamento e, por sua vez, aumenta a fim de manter uma distância mínima.

Figura 3.4: Representação esquemática de um processo de agregação limitada por difusão.



Devido à simplicidade de seu algoritmo, o DLA é aplicado em diversas áreas, incluindo fenômenos biológicos, tais como: bactérias e neurônios (BARABÁSI; STANLEY, 1995), otólitos (estruturas encontradas nos ouvidos internos dos peixes) (Duarte-Neto et al. 2014), crescimento de corais, (MEAKIN, 1995; MERKS et al., 2003), cristais (BANFIELD et al., 2000), flocos de neve (NITTMANN; STANLEY, 1987) e dissolução química (DACCORD, 1987). Foram estudados agregados formados a partir das versões do modelo DLA rede e fora dela (MEAKIN, 1983a; BALL; BRADY, 1985; TOLMAN; MEAKIN, 1989; KAUFMAN et al., 1995).

Durante o processo de formação do agregado, este se ramifica em várias escalas. A probabilidade para uma partícula se agregar é maior na ponta dos ramos do que no espaço onde se forma entre eles. Essa propriedade presente em todas as escalas é responsável pela natureza fractal do DLA (ROA, 2010).

A probabilidade de crescimento de um determinado sítio do perímetro da região analisada é a probabilidade de um caminhante aleatório visitar este sítio. Esta probabilidade é dada por u , obedecendo à equação de estado-estável

$$\nabla^2 u = 0 \quad (3.10)$$

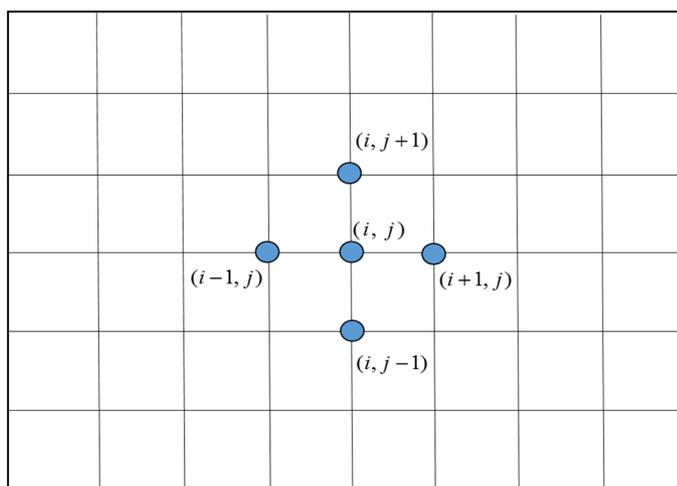
onde $u = 1$ quando está dentro do sitio periférico e $u = 0$ quando está fora do sítio periférico. A probabilidade que um sítio periférico seja visitado é proporcional ao fluxo neste sítio, i.e. $p \propto \nabla u$.

O modelo padrão DLA na grade quadrática pode ser descrita pela equação de Laplace discreta. Temos um valor da função $u(x, y)$ em um ponto central $u(x_i, y_j)$, assim:

$$u_{i,j} = (u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1})/4 \quad (3.11)$$

A equação acima mostra que a equação de Laplace calcula o valor da função pela $u(x_i, y_j)$ média aritmética dos quatro valores vizinhos ao ponto de coordenadas (x_i, y_j) . Figura 3.5.

Figura 3.5: Representação gráfica do espaçamento da grade quadrada



Batchelor e Henry (1993), por sua vez, propuseram a generalização desse modelo, levando em consideração a probabilidade de agregação local (s), definida como:

$$s = \alpha_p^{3-\beta} \quad (3.12)$$

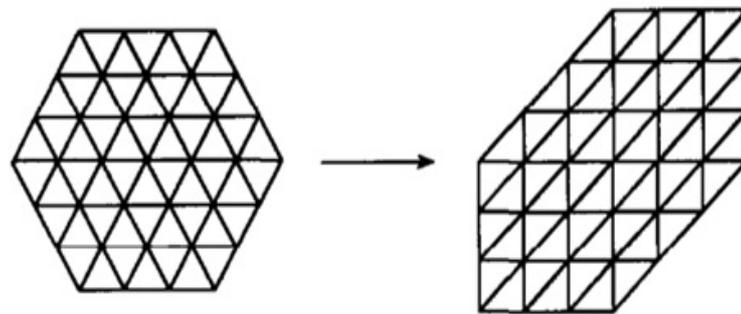
Onde o parâmetro $0 < \alpha_p < 1$ corresponde à tensão superficial, e $\beta \in \{1,2,3\}$ é o número de sítios vizinhos visto pela partícula que se aproxima do cluster, também em um movimento Browniano.

Neste modelo, as condições de contorno são as mesmas do modelo padrão. No entanto, a probabilidade do crescimento é dada por:

$$p_{i,j} = \frac{s(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1})}{4} = su_{i,j} \quad (3.13)$$

Batchelor, Dun e Henry (1993) estenderam a generalização do modelo DLA para uma grade triangular. A qual é considerada uma estrutura triangular como um quadrado deformado com ligações em diagonal, como representado na Figura 3.6.

Figura 3.6: Representação gráfica da Distorção da rede triangular para efeitos das simulações.



Fonte: Batchelor, Dun e Henry (BATCHELOR et al., 1993).

Baseado no modelo DLA generalizado, proposto por Batchelor e Henry (1993), Duarte-Neto et al (2014) propuseram uma adaptação dessa generalização, utilizando o modelo off-lattice DLA, modificando o número de sítios vizinhos vistos pelas partículas de entrada. Nesse trabalho, foi utilizado diferentes tipos de grades, levando em consideração a tensão superficial, a fim de avaliar a combinação da tensão superficial e o fluxo da partícula, bem como diferentes propriedades do confinamento e as condições de contorno.

3.4. Análise multifractal no modelo DLA

Em diversos estudos, tem-se investigado a multifractalidade do modelo DLA. Vicsek (1990) discute o conceito de multifractalidade da massa através de modelos de agregação determinísticos e estocásticos de crescimento fractal. Mostra-se que, nestes modelos, a escala da distribuição de densidade de

partículas pode ser descrito em termos de uma hierarquia infinita de dimensões generalizadas. E ainda mostrou que os agregados formados pelo modelo DLA são multifractais.

Em simulações feitas por Meakin (1983a), a dimensão fractal de agregados crescidos em grades foi de $D_f \approx 5d/6$ ($d = 2, \dots, 6$), assim para 2 dimensões temos que $D_f = 1,67$. Esse valor é um pouco diferente dos encontrados em estruturas off-lattices, ou seja, crescidas fora da grade no qual $D_f = 1,71$ (TOLMAN; MEAKIN, 1989). Conforme Meakin (1986), a anisotropia é menor em agregados obtidos por off-lattices DLA. Os autores Family et al. (1986) investigaram o processo de agregação limitada por difusão (DLA) em uma grade quadrada e encontraram que, independentemente da forma inicial das partículas de semente, o padrão final do agregado tem um formato anisotrópico.

Hayakawa et al. (1987) investigaram a distribuição de probabilidade de crescimento e verificaram que a dimensão generalizada $D(q)$ depende fortemente de q e o espectro $f(\alpha)$ é contínuo. De acordo com seus resultados, sugeriram que processos de crescimento pelo modelo DLA não pode ser descrito por uma teoria de escalonamento simples com poucos expoentes escalares.

Diversos estudos verificaram que a multifractalidade do DLA diminui monotonicamente com o aumento do q , tanto em relação à distribuição de probabilidade de crescimento (NITTMANN et al., 1987; NAGATANI, 1988) quanto à distribuição de massa (VICSEK et al., 1990; HANAN; HEFFERNAN, 2001, 2012).

Rodriguez-Romo e Sosa-Herrera (2013) verificaram que grandes clusters têm uma tendência a apresentar comportamento monofractal para a distribuição em massa. Esse autores concluíram que comportamentos multifractais, observados sem escalas intermediárias, ocorrem devido aos efeitos de tamanho finito e estes efeitos tendem a desaparecer à medida que o número de partículas em agregados aumenta.

Diferentemente de muitos autores que analisaram o comportamento multifractal da massa dos agregados e a distribuição de probabilidade de crescimento, Duarte-Neto (2012), em seu estudo, analisou o comportamento multifractal das flutuações do contorno dos agregados gerados a partir do

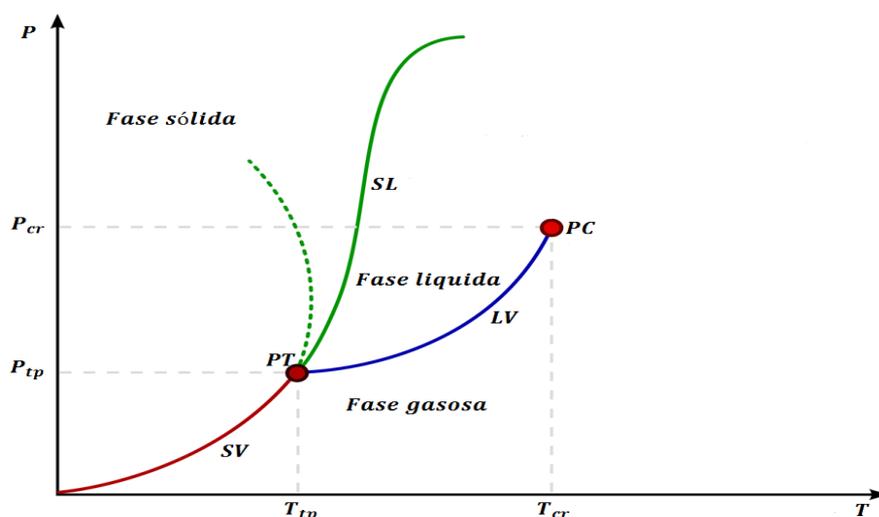
modelo de generalização DLA padrão, levando em consideração a tensão superficial e através de um conjunto de parâmetros extraídos a partir do espectro multifractal. Para extrair as flutuações do contorno, utilizou a técnica "Traveling Observer" Multifractal Detrended Fluctuation Analysis. Em seus resultados, pode-se verificar que a multifractalidade dos agregados depende do α_p tornando-se mais fraco no limite para o DLA padrão ($\alpha_p = 1$), a multifractalidade mais forte foi observada para $\alpha_p = 0,07$. O autor sugere que esse valor corresponde ao ponto crítico, em que ocorre uma transição entre uma fase "ordenada" e uma fase "desordenada". Verificou-se também que a formação de ramificação nos agrupamentos simulados depende principalmente da tensão superficial e o parâmetro multifractal α_0 funcionou como um parâmetro de ordem e o $\Delta\alpha$ como sua função.

3.5. Transição de fase

A palavra fase é utilizada para designar qualquer estado específico da matéria, tal como o de um sólido, um líquido ou um gás. Um exemplo comum é o composto H_2O , existe na fase líquida como água, na fase sólida (gelo) e na fase gasosa (vapor d' água). A transição de uma fase para outra é chamada de transição de fase ou de mudança de fase. As transições de fase são muito comuns na natureza (OLMSTED, 2000). Essas transições são caracterizadas por mudanças bruscas ou descontínuas nas propriedades termodinâmicas do sistema como resposta a variações contínuas de alguma condição externa, como temperatura, pressão, campo magnético (BRAGA, 2006). Uma transição de uma fase para outra geralmente ocorre quando existem condições de equilíbrio entre as fases, e para uma dada pressão isso ocorre para uma temperatura definida (YOUNG, 2008). Essas condições podem ser representado em um gráfico P (pressão) em função T (temperatura), chamado de diagrama de fase, como exemplo Figura 3.7.

Uma característica comum em transições de fases é a existência de parâmetros que têm um valor não nulo em uma temperatura abaixo da temperatura crítica e que se anulam continuamente na temperatura crítica. Tal parâmetro é conhecido como parâmetro de ordem (SALINAS, 2005).

Figura 3.7: Diagrama de fases, em termos de pressão contra temperatura, de um fluido simples. Neste diagrama, as curvas SV, LV e SL representam condições de pressão e temperatura para as quais existe transição de fase. A curva SV representa os estados de equilíbrio em que a fase sólida coexiste com a fase de vapor, a curva LV representa os estados de equilíbrio em que a fase líquida coexiste com a fase de vapor e a curva SL representa os estados de equilíbrio em que a fase sólida coexiste com a fase líquida. Além disso, PC é o ponto crítico e PT é o ponto triplo. O ponto triplo representa o estado da substância em que coexistem, em equilíbrio, as fases sólida, líquida e gasosa. A linha tracejada representa a curva de coexistência das fases sólida e líquida para a água, que tem um comportamento anômalo.



Fonte: Salinas, 2005.

Um outro exemplo de transição de fase, é a mudança de fase sofrida por alguns materiais magnético. Tais materiais, à medida que aumenta sua temperatura, a magnetização diminui continuamente até atingir um valor nulo na temperatura crítica. Assim, esses materiais mudam da fase magnética para a fase paramagnética. Ao mesmo tempo observa-se uma divergência na susceptibilidade magnética do sistema (MÓL, 2009), se comportando como um parâmetro de ordem. A susceptibilidade magnética é uma medida da capacidade do material adquirir magnetização. Quanto maior a susceptibilidade, maior será a magnetização do material.

3.6. Tensão Superficial

A tensão superficial é uma força molecular de coesão, cuja o efeito é minimizar a área superficial do fluido (MONTEIRO, 2006). A tensão superficial surge nos líquidos como resultado do desequilíbrio entre as forças agindo sobre as moléculas da superfície em relação àquelas que se encontram no interior da solução (BEHRING et al., 2004).

As forças intermoleculares nos líquidos são diretamente responsáveis por fenômenos de capilaridade tais como a subida de líquido em tubos capilares, a completa umidificação de uma toalha quando uma ponta fica mergulhada na água, e também por fenômenos de superfície tais como uma agulha que flutua sobre a superfície da água, muito embora sua densidade seja muito maior do que a da água, a caminhada dos insetos sobre superfícies líquidas (YOUNG, 2008).

As moléculas da camada superficial do líquido têm energia potencial maior do que as moléculas do interior, essa energia é resultado do trabalho realizado pelas forças de atração exercidas pelas moléculas do interior do líquido sobre as que se deslocam para a superfície (YOUNG, 2008). E como qualquer sistema em estado de equilíbrio, para o qual a sua energia é mínima, um líquido em equilíbrio deve ter a menor área superficial possível, ou seja, devem existir forças agindo no sentido de reduzir esta área.

Para o crescimento DLA, parâmetro α_p é análoga à "tensão superficial" (MEAKIN et al., 1987; BATCHELOR; HENRY, 1992). Esta analogia está frequentemente relacionado com interação de fluidos, quando a forma da superfície de um líquido depende das propriedades do fluido ou na superfície que está em contato, tais como o manejo viscoso, estudada por Meakin et al . (1987). A referência para o efeito de "tensão superficial" na forma de agregados foi feita pela primeira vez por D'Arcy Thompson em 1917 para descrever a forma de agregados de células e tecidos (THOMPSON, 1992).

4. METODOLOGIA

4.1. Diffusion-Limited Aggregation (DLA)

Os passos do modelo DLA utilizados no presente estudo são análogos ao do modelo DLA padrão, vistos na seção 3.3. Modificamos o número de possíveis direções para o passeio aleatório e o número de sítios vizinhos vistos pelas partículas de entrada. Na grade triangular, a partícula se move aleatoriamente em seis direções e a off-lattice DLA que usa um passeio aleatório fora da grade, diferentemente da grade triangular.

4.1.2. Grade Triangular

O modelo DLA padrão sobre a rede triangular é então descrita pela equação de Laplace discreta:

$$u_{i,j} = (u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j-1} + u_{i+1,j+1})/6 \quad (4.1)$$

Esta equação calcula o valor da função $u(x_i, y_j)$ pela média aritmética dos seis valores vizinhos ao ponto de coordenadas (x_i, y_j) .

Nessa generalização, levamos em consideração a probabilidade de agregação local (s), definida como:

$$s = \alpha_p^{5-\beta} \quad (4.2)$$

onde $\beta \in \{1,2,3,4,5\}$, e representa o número de sítios vizinhos visto pela partícula que se aproxima do agregado. Segue as mesmas condições de contorno do modelo padrão. Porém, a probabilidade do crescimento num sítio neste caso é:

$$p_{i,j} = s(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j-1} + u_{i+1,j+1})/6 \quad (4.3)$$

4.1.3. Off-Lattice

Em um modelo off-lattice DLA, as partículas são representadas como um círculo de diâmetro constante, diferentemente do modelo lattice DLA em que as partículas são em formas de quadrados (MOLCHANOV, 1999). Além disso, perde simplificação de que as partículas poderiam mover-se somente na horizontal ou na vertical, no caso de uma rede quadrada. As partículas estão se movendo livremente através da área em qualquer direção.

O processo básico para a formação de aglomerados por meio de off-lattice DLA é como se segue: inicialmente, clusterou agregado consiste em uma única partícula de semente. Uma nova partícula é lançada, que pode realizar um passeio aleatório contínuo até que ela atinga o cluster. Depois, outra partícula é lançada e este processo é repetido até o cluster atingir um tamanho pré definido (OSSADNIK, 1991). Se uma partícula se sobreponha outra, essa partícula é movida para outra posição e é incorporada no agregado (VICSEK, 1989).

- **Off-Lattice com 4 vizinhos**

Nessa generalização, levamos em consideração a probabilidade de agregação local (s), definida como:

$$s = \alpha_p^{3-\beta} \quad (4.4)$$

onde o parâmetro $0 < \alpha_p < 1$ corresponde à tensão superficial local, e $\beta \in \{1,2,3\}$ é o número de sítios vizinhos visto pela partícula que se aproxima do cluster.

- **Off-Lattice com 8 vizinhos**

Nessa generalização, levamos em consideração a probabilidade de agregação local (s), definida como:

$$s = \alpha_p^{7-\beta} \quad (4.5)$$

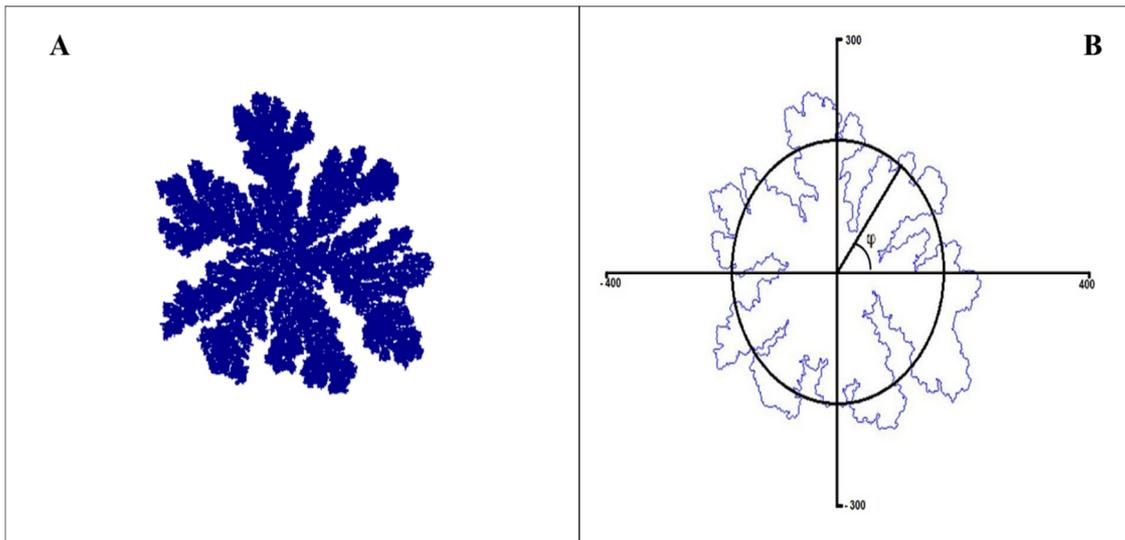
Nesse caso, $\beta \in \{1,2,3, \dots, 7\}$ é o número de sítios vizinhos visto pela partícula que se aproxima do cluster.

4.2. “Traveling Observer” Multifractal Detrended Fluctuation Analysis

4.2.2. Série de dados

Inicialmente, as imagens do contorno das estruturas obtidas pela generalização do modelo DLA são sobrepostas sobre um plano cartesiano, de tal maneira que o centro de massa do contorno seja o centro dos eixos coordenados (Figura 4.1).

Figura 4.1: Em (A), imagem obtida pela generalização do modelo DLA off-lattice 4 vizinhos com 50.000 partículas e $\alpha_p = 0,11$. Em (B), representação de seu contorno que serve para definir a série periódica do contorno de flutuações.



Seja C o contorno do agregado. Assim, a série de dados é utilizando os valores do raio r do contorno no ângulo φ . Os valores dos raios são calculados através das distâncias do centro no ponto $P(0,0)$ ao ponto $(x_{i,\varphi}, y_{i,\varphi})$, onde $x_{i,\varphi}, y_{i,\varphi} \in C$ e $i = 1, 2, 3, \dots, n$, uma vez que x e y são as coordenadas do pixel do contorno no ângulo φ , com φ variando de $-\pi$ a π .

O raio do contorno r_c normalizado (adimensional) no ponto i do contorno dos agregados é definido como:

$$r_c = \frac{\sqrt{x_{i,\varphi}^2 + y_{i,\varphi}^2}}{r_m} \quad (4.6)$$

em que r_m é definido como a média dos raios de k pontos na estrutura, $r_m = k^{-1} \sum_{i=0}^{k-1} r_i$ (LESTREL, 1997). Portanto, se $r_c < 1$, o ponto do contorno está dentro do círculo. No entanto, se $r_c > 1$, o ponto do contorno observado está fora do círculo.

4.2.3. Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF- DFA)

Seja w_k uma série temporal de r_c com valores entre $-\pi$ e π , de comprimento N , correspondente ao número de pixels que formam o contorno, com média \bar{w} .

O algoritmo do MF-DFA é dado a seguir:

1. Inicialmente, a série temporal w_k é integrada produzindo:

$$Y_i = \sum_{k=1}^i (w_k - \bar{w}), \quad i = 1, \dots, N \quad (4.7)$$

em que $\bar{w} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_k$ representa a média da série w_k .

2. A série integrada Y_i é dividida em $N_s = \text{int}[N/s]$ segmentos não sobrepostos de igual tamanho s e em cada segmento $s = 1, \dots, N_s$.
3. Calcula-se a tendência local $y_v(i)$ para cada um dos N_s segmentos pelo ajuste linear ou polinomial. Então, determina-se a variância sem tendência:

$$F^2(s, v) = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \{Y[(v-1)s+1] - y_v(i)\}^2, \quad v = 1, \dots, N_s \quad (4.8)$$

4. A função de flutuação de ordem q da série é dada pela expressão

$$F_q(s) = \left\{ \frac{1}{N_s} \sum_{v=1}^{N_s} [F^2(s, v)]^{\frac{q}{2}} \right\}^{\frac{1}{q}} \quad (4.9)$$

onde q pode assumir qualquer valor real, exceto zero. Em aplicações na prática, o valor de q é truncado em valores positivos e negativos. No presente estudo, o q varia de -10 a 10.

5. Se a série w_k possui as correlações de longo alcance, a função de flutuação $F_q(s)$ aumenta com s , como uma lei de potência,

$$F_q(s) \sim s^{h(q)} \quad (4.10)$$

O expoente de escala $h(q)$ representa o coeficiente angular da reta $\log(s)$ versus $\log F_q(s)$. Para valores positivos de q , $h(q)$ descreve a invariância escalar dos segmentos com grandes flutuações e, para valores negativos de q , $h(q)$ descreve a invariância escalar dos segmentos com pequenas flutuações. Em processos monofractais, o valor do expoente $h(q)$ é constante (independente de q) e para processos multifractais $h(q)$ é uma função decrescente de q , significando existência de uma hierarquia de expoentes de correlação e uma maior complexidade de organização temporal.

Além da forma funcional $h(q)$, as propriedades multifractais do contorno também podem ser caracterizadas através do espectro de singularidade $f(\alpha)$, que se relaciona ao expoente $\tau(q)$ obtida através da transformação de Legendre,

$$\alpha(q) = \tau'(q) = \frac{\partial \tau(q)}{\partial q} \quad f(\alpha) = q\alpha(q) - \tau(q) \quad (4.11)$$

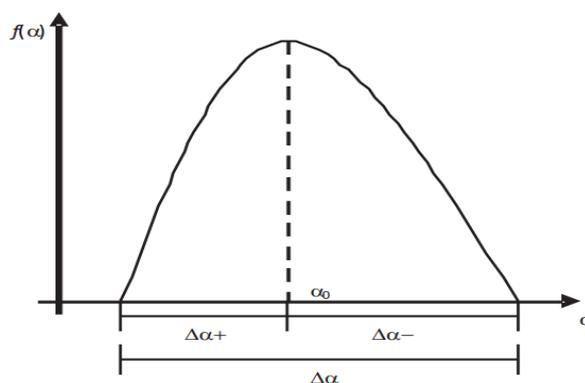
onde $\tau(q) = qh(q) - 1$ e é denominado expoente de escala de Renyi. Temos que $\alpha(q)$ é o poder de singularidade ou expoente Holder, enquanto $f(\alpha)$ denota a dimensão do subconjunto da série que é caracterizado por $\alpha(q)$.

Em séries temporais monofractais, o espectro é representado por apenas um ponto; já para uma série multifractal, o espectro é representado por uma função côncava para baixo, em que $f(\alpha)$ avalia o grau de multifractalidade do processo (FEDER, 1988; KANTELHARDT et al., 2002).

Um conjunto de parâmetros pode ser extraído a partir dos espectros multifractais (Figura 4.3) para a caracterização de complexidade de contorno, cada um com uma interpretação intuitiva (DUARTE-NETO et al., 2014):

- i) α_0 , a posição do máximo de $f(\alpha)$, que corresponde ao ponto em que $q \rightarrow 0$.
- ii) $\Delta\alpha$, a largura do espectro, a estimativa do intervalo de α onde $f(\alpha) > 0$, obtido como $\Delta\alpha = \alpha_{max} - \alpha_{min}$.
- iii) $\Delta\alpha+$, a contribuição da parte positiva de q na gama do espectro, calculado pela $\Delta\alpha+ = \alpha_0 - \alpha_{min}$.
- iv) $\Delta\alpha-$, a contribuição da parte negativa de q na gama do espectro, calculado pela $\Delta\alpha- = \alpha_{max} - \alpha_0$.

Figura 4.2: Representação esquemática dos parâmetros multifractais extraídos a partir do espectro singularidade.



Fonte: Duarte-Neto et al. (2014).

Estes parâmetros descrevem a multifractalidade do sinal e, conseqüentemente, a "Complexidade" da forma de contorno. O α_0 dá indicação se o processo subjacente é regular na aparência (TELESCA; LAPENNA, 2006). Assim, se α_0 é baixo, o sinal é não correlacionado e o processo subjacente "perde a estrutura fina", exibindo um contorno suavizado (SHIMIZU et al., 2002). O parâmetro $\Delta\alpha$ mede a amplitude de expoentes fractais necessários para descrever o sinal, ou seja, mede a largura do espectro de singularidade $f(\alpha)$. Portanto, quanto maior a amplitude, mais "forte" são as características multifractais. Parâmetros $\Delta\alpha +$ e $\Delta\alpha -$ funcionam como uma medida do domínio de expoentes fractais da maior e menor singularidade, respectivamente. Quanto maior for $\Delta\alpha -$, mais forte o peso da parte negativa de q no espectro fractal e pequenas flutuações dominam o contorno (correspondente a estrutura fina) e, se o espectro é dominado por $\Delta\alpha +$, grandes flutuações dominam o contorno.

4.3. Simulações

Os algoritmos foram implementados em linguagem C/C++ e, a máquina utilizada nas simulações possui processador Core i5 e memória RAM de 4G. Os algoritmos foram divididos em duas etapas:

- I. O crescimento dos agregados é com base na generalização do modelo DLA, levando em consideração a tensão superficial, modificando a restrição do número de possíveis direções para o passeio aleatório e o número de sítios vizinhos vistos pelas partículas de entrada, variando o valor de α_p de 0,01 a 1,0 ao passo de 0,01. Inicialmente, uma semente foi colocada no centro de uma matriz de 512 x 512. As novas partículas eram liberadas a partir de uma posição aleatória em um círculo com o raio inicial de 100. Essas partículas se movem de forma aleatória (Grade triangular) ou através de um passeio aleatório contínuo (Off-lattice). As partículas que atingem o círculo de lançamento são descartadas e, as que atingem o perímetro de crescimento têm probabilidade de agregação (s) (Eq.(4.2), (4.4) e (4.5), para a grade triangular, off-lattice com 4 vizinhos e off-lattice com 8 vizinhos, respectivamente). Cada vez que uma partícula se agrega, o tamanho do raio do conjunto é comparado com o raio do círculo de lançamento, que é, por sua vez, aumentada a fim de manter uma distância

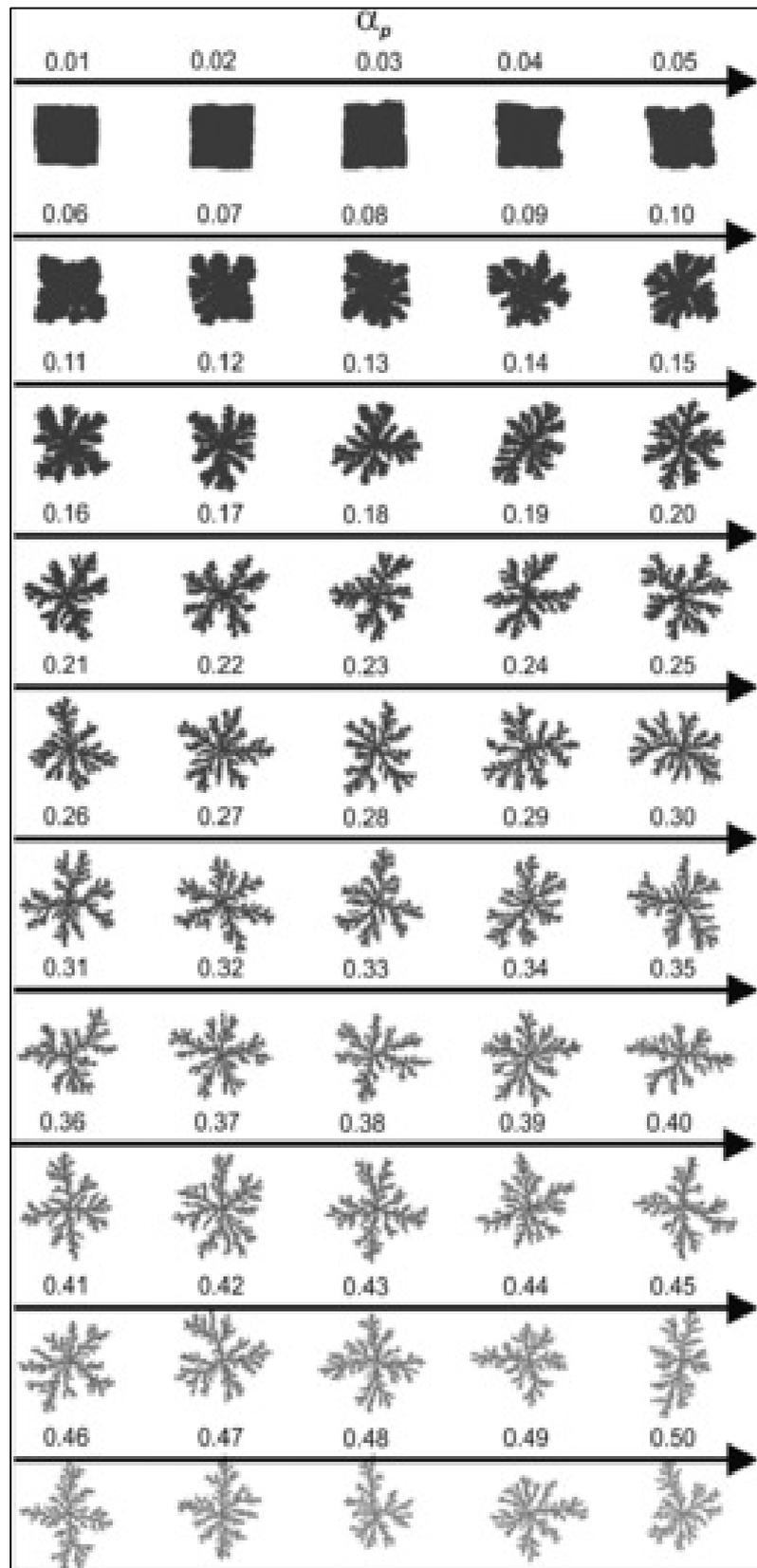
mínima de $\Delta r = 10$ (Figura 3.4). Cada processo de agregação termina quando o conjunto atinge o tamanho de 50 mil partículas. Cada condição de crescimento foi repetida 20 vezes para minimizar as variações devido a um erro aleatório, totalizando 3000 imagens. Em simulações off-lattice com 4 vizinhos, as simulações duravam em média 15 minutos. No entanto, para off-lattice com 8 vizinhos, duraram em média 35 minutos e, na grade triangular, duraram em média 20 minutos.

- II. Detecção contorno dos agregados e análise multifractal do contorno a partir da técnica "Traveling Observer" Multifractal Detrended Fluctuation Analysis, descrita no tópico 4.2. Para cada agregado, foi obtido uma matriz com informações das partículas extraído do contorno. A partir dessas informações, obtivemos o espectro de singularidade, bem como os parâmetros multifractais de cada agregado para os diferentes grades e tensão superficial (α_p).

5. RESULTADOSE DISCUSSÕES

As Figuras 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4 mostram os conjuntos de agregados obtidos a partir do modelo generalizado DLA para a grade quadrada, off-lattice com 4 e 8 vizinhos e a grade triangular, respectivamente. Nota-se que as estruturas obtidas a partir de uma baixa probabilidade de agregação, os agregados são mais compactadas, assemelhando-se a estruturas obtidas pelo modelo de Eden (BARABÁSI; STANLEY, 1995) e, conseqüentemente, resultando em uma superfície mais lisa. Porém, à medida que essa probabilidade aumenta, as estruturas tornam-se mais onduladas, com saliências e cavidades e mais ramificadas. Esta característica é observada na natureza durante o processo de biomineralização (SÖLLNER et al., 2003; MURAYAMA et al., 2005; MUKKAMALA et al., 2006; SPADAFORA et al., 2010). De acordo com Duarte-Neto et al. (2014), isso ocorre porque, quanto menor o valor da tensão superficial (α_p), a nova partícula lançada necessitará de mais vizinhos para que se conecte com a estrutura. Assim, a maneira como a partícula se agrega uma com as outras é uma característica importante para controlar a rugosidade da forma do agregado. Observa-se ainda, através dessas figuras, que as estruturas, obtidas usando grade triangular ou off-lattice com 8 vizinhos, apresentaram formas arredondadas, enquanto off-lattice com 4 vizinhos resulta em formas quadradas, semelhantes às de simulações em uma grade quadrada (DUARTE-NETO et al., 2014).

Figura 5.1: Diagrama morfológico de agregados com 50 mil partículas com diferentes probabilidades de agregação (grade quadrada).



Fonte: Duarte-Neto et al. (2014b)

Figura 5.2: Diagrama morfológico de agregados com 50 mil partículas com diferentes probabilidades de agregação, (off-lattice DLA com 8 vizinhos).

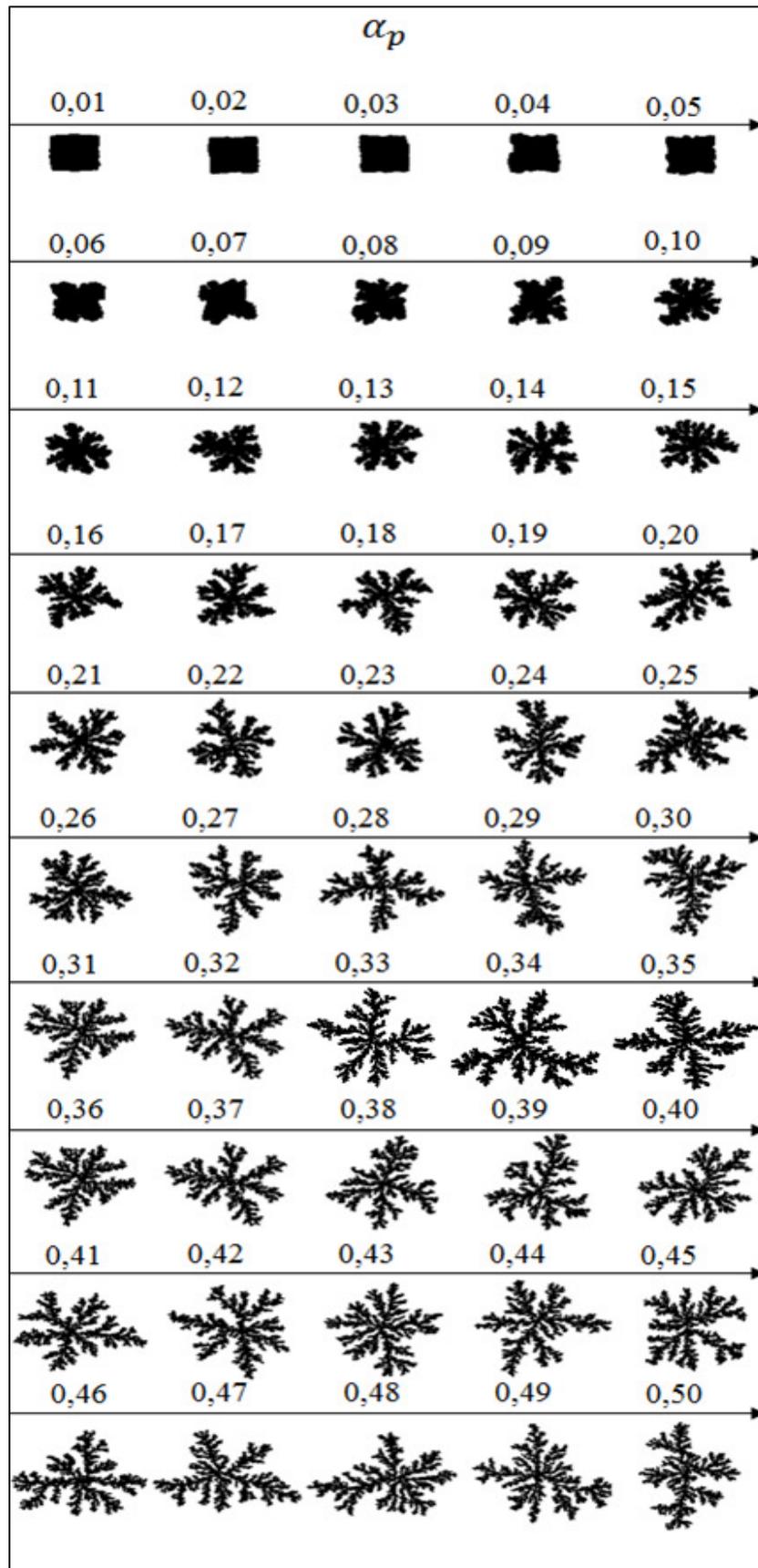


Figura 5.3: Diagrama morfológico de agregados com 50 mil partículas com diferentes probabilidades de agregação, (off-lattice DLA com 8 vizinhos).

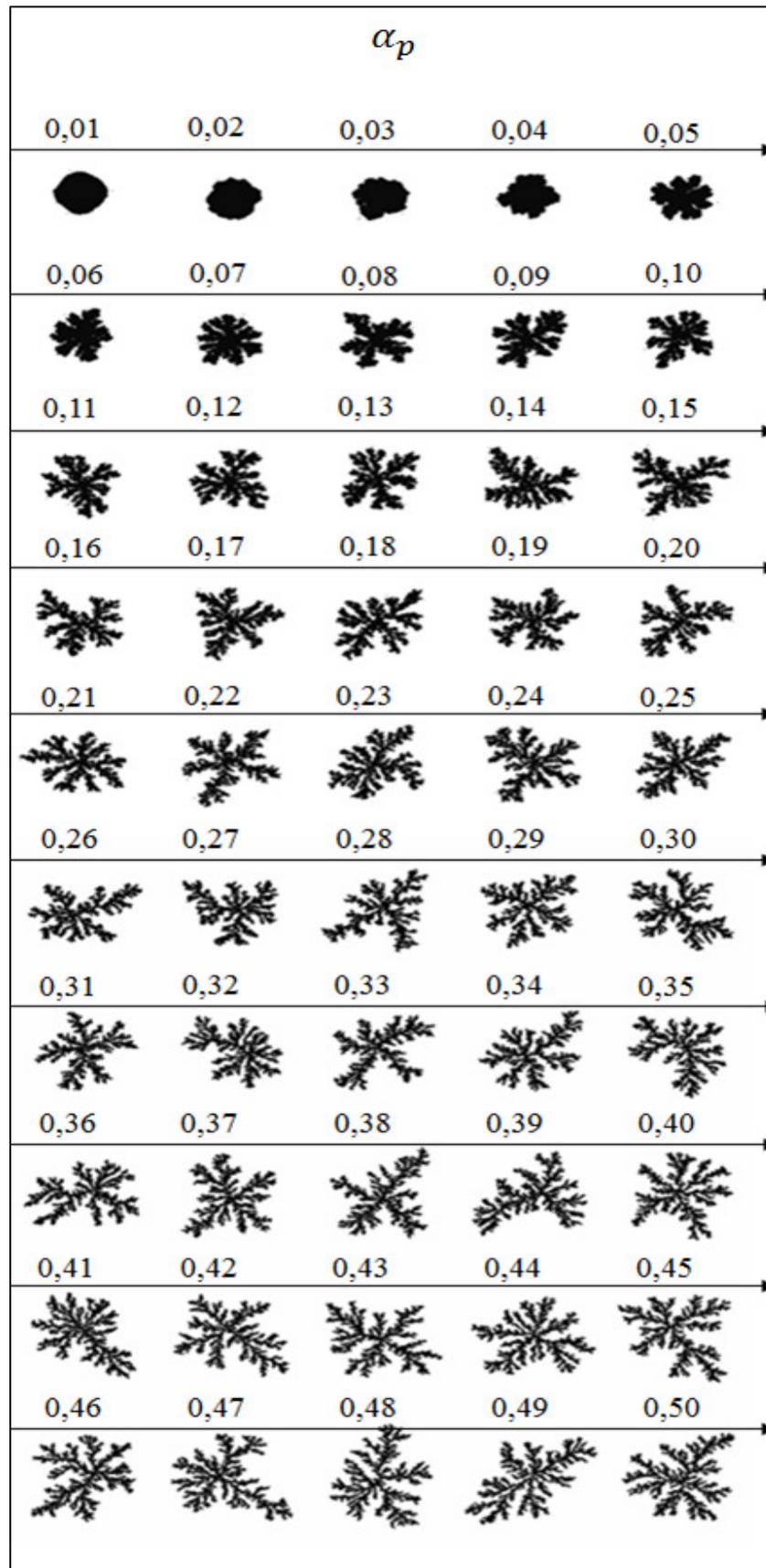
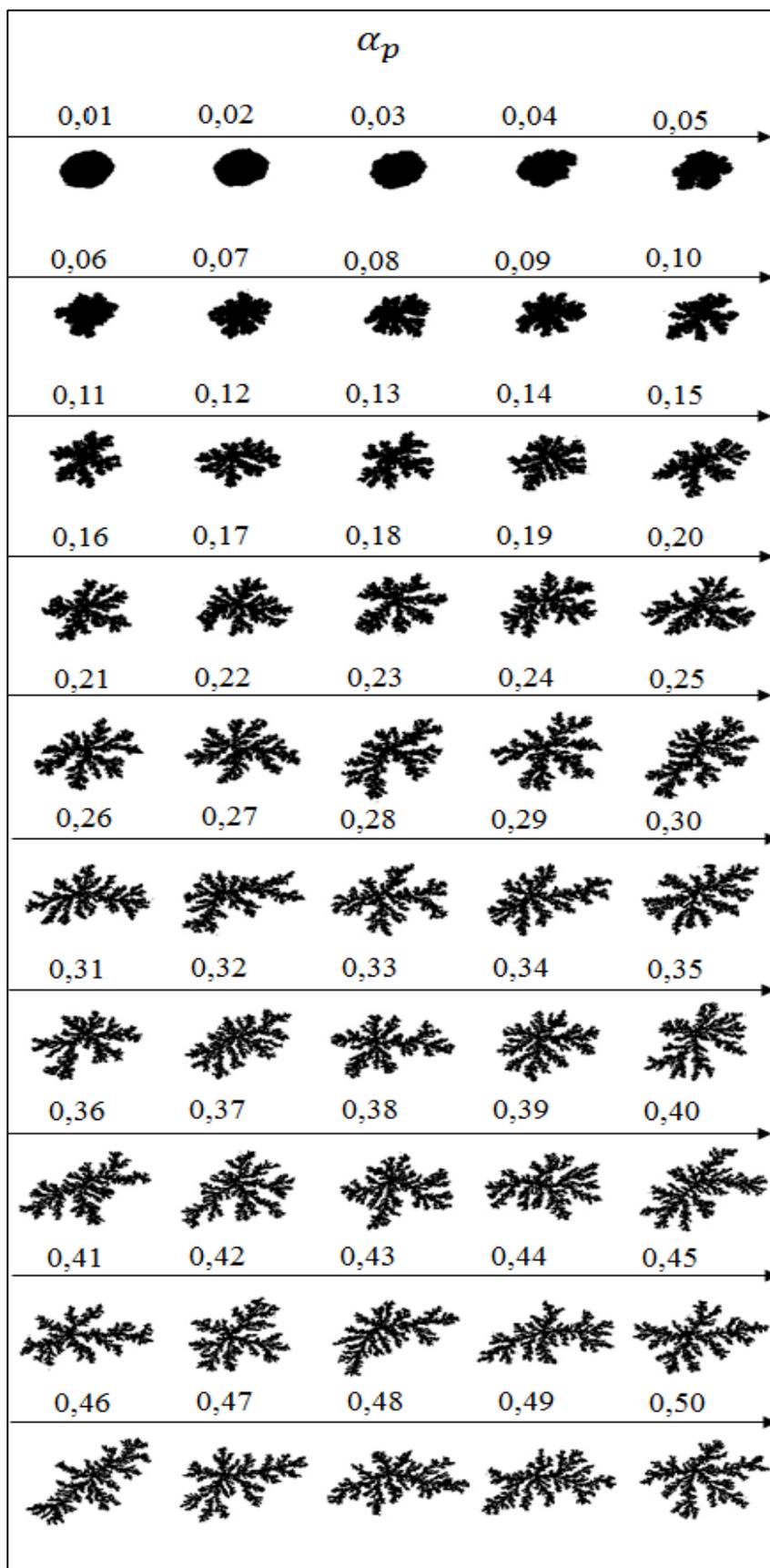


Figura 5.4: Diagrama morfológico de agregados com 50 mil partículas com diferentes probabilidades de agregação, (DLA grade triangular).



Para as diferentes grades, verificou-se que o expoente generalizado $h(q)$ apresenta um decaimento monótono em relação à q (Figura 5.5 A, Figura 5.6 A e Figura 5.7 A), ou seja, à função $h(q)$ decai à medida que q aumenta, indicando a necessidade de diversos expoentes de escala para descrever as propriedades fractais de diferentes momentos de q .

Alternativamente, a propriedade multifractal também pode ser refletida por outras duas medidas: o expoente de Rényi $\tau(q)$ e o espectro de singularidade $f(\alpha)$, obtidos através do expoente generalizado de Hurst. Nas Figuras 5.4 B, 5.5 B e 5.6 B, verifica-se que o expoente $\tau(q)$ não é função linear de q , apresentando dois diferentes regimes para os valores q negativos e positivos, mostrando que as flutuações de contorno dos agregados obtidos por diferentes grades possuem propriedades multifractais. A mesma conclusão pode ser obtida observando-se os espectros de singularidade $f(\alpha)$ (Figura 5.5 C, Figura 5.6 C e Figura 5.7 C), os quais exibem uma forma côncava para baixo com um ponto máximo, reafirmando a presença de multifractalidade. Tais características foram encontradas por Duarte-Neto (2012) ao analisar a multifractalidade de agregados na rede quadrada.

As Figuras 5.4, 5.5 e 5.6 mostram que a multifractalidade dos agregados, obtidos pela generalização do modelo DLA padrão para triangular lattice e off-lattices (4 e 8 vizinhos), dependem da tensão superficial (α_p), tornando-se mais fraca à medida que se aproxima do limite de um DLA padrão ($\alpha_p = 1$). O mesmo acontece em resultados encontrados por Duarte-Neto (2012) em agregados obtidos a partir da grade quadrada. A fraca multifractalidade também foi observada para o DLA padrão em outros estudos, tanto em relação à multifractalidade na distribuição de probabilidade de crescimento durante o processo de DLA (HAYAKAWA et al., 1987; NITTMANN; STANLEY, 1987) quanto na distribuição de massa (VICSEK et al., 1990; HANAN; HEFFERNAN, 2001, 2012).

Figura 5.5: (A) O q -ésimo momento versus o expoente generalizado $h(q)$, (B) q -ésimo momento versus o expoente multifractal $\tau(q)$, e (C) o espectro de singularidade $f(\alpha)$ para diferentes valores de α_p (Off-lattice com 4 vizinhos).

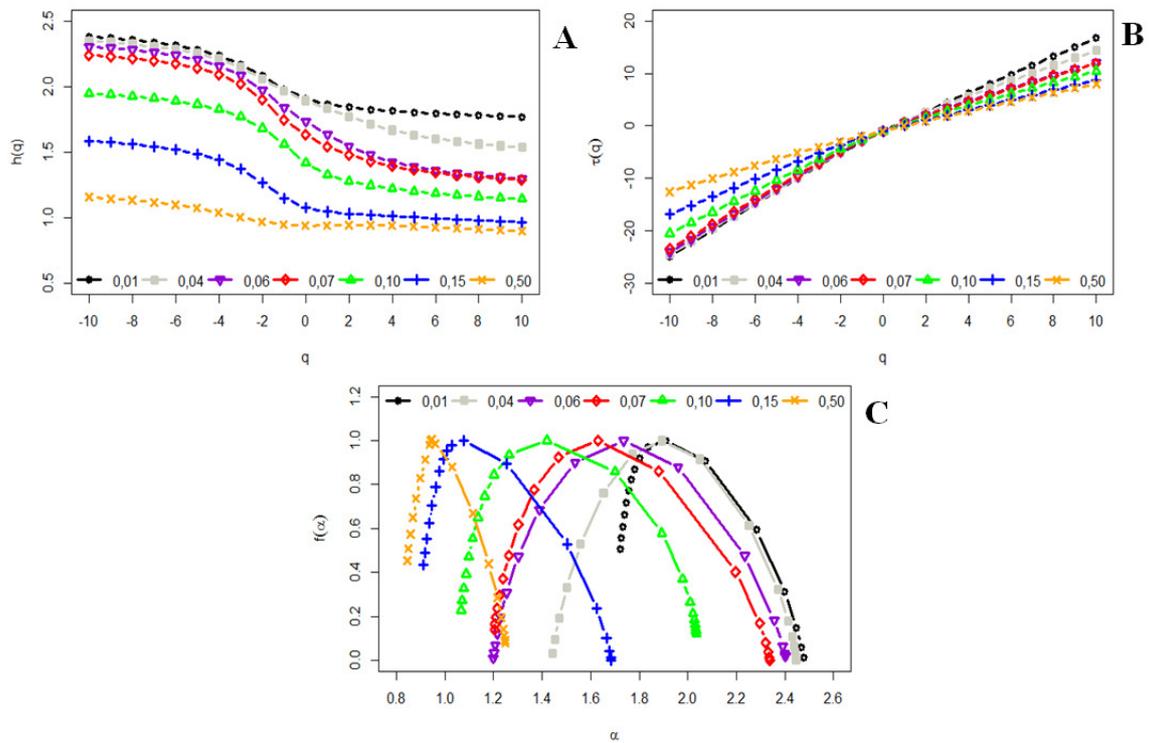


Figura 5.6: (A) O q -ésimo momento versus o expoente generalizado $h(q)$, (B) q -ésimo momento versus o expoente multifractal $\tau(q)$ e, (C) o espectro de singularidade $f(\alpha)$ para diferentes valores de α_p (Off-lattice com 8 vizinhos).

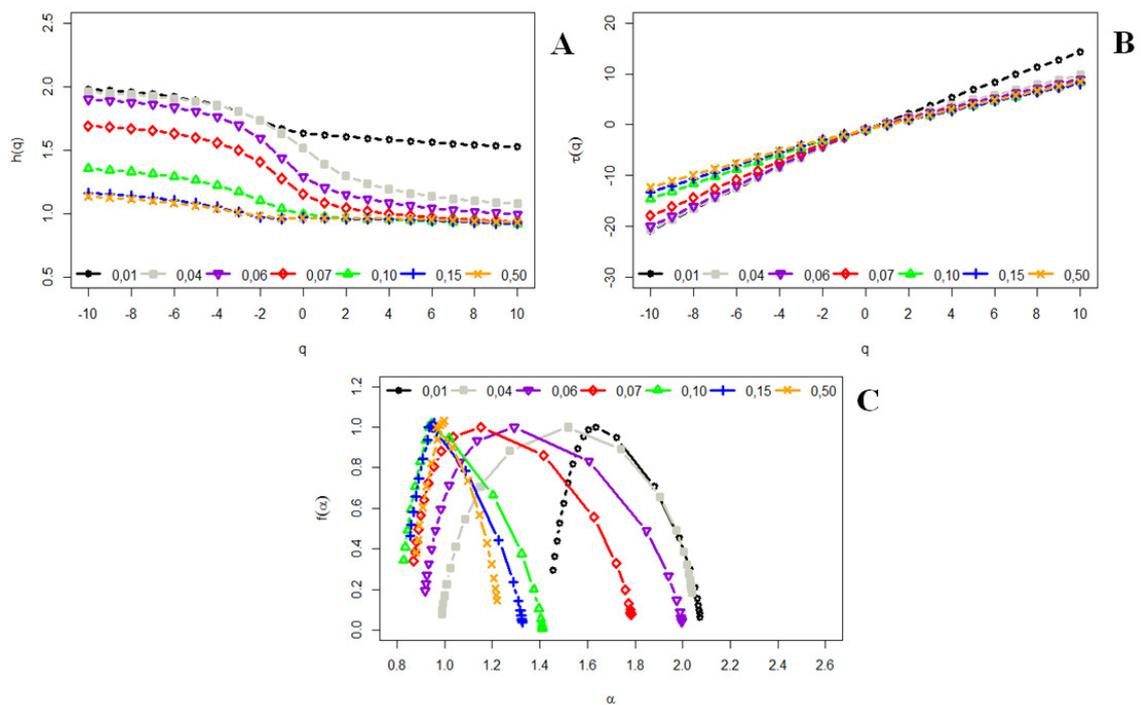
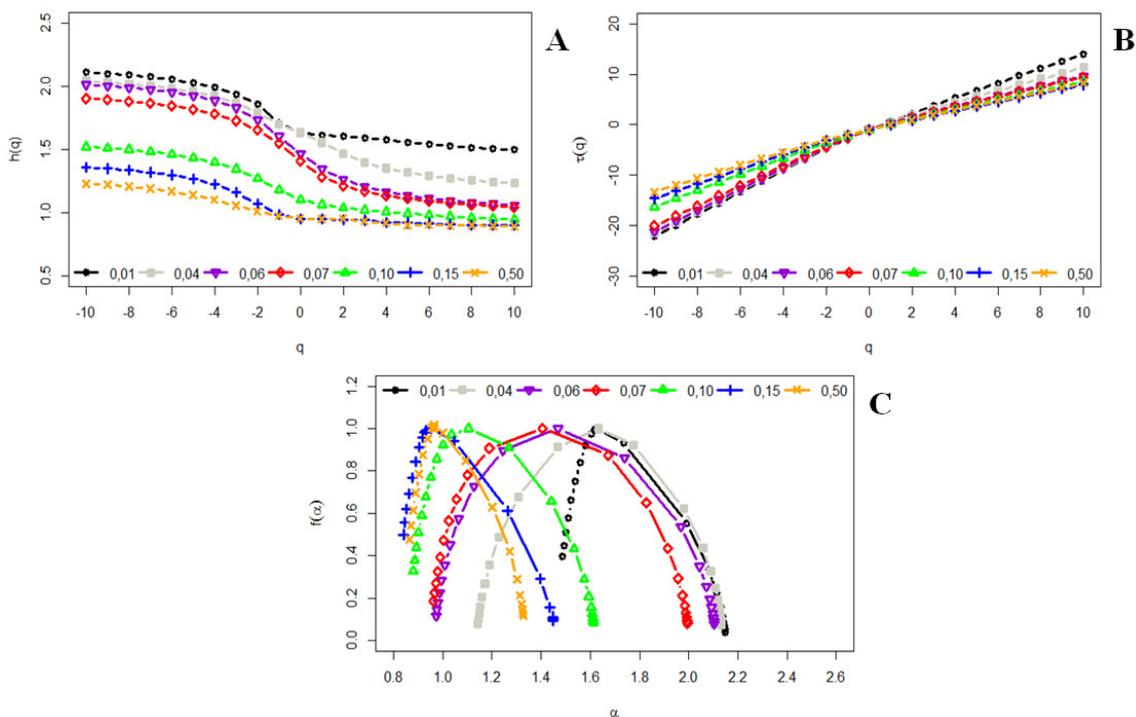


Figura 5.7: (A) O q -ésimo momento versus o expoente generalizado $h(q)$, (B) q -ésimo momento versus o expoente multifractal $\tau(q)$, e (C) o espectro de singularidade $f(\alpha)$ para diferentes valores de α_p (Grade Triangular).



Nas Figuras 5.7 B, 5.8 B e 5.9 B, observa-se o parâmetro $\Delta\alpha$ em função de α_p para os agregados com diferentes grades. A largura do espectro multifractal é o melhor indicador do grau de multifractalidade de um processo estocástico. Quanto maior o valor assumido por $\Delta\alpha$ (maior largura do espectro multifractal), mais forte a multifractalidade (DUARTE-NETO et al., 2014). Para agregados off-lattice com 4 vizinhos e a grade triangular, a multifractalidade mais forte foi observada para $\alpha_p = 0,06$ (Figura 5.5 C e Figura 5.7C). O pico observado em $\Delta\alpha +$ corresponde a esse valor (Figura 5.8 D e Figura 5.10 D). No entanto, estruturas obtidas como DLA off-lattice com 8 vizinhos, o agregado com $\alpha_p = 0,04$ foi o qual apresentou a multifractalidade mais forte (Figura 5.6 C), e o pico observado para $\Delta\alpha +$ corresponde também a esse valor (Figura 5.9 D). Assim, diferem da grade quadrada que apresentou multifractalidade mais forte no agregado com $\alpha_p = 0,07$ (DUARTE-NETO, 2012).

Se fizermos uma analogia dos parâmetros multifractais obtidos aqui com grandezas termodinâmicas em outros sistemas físicos, podemos considerar a tensão superficial α_p como responsável por provocar flutuações no contorno dos

agregados (equivalente à temperatura), o ponto máximo α_0 do espectro de singularidade $f(\alpha)$ como um parâmetro de ordem (magnetização) e $\Delta\alpha$, sendo sua função resposta (susceptibilidade) (Figura 5.8 A e B, Figura 5.9 A e B e Figura 5.10 A e B). Assim, com essa relação, podemos verificar a existência de uma transição de fase. Os picos apresentados nas Figuras 5.7B, 5.8B e 5.9B seriam os pontos críticos ($\alpha_p = 0,06$ ou $0,04$). Para valores abaixo de α_p , a fase é ordenada, na qual os contornos dos agregados são mais suaves e, para valores acima de α_p , a fase é desordenada, onde os contornos são rugosos. Essa transição de fase está associada a bruscas alterações estruturais em resposta à variação da tensão superficial (α_p). De acordo com Duarte-Neto et al. (2014), os valores de α_0 é baixo quando as flutuações do contorno não estão correlacionadas e o processo subjacente “perde a estrutura fina”, ou seja, a estrutura dominante tem mais energia em maiores flutuações, uma vez que pequenas flutuações tornam-se menos frequentes.

Figura 5.8: Variação dos parâmetros multifractais como uma função da "tensão superficial" (α_p). (Off-lattice com 4 vizinhos)

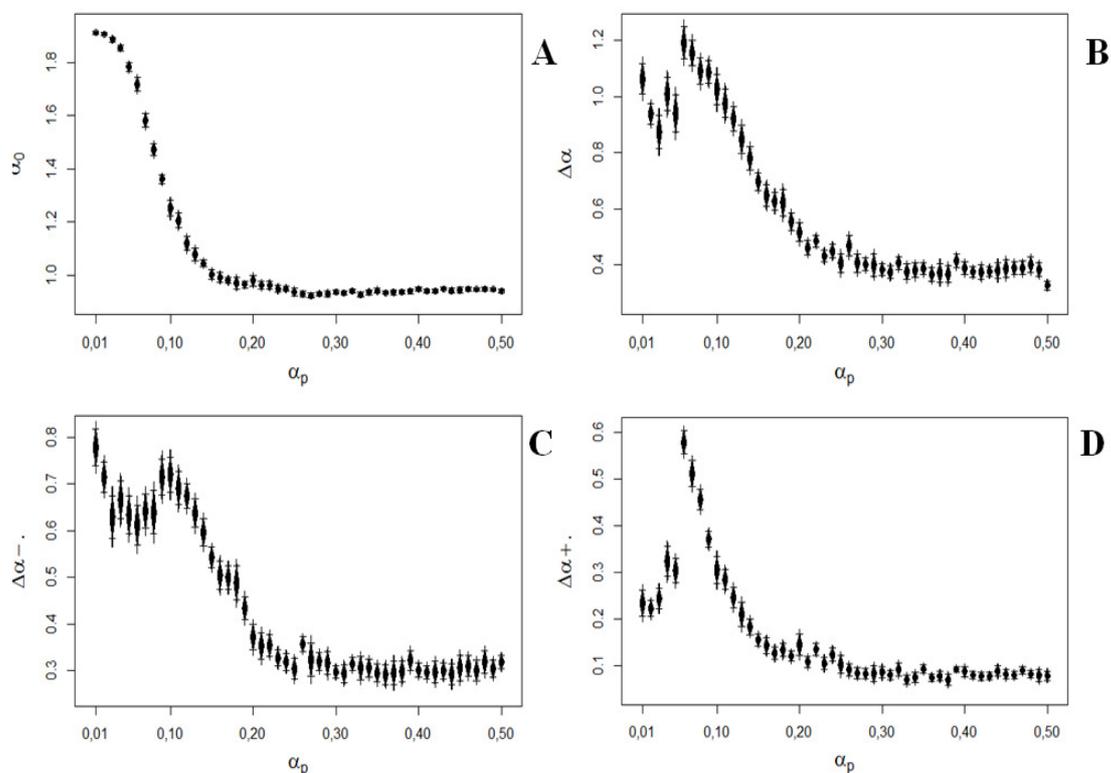


Figura 5.9: Variação dos parâmetros multifractais como uma função da "tensão superficial" (α_p). (Off-lattice com 8 vizinhos)

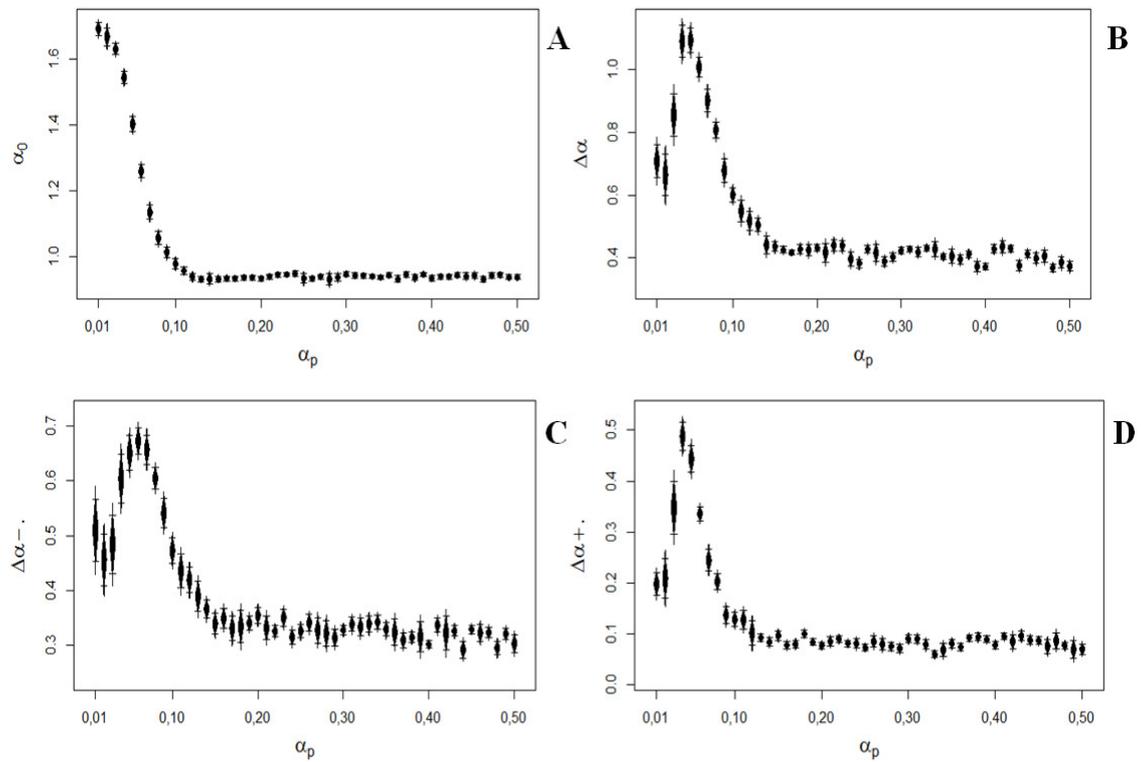
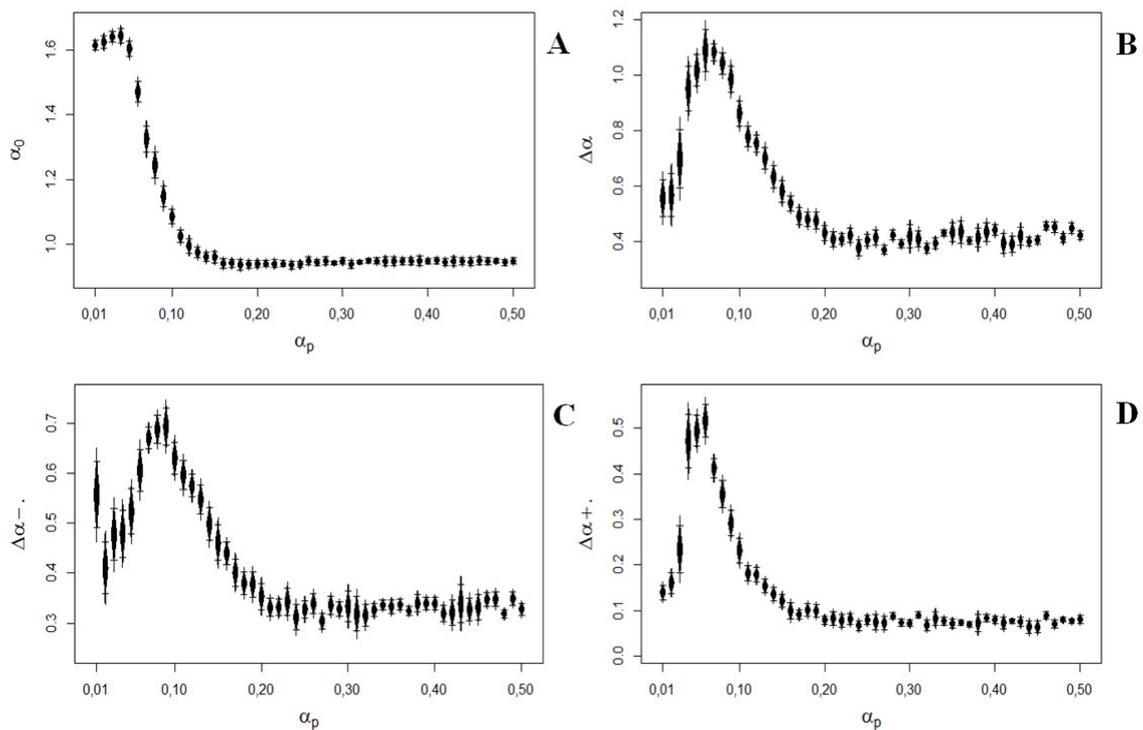


Figura 5.10: Variação dos parâmetros multifractais como uma função da "tensão superficial" (α_p). (Triangular lattice)



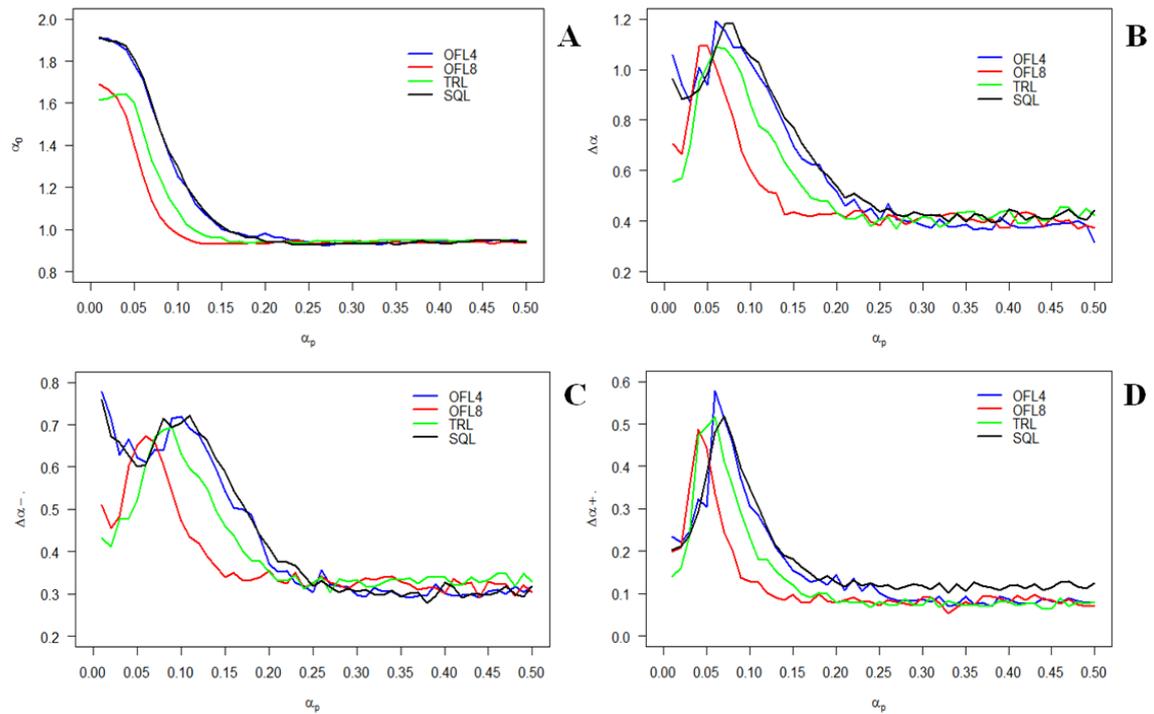
As Figuras 5.10 A-D mostram que o comportamento dos parâmetros multifractais depende do número de vizinhos observados pela partícula que em movimento, ou seja, depende da grade utilizada. As características multifractais da grade quadrada e do off-lattice com 4 vizinhos apresentam o mesmo comportamento. Porém, para o off-lattice com 8 vizinhos e o triangular lattice apresentam comportamentos diferentes. No off-lattice com 8 vizinhos, o parâmetro α_0 varia de 1,69 a 0,83, apresentando um decaimento monótono em relação à α_p . Para uma tensão superficial $\alpha_p = 0,01$, ao analisarmos os demais parâmetros, observamos os valores iniciais $\Delta\alpha = 0,71$, $\Delta\alpha_- = 0,51$ e $\Delta\alpha_+ = 0,19$ e, verificamos também um pico em $\alpha_p = 0,04$ com $\Delta\alpha = 1,10$ e $\Delta\alpha_+ = 0,48$; já para o parâmetro $\Delta\alpha_-$, o valor máximo foi de $\Delta\alpha_- = 0,67$ com $\alpha_p = 0,06$. No entanto, na grade triangular, foi observado um comportamento um pouco diferente entre $\alpha_p = 0,01$ e $\alpha_p = 0,04$, onde os valores de α_0 aumentam antes do decaimento padrão apresentados para todas as grades. Atribui-se essa distinção ao fato de que os agregados formados a partir desta grade estejam bem mais próximos a um círculo. Ainda em relação à grade triangular, verifica-se para uma tensão superficial $\alpha_p = 0,01$, que os valores iniciais para os parâmetros multifractais são $\Delta\alpha = 0,56$, $\Delta\alpha_- = 0,43$ e $\Delta\alpha_+ = 0,14$, apresentando um ponto máximo de $\Delta\alpha = 1,09$ e $\Delta\alpha_+ = 0,52$ para $\alpha_p = 0,06$; já para o parâmetro $\Delta\alpha_-$, o pico observado foi com $\alpha_p = 0,09$ ($\Delta\alpha_- = 0,69$).

De acordo com Duarte-Neto et al. (2014), essa diferença entre as grades está relacionada à forma do agregado e não às restrições nas direções disponíveis para os passeios aleatórios. A partir desses resultados, verifica-se que não importa se a partícula usa um passeio aleatório contínuo fora da grade ou um passeio aleatório em uma grade, o comportamento dos parâmetros multifractais será semelhantes. No entanto, a forma do agregado altera um pouco esse comportamento.

Da mesma forma que Duarte-Neto (2012) obteve expoentes críticos que tornaram o sistema independente de escala (número de partículas agregadas), é provável que haja expoentes críticos que tornam o comportamento dos parâmetros multifractais universal quanto ao número de vizinhos, mais precisamente à forma dos agregados. A dependência de escala apresentada

pele último autor citado pode ser na verdade a mesma dependência da forma apresentada no presente trabalho, uma vez que estruturas com um menor número de partículas apresentaram formas mais arredondadas.

Figura 5.11: Valores médios dos parâmetros multifractais como uma função da tensão superficial (α_p) para diferentes grades.



6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho teve como objetivo avaliar as propriedades multifractais de estruturas obtidas pela generalização do modelo DLA que leva em consideração a probabilidade de agregação local em diferentes grades (grade triangular e off-lattice), modificando o número de possíveis direções para o passeio aleatório e o número de sítios vizinhos experimentados pelas partículas de entrada a partir da técnica “Traveling Observer” Multifractal Detrended Fluctuation, extraíndo um conjunto de parâmetros a partir do espectro multifractal.

Independentemente do tipo de grade utilizada nas simulações, os agregados obtidos a partir de uma baixa probabilidade de agregação local são mais compactos e, à medida que aumenta a probabilidade, as estruturas tornam-se mais onduladas e mais ramificadas. Verificou-se que não importa se a partícula usa um passeio aleatório contínuo fora da grade ou um passeio aleatório em uma grade, o comportamento dos parâmetros multifractais será semelhante. No entanto, a forma do agregado altera esse comportamento.

Para as diferentes grades, o parâmetro α_0 se comportou como um parâmetro de ordem e $\Delta\alpha$ sendo sua função resposta. Verificou-se uma transição de fase dos agregados, na qual as estruturas passam de uma fase ordenada para uma fase desordenada. Os parâmetros multifractais abordados nesse trabalho podem ser utilizados para expressar quantitativamente o nível de organização das partículas dos agregados naturais. Portanto, o comportamento desses parâmetros demonstra forte semelhança com transições de fase observadas em outros sistemas clássicos da física estatística, mostrando propriedades ainda não observadas para um modelo de agregação microscópico em diferentes grades.

7. REFERÊNCIAS

BALL, R.; BRADY, R. M. Large scale lattice effect in diffusion-limited aggregation. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, 15. Nov. 1985.

BANFIELD, J. F.; WELCH, S. A.; ZHANG, H.; EBERT, T. T.; PENN, R. L. Aggregation-based crystal growth and microstructure development in natural iron oxyhydroxide biomineralization products. **Science (New York, N.Y.)**, v. 289, n. 5480, p. 751–4, 2000.

BARABÁSI, A.-L.; STANLEY, H. E. **Fractal Concepts in Surface Growth**. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.

BATCHELOR, M. T.; DUN, C. R.; HENRY, B. I. Growth and form in the zero-noise limit of discrete Laplacian growth processes with inherent surface tension. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 193, n. 3-4, p. 553–574, 1993.

BATCHELOR, M. T.; HENRY, B. I. Growth and form in the zero-noise limit of discrete Laplacian growth processes with inherent surface tension. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 187, n. 3-4, p. 551–574, 1992.

BEHRING, J. L.; LUCAS, M.; MACHADO, C.; BARCELLOS, I. O. Adaptação no método do peso da gota para determinação da tensão superficial: um método simplificado para a quantificação da CMC de surfactantes no ensino da química. **Química Nova**, v. 27, n. 3, p. 492–495, 2004.

BENICIO, R. B. DE; STOŠIĆ, T.; FIGUEIRÊDO, P. H. DE; STOŠIĆ, B. D. Multifractal behavior of wild-land and forest fire time series in Brazil. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 392, n. 24, p. 6367–6374, 2013.

BRAGA, M. R. **Estudo de Filmes Magnéticos Ultrafinos pelo Método de Monte Carlo**. Universidade Federal de Minas Gerais, 2006.

CASERTA, F.; STANLEY, H.; ELDRED, W.; et al. Physical mechanisms underlying neurite outgrowth: A quantitative analysis of neuronal shape. **Physical Review Letters**, v. 64, n. 1, p. 95–98, 1990.

CHRISTOPHER, R. A.; WATERS, J. A. Fourier analysis as a quantitative descriptor of miosphere shape. **Journal of Paleontology**, v. 48, p. 697–709, 1974.

COSTA, L. DA F.; CESAR JR., R. M. **Shape Analysis and Classification: Theory and Practice**. Hardcover: CRC Press, 2000.

CURRENTI, G.; NEGRO, C. DEL; LAPENNA, V.; TELESKA, L. Multifractality in local geomagnetic field at Etna volcano, Sicily (southern Italy). **Natural Hazards and Earth System Science**, v. 5, n. 4, p. 555–559, 2005.

DACCORD, G. Chemical dissolution of a porous medium by a reactive fluid. **Physical Review Letters**, v. 58, n. 5, p. 479–482, 1987.

DELLINO, P.; LIOTINO, G. The fractal and multifractal dimension of volcanic ash particles contour: a test study on the utility and volcanological relevance. **Journal of volcanology and geothermal research**, v. 113, n. 1-2, p. 1–18, 2002.

DU, G.; NING, X. Multifractal properties of Chinese stock market in Shanghai. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 387, n. 1, p. 261–269, 2008.

DUARTE-NETO, P. **Multifractal Analysis of Closed Contour Fluctuations**. Recife: UFRPE (Tese de Doutorado), 2012.

DUARTE-NETO, P.; STOŠIĆ, B.; STOŠIĆ, T.; et al. Multifractal Properties of a Closed Contour: A Peek beyond the Shape Analysis. (D. Rocchini, Ed.) **PloS one**, v. 9, n. 12, p. e115262, 2014.

DUARTE-NETO, P.; STOŠIĆ, T.; STOŠIĆ, B.; LESSA, R.; MILOŠEVIĆ, M. V. Interplay of model ingredients affecting aggregate shape plasticity in diffusion-limited aggregation. **Physical Review E**, v. 90, n. 1, p. 012312, 2014.

DUTTA, S. Multifractal properties of ECG patterns of patients suffering from congestive heart failure. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, v. 2010, n. 12, p. P12021, 2010.

EDEN, M. A Two-dimensional Growth Process. **Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume 4: Contributions to Biology and Problems of Medicine**. p.223–239, 1961.

FAMILY, F.; VICSEK, T.; TAGGETT, B. Lattice-induced anisotropy in a diffusion-limited growth model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 19, n. 12, p. L727–L732, 1986.

FEDER, J. **Fractals**. New York: Plenum Press, 1988.

FIGLIOLA, A.; SERRANO, E.; ROSSO, O. A. Multifractal detrended fluctuation analysis of tonic-clonic epileptic seizures. **The European Physical Journal Special Topics**, v. 143, n. 1, p. 117–123, 2007.

GRASSBERGER, P.; PROCACCIA, I. Characterization of Strange Attractors. **Physical Review Letters**, v. 50, n. 5, p. 346–349, 1983a.

GRASSBERGER, P.; PROCACCIA, I. Measuring the strangeness of strange attractors. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 9, n. 1-2, p. 189–208, 1983b.

GU, G.-F.; ZHOU, W.-X. Detrending moving average algorithm for multifractals. **Physical Review E**, v. 82, n. 1, p. 011136, 2010.

HANAN, W. G.; HEFFERNAN, D. M. Geometrical multifractality of the perimeter of DLA clusters. **Chaos, Solitons & Fractals**, v. 12, n. 1, p. 193–195, 2001.

HANAN, W. G.; HEFFERNAN, D. M. Multifractal analysis of the branch structure of diffusion-limited aggregates. **Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics**, v. 85, n. 2 Pt 1, p. 021407, 2012.

HARTE, D. **Multifractals**. Londres: Chapman & Hall, 2001.

HAYAKAWA, Y.; SATO, S.; MATSUSHITA, M. Scaling structure of the growth-probability distribution in diffusion-limited aggregation processes. **Physical Review A**, v. 36, n. 4, p. 1963–1966, 1987.

IVANOV, P. C.; AMARAL, L. A.; GOLDBERGER, A. L.; et al. Multifractality in human heartbeat dynamics. **Nature**, v. 399, n. 6735, p. 461–5, 1999.

KANTELHARDT, J. W.; KOSCIELNY-BUNDE, E.; RYBSKI, D.; et al. Long-term persistence and multifractality of precipitation and river runoff records. **Journal of Geophysical Research**, v. 111, n. D1, p. D01106, 2006.

KANTELHARDT, J. W.; ZSCHIEGNER, S. A.; KOSCIELNY-BUNDE, E.; et al. Multifractal detrended fluctuation analysis of nonstationary time series. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 316, n. 1-4, p. 87–114, 2002.

KAUFMAN, H.; VESPIGNANI, A.; MANDELBROT, B.; WOOG, L. Parallel diffusion-limited aggregation. **Physical Review E**, v. 52, n. 5, p. 5602–5609, 1995.

KAVASSERI, R. G.; NAGARAJAN, R. A multifractal description of wind speed records. **Chaos, Solitons & Fractals**, v. 24, n. 1, p. 165–173, 2005.

LESTREL, P. E. Introductio and overview of fourier descriptors. **Fourier Descriptors and Their Applications in Biology**. Cambridge ed., p.22 – 44, 1997.

LIM, G.; KIM, S.; LEE, H.; KIM, K.; LEE, D.-I. Multifractal detrended fluctuation analysis of derivative and spot markets. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 386, n. 1, p. 259–266, 2007.

LOPES, R.; BETROUNI, N. Fractal and multifractal analysis: a review. **Medical image analysis**, v. 13, n. 4, p. 634–49, 2009.

MANDELBROT, B. B. **Fractals: Form, Chance and Dimension**. 1st ed. W.H.Freeman & Company, 1977.

MANDELBROT, B. B. **The Fractal Geometry of Nature**. 1st ed. United States: W. H. Freeman and Company, 1982.

MANDELBROT, B. B. **No TitleThe Fractal Geometry of Nature**. New York: W.H. Freeman and Company, 1983.

MATSUSHITA, M.; FUJIKAWA, H. Diffusion-limited growth in bacterial colony formation. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 168, n. 1, p. 498–506, 1990.

MATSUSHITA, M.; SANO, M.; HAYAKAWA, Y.; HONJO, H.; SAWADA, Y. Fractal Structures of Zinc Metal Leaves Grown by Electrodeposition. **Physical Review Letters**, v. 53, n. 3, p. 286–289, 1984.

MEAKIN, P. Diffusion-controlled cluster formation in 2–6-dimensional space. **Physical Review A**, v. 27, n. 3, p. 1495–1507, 1983a.

MEAKIN, P. Effects of particle drift on diffusion-limited aggregation. **Physical Review B**, v. 28, n. 9, p. 5221–5224, 1983b.

MEAKIN, P. Universality, nonuniversality, and the effects of anisotropy on diffusion-limited aggregation. **Physical Review A**, v. 33, n. 5, p. 3371–3382, 1986.

MEAKIN, P. Progress in DLA research. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 86, n. 1-2, p. 104–112, 1995.

MEAKIN, P. **Fractals, Scaling and Growth Far from Equilibrium**. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.

MEAKIN, P.; DEUTCH, J. M. Monte Carlo simulation of diffusion controlled colloid growth rates in two and three dimensions. **The Journal of Chemical Physics**, v. 80, n. 5, p. 2115, 1984.

MEAKIN, P.; FAMILY, F.; VICSEK, T. Viscous fingering simulated by off-lattice aggregation. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 117, n. 2, p. 394–399, 1987.

MERKS, R.; HOEKSTRA, A.; KAANDORP, J.; SLOOT, P. Models of coral growth: spontaneous branching, compactification and the Laplacian growth assumption. **Journal of Theoretical Biology**, v. 224, n. 2, p. 153–166, 2003.

MEYER, M.; STIEDL, O. Self-affine fractal variability of human heartbeat interval dynamics in health and disease. **European journal of applied physiology**, v. 90, n. 3-4, p. 305–16, 2003.

MÓL, L. A. S. **Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares**. Universidade Federal de Minas Gerais, 2009.

MOLCHANOV, I. S. Diffusion-limited aggregation with jumps and flights. **Journal of Statistical Computation and Simulation**, v. 64, n. 4, p. 357–381, 1999.

MONTEIRO, L. H. A. **Sistemas Dinâmicos**. São Paulo: Editora Livraria Da Física, 2006.

MUKKAMALA, S. B.; ANSON, C. E.; POWELL, A. K. Modelling calcium carbonate biomineralisation processes. **Journal of inorganic biochemistry**, v. 100, n. 5-6, p. 1128–38, 2006.

MURAYAMA, E.; HERBOMEL, P.; KAWAKAMI, A.; TAKEDA, H.; NAGASAWA, H. Otolith matrix proteins OMP-1 and Otolin-1 are necessary for normal otolith growth and their correct anchoring onto the sensory maculae. **Mechanisms of development**, v. 122, n. 6, p. 791–803, 2005.

MUZY, J.; BACRY, E.; ARNEODO, A. Wavelets and multifractal formalism for singular signals: Application to turbulence data. **Physical Review Letters**, v. 67, n. 25, p. 3515–3518, 1991.

NAGATANI, T. Multifractal structures of mass and growth probability distributions in diffusion-limited aggregation on hierarchical lattices. **Physical Review A**, v. 38, n. 5, p. 2632–2640, 1988.

NAGATANI, T.; SAGUÉS, F. Morphological changes in convection-diffusion-limited deposition. **Physical Review A**, v. 43, n. 6, p. 2970–2976, 1991.

NITTMANN, J.; STANLEY, H. E. Non-deterministic approach to anisotropic growth patterns with continuously tunable morphology: the fractal properties of some real snowflakes. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 20, n. 17, p. L1185–L1191, 1987.

NITTMANN, J.; STANLEY, H.; TOUBOUL, E.; DACCORD, G. Experimental evidence for multifractality. **Physical Review Letters**, v. 58, n. 6, p. 619–619, 1987.

OLMSTED, D. P. **Lectures on Landau Theory of Phase Transitions**. University of Leeds: Department of Physics and Astronomy, 2000.

OÑATE RUBALCABA, J. J. Fractal analysis of climatic data: Annual precipitation records in Spain. **Theoretical and Applied Climatology**, v. 56, n. 2-3, p. 83–87, 1997.

OSSADNIK, P. Multiscaling analysis of large-scale off-lattice DLA. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 176, n. 3, p. 454–462, 1991.

OSWIECIMKA, P.; KWAPIEN, J.; DROŹDŹ, S. Wavelet versus detrended fluctuation analysis of multifractal structures. **Physical Review E**, v. 74, n. 1, p. 016103, 2006.

PERKIÖMÄKI, J. S.; MÄKIKALLIO, T. H.; HUIKURI, H. V. Fractal and complexity measures of heart rate variability. **Clinical and experimental hypertension (New York, N.Y.)**, v. 27, n. 2-3, p. 149–58, 1993.

ROA, M. A. D. **Crescimento laplaciano em duas dimensões: uma abordagem através da equação de Loewner**. Universidade Federal de Pernambuco, 2010.

RODRIGUEZ-ROMO, S.; SOSA-HERRERA, A. Lacunarity and multifractal analysis of the large DLA mass distribution. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 392, n. 16, p. 3316–3328, 2013.

SALINAS, S. R. A. **Introdução a Física Estatística**. 2ª ed. São Paulo: Universidade de São Paulo, 2005.

SCHUMANN, A. Y.; KANTELHARDT, J. W. Multifractal moving average analysis and test of multifractal model with tuned correlations. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 390, n. 14, p. 2637–2654, 2011.

SHIMIZU, Y.; THURNER, S.; EHRENBERGER, K. Multifractal Spectra as a Measure of Complexity in Human Posture. **Fractals**, v. 10, n. 01, p. 103–116, 2002.

SÖLLNER, C.; BURGHAMMER, M.; BUSCH-NENTWICH, E.; et al. Control of crystal size and lattice formation by starmaker in otolith biomineralization. **Science (New York, N.Y.)**, v. 302, n. 5643, p. 282–6, 2003.

SPADAFORA, A.; PERRI, E.; MCKENZIE, J. A.; VASCONCELOS, C. Microbial biomineralization processes forming modern Ca:Mg carbonate stromatolites. **Sedimentology**, v. 57, n. 1, p. 27–40, 2010.

TÉL, T.; FÜLÖP, Á.; VICSEK, T. Determination of fractal dimensions for geometrical multifractals. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 159, n. 2, p. 155–166, 1989.

TEL, T.; VICSEK, T. Geometrical multifractality of growing structures. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 20, n. 13, p. L835–L840, 1987.

TELESCA, L.; LAPENNA, V. Measuring multifractality in seismic sequences. **Tectonophysics**, v. 423, n. 1-4, p. 115–123, 2006.

TELESCA, L.; LOVALLO, M. Analysis of the time dynamics in wind records by means of multifractal detrended fluctuation analysis and the Fisher–Shannon information plane. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, v. 2011, n. 07, p. P07001, 2011.

TOLMAN, S.; MEAKIN, P. Off-lattice and hypercubic-lattice models for diffusion-limited aggregation in dimensionalities 2-8. **Physical review. A**, v. 40, n. 1, p. 428–437, 1989.

VICSEK, T. Formation of solidification patterns in aggregation models. **Physical Review A**, v. 32, n. 5, p. 3084–3089, 1985.

VICSEK, T. **Fractal Growth Phenomena**. World Science Publishing, 1989.

VICSEK, T. Mass multifractals. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 168, n. 1, p. 490–497, 1990.

VICSEK, T.; FAMILY, F.; MEAKIN, P. Multifractal Geometry of Diffusion-Limited Aggregates. **Europhysics Letters (EPL)**, v. 12, n. 3, p. 217–222, 1990.

VOSS, R. Multiparticle diffusive fractal aggregation. **Physical Review B**, v. 30, n. 1, p. 334–337, 1984.

VOSS, R. F. Characterization and Measurement of Random Fractals. **Physica Scripta**, v. T13, n. T13, p. 27–32, 1986.

WANG, Y.; LIU, L.; GU, R. Analysis of efficiency for Shenzhen stock market based on multifractal detrended fluctuation analysis. **International Review of Financial Analysis**, v. 18, n. 5, p. 271–276, 2009.

WEST, B. J.; LATKA, M.; GLAUBIC-LATKA, M.; LATKA, D. Multifractality of cerebral blood flow. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 318, n. 3-4, p. 453–460, 2003.

WEST, B. J.; SCAFETTA, N. A Multifractal Dynamical Model of Human Gait. , p. 10, 2005.

WITTEN, T.; SANDER, L. Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon. **Physical Review Letters**, v. 47, n. 19, p. 1400–1403, 1981.

YOUNG, H. D. **Física II: Termodinamica e ondas**. São Paulo: Addison Wesley, 2008.

YUAN, Y.; ZHUANG, X.; JIN, X. Measuring multifractality of stock price fluctuation using multifractal detrended fluctuation analysis. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 388, n. 11, p. 2189–2197, 2009.

ZHANG, Q.; XU, C.-Y.; CHEN, Y. D.; YU, Z. Multifractal detrended fluctuation analysis of streamflow series of the Yangtze River basin, China. **Hydrological Processes**, v. 22, n. 26, p. 4997–5003, 2008.