



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

TESE DE DOUTORADO

**ESTUDOS SOBRE O MODELO $O(N)$ NA REDE QUADRADA E DINÂMICA
DE BOLHAS NA CÉLULA DE HELE-SHAW**

ANTÔNIO MÁRCIO PEREIRA SILVA

Recife
2013



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

TESE DE DOUTORADO

ESTUDOS SOBRE O MODELO $O(N)$ NA REDE QUADRADA E DINÂMICA DE BOLHAS NA CÉLULA DE HELE-SHAW

por

ANTÔNIO MÁRCIO PEREIRA SILVA

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Giovani Lopes Vasconcelos (DF-UFPE)

Recife
2013

Catálogo na fonte
Bibliotecária Joana D'Arc Leão Salvador CRB4-532

S586e Silva, Antônio Márcio Pereira.
Estudos sobre o modelo $O(N)$ na rede quadrada e dinâmica de bolhas na célula de Hele-Shaw / Antônio Márcio Pereira Silva. – Recife: O Autor, 2013.
130 f.: fig.; tab. e gráfico.

Orientador: Giovani Lopes Vasconcelos.
Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 2013.
Inclui referências e apêndices.

1. Transformações de fase (Física estatística). 2. Monte Carlo, Método de. 3. Dinâmica dos fluidos. 4. Mapeamento conforme. I. Vasconcelos, Giovani Lopes (Orientador). II. Título.

530.1595 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2015-01



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física – CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil
Fone (++ 55 81) 2126-7640/2126-8449
<http://www.ufpe.br/ppg fisica> e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Tese de Doutorado

Antônio Márcio Pereira Silva

ESTUDOS SOBRE O MODELO $O(N)$ NA REDE QUADRADA E DINÂMICA DE BOLHAS NA CÉLULA DE HELE-SHAW

A Banca Examinadora composta pelos Professores Ernesto Carneiro Pessoa Raposo (Presidente), Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes, Maurício Domingues Coutinho Filho, todos do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e José Soares de Andrade Júnior, do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, consideram o candidato:

(X) Aprovado

() Reprovado

() Em exigência

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco em vinte e seis de agosto de dois mil e treze.

Prof. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo
Presidente

Prof. Marcelo Andrade de Filgueiras
Gomes

Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho

Prof. José Soares de Andrade Júnior

Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de
Moura

Dedico a minha família.

Agradecimentos

Agradeço a minha família pela força e o carinho que me deram.

Sou muito grato a meu orientador, o professor Giovani Vasconcelos, pela orientação e o acolhimento durante esses quase 7 anos em que participei do grupo do Laboratório de Simulação Analógica (LSA), assim também como ao professor Marcelo Gomes e a meus companheiros de laboratório, Thiago Sobral e Victor Hugo, entre outros colegas que por lá passaram.

Agradeço imensamente a meu co-orientador, o professor Adriaan Schakel, pelos 2 anos de colaboração na minha formação.

Agradeço ao Programa de Pós-graduação em Física pela oportunidade de estudar nesse Departamento, assim como a todos funcionários do DF.

Agradeço a minha baixinha pelo amor e o companheirismo.

Agradeço a meus amigos e a todos que tiveram paciência comigo.

E finalmente agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

No presente trabalho duas classes de problemas são abordadas. Primeiramente, são apresentados estudos computacionais sobre o modelo $O(n)$ de spins na rede quadrada, e em seguida apresentamos novas soluções exatas para a dinâmica de bolhas na célula de Hele-Shaw. O estudo do modelo $O(n)$ é feito utilizando sua representação em laços (cadeias fechadas), a qual é obtida a partir de uma expansão para altas temperaturas. Nesse representação, a função de partição do modelo possui uma expansão diagramática em que cada termo depende do número e comprimento total de laços e do número de (auto)interseções entre esses laços. Propriedades críticas do modelo de laços $O(n)$ são obtidas através de conceitos oriundos da teoria de percolação. Para executar as simulações Monte Carlo, usamos o eficiente algoritmo WORM, o qual realiza atualizações locais através do movimento da extremidade de uma cadeia aberta denominada de verme e não sofre com o problema de "critical slowing down". Para implementar esse algoritmo de forma eficiente para o modelo $O(n)$ na rede quadrada, fazemos uso de uma nova estrutura de dados conhecida como listas satélites. Apresentamos estimativas para o ponto crítico do modelo para vários valores de n no intervalo de $0 < n \leq 2$. Usamos as estatísticas de laços e vermes para extrair, respectivamente, os expoentes críticos térmicos e magnéticos do modelo. No estudo de dinâmica de interfaces, apresentamos uma solução exata bastante geral para um arranjo periódico de bolhas movendo-se com velocidade constante ao longo de uma célula de Hele-Shaw. Usando a periodicidade da solução, o domínio relevante do problema pode ser reduzido a uma célula unitária que contém uma única bolha. Nenhuma imposição de simetria sobre forma da bolha é feita, de modo que a solução é capaz de produzir bolhas completamente assimétricas. Nossa solução é obtida por métodos de transformações conformes entre domínios duplamente conexos, onde utilizamos a transformação de Schwarz-Christoffel generalizada para essa classe de domínios.

Palavras-chave: Modelo $O(n)$ de spins. Algoritmo WORM. Propriedades Críticas. Simulação Monte Carlo. Dinâmica de interfaces. Célula de Hele-Shaw. Transformações conformes.

Abstract

In this thesis two classes of problems are discussed. First, we present computational studies of the $O(n)$ spin model on the square lattice and determine its critical properties, whereas in the second part of the thesis we present new exact solutions for bubble dynamics in a Hele-Shaw cell. The $O(n)$ model is investigated by using its loop representation which is obtained from a high-temperature expansion of the original model. In this representation, the partition function admits a diagrammatic expansion in which each term depends on the number and total length of loops (closed graphs) as well as on the number of intersections between these loops. Critical properties of the $O(n)$ model are obtained by employing concepts from percolation theory. To perform Monte Carlo simulations of the model, we use the WORM algorithm, which is an efficient algorithm that performs local updates through the motion of one of the ends (called *head*) of an open chain (called *worm*) and hence does not suffer from “critical slowing down”. To implement this algorithm efficiently for the $O(n)$ model on the square lattice, we make use of a new data structure known as a satellite list. We present estimates for the critical point of the model for various values of n in the range $0 < n \leq 2$. We use the statistics about the loops and the worm to extract the thermal and magnetic critical exponents of the model, respectively. In our study about interface dynamics, we present a rather general exact solution for a periodic array of bubbles moving with constant velocity in a Hele-Shaw cell. Using the periodicity of the solution, the relevant domain of the problem can be reduced to a unit cell containing a single bubble. No symmetry requirement is imposed on the bubble shape, so that the solution is capable of generating completely asymmetrical bubbles. Our solution is obtained by using conformal mappings between doubly-connected domains and employing the generalized Schwarz-Christoffel formula for this class of domains.

Keywords: $O(n)$ spin model. WORM algorithm. Critical properties. Monte Carlo simulation. Interface dynamics. Hele-Shaw cell. Conformal mappings.

Lista de Figuras

1.1	Interface separando dois aglomerados de spins.	20
1.2	As três fases dos traços formados pelo processo estocástico de Loewner.	20
1.3	Processo de agregação por difusão limitada.	22
1.4	Célula de Hele-Shaw.	22
1.5	Padrão de dedos viscosos numa célula de Hele-Shaw[1].	23
2.1	Diagramas típicos representando termos em (2.6). Os termos correspondentes são dados nas legendas das figuras.	30
2.2	Exemplos de diagramas de contribuição não-nula. Os diagramas são formados por polígonos coloridos.	31
2.3	Decomposição de vértices do tipo v_4 .	33
2.4	Decomposição do diagrama da figura 2.2(a) em 3 configurações distintas de laços.	33
2.5	Configuração contendo laços e o verme.	35
2.6	Verme e laços	37
2.7	Processo em que o verme cresce ao acrescentar uma ligação (seta) entre os sítios i e j .	38
2.8	Processo em que o verme apaga a última ligação (seta) dele.	38
2.9	Processo em que verme se fecha e forma um novo laço.	39
2.10	Processo em que "nasce" um verme.	40
2.11	Processo de sorteio de instrução de rota. O verme avança e toca um laço. A cor vermelha das arestas (setas) indica uma mudança na orientação original dessas arestas.	42
2.12	Processo de sorteio de instrução de rota. O verme avança e toca em si mesmo. A cor vermelha das arestas (setas) indica uma mudança na orientação original dessas arestas.	43

LISTA DE FIGURAS

2.13	Processo de sorteio de instrução de rota. O verme toca um laço.	44
2.14	O verme “nasce” apagando um laço.	45
2.15	Processo em que o verme se apaga completamente.	46
2.16	Processo em que o verme “morre” e deixa um novo laço.	46
2.17	Processo em que o verme “morre” e deixa dois novos laços.	47
2.18	Processo em que ocorre reconexão.	48
2.19	Processo em que ocorre um backbiting.	49
2.20	Processo em que o verme destrói um laço. O restante do laço é reconectado ao corpo do verme.	49
2.21	Lista de satélites	51
3.1	Laços numa rede quadrada 5×5 com condições de contorno periódicas.	55
3.2	(a) Probabilidade Π_L de encontrar um ou mais laços infinitos na rede como função da fugacidade de arestas K , para vários valores de L , para $n = 1$. (b) Π_L como função de $(K - K_c)L^{1/\nu}$, onde usamos o valor estimado de K_c e o valor exato de ν para $n = 1$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.	56
3.3	(a) Probabilidade Π_L de encontrar um ou mais laços infinitos na rede como função da fugacidade de arestas K , para vários valores de L , para $n = 0,01$. (b) Π_L como função de $(K - K_c)L^{1/\nu}$, onde usamos o valor estimado de K_c e o valor exato de ν para $n = 0,01$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.	56
3.4	(a) Probabilidade Π_L de encontrar um ou mais laços infinitos na rede como função da fugacidade de arestas K , para vários valores de L , para $n = 1,8$. (b) Π_L como função de $(K - K_c)L^{1/\nu}$, onde usamos o valor estimado de K_c e o valor exato de ν para $n = 1,8$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.	57
3.5	Estimativas para o inverso dos pontos críticos $1/K'_c \equiv n/K_c$ do modelo de laços $O(n)$ em uma rede quadrada junto com a curva obtida pela equação (3.1) com coeficientes a e b dados pela equação (3.2).	60

LISTA DE FIGURAS

- 3.6 Colapso do observável de percolação Π_L para $n = 0,5$. Em (a) usamos nossa estimativa a partir do colapso por inspeção visual, $K_c = 0,19704$, e em (b) usamos o valor dado pelas equações (3.1) e (3.2), $K_c = 0,19699$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras. 60
- 3.7 Número médio de (a) arestas $\langle b \rangle$, (b) cruzamentos $\langle m_4 \rangle$ e (c) laços $\langle l \rangle$ para $0 < n < 1,8$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras. 61
- 3.8 Exemplos de configurações críticas de laços em redes de lado $L = 128$ para $n = 0,01, 1$ e 2 . Os valores de K_c usados são aqueles dados na tabela 3.1. 62
- 3.9 Comprimento médio $\langle M_{inf} \rangle$ dos laços infinitos em função do tamanho linear L da rede. Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica. Cada ponto do gráfico é a média de 10.000.000 de amostras. 64
- 3.10 (a) Distribuição l_M de laços de tamanho M em função de M , para vários valores de L , para $n = 1$ e $K_c = 0,4141$. (b) Gráfico de $l_M L^{d+D}$ em função de M/L^D , para vários valores de L . Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica. 66
- 3.11 (a) Distribuição z_M de vermes de tamanho M em função de M , para vários valores de L . (b) gráfico de z_M/L^D em função de M/L^D , para vários valores de L . 67
- 3.12 Susceptibilidade magnética χ em função do tamanho linear L . Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica. 68
- 3.13 (a) Probabilidade Π_L de encontrar um ou mais laços infinitos na rede como função da fugacidade de arestas K , para vários valores de L , para $n = 2$ e $K_c = 1,04$. (b) Gráfico de Π_L em função de $(K - K_c) \ln^2(L/L_0)$, para vários valores de L , onde usamos que $K = 1,040$ e $L_0 = 0,55$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras. 70
- 3.14 A rigidez de spin (reescalada) $\langle w^2 \rangle$ como função de $1/K$ para vários tamanhos de rede. A linha horizontal denota o valor de $\langle w^2 \rangle = 4/\pi$. Cada ponto do gráfico é a média de 1.000.000 de amostras. 71
- 3.15 Menos o inverso da variável do grupo de renormalização x , definida na equação (3.19), como função de L para $K = 1,030, 1,040, 1,050$ e $1,060$. A curva em destaque é o melhor ajuste para os dados em $K = 1,040$. Cada ponto do gráfico é a média de 1.000.000 de amostras. 72

LISTA DE FIGURAS

- 3.16 (a) Distribuição l_M de laços de tamanho M em função de M , para vários valores de L , para $n = 2$ e $K_c = 1,040$. (b) Gráfico de $l_M L^{d+D}$ em função de M/L^D , para vários valores de L , usando $D = 3/2$. Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica. 73
- 3.17 (a) Número de vermes de tamanho M , z_M , como função de M para vários tamanhos de rede, para $n = 2$ e $K_c = 1,040$. (b) Gráfico de z_M/L^ϑ como função de M/L^D , usando $\vartheta = 1/4$ e $D = 3/2$. 73
- 3.18 A observável Π_L em função da fugacidade de arestas K , para vários tamanhos lineares L de redes, para $n = 3$. Cada ponto do gráfico é a média de 10.000.000 de amostras. 75
- 3.19 n/K_c versus n . A curva tracejada representa a continuação analítica da curva para baixas temperaturas. 76
- 3.20 Tamanho médio $\langle M_{inf} \rangle$ de laços infinitos em função do comprimento linear L para $n = 2$ e $K = 1,1365$. Cada ponto do gráfico é a média de 10.000.000 amostras. 76
- 3.21 (a) A distribuição l_M de laços de tamanho M em função de M , para vários tamanhos lineares L , para $n = 2$ e $K = 1,1365$. (b) Gráfico de $l_M L^{d+D}$ em função de M/L^D , para vários valores de L , usando $D = 1,5619$. Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica. 77
- 3.22 (a) A distribuição z_M de vermes de tamanho M em função de M , para vários tamanhos lineares L , para $n = 2$ e $K = 1,1365$. (b) Gráfico de z_M/L^ϑ em função de M/L^D , para vários valores de L , usando $D = 1,5619$ e $\vartheta = 0,218$. 77
- 3.23 A susceptibilidade magnética χ em função do tamanho linear L , para $n = 2$ e $K = 1,1365$. Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica. 78
- 4.1 Fileira de bolhas em uma célula de Hele-Shaw. 80
- 4.2 Problema no referencial das bolhas: (a) Célula unitária e (b) célula unitária reduzida. 82
- 4.3 Domínios do escoamento: (a) no plano z e (b) no plano w . 85
- 4.4 Domínios do escoamento: (a) no plano z e (b) no plano $\tilde{w}$. 87
- 4.5 Domínios do escoamento: (a) no plano z , (b) no plano w , (c) no plano $\tilde{w}$ e (d) no plano auxiliar ζ . 88

LISTA DE FIGURAS

4.6	Solução de Burgess e Tanveer. Usamos os seguintes parâmetros: $q = 0,5$ e $\theta_1 = 0,5$, e obtemos $2L = 0,83$.	100
4.7	Solução simétrica em relação ao eixo $y = 0,5$. Usamos os seguintes parâmetros: $q = 0,6$, $\theta_1 = 0,2$ e $\theta_3 = 1,0$, e obtemos $\beta_2 = 0,29$ e $2L = 2,10$.	101
4.8	Solução simétrica em relação ao eixo $x = L$. Usamos os seguintes parâmetros: $q = 0,5$, $\theta_1 = 0,3$ e $\theta_2 = 1,5$, e obtemos $\beta_1 = 1,21$ e $2L = 1,0$.	102
4.9	Solução geral do problema. Usamos os seguintes parâmetros: $q = 0,55$, $\theta_1 = 1,0$, $\theta_2 = 3,6$ e $\theta_3 = 3,8$, e obtemos $\beta_1 = 1,98$, $\beta_2 = 0,30$ e $2L = 1,8$.	103
A.1	Balanço entre as situações em que o verme se fecha e forma um novo laço ($E \rightarrow D$) e em que um verme nasce destruindo um laço ($D \rightarrow E$).	112
A.2	Balanço entre as situações em que o verme nasce ($E \rightarrow D$) e em que um verme morre ($D \rightarrow E$).	113
A.3	Processo de sorteio de instrução de rota. Balanço entre as situações em que verme nasce e toca um laço ($E \rightarrow D$) e situações inversas ($D \rightarrow E$).	114
A.4	Balanço entre as situações em que o verme avança ($E \rightarrow D$) e em que um verme apaga uma aresta dele ($D \rightarrow E$).	116
A.5	Processo de sorteio de instrução de rota. Balanço entre as situações em que o verme avança e toca a si mesmo ($E \rightarrow D$) e situações inversas ($D \rightarrow E$).	118
B.1	(a) Domínio correspondente no plano ζ ; (b) Região poligonal no plano z .	119

Lista de Tabelas

3.1	Estimativas de K_c/n para vários valores de n .	58
-----	---	----

Sumário

1	Introdução	16
1.1	Modelo de Ising na criticalidade	17
1.1.1	<i>Scaling</i> e universalidade	17
1.1.2	Invariância conforme	18
1.1.3	Evolução estocástica de Loewner	19
1.2	Modelos de crescimento	21
1.2.1	Agregação limitada por difusão	21
1.2.2	O escoamento de Hele-Shaw	22
1.3	Uma revisão sobre modelo de laços $O(n)$	24
1.4	Uma revisão sobre o problema de bolhas em células de Hele-Shaw	26
2	Modelo $O(n)$ e sua representação em laços	28
2.1	Representação em laços para o modelo $O(n)$ de spins	28
2.1.1	Modelo de laços: Uma expansão em séries para altas temperaturas	29
2.2	Algoritmo WORM para modelo $O(n)$	34
2.3	Descrição do algoritmo	36
2.3.1	ADICIONANDO UMA ARESTA	39
2.3.2	APAGANDO UMA ARESTA	45
2.3.3	Probabilidades de Aceitação	50
2.4	Estrutura de dados	51
3	Resultados	54
3.1	Linha crítica	54
3.2	Expoentes críticos para o modelo de Ising ($n = 1$)	63
3.2.1	Estatística para cadeias fechadas	63
3.2.2	Estatística para cadeias abertas	65

SUMÁRIO

3.3	Modelo XY ($n = 2$)	69
3.4	Caso $n > 2$	74
3.4.1	Fase de baixas temperaturas	75
4	Arranjo periódico de bolhas assimétricas numa célula de Hele-Shaw	79
4.1	Formulação do problema	79
4.2	O potencial complexo no referencial do laboratório	86
4.3	Formulação via transformações conformes	88
4.4	Solução Geral	89
4.4.1	A função $W(\zeta)$	89
4.4.2	A função $\tilde{W}(\zeta)$	94
4.4.3	Caso especial: $U = 2V$	97
4.5	Exemplos	99
5	Conclusões	104
	Referências	106
	Apêndice A - Balanço detalhado	111
	Apêndice B - Transformação de Schwarz-Christoffel para domínios duplamente conexos	119
	Apêndice C - Artigos publicados	121
C.1	Artigo 1	122
C.2	Artigo 2	126

CAPÍTULO 1

Introdução

Todos os dias nos deparamos com vários tipos de padrões em várias escalas de observação, natural ou artificial. Por exemplo, padrões em forma de espirais podem ser encontrados desde numa concha de caracol até numa galáxia distante. Tanto os próprios padrões em si quanto seus mecanismos de formação atraem o interesse de cientistas em diversas áreas do conhecimento.

Do ponto de vista físico, vários processos naturais que levam à formação de padrões têm como fator de dificuldade o fato de ocorrerem num estado de não-equilíbrio. No entanto, com o desenvolvimento e a invenção de novas ferramentas matemáticas para a física, os padrões estão continuamente sendo melhor entendidos. Alguns modelos propostos conseguem descrever em detalhes alguns desses processos complicados.

Muitos padrões na natureza são formados devido à interações entre propriedades termodinâmicas, instabilidades e processos de transporte. Em geral, os processos de convecção e difusão geram diferentes tipos de padrões. Tipicamente, a convecção domina os processos de transporte, porém, em alguns casos que ocorrem na natureza apenas a difusão tem o controle na formação de padrões.

Em física computacional, a formação de padrões em simulações podem revelar propriedades interessantes sobre o comportamento do sistema em questão. As propriedades geométricas desses padrões podem implicar em resultados e interpretações importantes. Às vezes, modelos computacionais mais simples podem modelar problemas mais complexos, desde um processo de formação de estruturas fractais ao de crescimento de interfaces.

Alguns processos de naturezas aparentemente distintas têm algum tipo de conexão entre eles, o que pode acontecer em situações bem particulares. Por exemplo, o processo de crescimento de dedos viscosos numa célula de Hele-Shaw pode apresentar alguma conexão, por mais que não aparente, com os padrões de aglomerados de spins que ocorrem na criticalidade para o modelo de Ising. A seguir, tentaremos mostrar como esses dois problemas tão distintos podem estar, de alguma certa forma, ligados um ou outro.

1.1 Modelo de Ising na criticalidade

Consideremos o conhecido modelo de Ising, o qual descreve uma rede em que cada sítio j contém um spin σ_j que pode tomar os valores $\sigma_j = \pm 1$. É sabido que o modelo de Ising consegue descrever a perda de magnetização de um material magnético quando esse se encontra a uma temperatura T acima de uma certa temperatura crítica T_c . A magnetização do material é denominada nesse contexto de parâmetro de ordem, pois abaixo de T_c , os spins se encontra numa fase ordenada, indicando que o material está magnetizado, e acima de T_c os spins encontram-se numa fase desordenada, onde a magnetização do material é nula. Quando nos aproximamos da temperatura crítica T_c a partir da fase ordenada (ou seja, quando $T < T_c$), a magnetização desse material vai a zero de maneira contínua, caracterizando o que denominamos de transição de fase de segunda ordem.

1.1.1 *Scaling* e universalidade

É encontrado experimentalmente que nas proximidades de uma transição de fase contínua, algumas quantidades observáveis mostram um comportamento do tipo

$$O(T) \sim (T - T_c)^{x_O}, \quad (1.1)$$

onde o expoente x_O é conhecido como o expoente crítico do observável O . Por exemplo, a magnetização tende a zero como $(T_c - T)^\beta$ apenas quando a temperatura T é menor que a temperatura crítica T_c . Por outro lado, a susceptibilidade magnética diverge como $|T - T_c|^{-\gamma}$ quando estamos próximos de T_c . Esses expoentes críticos são ditos serem universais pelo fato de que diferentes sistemas apresentam comportamentos críticos com exatamente os mesmos expoentes críticos. Este fenômeno é conhecido como universalidade.

Teoricamente, a universalidade nos leva a concluir que, na transição de fase, várias propriedades macroscópicas de um sistema tornam-se independentes dos detalhes microscópicos, podendo ser descritas por um pequeno número de parâmetros globais tais como a dimensionalidade do sistema e o alcance das interações entre partículas. Esta observação justifica o uso de modelos mais simples para investigar o comportamento crítico, pois nesses modelos podemos descartar muitos detalhes sobre as interações. Assim, para modelos pertencentes à

mesma classe de universalidade, pode-se tentar resolver o mais simples deles de forma exata e então obter as propriedades críticas de todos os modelos dessa mesma classe inclusive aqueles modelos que são mais difíceis de serem resolvidos exatamente.

Geralmente, na proximidade do ponto crítico, o comportamento do sistema é descrito pelas flutuações que ocorrem nesse sistema. Quando nos aproximamos do ponto crítico a partir de uma fase desordenada, flutuações locais em diferentes pontos do sistema tendem a ser correlacionadas à distâncias cada vez maiores quanto mais próximos estamos do ponto crítico. O comprimento de escala típico destas correlações, o comprimento de correlação ξ , diverge como

$$\xi \sim |T_c - T|^{-\nu} \quad (1.2)$$

quando nos aproximamos do ponto crítico pela fase ordenada. Quando estamos fora do ponto crítico, o comprimento de correlação é finito, contudo, no ponto crítico, o comprimento de correlação ξ é infinito e assim o sistema comporta-se da mesma maneira quando observado em escalas diferentes, ou seja, o sistema é invariante sob mudança de escala. Essa invariância de escala implica que flutuações ocorrem em todas as escalas de observação. Uma interpretação geométrica para essa propriedade do sistema é que aglomerados de spins são estruturas auto-similares, ou seja, qualquer parte do sistema é similar ao sistema inteiro.

1.1.2 Invariância conforme

No ponto crítico, ou em escalas de comprimento muito maiores que o espaçamento entre spins, a representação de rede pode ser substituída por uma representação de contínuo. A partir da hipótese de invariância de escala surgiu a ideia de que sistemas cujas interações são apenas de natureza local podem ser invariantes sob mudança de escala localmente. Assim, nessa representação de contínuo, o estado de um spin pode ser descrito por uma função local $\psi(\mathbf{r})$, a qual é invariante sob mudança de escala. Desde que a geometria do sistema, no limite de uma teoria contínua, tem uma estrutura auto-similar, ela será independente de rotações, translações e mudança de escala, ou seja, o sistema é invariante conformalmente. Assim, no limite do contínuo, a teoria que descreve o sistema é uma teoria de campos conforme.

O comportamento do modelo de Ising na criticalidade não é único. Muitos outros modelos estatísticos como os de percolação e *self-avoiding walks* (SAW) também têm essas proprieda-

des. A suposição de invariância conforme é especialmente poderosa em duas dimensões, pois qualquer função analítica define uma transformação conforme e vice-versa. Com o passar dos anos, a hipótese de invariância conforme obteve muito sucesso ao explicar o comportamento crítico de sistemas bidimensionais, e seus resultados concordam com os resultados de modelos resolvidos exatamente [2]. Por exemplo, é possível calcular algumas quantidades úteis, tais como funções de correlação, de maneira simples e então obter propriedades universais do modelo. Entretanto, a suposição de invariância conforme dada pelos físicos é bastante intuitiva e muitas questões de natureza matemática ainda permanecem abertas.

Há pouco mais de uma década, avanços realizados em geometria estocástica fizeram surgir uma nova formulação sobre teorias conformes, a qual é baseada nas velhas ideias do matemático Charles Loewner. Essa formulação, conhecida como evolução estocástica de Loewner, a qual foi apresentada pelo matemático Oded Schramm, define uma família de curvas em duas dimensões dependentes de um parâmetro κ . Tais curvas são especiais pois acredita-se que elas descrevam as paredes de domínios (entre aglomerados de spins) de modelos da física estatística e outros modelos matemáticos no limite de uma teoria de contínuo.

1.1.3 Evolução estocástica de Loewner

Algumas estruturas fractais que aparecem no modelo de Ising, tais como uma interface entre dois grandes aglomerados de spins, sendo um com spins $\sigma = -1$ e o outro com spins $\sigma = +1$, quando tomadas no limite de uma teoria de campos conforme, podem ser descritas pelo processo conhecido como evolução estocástica de Loewner. Nesse processo, uma curva γ_t cresce continuamente sobre o semi-plano superior do plano complexo z , partindo da origem $z = 0$. A extremidade dessa curva que avança sobre o plano descreve um movimento aleatório. Esse processo então produz uma curva fractal que é invariante conformalmente, e portanto pode ser usada para descrever propriedades críticas para modelos estatísticos no limite do contínuo. Essa nova formulação para o problema além de apresentar informações que a teoria padrão não contem, tais como aspectos geométricos, possui um rigor matemático que é de grande interesse para os físicos teóricos. A evolução estocástica de Loewner tem atraído bastante a atenção dos físicos e matemáticos, ainda mais que recentemente dois trabalhos nessa área foram agraciados com medalhas Fields, uma para W. Werner em 2006 e outra para S. Smirnov em 2010.

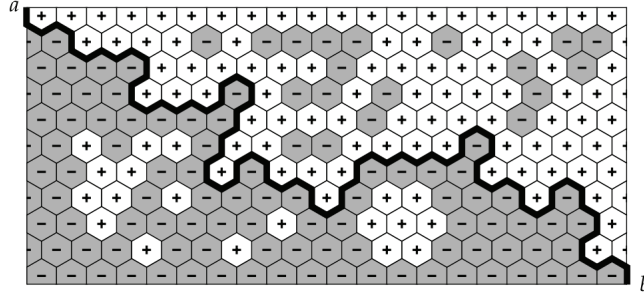


Figura 1.1 Interface separando dois aglomerados de spins.

A evolução estocástica de Loewner gera uma família de curvas que não se cruzam e não são ramificadas que são dependentes de um parâmetro adimensional κ , relacionado à intensidade das flutuações estocásticas, o qual é muito importante para o comportamento das curvas. Por exemplo, para κ no intervalo $0 < \kappa \leq 4$, o traço γ_t descreve uma curva aleatória que não se auto intercepta e não toca o eixo real do plano z . Nesse caso, conjectura-se que o traço descrevendo o contorno entre grandes aglomerados no modelo de Ising na criticalidade e no limite do contínuo, é obtido quando $\kappa = 3$. Também conjectura-se que o traço para o modelo de SAW é obtido para $\kappa = 8/3$. Para o modelo de spins $O(n)$ conjectura-se que o parâmetro κ é dado no intervalo $8/3 \leq \kappa \leq 4$, para $n = -2\cos(4\pi/\kappa)$.

Para κ no intervalo $4 < \kappa < 8$, o traço γ_t começa a se interceptar. Quando $\kappa \geq 8$, as curvas passam a preencher uma região inteira do semi-plano. Estas fases para diferentes intervalos de κ estão ilustradas na figura 1.2. Foi mostrado em [3] que a dimensão fractal D_H das curvas

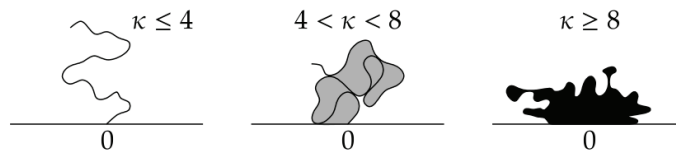


Figura 1.2 As três fases dos traços formados pelo processo estocástico de Loewner.

geradas pelo processo estocástico de Loewner depende de κ como

$$D_H = 1 + \frac{\kappa}{8}, \quad \text{para } 0 \leq \kappa \leq 8. \quad (1.3)$$

Para $\kappa > 8$ as curvas preenchem o semi-plano de maneira que $D_H = 2$.

Na próxima seção, apresentaremos outro tipo de problema que pode ser estudado por meio do processo estocástico de Loewner, o qual é referente ao problema de crescimento laplaciano.

1.2 Modelos de crescimento

Outro problema que pode ser formulado usando processos estocásticos para a formação de padrões é o processo de agregação limitada por difusão. Este processo de formação de aglomerados tem muitas similaridades com outros processos, como a formação de dedos viscosos em células de Hele-Shaw. Essas similaridades serão discutidas a seguir.

1.2.1 Agregação limitada por difusão

O conceito de agregação limitada por difusão foi primeiramente introduzido por Witten e Sander [4], como um modelo de agregação irreversível e aleatória. Esse modelo tenta visualizar partículas que se movem aleatoriamente em um líquido devido ao movimento browniano. Quando duas partículas colidem uma com a outra, elas permanecem “coladas” uma à outra de forma irreversível, o que conduz ao crescimento de aglomerados de partículas. Um importante detalhe desse modelo é que a densidade de partículas no fluido é muito baixa, o que permite-nos considerar que apenas uma colisão ocorre num dado instante de tempo.

Esse processo pode ser modelado como segue: considere uma rede com uma partícula parada e posicionada no centro da rede, enquanto uma segunda partícula move-se aleatoriamente em algum lugar na rede, longe da partícula que está fixa. Essa partícula que se move pode ou escapar para muito longe da partícula fixa ou colidir com ela. No segundo caso, a segunda partícula permanecerá aderida àquela que está fixa, tornando-se parte do aglomerado. Assim que a segunda partícula está “fora do jogo”, uma terceira partícula é adicionada a rede e passará a se mover aleatoriamente na rede, seguindo o mesmo procedimento da segunda. E o processo assim continua, fazendo com que o aglomerado de partículas cresça. Esse algoritmo produz um aglomerado fractal e ramificado, como mostra a figura 1.3.

Apesar de o modelo de agregação limitada por difusão ser bastante interessante, sua relevância não é aparente. Para mostrar a generalidade desse modelo, vamos considerar um



Figura 1.3 Processo de agregação por difusão limitada.

problema bem diferente desse: o escoamento de fluido viscoso numa célula de Hele-Shaw.

1.2.2 O escoamento de Hele-Shaw



Figura 1.4 Célula de Hele-Shaw.

Num escoamento de Hele-Shaw, um fluido viscoso escoa numa célula de Hele-Shaw, ou seja, entre duas placas paralelas que distam de uma pequena distância b uma da outra conforme indicado na figura 1.4. Nesse escoamento, a velocidade do fluido $\vec{v}$ é proporcional ao gradiente de pressão, e é dada por

$$\vec{v} = -\frac{b^2}{12\mu} \vec{\nabla} p, \quad (1.4)$$

onde p é a pressão e μ é a viscosidade do fluido. Se o fluido é incompressível, ou seja, $\nabla \cdot \vec{v} = 0$,

temos que a pressão p obedece à equação de Laplace

$$\nabla^2 p = 0. \quad (1.5)$$

Suponha a injeção de um segundo fluido na célula de Hele-Shaw, o qual é imiscível e menos viscoso que o primeiro fluido contido na célula. Devido à baixa viscosidade do fluido injetado, a pressão dentro desse fluido pode ser considerada constante. Temos então que a pressão dentro do fluido mais viscoso obedece a equação de Laplace (1.5) e sua velocidade, assim com a velocidade da interface fluido-fluido, é dada pela equação (1.4). O resultado dessa injeção de um fluido menos viscoso na célula é um fenômeno conhecido como instabilidade de Saffman e Taylor, o qual provoca a formação de dedos viscosos. Um exemplo desse padrão de dedos viscosos é mostrada na figura 1.5.

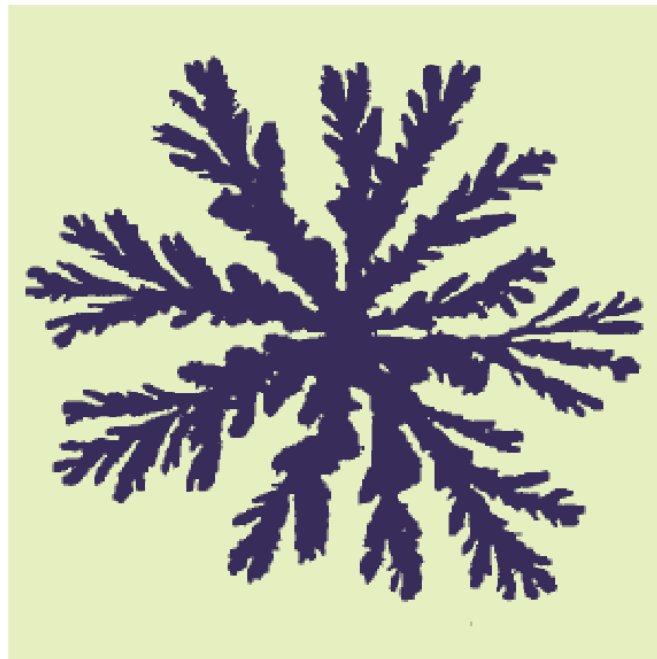


Figura 1.5 Padrão de dedos viscosos numa célula de Hele-Shaw[1].

Podemos notar que o padrão dos dedos viscosos numa célula de Hele-Shaw mostrada na figura 1.5 é muito similar ao padrão obtido na simulação de DLA mostrada na figura 1.3. Isso ocorre porque a descrição matemática desses dois modelos é quase idêntica. Enquanto que para um escoamento viscoso numa célula de Hele-Shaw a pressão p satisfaz a equação de Laplace, e a velocidade da interface é proporcional ao gradiente de pressão, para o modelo de agregação

por difusão limitada temos que a densidade de probabilidade de uma partícula movendo-se aleatoriamente satisfaz a equação de Laplace, e que a superfície do aglomerado tem uma densidade de probabilidade constante. Nesse último caso, a probabilidade de crescimento na superfície do agregado é proporcional ao gradiente da densidade de probabilidade. Isso mostra que o modelo de agregação limitada por difusão é uma versão estocástica do problema de escoamento de Hele-Shaw.

Em cada um dos casos de formação de padrão citados acima, o crescimento das interfaces é muito lento, de modo que podemos usar a equação de Laplace ao invés da equação de difusão. Isso sugere que a equação de Laplace pode ser útil na descrição de processos em que o transporte difusivo controla o crescimento de uma estrutura.

Embora o uso do formalismo de representações conformes seja natural no estudo do problema de escoamento viscoso de Hele-Shaw, Hastings e Levitov [5] propuseram uma nova formulação matemática para o estudo de agregação limitada por difusão, em que o crescimento do agregado de partículas pode ser visto como um problema de iteração de mapas conformes. Esta formulação despertou novamente o interesse nesse tipo de problema devido ao uso de poderosas ferramentas da teoria das funções analíticas. Essa formulação é similar ao processo de evolução estocástica de Loewner mencionado anteriormente.

Nesta tese apresentaremos dois trabalhos referentes aos seguintes temas: Simulações Monte Carlo para o modelo de laços $O(n)$ numa rede quadrada e solução geral para um fileira infinita de bolhas numa célula de Hele-Shaw. Embora esses dois problemas sejam distintos, existe contudo uma teoria matemática - invariância conforme -, que de certo modo permeia e conecta os dois temas.

Nas próximas seções apresentaremos um pouco do histórico desses dois temas. Iniciaremos pelo problema do modelo de laços $O(n)$.

1.3 Uma revisão sobre modelo de laços $O(n)$

O modelo $O(n)$ de spins em sua representação para altas temperaturas encontra diversas aplicações em física estatística e teorias de campos. Nessa representação, não mais visualizamos spins posicionados em sítios sobre uma rede, mas apenas ligações entre sítios próximos for-

mando vários polígonos, os quais denominamos de laços. A estatística desse modelo é obtida em função das propriedades geométricas das configurações de laços. Por exemplo, para laços oriundos de uma rede hexagonal a função de partição do modelo depende apenas dos número total e comprimento dos laços. É interessante mencionar que, em particular, para o modelo de Ising (ou modelo $O(1)$) na rede 2D quadrada, esses laços representam as fronteiras dos aglomerados de spins de mesma orientação em relação a uma rede quadrada “dual” devido à famosa dualidade de Kramers-Wannier[6].

Além do modelo de Ising, podemos mencionar outros modelos importantes em física que são casos particulares do modelo $O(n)$. O modelo $O(2)$ (também conhecido como modelo XY) em 2D é particularmente interessante devido à presença de uma peculiar transição de fase conhecida como transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless, a qual é observada experimentalmente em cristais líquidos e filmes finos de hélio líquido [7]. Podemos também citar o modelo para $O(3)$, ou modelo de Heisenberg, o qual é utilizado no estudo de ferromagnetos quânticos.

Apesar de n representar o número de componentes dos spins, e portanto ser um número inteiro, é possível considerar uma continuação analiticamente para n real no intervalo $-2 \leq n \leq 2$, o que é facilitado pela representação para altas temperaturas do modelo $O(n)$. Soluções exatas na criticalidade são conhecidas para redes hexagonais [8]. Assim, o modelo descrevendo o comportamento estatístico de longas cadeias de polímeros (estudado por de Gennes [9]) corresponde ao caso limite em que $n \rightarrow 0$. Nesse caso, a estatística do problema não está relacionada com laços mas a cadeias abertas representadas por *self avoiding walks* (SAWs). Como exemplo de modelo para n negativo podemos citar o modelo gaussiano, o qual corresponde a $n = -2$.

As estruturas fractais representadas pelos laços do modelo $O(n)$ foram estudadas utilizando uma abordagem de teoria de percolação[10]. Tal abordagem permitiu obter os expoentes críticos térmicos e magnéticos do modelo $O(1)$ com ótima precisão utilizando simulação Monte Carlo. Nesse trabalho os autores utilizaram um algoritmo especial baseado em *updates* locais que é bastante eficiente mesmo para simulações na criticalidade[11].

Até recentemente, o estudo desse modelo de laços foi quase que exclusivamente feito em redes hexagonais para evitar a presença de cruzamentos entre os laços. Esta consideração simplifica muito a análise desse problema e assim justifica a quantidade exorbitante de trabalhos realizados em redes hexagonais. Embora a presença de cruzamentos em modelos de laços para

redes quadradas seja vista como um fator complicante, alguns trabalhos para n não-inteiro têm sido executados em redes quadradas levando em consideração apenas alguns tipos de cruzamentos [12, 13]. O problema de cruzamentos foi resolvido formalmente por Chayes e outros [14]. Nesse trabalho, os cruzamento que surgem na rede podem ser associados a “instruções de rota” necessárias para identificar unicamente esses laços. Tal abordagem será muito importante nessa tese e será discutida mais adiante.

1.4 Uma revisão sobre o problema de bolhas em células de Hele-Shaw

O estudo de formação de interfaces em células de Hele-Shaw chama a atenção de pesquisadores desde os trabalhos pioneiros de Saffman e Taylor [15, 16]. Recentemente, mostrou-se que esse o problema tem conexões mais profundas com outros ramos da física matemática como, por exemplo, teoria de cordas[17]. Do ponto de vista teórico, apesar de ser um problema de dinâmica não linear, o problema de propagação de interfaces em células de Hele-Shaw é particularmente tratável quando desprezamos a tensão superficial entre os fluidos, de maneira que muitas soluções exatas para escoamentos estacionários ou dependentes do tempo foram desenvolvidas. Algumas dessas soluções foram obtidas considerando-se o domínio do escoamento simplesmente conexo, de modo que muitas soluções simétricas para interfaces de bolhas e dedos viscosos foram obtidas. Entre as soluções estacionárias podemos citar as soluções descrevendo uma fileira periódica de bolhas [18], dedos não-simétricos em uma célula inclinada em relação ao eixo longitudinal da mesma [19], soluções periódicas para múltiplas bolhas por célula unitária [20, 21], soluções para múltiplos dedos viscosos [22, 23] e para dedos com um número arbitrário de bolhas em seus topos [24], e soluções mais gerais para um número arbitrário de bolhas na célula [25].

A obtenção de soluções para interfaces assimétricas num escoamento de Hele-Shaw é bastante desafiadora e poucas soluções são conhecidas[26, 27, 28]. Nesses casos o domínio do escoamento viscoso é multiplamente conexo.

Quanto às solução dependente do tempo podemos iniciar citando o trabalho de Saffman [16] em 1959. Outras soluções dependentes do tempo foram obtidas para escoamentos em célula de Hele-Shaw infinita na presença de obstáculos[29, 30, 31], assim como também foram

estudadas numericamente [32].

Para problemas com tensão superficial não-nula torna-se mais difícil obter soluções exatas para o problema. Há uma solução não-trivial devida a Vasconcelos e Kadanoff [33]. Devido a esta dificuldade, os efeitos de pequenas quantidades de tensão superficial têm sido intensamente estudados em conexão com o chamado problema de seleção, o qual refere-se ao fato de que soluções exatas quando tomamos a tensão superficial nula são degeneradas no sentido de que parâmetros físicos da solução não determinam a velocidade da interface. Este problema foi primeiramente notado por Saffman e Taylor [15] em 1958, onde eles perceberam que dedos viscosos com largura relativa igual a 0.5 são obtidos para tensão superficial zero. No entanto, este problema já é entendido teoricamente [34, 35, 36].

Esta tese está organizada como segue. No capítulo 2 apresentamos a formulação do modelo de laços $O(n)$ para uma rede quadrada, e discutimos a implementação do algoritmo WORM utilizado nas simulações Monte Carlo. No capítulo 3 apresentamos os resultados obtidos para os expoentes críticos do modelo $O(n)$ a partir de nossas simulações Monte Carlo na rede quadrada para n no intervalo $0 < n \leq 2$. No capítulo 4 formulamos o problema de uma fileira periódica de bolhas assimétricas numa célula de Hele-Shaw e discutimos nossos resultados. Finalmente, no capítulo 5 apresentamos nossas conclusões.

Modelo $O(n)$ e sua representação em laços

Em física estatística, a função de partição de um sistema com partículas interagentes pode ser expandida em diagramas a partir do conhecido método de expansões em clusters (ou expansão em altas temperaturas). No caso de sistemas magnéticos, em que os spins dos átomos estão fixos sobre os vértices de uma rede, esses diagramas (grafos) são formados por arestas ligando sítios dessa rede e formando estruturas poligonais chamadas de laços. No contexto de modelo de laços, a função de partição dependerá dos número e comprimento total dos laços, e da quantidade de (auto)interseções entre eles. Observáveis físicos são agora obtidos não pela amostragem do ensemble de configurações de spins do sistema, mas pela amostragem de um ensemble grand canônico desses laços. Nesse cenário, os laços podem ser vistos como aglomerados (clusters) formados por ligações, o que torna possível estudar o comportamento crítico desse sistema a partir de conceitos de teoria da percolação.

Nesse capítulo começamos introduzindo o conceito de modelo de laços para o modelo $O(n)$ de spins para o caso de uma rede quadrada e no final introduziremos o conceito do algoritmo WORM, o qual será utilizado na simulação Monte Carlo desse modelo.

2.1 Representação em laços para o modelo $O(n)$ de spins

O modelo $O(n)$, usado no estudo do comportamento de sistemas magnéticos, foi primeiro resolvido por Stanley [37], que mostrou que certas propriedades críticas dependem de forma suave e monótona de n . Esse modelo é um caso geral dos modelos de Ising ($n = 1$), XY ($n = 2$) e de Heisenberg ($n = 3$). Ele descreve N spins unitários $\vec{S} = (S^1, S^2, \dots, S^n)$ de n componentes, distribuídos sobre os vértices de uma rede d -dimensional. A hamiltoniana desse modelo é dada por

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i, j \rangle} J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.1)$$

onde J é o acoplamento entre spins e o produto escalar é limitado a todos os pares de primeiros vizinhos. A função de partição para esse modelo é dada por

$$Z = \text{Tr} \prod_{\langle i,j \rangle} \exp(-\beta J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j), \quad (2.2)$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$ é o inverso da temperatura e o traço Tr representa a soma (integral) sobre todas as possíveis configurações de spins.

2.1.1 Modelo de laços: Uma expansão em séries para altas temperaturas

No limite de altas temperaturas, o modelo (2.2) pode ser aproximado por um modelo com a seguinte função de partição

$$Z_{\square} = \text{Tr} \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + K \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j), \quad (2.3)$$

onde o termo $1 + K \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ representa um truncamento do fator de Boltzmann e K é um parâmetro que depende da temperatura. Os spins $\vec{S}$ estão distribuídos sobre os vértices de uma rede quadrada com condições de contorno periódicas, de modo que cada spin interage com os 4 spins vizinhos mais próximos. Um dos motivos para trabalharmos com esse modelo truncado é devido ao fato de ele simplificar a representação dos diagramas que serão usados mais adiante. Apesar de o modelo (2.3) representar uma hamiltoniana do tipo $\sum_{\langle i,j \rangle} \log(1 + K \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)$, espera-se que essa representação ainda pertença à mesma classe de universalidade do modelo $O(n)$. Note que o parâmetro K deve satisfazer a condição $|K| \leq 1$ para que o peso de uma configuração de spins seja positivo. Nessa tese vamos nos restringir apenas ao caso de acoplamentos ferromagnéticos ($K \geq 0$).

Na sua forma integral, $Z_{\square}$ fica

$$Z_{\square} = \int \prod_{i=1}^N \frac{d\Omega_{ni}}{\Omega_n} \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + K \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j), \quad (2.4)$$

onde $\Omega_n = 2\pi^{n/2} [\Gamma(n/2)]^{-1}$ denota o ângulo sólido n -dimensional.

A série em altas temperaturas de (2.4) é obtida expandindo $Z_\square$ em potências de K , ou seja,

$$Z_\square = \frac{1}{[\Omega_n]^N} \int \prod_{i=1}^N d\Omega_{ni} \left(1 + K \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + K^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle k,l \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \vec{S}_k \cdot \vec{S}_l + \dots \right). \quad (2.5)$$

Além disso, cada termo dos somatórios acima pode ser expandido em termos que explicitam as componentes dos spins,

$$Z_\square = \frac{1}{[\Omega_n]^N} \int \prod_{i=1}^N d\Omega_{ni} \left(1 + K \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} + K^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle k,l \rangle} \sum_{\alpha, \beta} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} S_k^{\beta} S_l^{\beta} + \dots \right). \quad (2.6)$$

onde fizemos $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \sum_{\gamma=1}^n S_i^{\gamma} S_j^{\gamma}$.

Os vários termos da expansão em (2.6) podem ser representados de uma maneira conveniente como segue: cada termo $K S_i^{\gamma} S_j^{\gamma}$ pode ser representado por uma aresta de “cor” γ (ou seja, cada componente de spin tem uma cor associada a ela) ligando o sítio i ao sítio j , como mostra a figura 2.1. Assim, as contribuições dos termos de ordem K em (2.6) são representadas por diagramas contendo uma simples aresta entre dois sítios vizinhos quaisquer. Similarmente, as contribuições dos termos de ordem K^2 são representadas por diagramas contendo duas arestas entre pares distintos de vizinhos e, de modo geral, as contribuições dos termos de ordem K^b são representadas por diagramas contendo b arestas.

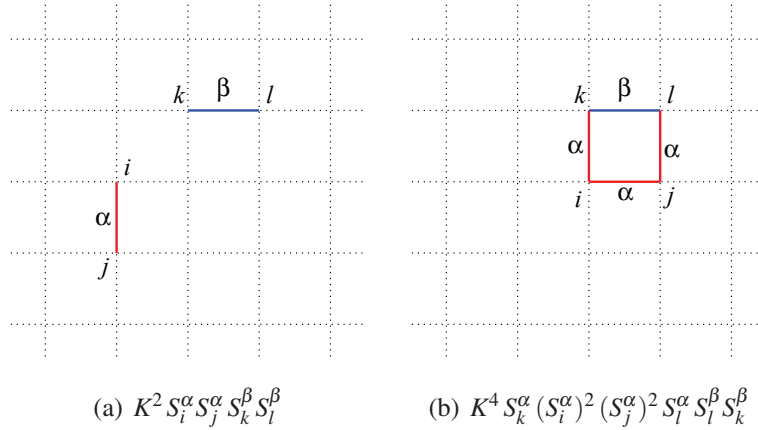


Figura 2.1 Diagramas típicos representando termos em (2.6). Os termos correspondentes são dados nas legendas das figuras.

A vantagem de se usar o modelo truncado (2.3) é que nele pares de sítios são conectados por apenas uma aresta, enquanto que se usássemos o modelo convencional (2.2), com o fator

de Boltzmann expandido em séries de Taylor, obteríamos diagramas mais complicados, em que sítios poderiam ser conectados por várias arestas coloridas. Por estar associado à quantidade de arestas de cada diagrama, o parâmetro K será referido aqui como a “fugacidade de arestas”.

Distribuindo o sinal de integração aos termos da expansão em (2.6), obtemos que cada termo de $Z_{\square}$ é composto por N integrais do tipo

$$v_{\{t_1, t_2, \dots, t_n\}} = \frac{1}{\Omega_n} \int d\Omega_n (S^1)^{t_1} (S^2)^{t_2} \dots (S^n)^{t_n}, \quad (2.7)$$

onde cada $v_{\{t_1, t_2, \dots, t_n\}}$ representa um peso associado ao tipo de vértice (configuração de arestas) que ocorre num dado sítio da rede. Aqui, S^{α} ($\alpha = 1, 2, \dots, n$) são as componentes do spin do sítio e os expoentes t_{α} representam a quantidade de arestas de cor α ligadas a esse sítio e, portanto, descrevem o vértice formado ali.

A quantidade de diagramas pode ser agora reduzida se observarmos que a integral (2.7) se anula quando pelo menos um dos t_{α} é ímpar, ou seja, diagramas contendo algum (ou vários) sítio com um número ímpar de arestas de mesma cor não contribuem para a função de partição $Z_{\square}$. Assim, após eliminarmos esses diagramas, sobram apenas aqueles que são compostos por polígonos coloridos. Exemplos de diagramas que contribuem para a função de partição são mostrados na figura 2.2. Já a figura 2.1 exemplifica diagramas que devem ser descartados. Em particular, note que a figura 2.1(b) não contém um polígono, e sim duas linhas poligonais, uma formada por 3 arestas de cor α e outra formada por uma aresta de cor β .

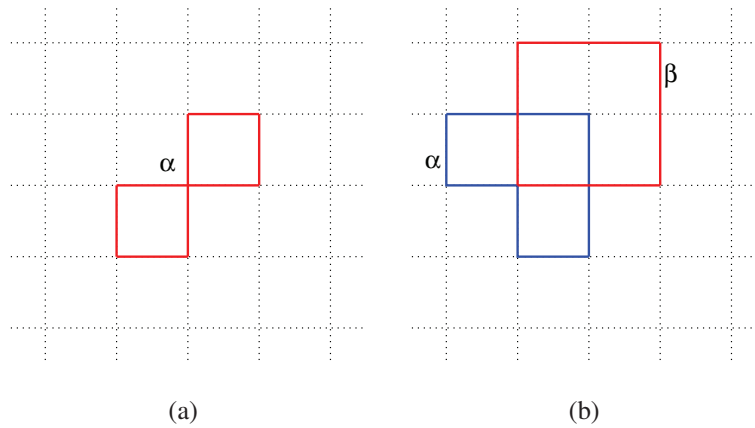


Figura 2.2 Exemplos de diagramas de contribuição não-nula. Os diagramas são formados por polígonos coloridos.

Para os diagramas que contribuem para $Z_{\square}$, o valor da integral (2.7) dependerá apenas dos

tipos de vértices que podem ocorrer em cada sítio. Para uma rede quadrada, esses diagramas são formados pelos seguintes tipos de vértices não-vazios: vértices com 2 arestas de mesma cor, cujos pesos representaremos por v_2 ; vértices com 2 pares de arestas de cores diferentes, cujos pesos são v_{22} , e vértices com 4 arestas de mesma cor, cujos pesos são v_4 . Pode-se mostrar que [14] os pesos v_2 , v_{22} e v_4 , obtidos através da equação (2.7), são:

$$v_2 = \frac{1}{n} \quad v_{22} = \frac{1}{n(n+2)} \quad v_4 = \frac{3}{n(n+2)}. \quad (2.8)$$

Além disso, vértices vazios, ou seja, que não possuem arestas, têm peso igual a 1.

A função de partição pode ser então escrita como

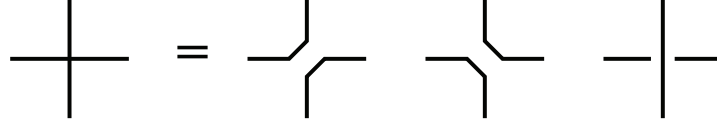
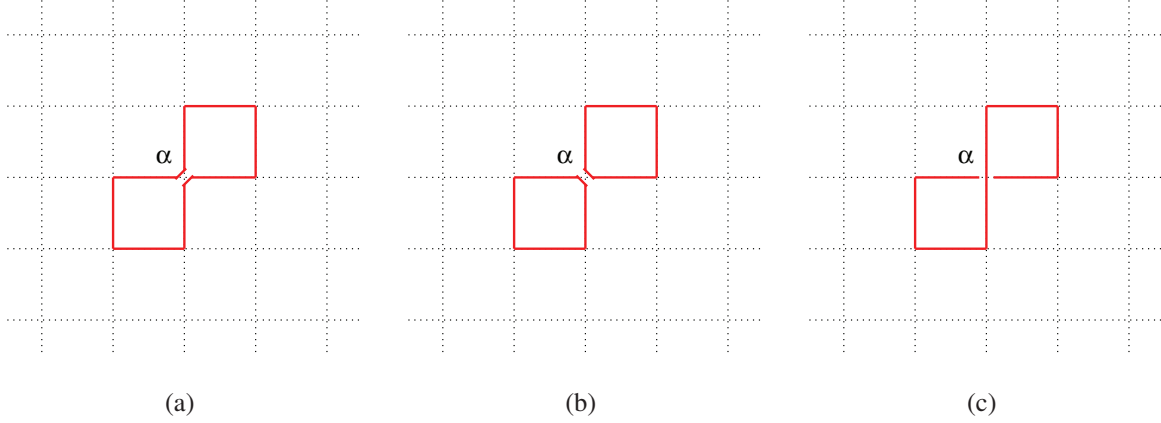
$$Z_{\square} = \sum_{\{\mathcal{G}\}} K^b \left(\frac{1}{n} \right)^{m_2} \left(\frac{1}{n(n+2)} \right)^{m_{22}} \left(\frac{3}{n(n+2)} \right)^{m_4}, \quad (2.9)$$

onde $\{\mathcal{G}\}$ representa o conjunto de diagramas formados por polígonos, e os expoentes m_2 , m_{22} e m_4 são, respectivamente, a quantidade de vértices dos tipos v_2 , v_{22} e v_4 de um dado diagrama de $\{\mathcal{G}\}$.

A representação em laços do modelo (2.3) é obtida quando cada polígono de um diagrama pode ser visto como um circuito com uma única trajetória. Polígonos assim descritos são denominados laços. Por exemplo, na figura 2.2(b), ambos os polígonos de cores α e β representam laços, pois eles descrevem circuitos com uma única rota. Por outro lado, na figura 2.2(a) vemos que o polígono pode ser percorrido de várias maneiras devido à presença de um vértice do tipo v_4 , o qual, diferentemente de tipo v_{22} , não possui “instruções de rota”.

O problema relacionado com o vértice de tipo v_4 foi resolvido por Chayes e outros [14], e é descrito a seguir. O fator 3 que relaciona v_{22} a v_4 em (2.8) tem a seguinte interpretação: cada vértice de tipo v_4 pode ser visto como uma composição de 3 tipos de cruzamentos formados por dois pares de ligações da mesma cor (ver figura 2.3), onde cada um tem peso $\frac{1}{n(n+2)}$. Assim, cada diagrama contendo m_4 vértices do tipo v_4 pode ser decomposto em 3^{m_4} diagramas distintos onde cada vértice desse tipo possui agora uma “instrução de rota” bem definida. Como exemplo, o diagrama da figura 2.2(a) pode ser decomposto em 3 configurações de laços distintas, como mostra a figura 2.4.

Uma vez que todo vértice contendo dois pares de aresta e “instruções de rota” bem definidas

**Figura 2.3** Decomposição de vértices do tipo v_4 .**Figura 2.4** Decomposição do diagrama da figura 2.2(a) em 3 configurações distintas de laços.

tem peso $1/(n(n+2))$, vamos nos referir a eles apenas como cruzamentos. Assim, se m_4 é o número de cruzamentos de um dado diagrama, podemos reescrever (2.9) apenas como

$$Z_{\square} = \sum_{\{\mathcal{G}\}} K^b \left(\frac{1}{n} \right)^{m_2} \left(\frac{1}{n(n+2)} \right)^{m_4}, \quad (2.10)$$

Para uma rede quadrada (com condições de contorno periódicas), podemos usar o fato de que $b = m_2 + 2m_4$ para rescrever (2.10) como

$$Z_{\square} = \sum_{\{\mathcal{G}\}} \left(\frac{K}{n} \right)^b \left(\frac{n}{n+2} \right)^{m_4}. \quad (2.11)$$

onde a fugacidade de arestas K aparece somente em forma reescalada $K' \equiv K/n$. Apesar de no início da seção termos feito a restrição $K \leq 1$, nenhuma restrição é requerida na representação (2.11) e K pode ser continuada analiticamente para $K > 1$.

Podemos ainda simplificar nosso modelo atentando para o fato de que uma configuração de laços é unicamente definida pelos laços que a formam. Portanto, mudar a cor de um laço não

muda o peso dessa configuração. Logo, temos que

$$Z_{\square} = \sum_{\{\mathcal{G}\}} \left(\frac{K}{n}\right)^b \left(\frac{n}{n+2}\right)^{m_4} n^l, \quad (2.12)$$

onde n^l é o fator de degenerescência de uma configuração contendo l laços. Portanto, podemos representar configurações de laços que diferem apenas pelas cores dos laços por uma única configuração “sem cor”, cujo peso é a soma dos pesos dessas n^l configurações coloridas. Como mencionado anteriormente, o peso associado a cada diagrama de $Z_{\square}$ depende dos números de arestas b , cruzamentos m_4 e laços l .

Na próxima seção, apresentaremos um eficiente algoritmo que será utilizado em nossas simulações do modelo de laços apresentado acima.

2.2 Algoritmo WORM para modelo $O(n)$

O algoritmo WORM, introduzido por Prokof'ev e Svistunov [11], utiliza a ideia de gerar configurações de trajetórias fechadas (produzidas por expansão em séries para altas temperaturas) através do movimento das extremidades de uma cadeia aberta, à qual nos referiremos como “verme”. Uma das vantagens desse método é que apesar dos *updates* dos estados do sistema serem feitos localmente, ainda assim ele é tão eficiente quanto algoritmos que realizam *updates* globais, não sofrendo com o problema do *critical slowing down*, segundo o qual nas proximidades do ponto crítico, o tempo que devemos esperar para obter amostras descorrelacionadas torna-se demasiadamente grande.

No contexto do nosso problema, é possível introduzir o algoritmo WORM via função de correlação spin-spin $G(\mathbf{i}_1 - \mathbf{i}_2)$, a qual é definida como

$$G(\mathbf{i}_1 - \mathbf{i}_2) = \langle \vec{S}_{i_1} \cdot \vec{S}_{i_2} \rangle = \frac{Z_{i_1, i_2}}{Z_{\square}}, \quad (2.13)$$

onde $Z_{\square}$ é dada pela equação (2.3) e a função de correlação (não-normalizada) Z_{i_1, i_2} é definida como

$$\text{Tr} \left(\vec{S}_{i_1} \cdot \vec{S}_{i_2} \right) \prod_{\langle i, j \rangle} (1 + K \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j). \quad (2.14)$$

Aqui, $\vec{S}_{i_1}$ e $\vec{S}_{i_2}$ são spins unitários de n componentes localizados, respectivamente, nos sítios i_1 e i_2 da rede.

Seguindo um procedimento similar ao usado na seção anterior para obter (2.12), encontramos que Z_{i_1, i_2} pode ser expressa como

$$Z_{i_1, i_2} = \sum_{\{\mathcal{Z}\}} K^b \left(\frac{1}{n} \right)^{m_1+m_2} \left(\frac{1}{n(n+2)} \right)^{m_3+m_4} n^{l+o}, \quad (2.15)$$

onde $\{\mathcal{Z}\}$ representa todos os diagramas contendo laços e uma cadeia aberta (verme) que conecta o sítio i_1 ao sítio i_2 (ver figura 2.5). Assim como no capítulo anterior, K é a fugacidade de arestas, b é o número de arestas, m_i ($i=1,2,3,4$) é a quantidade de vértices formados por i arestas e l é o número de laços. A variável o é usada aqui apenas para indicar a presença ($o=1$) ou não ($o=0$) do verme. Assim como a variável o , m_1 e m_3 aparecem em (2.15) devido à presença do verme. Em geral, cada sítio da rede é povoado por um número par de arestas, exceto os sítios contendo as extremidades do verme.

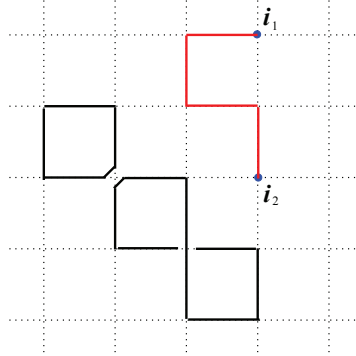


Figura 2.5 Configuração contendo laços e o verme.

Diferentemente da expansão diagramática para $Z_{\square}$, onde os diagramas que contêm uma cadeia aberta são descartados por não contribuírem com a função de partição, os diagramas da expansão de Z_{i_1, i_2} contendo o verme não são descartados devido à presença do fator $\vec{S}_{i_1} \cdot \vec{S}_{i_2}$ em (2.14), o qual funciona como uma “aresta virtual” que liga o sítio i_1 ao sítio i_2 e “fecha” o verme. Isso ajudar a explicar por que em (2.15) as arestas dos tipos m_1 e m_3 têm, respectivamente, pesos $1/n$ e $1/(n(n+2))$, os quais são, respectivamente, os pesos associados às arestas dos tipos m_2 e m_4 .

Quando $i_1 = i_2$ (ou seja, não há verme) temos que, na equação (2.14), $\vec{S}_{i_1} \cdot \vec{S}_{i_1} = 1$ e, portanto,

Z_{i_1, i_1} coincide com $Z_{\square}$, já que na ausência do verme $\{\mathcal{Z}\}$ equivale a $\{\mathcal{G}\}$. Essa consideração nos dá um interessante esquema para simulação Monte Carlo, uma vez que podemos obter a estatística tanto para Z_{i_1, i_2} quanto para $Z_{\square}$ durante o mesmo processo Monte Carlo.

Para uso posterior, mencionamos aqui que o peso estatístico de cada configuração de $\{\mathcal{Z}\}$, dado em (2.15), pode ser escrito como

$$K^b Q(k_1) Q(k_2) \dots Q(k_N) n^l, \quad (2.16)$$

onde os fatores $Q(k_i)$ são pesos associados a um sítio i e k_i é o número de arestas conectadas àquele sítio. Um sítio pode ter os seguintes pesos:

$$Q(k_i) = \begin{cases} 1, & k_i = 0 \\ 1/n, & k_i = 2 \\ 1/n(n+2), & k_i = 4 \end{cases}. \quad (2.17)$$

Além disso, vamos usar a seguinte convenção: se $i_1 \neq i_2$, o número de arestas nos sítios i_1 e i_2 é dado, respectivamente, por $k_{i_1} + 1$ e $k_{i_2} + 1$, onde podemos interpretar a unidade a mais como sendo devido à presença da “aresta virtual” mencionada acima.

Para implementar o algoritmo WORM, devemos conhecer os números totais de arestas b , de cruzamentos m_4 e de laços l a cada passo do verme, pois as probabilidades de transição de uma configuração para outra dependerão delas. Na próxima seção, apresentaremos um algoritmo que usa a ideia de gerar configurações de laços pelo movimento da extremidade de um verme e que atualiza, a cada passo da extremidade, as quantidades b , m_4 e l e as respectivas possibilidades de aceitação de cada movimento da extremidade (a qual vamos nos referir também como a “cabeça o verme”).

2.3 Descrição do algoritmo

Considere uma rede quadrada de lado L , contendo $L \times L$ sítios dispostos sobre seus vértices e sujeita à condições de contorno periódicas. Estamos interessados em povoar essa rede com laços (cadeias fechadas) e para isso vamos usar o artifício descrito a seguir. Considere um

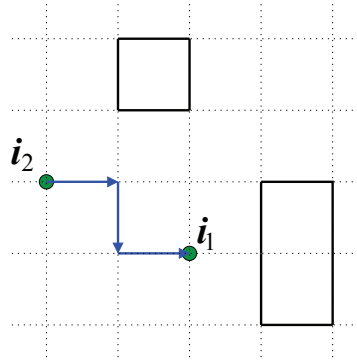


Figura 2.6 Verme e laços

verme (cadeia aberta) formado por uma sequência de arestas (as quais serão representadas por setas) que ligam sítios vizinhos (figura 2.6). O verme tem a função de acrescentar ou apagar ligações entre os sítios da rede, o que é feito através do movimento de uma de suas extremidades, a saber, i_1 , enquanto a outra extremidade, i_2 , permanece fixa. Por simplicidade, vamos nos referir à extremidade i_1 como a “cabeça” do verme e à extremidade i_2 como a “cauda” do verme. Quando a cabeça do verme se move de um sítio i para um sítio vizinho j , ele acrescenta ali uma seta, caso não haja nenhuma ligação entre i e j (figura 2.7). Essa seta é incorporada à sequência de setas que forma o verme. No entanto, quando a cabeça do verme se move de um sítio para outro e esses sítios já estão conectados por uma ligação, o verme apaga essa ligação existente, como mostra a figura 2.8. A sequência de setas que forma o verme é orientada de maneira que se possa ir da cauda do verme até sua cabeça, ou seja, de i_2 até i_1 . Apesar de a cabeça do verme dar um passo de cada vez, se movimentando de forma “suave”, o tamanho do verme pode mudar abruptamente quando ele abre um laço e o conecta a si mesmo, ou quando desconecta de si uma cadeia fechada que se tornará um novo laço.

Laços surgem sobre a rede por diversos processos. Por exemplo, quando a cabeça do verme encontra a sua cauda, o verme se fecha sobre si mesmo e forma um laço. Outro caso é quando a cabeça apaga uma seta do próprio verme, podendo acontecer de um pedaço da cadeia se desconectar do verme e formar um laço. Esse último processo é chamado de *Backbiting*. Além disso, ainda é possível formar um laço quando a cabeça do verme se move para um sítio $j \neq i_2$, adicionando uma seta, e toca o próprio verme. Nesse caso, devemos sortear uma das possíveis instruções de rota descritas na seção anterior antes de testarmos a probabilidade de aceitação da nova configuração. Esses processos mencionados acima serão discutidos com mais detalhes

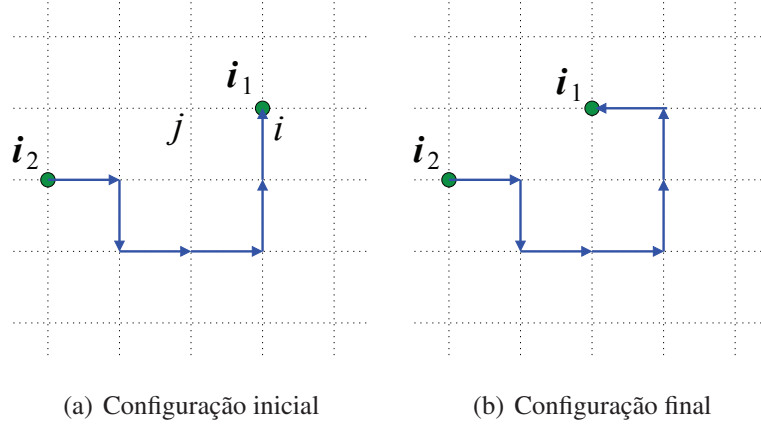


Figura 2.7 Processo em que o verme cresce ao acrescentar uma ligação (seta) entre os sítios i e j .

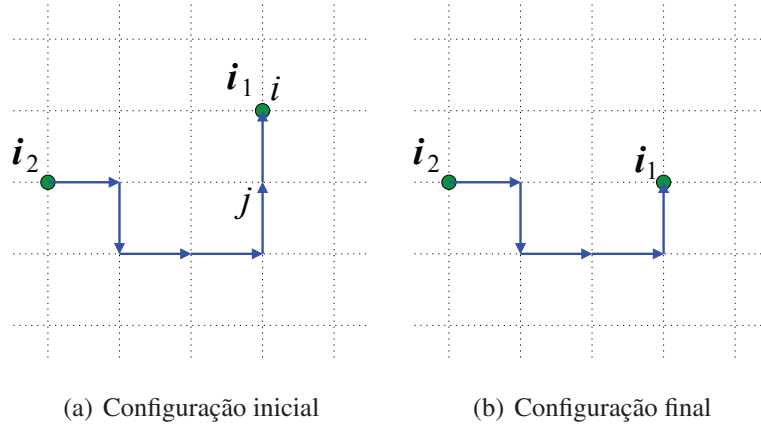


Figura 2.8 Processo em que o verme apaga a última ligação (seta) dele.

nas próximas seções.

Denotemos por $P(i \rightarrow j; b \rightarrow b + 1)$ a probabilidade de movermos a cabeça do verme do sítio i para o sítio j acrescentando uma ligação à configuração, e por $P(i \rightarrow j; b \rightarrow b - 1)$ a probabilidade de movermos a cabeça do verme de i para j apagando uma ligação. As probabilidades $P(i \rightarrow j; b \rightarrow b + 1)$ e $P(i \rightarrow j; b \rightarrow b - 1)$ dependem do tipo de *update* que será realizado, e as expressões para cada um dos possíveis casos serão apresentados mais adiante.

O algoritmo utilizado em nossas simulações será descrito como segue:

1. Escolha aleatoriamente um sítio i da rede e faça $i_1 = i_2 = i$;
2. Se $i_1 = i_2$, proponha deslocar as extremidades do verme para um sítio qualquer da rede com probabilidade P_0 . Se a proposta for aceita, repita o passo 2. Caso a proposta seja rejeitada, vá para o passo 3;

3. Escolha aleatoriamente um sítio j vizinho do sítio i . Proponha deslocar a extremidade i_1 do verme do sítio i para j com probabilidade $P(i \rightarrow j; b \rightarrow b + 1)$ se i e j não estão ligados por uma aresta, ou com probabilidade $P(i \rightarrow j; b \rightarrow b - 1)$ caso i e j estejam ligados por uma aresta;
4. Se $i_1 \neq i_2$, volte para o passo 3; senão, volte para o passo 2.

Discutiremos agora os possíveis *updates* que ocorrem em nosso algoritmo e apresentaremos suas respectivas probabilidades de aceitação. Primeiramente discutiremos os casos em que, após o *update*, uma aresta é adicionada à rede e depois os casos em que propomos apagar uma aresta.

2.3.1 ADICIONANDO UMA ARESTA

Nesse caso temos três situações genéricas distintas, a saber:

1. Vamos começar discutindo o caso mais simples em que $i = i_1$ e $j = i_2$, ou seja, ao dar um passo e acrescentar uma aresta à rede, o verme se fecha formando um laço, como mostra a figura 2.9. A probabilidade de aceitação desse *update* é dada por

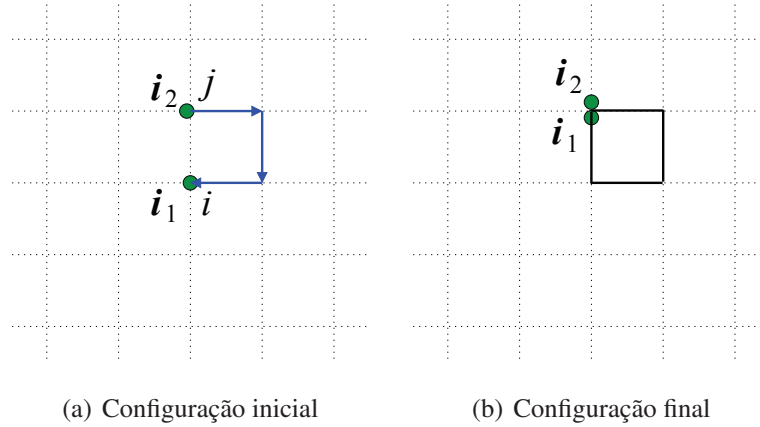


Figura 2.9 Processo em que verme se fecha e forma um novo laço.

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b + 1) = (1 - P_0)K. \quad (2.18)$$

onde o fator K propõe que uma aresta seja acrescentada à configuração final, e o fator $(1 - P_0)$ surge devido ao balanço detalhado (ver Apêndice A).

2. Outro possível *update* é aquele em que $i = i_1 = i_2$, ou seja, não temos nenhum verme na rede, e propomos mover a cabeça do verme (i_1) para um sítio vizinho j , fazendo crescer um novo verme. Devemos considerar alguns casos distintos como segue:

- (a) $k_i = 0$ e $k_j = 0$: nesse caso, não temos nenhum laço passando pelos sítios i e j , como mostra a figura 2.10. Então, a probabilidade de movermos a cabeça do verme de i para j acrescentando uma aresta é dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \frac{K}{(1-P_0)} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n, \quad (2.19)$$

onde a razão $Q(k_i+2)/Q(k_i)$ indica que o número de arestas no sítio i será acrescido de duas unidades (uma unidade é devida à nova aresta e a outra à aresta “virtual”), o fator n indica que uma nova cadeia (nesse caso, o verme) será adicionada à configuração. Novamente, o fator K indica que uma nova aresta será adicionada à configuração.

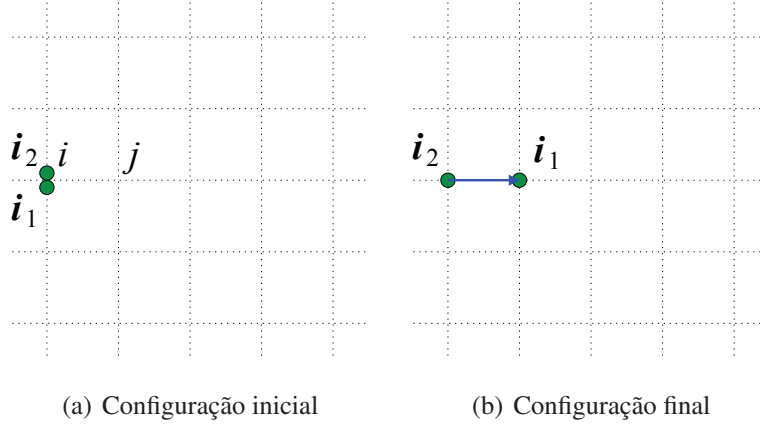


Figura 2.10 Processo em que “nasce” um verme.

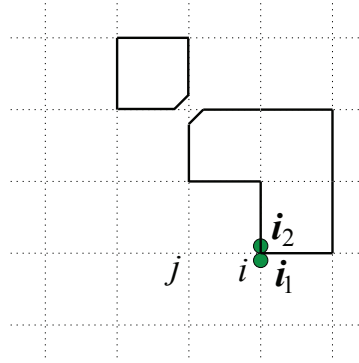
- (b) $k_i = 2$ e $k_j = 0$: esse caso difere do anterior apenas por causa da presença de um laço no sítio i , de modo que o verme “nasce” com a cauda tocando aquele laço. Nesse caso, teremos três possibilidades de configuração final, as quais diferem pela escolha da instrução de rota do sítio i , como mostra a figura 2.11. A probabilidade de aceitação de uma das três configurações finais pode ser expressa como

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \frac{3K}{(1-P_0)} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n^\delta, \quad (2.20)$$

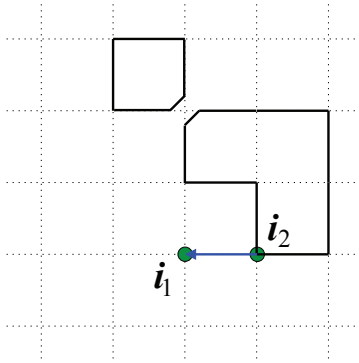
onde o fator 3 é devido ao balanço detalhado, como explicado no Apêndice B, e o expoente δ depende da configuração final e será dado por

$$\delta = \begin{cases} 1, & \text{se a configuração final for a II,} \\ 0, & \text{se a configuração final for a III,} \\ 0, & \text{se a configuração final for a IV.} \end{cases} \quad (2.21)$$

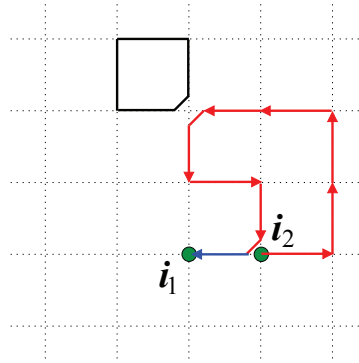
Note que $\delta = 1$ para a configuração II pois uma nova cadeia (o verme) surge na rede, enquanto nas configurações III e IV $\delta = 0$, pois um novo verme surge, mas um laço foi destruído, de forma que o número total de cadeias não variou.



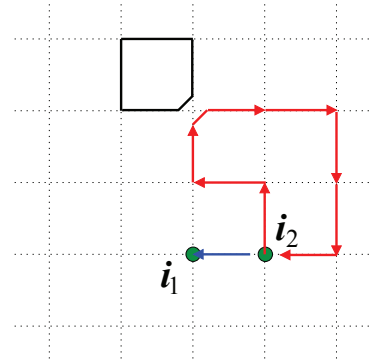
(a) Configuração inicial I



(b) Configuração final II



(c) Configuração final III



(d) Configuração final IV

Figura 2.11 Processo de sorteio de instrução de rota. O verme avança e toca um laço. A cor vermelha das arestas (setas) indica uma mudança na orientação original dessas arestas.

- (c) $k_i = 0$ e $k_j = 2$: nesse caso, temos um laço passando pelo sítio j e quando o verme “nasce” a cabeça dele toca esse laço. O procedimento para esse caso é semelhante

ao procedimento usado no caso anterior, em que o laço passava pelo sítio i . Teremos também 3 configurações finais, as quais diferem pela escolha da instrução de rota no sítio j . A probabilidade de aceitação de qualquer uma das configurações finais será dada pela equação (2.20), onde o valor de δ será 0 ou 1, como explicado no caso anterior.

- (d) $k_i = 2$ e $k_j = 2$: vamos considerar agora o caso em que temos um laço passando pelo sítio i e outro passando pelo sítio j . Quando o verme “nasce”, a cabeça dele toca o laço passando no sítio j e a cauda dele toca o outro laço passando pelo sítio i . Nesse caso, devemos proceder escolhendo tanto uma instrução de rota para o sítio i quanto para o sítio j , de modo que teremos 9 configurações finais distintas. A probabilidade de aceitação de qualquer uma das configurações finais será agora dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \frac{9K}{(1-P_0)} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n^\delta, \quad (2.22)$$

onde o fator 9 é devido ao balanço detalhado. O expoente δ poderá ser 1, 0 ou -1. Por exemplo, δ será igual a -1 na situação em que o verme destrói os dois laços e os incorpora ao corpo dele, pois destruímos 2 cadeias fechadas, ou seja, os laços, e criamos uma cadeia aberta, ou seja, o verme.

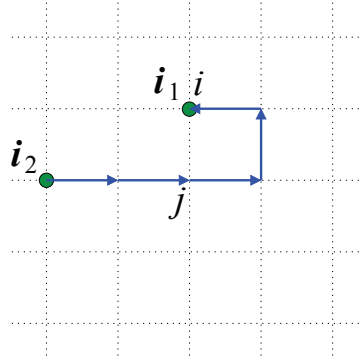
- (e) $k_i = 2$ e $k_j = 2$: por último, vamos considerar o caso em que um único laço passa ao mesmo tempo pelos sítios i e j . Assim como no caso anterior, quando o verme “nasce” a cabeça e a cauda dele tocam esse laço ao mesmo tempo nos sítios j e i , respectivamente. Teremos então que escolher uma instrução de rota para o sítio i e uma para o sítio j , de maneira que teremos 9 configurações finais possíveis. A probabilidade de transição da configuração inicial para uma das 9 configurações finais pode ser dada pela equação (2.22), onde δ poderá ser 0 ou 1 dependendo da configuração final.

3. Agora consideraremos o caso em que $i = i_1 \neq i_2$ e $j \neq i_2$, ou seja, temos um verme cuja a cabeça avança do sítio i para o sítio j , acrescentando uma aresta. Nesse caso, o verme apenas cresce sem se fechar, já que $j \neq i_2$, ou seja, o sítio j não contém a cauda do verme. Devemos analisar aqui os seguintes casos distintos:

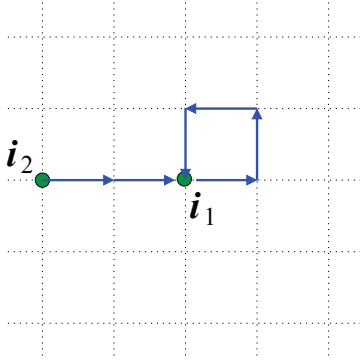
- (a) $k_j = 0$: nesse caso a cabeça do verme avança de i para j sem tocar em nenhuma cadeia, como mostra a figura 2.7. A probabilidade de aceitação da nova configuração será dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = K \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)}. \quad (2.23)$$

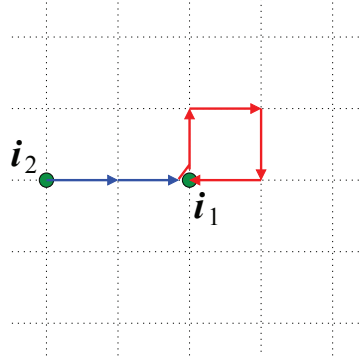
- (b) $k_j = 2$: vamos considerar que nesse caso o verme passa pelo sítio j de modo que quando a cabeça do verme avança do sítio i para o sítio j , ela toca o próprio verme. Nesse caso teremos 3 configurações finais distintas devido às possíveis instruções de rota, como mostra a figura 2.12. A probabilidade de aceitação de qualquer uma



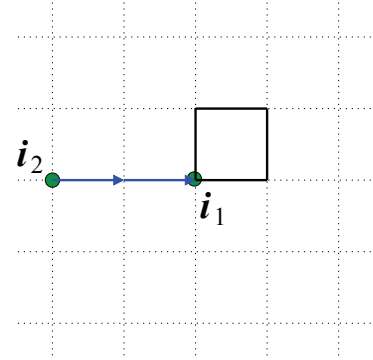
(a) Configuração inicial I



(b) Configuração final II



(c) Configuração final III



(d) Configuração final IV

Figura 2.12 Processo de sorteio de instrução de rota. O verme avança e toca em si mesmo. A cor vermelha das arestas (setas) indica uma mudança na orientação original dessas arestas.

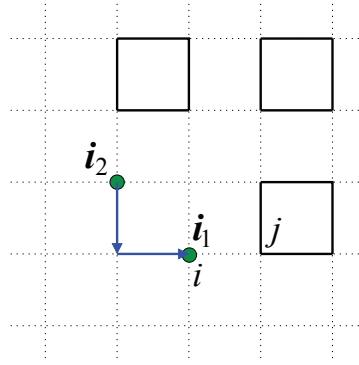
das 3 configurações finais será dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = 3K \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n^\delta. \quad (2.24)$$

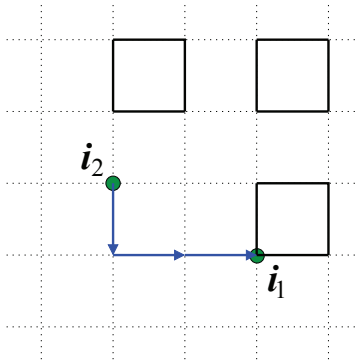
onde temos que δ será dada por

$$\delta = \begin{cases} 0, & \text{se a configuração final for a II,} \\ 0, & \text{se a configuração final for a III,} \\ 1, & \text{se a configuração final for a IV.} \end{cases} \quad (2.25)$$

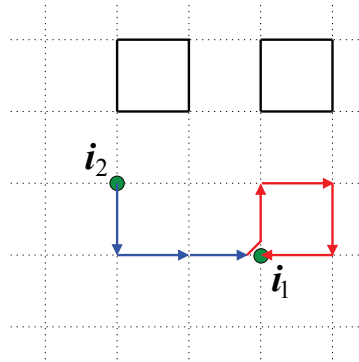
(c) $k_j = 2$: finalmente consideremos o caso em que há um laço passando pelo sítio j (figura 2.13). Então quando a cabeça do verme vai do sítio i para o sítio j , o verme toca o laço. Essa situação assemelha-se ao caso descrito em (2c) onde temos 3 configurações finais diferentes. A probabilidade de aceitação de qualquer uma das configurações finais será dada pela equação (2.24), onde δ pode ser igual a 0 ou -1. O valor de δ será igual a 0 se o verme não destruir o laço, e será igual a -1 se o laço for desfeito e o restante dele incorporado ao corpo do verme.



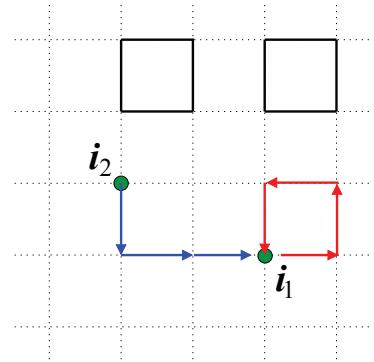
(a) Configuração inicial I



(b) Configuração final II



(c) Configuração final III



(d) Configuração final IV

Figura 2.13 Processo de sorteio de instrução de rota. O verme toca um laço.

2.3.2 APAGANDO UMA ARESTA

Discutiremos agora os casos em que após o *update* o número de arestas é diminuído de uma unidade.

1. Consideremos o caso em que $i = i_1 = i_2$ e movemos a cabeça do verme do sítio i para o sítio j , apagando uma aresta que pertence a um laço, fazendo com que o restante do laço passe a compor o corpo do verme, como mostra a figura 2.14.

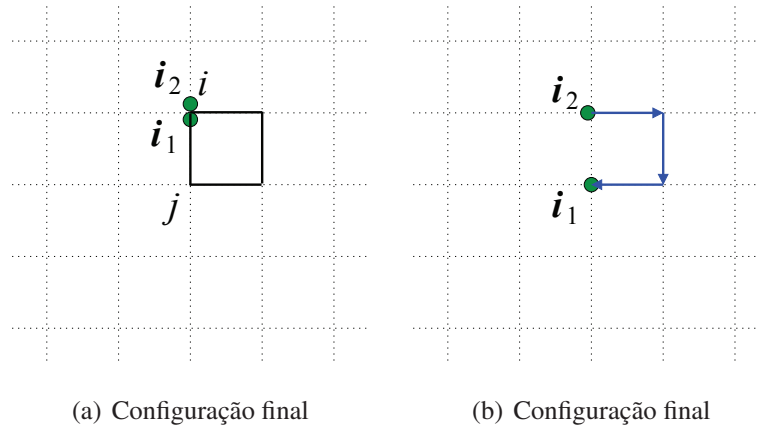


Figura 2.14 O verme “nasce” apagando um laço.

A probabilidade de aceitação para esse caso será dada por:

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b - 1) = \frac{K^{-1}}{(1 - P_0)}. \quad (2.26)$$

Note que o termo $1/K$ que aparece em (2.26) está relacionado com a proposta de apagar uma aresta da configuração e o fator $1/(1 - P_0)$ é devido ao balanço detalhado; vide Apêndice A.

2. Discutiremos agora o caso em que $i = i_1$ e $j = i_2$, e a aresta ligando os sítios i e j será apagada. Podemos considerar os seguintes casos:

- (a) A situação mais simples é aquela em que temos um verme formado por uma única aresta que apaga a si mesmo, como mostra a figura 2.15. A probabilidade de transição da configuração inicial para a configuração final será

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b - 1) = K^{-1} \frac{Q(k_i - 1)}{Q(k_i + 1)} \frac{Q(k_j - 1)}{Q(k_j + 1)} n^{-1}. \quad (2.27)$$

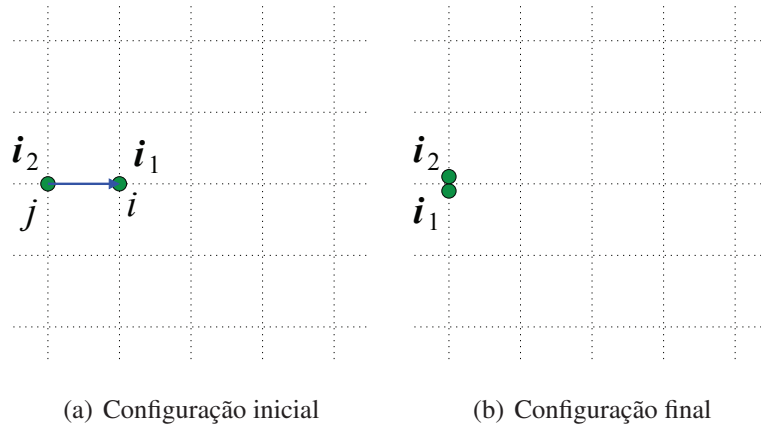


Figura 2.15 Processo em que o verme se apaga completamente.

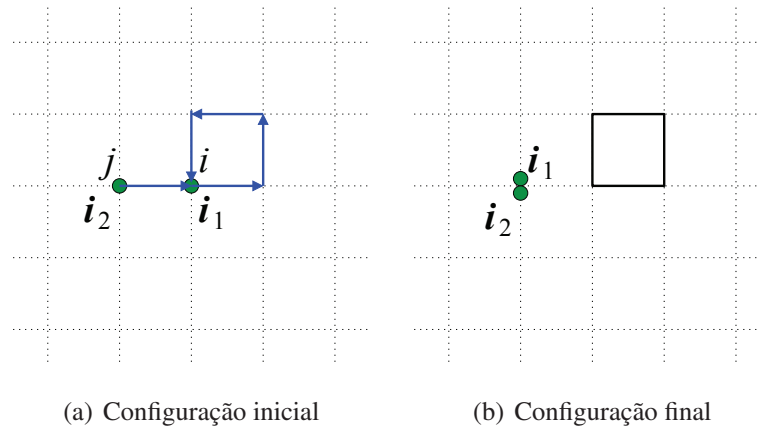


Figura 2.16 Processo em que o verme “morre” e deixa um novo laço.

Caso tenhamos que $k_i = 3$ (ou $k_j = 3$), ou seja, se algum laço passa ou pelo sítio i (ou pelo sítio j), devemos multiplicar a probabilidade dada em (2.27) pelo fator $1/3$, o qual é devido ao balanço detalhado. Caso $k_i = 3$ e $k_j = 3$, ambos os sítios i e j contribuem para a probabilidade de aceitação do *update* com um fator multiplicativo $1/3$, de maneira que um fator $1/9$ deve ser multiplicado a probabilidade (2.27). Nenhum laço que passe por i e/ou por j sofre alteração após o *update*.

- (b) $k_i = 3$: outro caso é aquele em que o verme é formado por mais de uma aresta e a cabeça dele toca o corpo dele. Assim, quando a cabeça do verme se move do sítio i para o sítio j e apaga a primeira seta dele, o verme desaparece (ou seja, $i_1 = i_2$) deixando um novo laço na rede, como mostrado na figura 2.16. A probabilidade de aceitação da nova configuração é dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \frac{K^{-1}}{3} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} \frac{Q(k_j-1)}{Q(k_j+1)}. \quad (2.28)$$

Se houver um laço passando pelo sítio j , ou seja, $k_j = 3$, devemos acrescentar mais um fator $1/3$ à probabilidade (2.28).

- (c) Considere agora a situação em que tanto a cabeça quanto a cauda do verme tocam o próprio verme, respectivamente, nos sítios i e j (ou seja, temos que $k_i = 3$ e $k_j = 3$). Quando a cabeça do verme avança de i para j , ela apaga um seta dele e o verme desaparece deixando dois novos laços, como mostra a figura 2.17. Temos que a probabilidade de transição será dada por

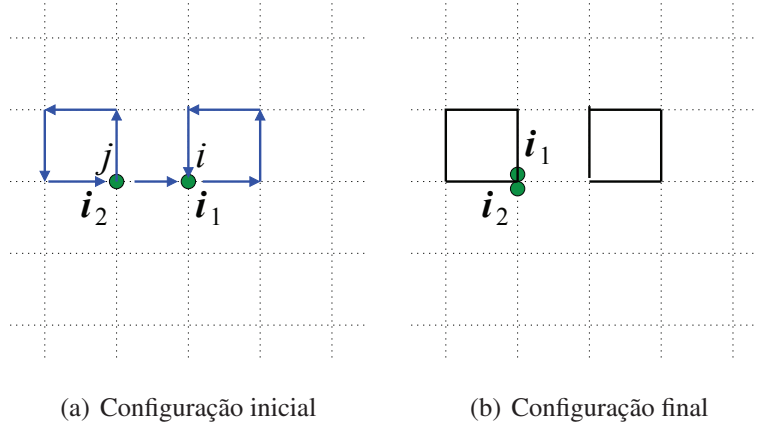


Figura 2.17 Processo em que o verme “morre” e deixa dois novos laços.

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = K^{-1} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} \frac{Q(k_j-1)}{Q(k_j+1)} n. \quad (2.29)$$

3. Consideremos agora os casos em que o verme apaga uma aresta da rede (a qual pode pertencer ou a um laço ou ao próprio verme) e, ao contrário do caso anterior, não desaparece na configuração final. Analisemos os seguintes casos:

- (a) O caso mais simples será aquele em que o verme apaga a última seta da sequência que o forma (ver figura 2.8). Nesse caso, a probabilidade de transição será

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = K^{-1} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)}. \quad (2.30)$$

Caso $k_i = 3$ na configuração inicial, ou seja, se houver um laço passando pelo sítio i , devemos acrescentar o fator $1/3$ à equação (2.30).

- (b) Consideremos agora o caso em que a cabeça do verme está tocando o corpo do mesmo (ou seja, teremos que $k_i = 3$) e ao andar de i para j apagará uma seta dele. Teremos então duas situações distintas:

- i. Suponha que na primeira situação a seta do verme que será apagada, está apontando do sítio i para o sítio j , ou seja, essa seta aponta no mesmo sentido do deslocamento da cabeça do verme. Nesse caso, o segmento do verme após a seta excluída deverá ser reconectado ao restante do segmento do mesmo, como mostra a figura 2.18. A probabilidade de aceitação do *update* será dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \frac{K^{-1}}{3} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)}. \quad (2.31)$$

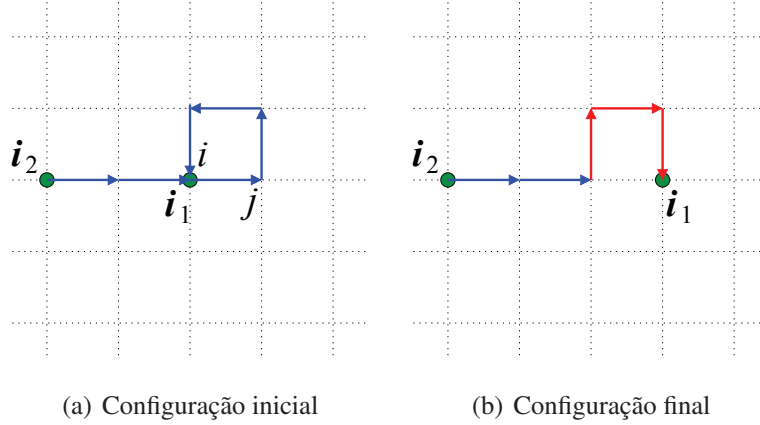


Figura 2.18 Processo em que ocorre reconexão.

- ii. Suponha agora que a seta do verme que será apagada aponte de j para i , ou seja, no sentido contrário ao da cabeça do verme. Nesse caso, ocorrerá um *backbiting* e o segmento do verme após a seta excluída formará um novo laço (ver figura 2.19). Assim, a probabilidade de transição será dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \frac{K^{-1}}{3} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} n. \quad (2.32)$$

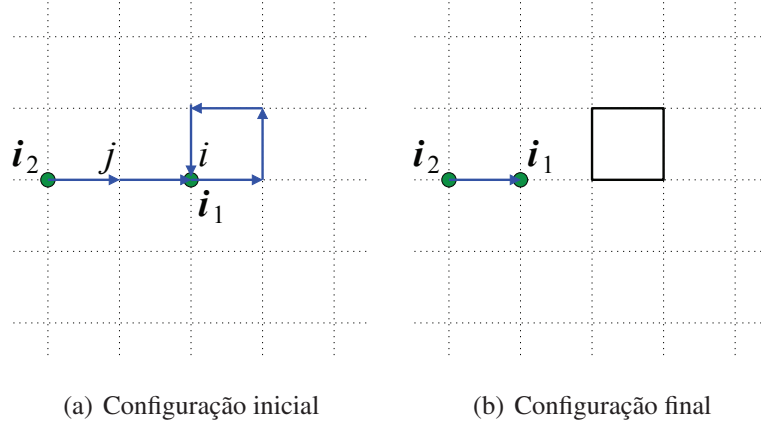


Figura 2.19 Processo em que ocorre um backbiting.

- (c) Finalmente, considere o caso em que o verme apagará uma aresta pertencente à um laço. Nesse caso, $k_i = 3$ pois a cabeça do verme toca o laço no sítio i . Além disso, ao apagar a aresta do laço, o restante do segmento do laço é anexado ao verme de forma que a orientação das setas do segmento anexado seja apropriada, como mostra a figura 2.20. A probabilidade de aceitação da nova configuração será:

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \frac{K^{-1}}{3} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} n^{-1}. \quad (2.33)$$

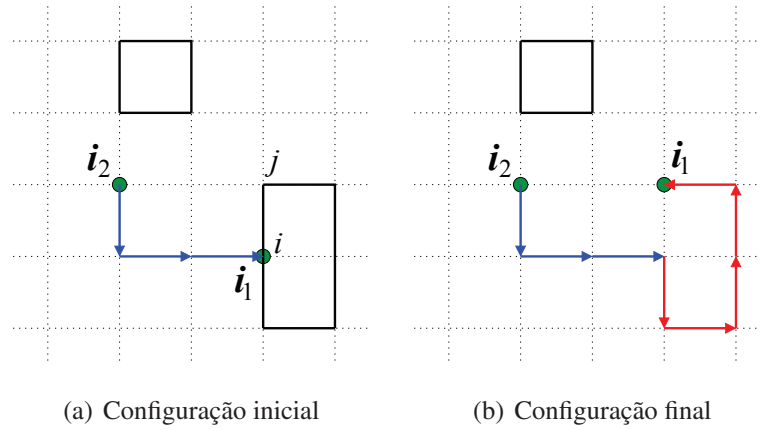


Figura 2.20 Processo em que o verme destrói um laço. O restante do laço é reconectado ao corpo do verme.

Podemos então sumarizar as probabilidades de aceitação como descrito na próxima subseção.

2.3.3 Probabilidades de Aceitação

Conforme vimos acima, a probabilidade $P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)$ de mover a extremidade i_1 de um sítio i para um sítio vizinho j acrescentando uma aresta à rede é dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \begin{cases} rK \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n c_i c_j & \text{se } i = i_1 = i_2 \\ K \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} c_i c_j & \text{se } j \neq i_2, i = i_1 \neq i_2 \\ rK, & \text{se } j = i_2 \end{cases} \quad (2.34)$$

e a probabilidade $P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1)$ de mover i_1 para um sítio j apagando uma aresta da rede é dada por

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \begin{cases} \frac{r}{K} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} \frac{Q(k_j-1)}{Q(k_j+1)} n c_i c_j & \text{se } j = i_2 \\ \frac{1}{K} \frac{Q(k_j-1)}{Q(k_j+1)} c_i c_j & \text{se } j \neq i_2, i = i_1 \neq i_2 \\ \frac{r}{K}, & \text{se } i = i_1 = i_2 \end{cases} \quad (2.35)$$

onde os fatores $Q(k)$ foram definidos na equação (2.17), e os fatores r , c_i e c_j são necessários para o balanço detalhado. As razões $Q(k+2)/Q(k)$ e $Q(k-1)/Q(k+1)$ podem ser expressas como

$$\frac{Q(k+2)}{Q(k)} = \frac{1}{n+k}, \quad \frac{Q(k-1)}{Q(k+1)} = n+k-1, \quad (2.36)$$

onde n representa o número de componentes de spin e k denota o número de arestas de um dado sítio na configuração inicial. O fator r , que faz o balanço entre as propostas de começar um novo verme e a de formar um laço quando as extremidades do verme se encontram, é dado por

$$r = \begin{cases} 1/(1-P_0), & \text{se } i = i_1 = i_2 \\ 1-P_0, & \text{se } j = i_2 \\ 1, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.37)$$

enquanto que os fatores c_i e c_j , que fazem os balanços das propostas com instruções de rota, são dados por

$$c_l = \begin{cases} 3n^{\delta_l}, & \text{se } b \rightarrow b+1 \text{ e } k_l = 2 \\ n^{\delta_l}/3, & \text{se } b \rightarrow b-1 \text{ e } k_l = 3 \\ 1, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.38)$$

onde os fatores n^{δ_l} ($l = i, j$) servem para corrigir a variação do número de cadeias, pois o número de cadeias após o *update* dependerá da proposta de instrução de rota escolhida.

Com o algoritmo descrito acima, podemos identificar corretamente todos os laços existentes na rede a cada passo dado pelo verme. Agora que sabemos como identificar todos os laços que surgem na rede, precisaremos de uma estrutura de dados em forma de lista que nos auxilie nos passos descritos acima.

2.4 Estrutura de dados

Como vimos na seção anterior, necessitamos de um algoritmo para realizar algumas atividades, como desconectar pedaços do verme para gerar laços ou reconectar (e reorientar) pedaços de segmentos ao verme. Para fazermos essas tarefas de forma rápida, propomos uma estrutura de dados baseada em uma estrutura chamada de lista de satélites. Listas de satélites são estruturas em forma de escada formadas por uma lista duplamente encadeada (ver figura 2.21), qual pode ser percorrida em ambos os sentidos. Cada “degrau” dessa lista representa um nó que contém a informação relevante, no nosso caso uma aresta existente na rede. Cada nó, por sua vez, possui em suas extremidades dois satélites ligados um ao outro. Enquanto que em um dos lados da lista os satélites são ligados uns aos outros de maneira que se possa percorrer a lista no sentido que ela cresce, os satélites no outro lado da lista são ligados uns aos outros no sentido contrário. Além de apontar para o próximo elemento da lista, os satélites que formam um nó também apontam um para o outro, de maneira que se possa correr a lista satélite num sentido e então, ao trocar de lado num dado nó, se possa percorrer a lista no sentido contrário. Esse aspecto da lista satélite, ou seja, a possibilidade de percorrê-la em ambas as direções, é a chave para acompanharmos de forma eficiente a mudança do número de laços durante os *updates*.

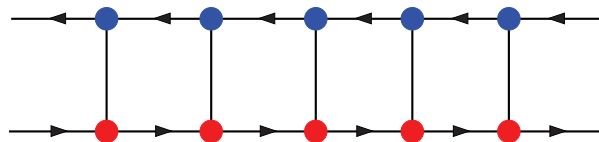


Figura 2.21 Lista de satélites

Cada cadeia da rede (laço ou verme) é identificada por um rótulo. Além disso, cada aresta

de uma dada cadeia armazena a informação do rótulo dessa cadeia a qual ela pertence. Quando uma nova aresta é acrescentada ao verme, essa aresta recebe o rótulo do verme. Já quando uma aresta é selecionada para ser apagada da rede, saberemos através do rótulo que ela guarda em que lista devemos procurar o nó que a representa para então apagá-lo. Numa situação em que duas cadeias são conectadas uma à outra para formar uma cadeia maior, as arestas da menor dessas duas cadeias deverão receber o mesmo rótulo das arestas da cadeia maior, de maneira que todas as arestas da nova cadeia estejam apropriadamente rotuladas. Da mesma maneira, quando o processo inverso ocorre, ou seja, quando uma cadeia é dividida em duas novas cadeias, as arestas da menor dessas duas novas cadeias devem receber um novo rótulo, o qual não pode ser usado por nenhuma outra cadeia.

Como mostrado anteriormente, durante um *update* o número de laços pode mudar de várias maneiras. Então, para acomodarmos os *updates* com um baixo custo computacional, nós usamos listas de satélites fechadas para representar tanto os laços quanto o verme. Na lista que representa o verme, o último nó da lista (a cabeça do verme) sempre aponta para o primeiro nó (a cauda do verme) em um lado da lista e vice-versa no outro lado da lista. Como discutido anteriormente, apenas o verme tem um senso de direção. Quando a cabeça do verme toca a cauda dele, o verme se fecha e sua noção de direção passa a ser arbitrária, de modo que o laço formado não é orientado.

Outro *update* durante o qual o número de laços aumenta de uma unidade é quando ocorre um *backbiting*, onde o verme apaga uma de suas próprias arestas e assim gera um laço. Esse *update* tem um custo computacional maior, pois o verme se quebra em dois segmentos e assim uma nova lista satélite deve ser criada para acomodar ou o novo laço ou o restante do verme. Enquanto o custo de cortar e reconectar as extremidades das listas independe do tamanho delas, as arestas do segmento que será representado pela nova lista devem receber um rótulo diferente, indicando que elas pertencem à nova lista. Como o custo computacional de trocar os rótulos antigos por novos depende linearmente do tamanho da nova lista, é conveniente que a nova lista acomode o menor dos dois segmentos. Para identificar qual dos dois segmentos é o menor podemos proceder da seguinte maneira: antes de excluir o nó representando a aresta apagada e assim quebrar a lista de satélites representando o verme em duas partes, nós percorremos essa lista de satélites simultaneamente em ambos sentidos, partindo do nó que representa a aresta que será apagada, até que ou a cabeça do verme ou a cauda dele seja alcançada. Se a cabeça do

verme for alcançada primeiro, então o segmento que formará o novo laço será o menor. Caso a cauda do verme seja alcançada primeiro, o segmento que representará o verme será o menor dos dois. Então, após inserirmos o menor segmento na nova lista e trocarmos os rótulo das arestas desse segmento, nós reconectamos as extremidades das listas a um custo computacional fixo, usando as propriedades das listas de satélites.

Se agora considerarmos o caso em que o número de laços é decrescido de uma unidade, por exemplo, quando o verme apaga uma aresta pertencente à um laço, o custo para incorporar o segmento restante do laço ao corpo do verme é fixo já que isso é feito apenas reconectando os nós das extremidades das duas listas de modo que a nova sequência de arestas do verme está devidamente orientada. Por fim, devemos atualizar os rótulos das arestas da nova cadeia.

A estrutura de dados baseada em listas de satélites pode ser facilmente implementada na linguagem C (ou outra semelhante). Entretanto, os aspectos práticos de como realizar operações (e.g., reconexão, ...) sobre as listas de satélites são um tanto técnicos e não serão apresentados nessa tese.

CAPÍTULO 3

Resultados

Nesse capítulo apresentaremos os principais resultados das nossas simulações para o modelo de laços $O(n)$ numa rede quadrada, usando o algoritmo descrito no capítulo anterior. Inicialmente, ilustraremos o método utilizado para obtenção da nossa estimativa para o ponto crítico do modelo de laços $O(n)$ para $0 < n \leq 2$. Discutiremos então os métodos de obtenção dos expoentes críticos usando como exemplo o modelo $O(1)$. Em seguida apresentaremos alguns métodos utilizados para estimar o ponto crítico para o caso do modelo $O(2)$. No final do capítulo faremos uma discussão preliminar sobre o comportamento do modelo para o caso em que $n > 2$.

3.1 Linha crítica

Como discutido no capítulo 2, podemos estudar as propriedades críticas do modelo $O(n)$ de laços através de conceitos oriundos das teoria de percolação e transições de fase e fenômenos críticos. Antes de apresentarmos um método para estimarmos a fugacidade crítica, ou ponto crítico, K_c , para o modelo $O(n)$ de laços, precisamos definir primeiro alguns conceitos relevantes, como o que são laços infinitos. Durante uma simulação, os laços que surgem sobre a rede periódica podem ser infinitos ou não. Para sabermos distinguir entre esses dois tipos de laços, precisamos visualizar a rede quadrada com condições de contorno periódicas como um toroide. Denominamos por laços infinitos aqueles laços que, ao serem contraídos sobre a superfície do toroide, se enrolam no toroide de forma que não se pode reduzi-los a um ponto. Além disso, o número de vezes que esse laço “infinito” dá voltas ao redor do toroide é chamado de *winding number*. Esses laços são ditos serem infinitos porque quando completamos o plano com repetições da rede original, esses laços se unem às suas cópias, formando laços de comprimento infinito. Os laços que não são infinitos têm *winding number* zero.

Como exemplo, considere a configuração de laços mostrada na figura 3.1, onde temos dois laços numa rede quadrada com condições de contorno periódicas. Nessa figura, note que apenas o laço à esquerda é um laço infinito, pois ao completarmos o plano com cópias da figura 3.1, esse laço se unirá (pelas suas extremidades) às suas cópias, formando assim um laço de comprimento infinito. Note também que esse laço infinito não pode ser contraído à um ponto, e que ele tem então *winding number* igual a 1, ou seja, ele dá apenas uma volta em torno do toroide. Já o laço à direita pode ser contraído à um ponto e, portanto, tem *winding number* igual a zero.

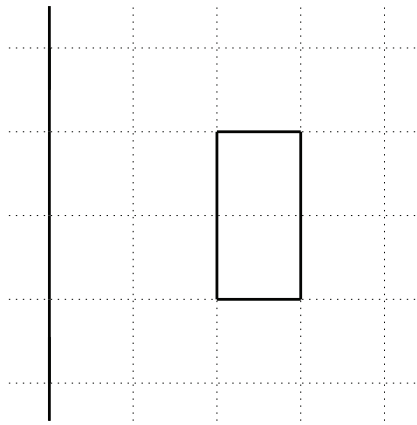


Figura 3.1 Laços numa rede quadrada 5×5 com condições de contorno periódicas.

Observe que esses laços “infinitos” podem ser encarados como aglomerados que percolam a rede. Em vista disso, para determinarmos o ponto crítico do modelo de laços $O(n)$ numa rede quadrada para $0 < n < 2$, nós medimos a probabilidade Π_L de que um ou mais laços infinitos sejam encontrados na rede de tamanho linear L . Essa observável não tem propriedade de escala, de modo que quando fazemos o gráfico de Π_L em função da fugacidade de arestas K , as curvas obtidas para sistemas com diferentes tamanhos lineares L devem se cruzar exatamente em um mesmo ponto. Como esse ponto de interseção das curvas é independente de L , ele marca o valor de K para o qual os laços infinitos aparecem pela primeira vez numa rede infinita. Esse limite de percolação para laços produzidos por expansões para altas temperaturas coincide com o início das correlações spin-spin de longo alcance, ou seja, ele ocorre quando nos aproximamos do ponto crítico K_c . Nas figuras 3.2(a), 3.3(a), 3.4(a) apresentamos o comportamento de Π_L para três valores de n (0,01, 1 e 1,8) e para vários valores de L .

Na figura 3.2(a) para o modelo de Ising ($n = 1$), pode-se ver que o ponto de cruzamento das

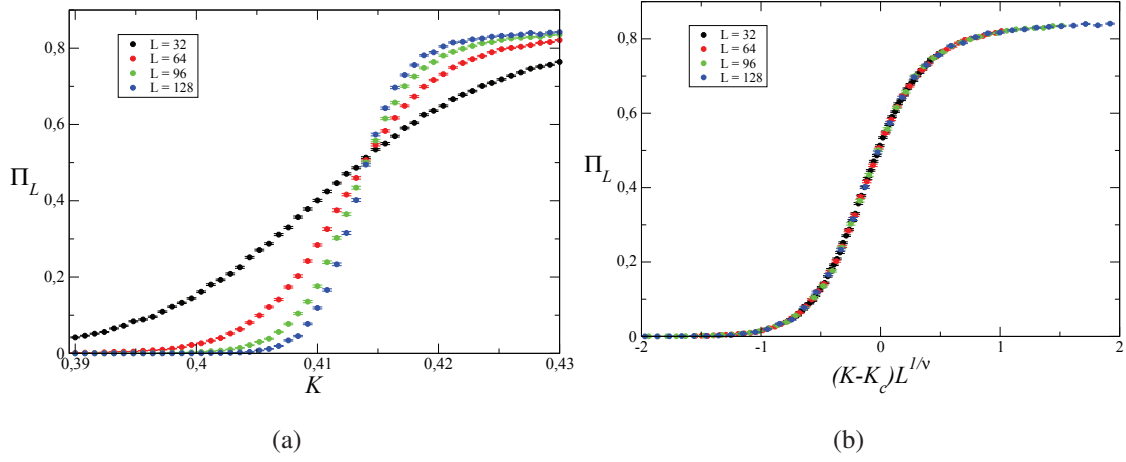


Figura 3.2 (a) Probabilidade Π_L de encontrar um ou mais laços infinitos na rede como função da fugacidade de arestas K , para vários valores de L , para $n = 1$. (b) Π_L como função de $(K - K_c)L^{1/\nu}$, onde usamos o valor estimado de K_c e o valor exato de ν para $n = 1$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.

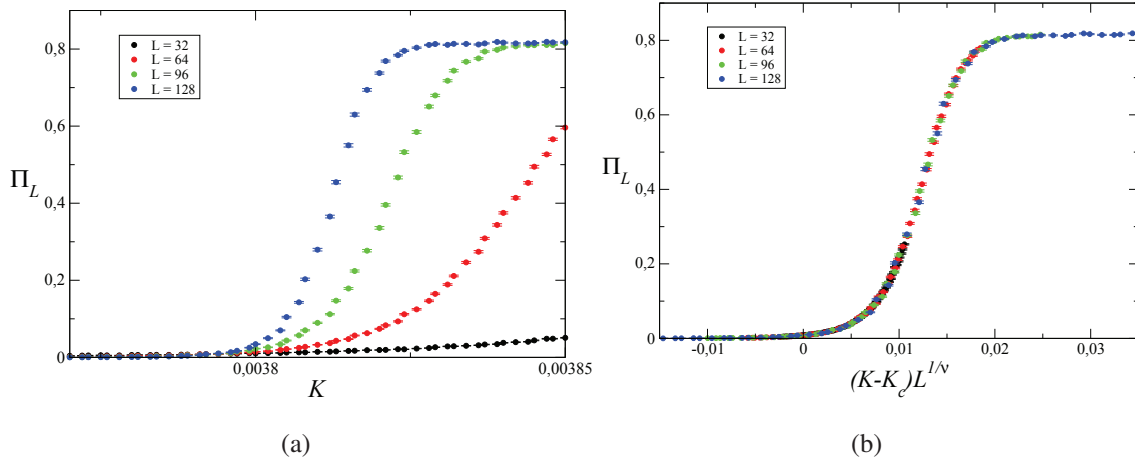


Figura 3.3 (a) Probabilidade Π_L de encontrar um ou mais laços infinitos na rede como função da fugacidade de arestas K , para vários valores de L , para $n = 0,01$. (b) Π_L como função de $(K - K_c)L^{1/\nu}$, onde usamos o valor estimado de K_c e o valor exato de ν para $n = 0,01$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.

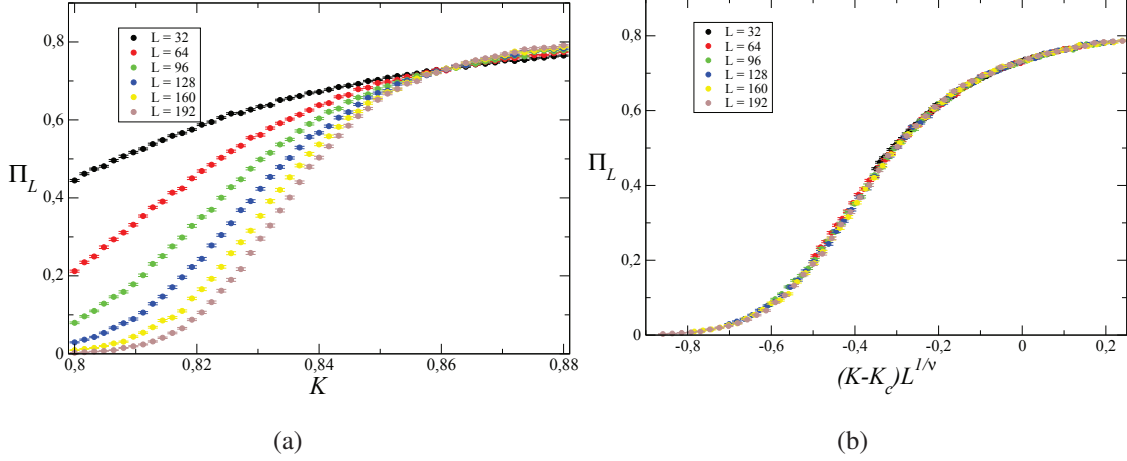


Figura 3.4 (a) Probabilidade Π_L de encontrar um ou mais laços infinitos na rede como função da fugacidade de arestas K , para vários valores de L , para $n = 1, 8$. (b) Π_L como função de $(K - K_c)L^{1/\nu}$, onde usamos o valor estimado de K_c e o valor exato de ν para $n = 1, 8$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.

curvas citadas acima pode ser identificado com relativa precisão. Entretanto quando tomamos os casos limites em que $n \rightarrow 0$ (figura 3.3(a)) e $n \rightarrow 2$ (figura 3.4(a)), fica mais difícil obter os valores de K_c para esses pontos de interseção. Isso se dá porque para $n = 0,01$ (figura 3.3(a)) o ponto de cruzamento das curvas se encontra na parte mais baixa das curvas, enquanto que para $n = 1, 8$ (figura 3.4(a)) esse ponto de interseção se localiza na parte mais alta das curvas, e nessas regiões as curvas tendem a ser muito próximas umas das outras.

Para determinar K_c (ou seja, o valor de K onde ocorre a interseção das curvas para Π_L) de forma mais precisa, nós usaremos uma segunda propriedade de Π_L , a qual diz que esse observável é uma função apenas da razão de dois comprimentos de escala relevantes, a saber, o comprimento linear, L , da rede e o comprimento de correlação, ξ . O comprimento de correlação diverge como $\xi \sim |K - K_c|^{-\nu}$ quando K se aproxima de K_c (onde ν é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação). Então, quando fazemos o gráfico de Π_L como função de $(K - K_c)L^{1/\nu}$, as curvas para os diferentes valores de L devem colapsar em uma única curva. Uma vez que o expoente ν é conhecido exatamente para $-2 \leq n \leq 2$ [8], podemos estimar a localização do cruzamento das curvas simplesmente mantendo o expoente ν fixo enquanto variamos o valor de K_c até obtermos o melhor colapso das curvas. Exemplos desse procedimento, de mostrar o colapso das curvas Π_L para $n = 0,01, 1$ e $1,8$, estão mostrados nas figuras 3.3(b), 3.2(b) e 3.4(b), respectivamente. Nossas estimativas para o valor de K_c para vários valores de

n	K_c/n	n	K_c/n
0.01	0.37930(5)	1.0	0.4141(1)
0.1	0.38178(3)	1.1	0.4192(1)
0.2	0.38464(4)	1.2	0.4246(2)
0.3	0.3877(4)	1.3	0.4307(1)
0.4	0.3908(3)	1.4	0.4374(2)
0.5	0.3941(1)	1.5	0.4450(2)
0.6	0.3977(2)	1.6	0.4539(2)
0.7	0.4014(2)	1.7	0.4647(2)
0.8	0.4053(1)	1.8	0.4785(2)
0.9	0.4096(2)	2.0	0.520(4)

Tabela 3.1 Estimativas de K_c/n para vários valores de n .

n no intervalo $0 < n \leq 1,8$ são mostradas na tabela 3.1. As barras de erro são estimadas por inspeção visual e representam os intervalos nos quais a qualidade do colapso das curvas permanece mais ou menos a mesma. Embora possa não parecer à primeira vista, esse método é muito sensível e produz resultados muito precisos [38]. A qualidade dos colapsos obtidos é excelente para todos os valores no intervalo $0 < n \lesssim 1,8$ que investigamos. Para $n \gtrsim 1,8$ a qualidade dos colapsos diminui e no caso limite, $n \rightarrow 2$, onde $1/\nu \rightarrow 0$, o colapso das curvas não ocorre.

Para investigar o modelo $O(2)$, apresentaremos mais adiante uma discussão sobre ele em detalhes, visto que esse modelo (o qual corresponde ao modelo XY) apresenta a famosa transição de fase do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT). Antes, porém, vamos discutir uma possível tentativa de descrever a linha crítica do modelo $O(n)$ na rede quadrada através de uma expressão analítica para K_c .

Para o modelo de laços $O(n)$ em uma rede hexagonal, a linha de pontos críticos é exatamente dada por [8]

$$\frac{1}{K_c'^2} = a + b\sqrt{2-n}, \quad (3.1)$$

onde $K' \equiv K/n$, $a = 2$ e $b = 1$. Essa função representa a solução de uma equação quadrática. Para investigar se a linha de pontos críticos para o modelo $O(n)$ numa rede quadrada é governada por uma equação do mesmo tipo que (3.1), fizemos o gráfico de nossas estimativas de

$1/K'_c$ como função de n e comparamos com o comportamento previsto pela equação 3.1. Os valores de a e b para o modelo de laços $O(n)$ na rede quadrada podem ser obtidos usando o fato de que o ponto crítico para o modelo de Ising ($n = 1$) é conhecido exatamente, $K_c(1) = \sqrt{2} - 1$, ao passo que para o modelo de *self-avoiding walks* ($n \rightarrow 0$) K_c é conhecido com alta precisão [39], $K_c(n \rightarrow 0) = 0,3790522\dots$. Usando esses valores na equação (3.1) obtemos

$$a = 3,096857207(1), \quad b = 2,731569918(1), \quad (3.2)$$

As incertezas nos últimos dígitos dos coeficientes a e b decorrem da incerteza do ponto crítico para o modelo de SAW. Na figura 3.5 mostramos uma comparação entre os pontos estimados para K_c e a curva descrita pela equação (3.1) com os valores de a e b obtidos em (3.2). Os valores para K_c obtidos pela equação (3.1) diferem por menos que 0,6% dos valores obtidos usando o colapso das curvas mostrado acima, para n no intervalo de $0 < n \leq 1.8$, o que mostra que a equação (3.1) dá uma boa descrição para nossas estimativas de K_c dentro do intervalo de n considerado. Apesar dessa ótima concordância, a curva teórica (3.1) parece representar apenas uma boa aproximação para a linha crítica do modelo e não um resultado exato. Isso fica mais claro quando observamos, por exemplo, que o valor crítico K_c do modelo para $n = 0,5$ obtido através da inspeção visual do melhor colapso é 0,19704, ao passo que o valor obtido pela equação acima é de 0,19699, os quais diferem por uma diferença relativa de apenas 0,03%. No entanto, o colapso das curvas Π_L usando o segundo valor de K_c falha quando levamos em consideração uma rede grande, com $L = 512$, como mostra a figura 3.6.

As curvas para os valores médios dos números de arestas $\langle b \rangle$, cruzamentos $\langle m_4 \rangle$ e laços $\langle l \rangle$, na criticalidade, em função de n para redes quadradas de lado $L = 128$ são mostradas na figura 3.7. Como podemos observar na figura citada, os números médios de arestas $\langle b \rangle$, de cruzamentos $\langle m_4 \rangle$ e de laços $\langle l \rangle$ crescem quando n cresce. Esse comportamento pode ser facilmente entendido com ajuda da equação (2.12) para a função de partição. Para isso, vale notar os seguintes fatos:

1. a fugacidade crítica reescalada $K'_c \equiv K_c/n$, a qual representa o peso associado a cada aresta presente na rede, cresce com n (ver figura 3.5). Logo, a probabilidade de acrescentar uma aresta à configuração também cresce com n , explicando o aumento do número médio $\langle b \rangle$ de arestas quando n cresce;

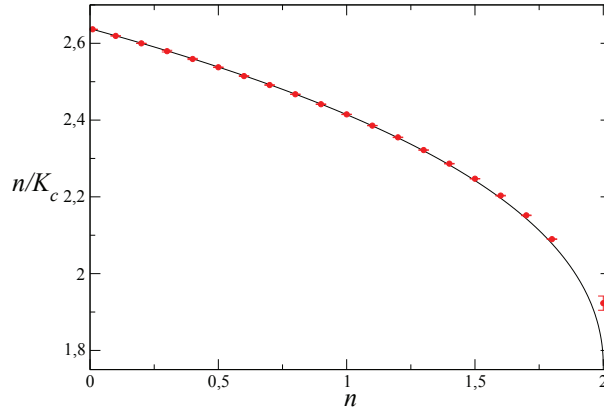


Figura 3.5 Estimativas para o inverso dos pontos críticos $1/K'_c \equiv n/K_c$ do modelo de laços $O(n)$ em uma rede quadrada junto com a curva obtida pela equação (3.1) com coeficientes a e b dados pela equação (3.2).

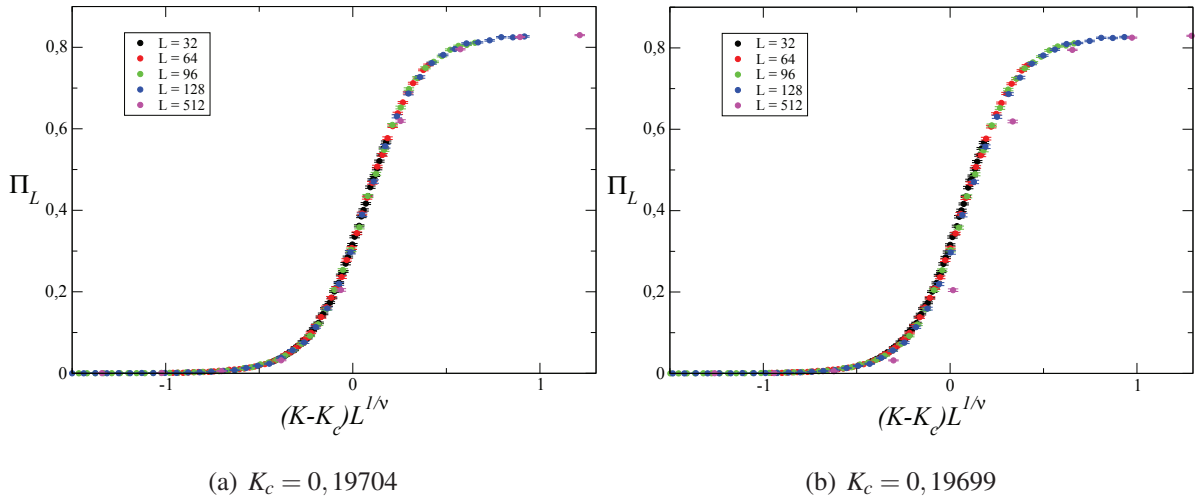


Figura 3.6 Colapso do observável de percolação Π_L para $n = 0,5$. Em (a) usamos nossa estimativa a partir do colapso por inspeção visual, $K_c = 0,19704$, e em (b) usamos o valor dado pelas equações (3.1) e (3.2), $K_c = 0,19699$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.

2. o fator $n/(n+2)$, relacionado com o peso dos cruzamentos, também cresce com n . Assim, a probabilidade de acrescentar um cruzamento à configuração de laços também cresce quando n cresce, fazendo com que o número médio de cruzamentos $\langle m_4 \rangle$ aumente com n ;
3. o fator de degenerescência n , o qual funciona como uma fugacidade de laços, obviamente cresce com n e é proporcional a probabilidade de acrescentar um laço à rede. Portanto, o número médio $\langle l \rangle$ de laços também cresce com n .

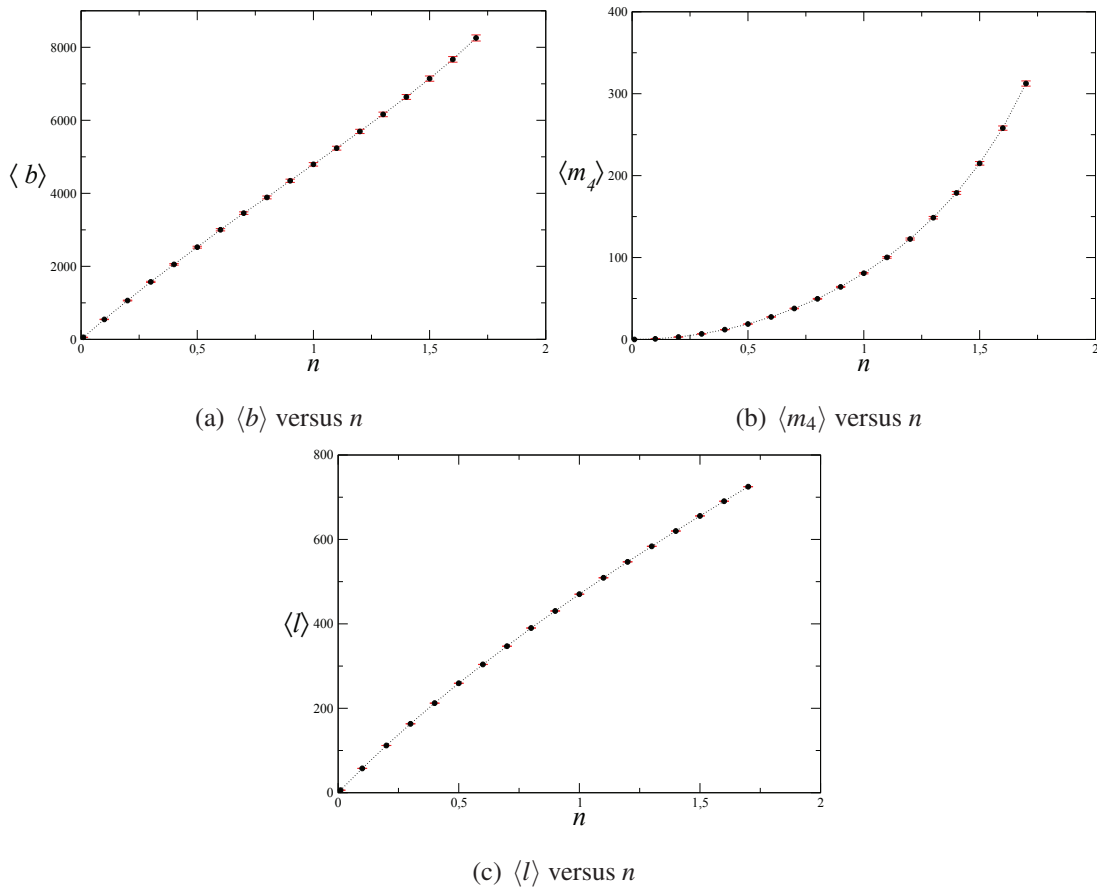


Figura 3.7 Número médio de (a) arestas $\langle b \rangle$, (b) cruzamentos $\langle m_4 \rangle$ e (c) laços $\langle l \rangle$ para $0 < n < 1,8$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.

Nós encontramos ainda que o número médio de cruzamentos $\langle m_4 \rangle$ para uma rede quadrada de lado $L = 128$ pode ser modelada por uma dependência polinomial em n da forma

$$\langle m_4 \rangle = An^2 + Bn^6, \quad (3.3)$$

a qual é mostrada na figura 3.7(b). Um ajuste para os dados no intervalo $0 < n < 1,8$ fornece $A = 76,0(3)$ e $B = 3,92(10)$, com $\chi^2/DOF = 1,0$, indicando um excelente ajuste. Não encontramos dependência similar em n para os valores médios dos números de arestas $\langle b \rangle$ e de laços $\langle l \rangle$.

O comportamento para $\langle b \rangle$, $\langle m_4 \rangle$ e $\langle l \rangle$ em função de n discutido acima pode ser observado na figura 3.8, onde são mostradas configurações de laços (sem verde) para $n = 0,01$, 1 e 2, obtidas na criticalidade. Nessa figura podemos ver que para $n = 0,01$ (figura 3.8(a)), as quantidades de arestas, cruzamentos e laços são muito pequenas. Para $n = 1$ (figura 3.8(b)), essas quantidades aumentam consideravelmente e pode-se notar que laços de diversos tamanhos surgem na rede. Finalmente, para o caso em que $n = 2$ (figura 3.8(c)), a configuração de laços torna-se mais densa e os laços cruzam-se com mais frequência.

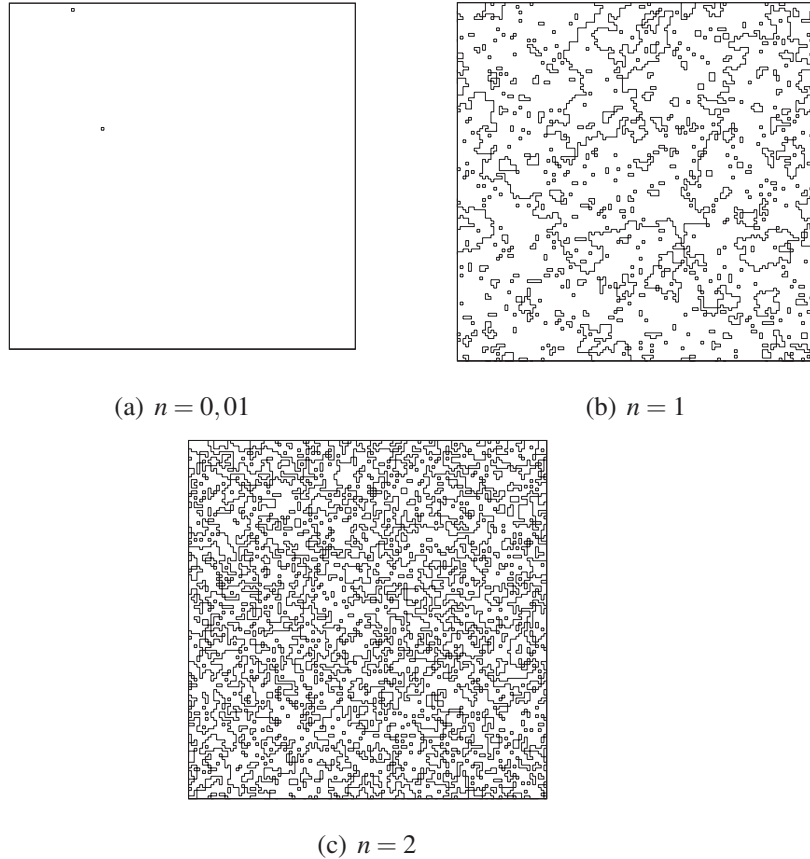


Figura 3.8 Exemplos de configurações críticas de laços em redes de lado $L = 128$ para $n = 0,01$, 1 e 2. Os valores de K_c usados são aqueles dados na tabela 3.1.

Com as estimativas de K_c para vários valores de n , podemos agora verificar se nossos re-

sultados são confiáveis através da análise dos expoentes críticos do modelo. Na próxima seção mostraremos como extrair os expoentes críticos, aplicando a teoria de percolação às estatísticas de cadeias abertas (vermes) e de cadeias fechadas (laços) para o caso particular do conhecido modelo de Ising.

3.2 Expoentes críticos para o modelo de Ising ($n = 1$)

Nessa seção analisaremos o caso particular do modelo $O(n)$ de laços para $n = 1$, o qual corresponde ao modelo de Ising. Apesar de trabalharmos como o modelo truncado (2.3), o modelo $O(1)$ pode ser obtido diretamente do hamiltoniano para o modelo de Ising sem necessidade de truncarmos o fator de Boltzmann. Para isso basta usarmos a seguinte identidade:

$$\exp(-\beta \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) \equiv \cosh(-\beta) \left(1 + \tanh(-\beta) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) = -\cosh(\beta) \left(1 + K \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right), \quad (3.4)$$

onde podemos identificar que a fugacidade de arestas K é igual a $\tanh(\beta)$. O prefator $\cosh(\beta)$ será irrelevante para as nossas pretensões. Uma vez que a temperatura crítica para o modelo de Ising em 2D é conhecida ser

$$\beta_c = \frac{\ln(1 + \sqrt{2})}{2}, \quad (3.5)$$

temos que para o modelo $O(1)$, $K_c = \tanh(\beta_c) = \sqrt{2} - 1$ como mencionado na seção anterior.

Durante nossas simulações, coletamos dados para a estatística tanto de cadeias abertas (vermes) quanto de cadeias fechadas (laços), porém separadamente. Os dados obtidos para a estatística de cadeias abertas foram coletados sempre que houvesse um verme na rede, ao passo que a coleta de dados para a estatística de cadeias fechadas ocorria apenas nas situações em que não havia verme na rede. Apresentaremos primeiro resultados referentes à estatística das cadeias fechadas.

3.2.1 Estatística para cadeias fechadas

Consideremos primeiramente uma importante característica das cadeias (abertas ou fechadas) geradas pelo algoritmo WORM, a saber, sua dimensão fractal D . Uma maneira de obtermos o

valor de D é descrito a seguir. Como mencionado anteriormente, do ponto de vista da teoria da percolação, os laços infinitos podem ser vistos como aglomerados que percolam a rede. Na criticalidade, o tamanho médio desses aglomerados, ou seja, o comprimento médio $\langle M_{inf} \rangle$ dos laços infinitos tem o seguinte comportamento de escala:

$$\langle M_{inf} \rangle \sim L^D. \quad (3.6)$$

onde $D = 11/8$ para $n = 1$. Podemos então medir o comprimento médio $\langle M_{inf} \rangle$ dos laços infinitos para vários tamanhos lineares L de rede quadrada e obtermos o expoente D através de um ajuste do tipo lei de potência, como mostrado na equação (3.6). A figura 3.9 mostra o gráfico de $\langle M_{inf} \rangle$ em função de L medidos no ponto crítico K_c para $n = 1$. Obtemos através de um ajuste do tipo lei de potência que $D = 1,3776(4)$ com $\chi^2/DOF = 1,35$, o qual é muito próximo do resultado esperado, a saber, $D = 11/8 = 1,375$ para $n = 1$.

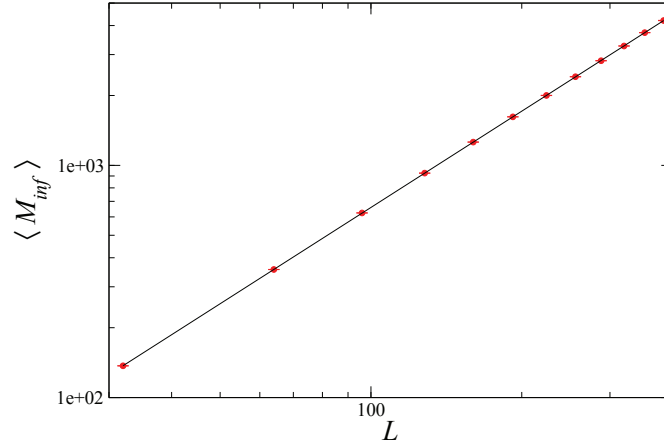


Figura 3.9 Comprimento médio $\langle M_{inf} \rangle$ dos laços infinitos em função do tamanho linear L da rede. Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica. Cada ponto do gráfico é a média de 10.000.000 de amostras.

A próxima quantidade a ser considerada é a distribuição l_M de laços de tamanho M , a qual é definida como

$$l_M = \mathcal{N}_M / \mathcal{N}, \quad (3.7)$$

onde $\mathcal{N}_M$ é o número total de laços de tamanho M coletados durante a simulação e $\mathcal{N} = \sum_M \mathcal{N}_M$ é a quantidade total de laços coletados. Próximo do ponto crítico K_c , a distribuição l_M de laços de tamanho M possui uma forma assintótica similar à da distribuição de tamanhos de

aglomerados no limite de percolação, a qual é dada por [10]

$$l_M \sim M^{-\tau} e^{-\theta M}, \quad (3.8)$$

onde temos que $\tau = (d + D)/D$, com $D = 11/8$, $d = 2$ (a dimensionalidade da rede) e o fator θ depende da distância ao ponto crítico sendo dado por

$$\theta \propto |K - K_c|^{1/\sigma}, \quad (3.9)$$

onde $\sigma = 3/8$ para $n = 1$. Quando θ é finito, a exponencial em (3.8) dificulta o aparecimento de grandes laços na rede. No entanto, quando K se aproxima do valor crítico K_c , o fator θ vai a zero e assim grandes laços são permitidos se proliferarem na rede. A dimensão fractal D e o expoente σ definido em (3.9) estão relacionados com o expoente ν , que é associado à divergência do comprimento de correlação ξ , através da seguinte relação [40]:

$$\nu = \frac{1}{\sigma D}.$$

O gráfico da distribuição l_M em função do comprimento M dos laços, na criticalidade, para vários valores de L é mostrado na figura 3.10(a), onde ambos os eixos estão na escala logarítmica. O comportamento não linear no limite de M grande visto no gráfico log-log da figura 3.10(a) para todas as curvas, é um efeitos devido ao tamanho finito das redes. Observamos em nossas simulações que a distribuição l_M tem um comportamento descrito pelo seguinte finite-size scaling:

$$l_M \sim L^{-d-D} \mathcal{L}(M/L^D). \quad (3.10)$$

A verificação da equação acima pode ser vista na figura 3.10(b), onde, ao fazermos o gráfico de $l_M L^{d+D}$ em função de M/L^D , constatamos que as curvas para sistemas com diferentes tamanhos lineares L se colapsam em uma curva universal, quando usamos $D = 11/8$.

3.2.2 Estatística para cadeias abertas

Consideremos agora a estatística para as cadeias abertas. A observável levada em conta em nossas simulações foi o número, z_M , de vermes de tamanho M , o qual é obtido acumulando

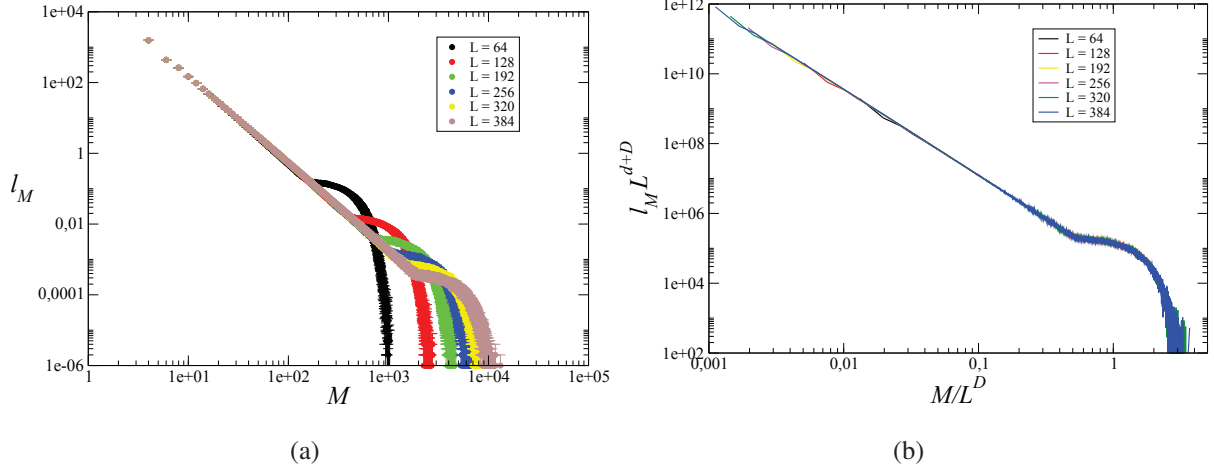


Figura 3.10 (a) Distribuição l_M de laços de tamanho M em função de M , para vários valores de L , para $n = 1$ e $K_c = 0,4141$. (b) Gráfico de $l_M L^{d+D}$ em função de M/L^D , para vários valores de L . Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica.

a quantidade de vezes que um verme de tamanho M é encontrado na rede. Assumimos que o número z_M comportar-se como [10]

$$z_M K^M \sim M^{\vartheta/D} e^{-\theta M}, \quad (3.11)$$

onde $D = 11/8$ e $\vartheta = 3/8$ é um expoente adicional, o qual foi introduzido pela primeira vez no contexto de SAW [41], que define, juntamente com outros expoentes, a classe de universalidade para o modelo $O(1)$. Assim como na equação (3.8), enquanto θ é finito, o fator exponencial suprime as grandes cadeias abertas, as quais tornam-se menos raras quando $K = K_c$. Na figura 3.11(a) mostramos o perfil da distribuição z_M , na criticalidade, para várias redes com diferentes tamanhos lineares L . Em comparação com a equação (3.10) para a distribuição l_M , temos que o *finite-size scaling* para a distribuição z_M é dado por

$$z_M \sim L^{\vartheta} \mathcal{Z}(M/L^D). \quad (3.12)$$

A equação acima nos diz que se fizermos o gráfico de z_M/L^{ϑ} em função de M/L^D , as curvas para diferentes valores de L colapsam numa única curva universal, o que é mostrado na figura 3.11(b).

A susceptibilidade magnética χ pode ser definida, na criticalidade, em termos da distribui-

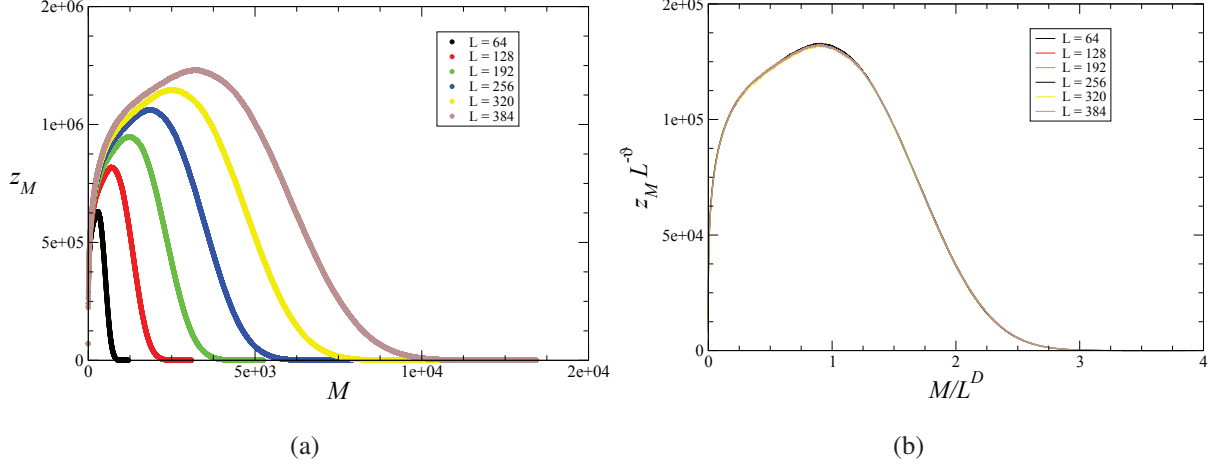


Figura 3.11 (a) Distribuição z_M de vermes de tamanho M em função de M , para vários valores de L . (b) gráfico de z_M/L^v em função de M/L^D , para vários valores de L .

ção z_M como [10]

$$\chi(K_c) = \sum_M z_M, \quad (3.13)$$

e é conhecida comportar-se como

$$\chi(K_c) \sim L^{\gamma/\nu} = L^{2-\eta}, \quad (3.14)$$

onde usamos que $\gamma/\nu = 2 - \eta$. Aqui, γ e ν são expoentes associados, respectivamente, com as divergências da susceptibilidade χ e do comprimento de correlação ξ quando $|K - K_c| \rightarrow 0$, e η é o expoente definido pelo comportamento algébrico da função de correlação spin-spin $G(\mathbf{i}_1 - \mathbf{i}_2)$ (ver equação (2.13)):

$$G(\mathbf{i}_1 - \mathbf{i}_2) = G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}.$$

Como a susceptibilidade χ está relacionada à distribuição z_M através da equação (3.13), podemos obter uma relação entre os expoentes η , ν e a dimensão fractal D como segue. Primeiro reescrevemos (3.13) em forma de integral como

$$\chi = \sum_M z_M \rightarrow \int z_M dM.$$

Usando agora a equação (3.12), temos que

$$\begin{aligned}
 \chi &= L^{\vartheta} \int \mathcal{Z}(M/L^D) dM \\
 &= L^{\vartheta+D} \int \mathcal{Z}(M/L^D) d\left(\frac{M}{L^D}\right) \\
 \chi &\sim L^{\vartheta+D}.
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Comparando a equação (3.15) com a (3.14), obtemos então que [42]

$$2 - \eta = \vartheta + D. \tag{3.16}$$

Finalmente podemos usar o *scaling* (3.14) para determinar o expoente η . Esse resultado é mostrado na figura 3.12, onde obtemos através de um ajuste do tipo lei de potência que $\eta = 0,2496(6)$ com $\chi^2/DOF = 0,35$, o que mostra um excelente acordo com o valor esperado $\eta = 1/4 = 0,25$.

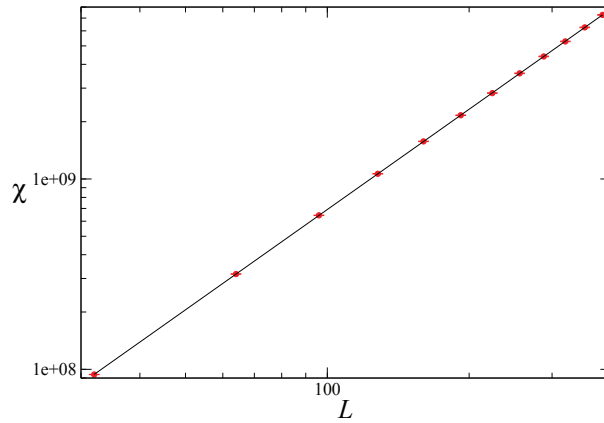


Figura 3.12 Susceptibilidade magnética χ em função do tamanho linear L . Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica.

Na próxima seção apresentaremos nossa estimativa do ponto crítico K_c para o modelo $O(2)$, o qual corresponde ao modelo XY.

3.3 Modelo XY ($n = 2$)

O ponto crítico do modelo XY é especial devido às correções logarítmicas para *scaling* e também porque o comprimento de correlação ξ diverge exponencialmente ao invés da divergência tipo lei de potência observada nos casos em que $n < 2$. Especificamente, ξ diverge abaixo de K_c como [43]

$$\xi \sim \exp(ct^{-\nu'}), \quad (3.17)$$

onde $\nu' = 1/2$, c é uma constante não-universal, e $t \equiv (K_c - K)/K_c$ é a distância do ponto crítico. Esses dois fatores complicadores sabidamente dificultam a determinação de K_c , fazendo com que sejam necessárias simulações Monte Carlo em redes bem maiores do que aquelas usadas para $n < 2$ para se conseguir precisões comparáveis.

Devido ao comprimento de correlação ξ depender exponencialmente da distância ao ponto crítico, o colapso das curvas da observável de percolação Π_L para $n = 2$ é agora estabelecido fazendo o gráfico de Π_L , não como função de $(K - K_c)L^{1/\nu}$, mas sim de $(K - K_c)\ln^{1/\nu'}(L/L_0)$ [44]. Nesse caso, L_0 é algum comprimento característico da ordem do espaçamento entre os sítios da rede. Note que este parâmetro livre (L_0) não precisa ser incluído nos casos para $n < 2$, pois lá isso conduz apenas a uma constante multiplicativa, a qual não é importante. As observações acima afirmam que para $n = 2$, Π_L é uma função da razão

$$\frac{\ln(L/L_0)}{\ln(\xi)} \quad (3.18)$$

ao invés de L/ξ (ou uma potência disso) como nos casos para $n < 2$. Assim, variando K_c e L_0 até conseguirmos o melhor colapso das curvas para Π_L em função de $(K - K_c)\ln^{1/\nu'}(L/L_0)$, chegamos as estimativas de $K_c = 1,04(1)$ para $L_0 = 0,55(15)$, como podemos ver na figura 3.13.

Uma outra estimativa para K_c para $n = 2$ pode ser obtida através da análise de outro observável importante relacionado com a transição de fase do tipo BKT, a saber, a “rigidez” de spins, Υ . Essa grandeza exibe um salto universal no ponto crítico que é único na transição de fase do tipo BKT. Em nosso modelo de laços, a observável Υ está codificada no *winding number*, w , da configuração de laços [45]. Como mencionado no início desse capítulo, para uma dada configuração de laços, o *winding number* especifica o número de voltas que os laços infinitos dão

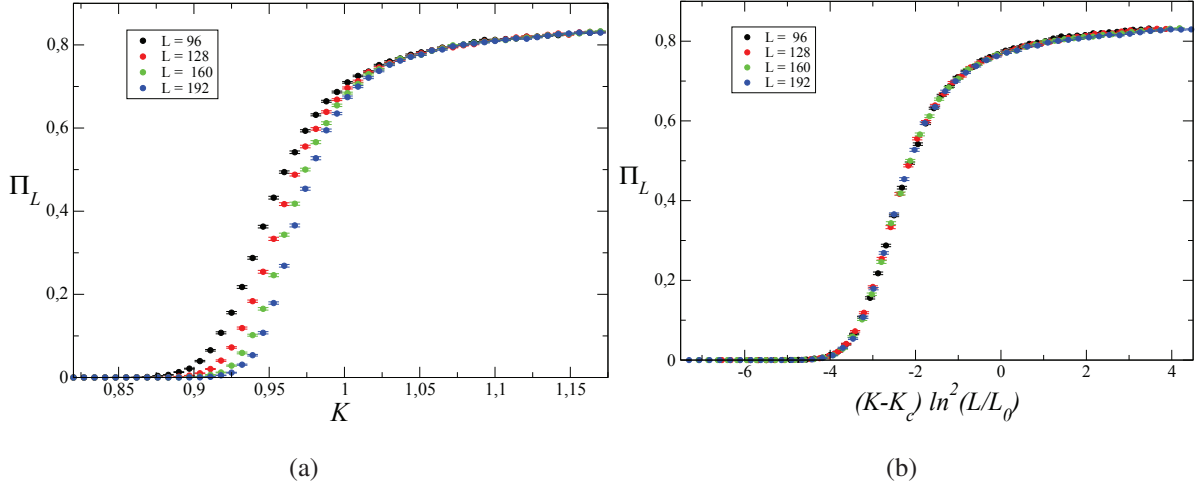


Figura 3.13 (a) Probabilidade Π_L de encontrar um ou mais laços infinitos na rede como função da fugacidade de arestas K , para vários valores de L , para $n = 2$ e $K_c = 1,04$. (b) Gráfico de Π_L em função de $(K - K_c) \ln^2(L/L_0)$, para vários valores de L , onde usamos que $K = 1,040$ e $L_0 = 0,55$. Cada ponto dos gráficos é a média de 1.000.000 de amostras.

ao redor da rede (ou melhor, do toroide) em qualquer das duas direções. Mais especificamente, a observável Υ é determinada pela média $\langle w^2 \rangle$ do quadrado do *winding number* das configurações de laços. Na figura 3.14 mostramos o gráfico da média $\langle w^2 \rangle$ como função de $1/K$ para vários valores de L , e observamos que ela apresenta o comportamento esperado [44] da rigidez de spin, sendo finita para a fase de baixas temperaturas e decaindo rapidamente o zero quando $1/K$ cresce até entrar na fase de altas temperaturas.

Como mencionado, a rigidez de spin pode ser usada para obter uma segunda estimativa para o ponto crítico K_c para $n = 2$. Para isso vale notar que $\langle w^2 \rangle$ aparece nas equações de grupo de renormalização de Kosterlitz [43] somente através da seguinte combinação:

$$x \equiv 2 - \frac{\pi}{2} \langle w^2 \rangle. \quad (3.19)$$

Para o sistema infinito ($L \rightarrow \infty$), temos que

$$\lim_{K \rightarrow K_c^+} \langle w^2 \rangle = \frac{4}{\pi}, \quad (3.20)$$

tal que nesse limite x vai a zero. A linha horizontal na figura 3.14 marca este valor de $\langle w^2 \rangle$. Os pontos de cruzamento desta linha horizontal com as curvas dos dados dão estimativas de

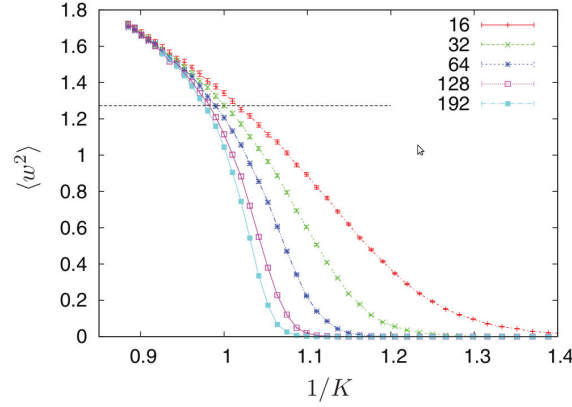


Figura 3.14 A rigidez de spin (reescalada) $\langle w^2 \rangle$ como função de $1/K$ para vários tamanhos de rede. A linha horizontal denota o valor de $\langle w^2 \rangle = 4/\pi$. Cada ponto do gráfico é a média de 1.000.000 de amostras.

K_c , as quais ficam mais precisas quando aumentamos o tamanho da rede. De fato, a variável x definida em (3.19) numa rede finita é finita no ponto crítico e vai a zero quando o tamanho da rede vai para infinito de acordo com a seguinte relação [46]:

$$\lim_{K \rightarrow K_c^+} x = -\frac{1}{\ln(L/L_0)}, \quad (3.21)$$

onde L_0 é novamente algum comprimento característico para este observável, o qual é da ordem do espaçamento da rede. Weber e Minnhagen [46] propuseram usar esta dependência para estimar o ponto crítico K_c como descrito a seguir. Primeiro medimos o valor de x em redes de diferentes tamanhos para um valor fixo de K e então fazemos um ajuste do tipo (3.21) para os dados, usando L_0 como parâmetro livre. Esse procedimento é repetido para vários valores de K , de modo que o valor de K que produz o melhor ajuste é finalmente tomado como a estimativa para o ponto crítico. A figura 3.15 mostra o gráfico de $-1/x$ como função de L para alguns valores de K (num intervalo onde esperamos encontrar o ponto crítico K_c) juntamente com seus respectivos ajustes do tipo $\ln(L) - \ln(L_0)$. Em destaque nessa figura está a curva para $K = 1,040$ a qual possui o melhor ajuste em relação às demais, o qual foi obtido para $L_0 = 0.88(5)$ com $\chi^2/DOF = 0,25$. Por esse método, estimamos o seguinte valor para o ponto crítico: $K_c = 1,040(7)$, o qual concorda com a estimativa obtida anteriormente através do colapso das curvas da observável de percolação Π_L mostrado na figura 3.13.

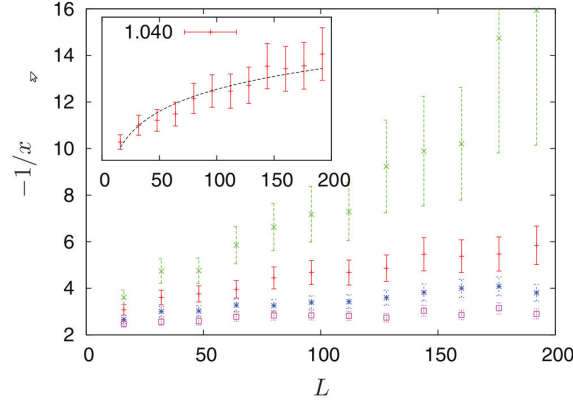


Figura 3.15 Menos o inverso da variável do grupo de renormalização x , definida na equação (3.19), como função de L para $K = 1,030, 1,040, 1,050$ e $1,060$. A curva em destaque é o melhor ajuste para os dados em $K = 1,040$. Cada ponto do gráfico é a média de 1.000.000 de amostras.

Uma evidência adicional de que a nossa estimativa para K_c é bastante satisfatória pode ser obtida através da análise de efeitos de tamanho finito (*finite-size scaling*) para as distribuições dos números l_M de laços de tamanho M e z_M de vermes de tamanho M . Como discutido na seção anterior, verificamos que na criticalidade a grandeza l_M comporta-se de acordo com a equação (3.10), onde $\mathcal{L}$ é uma função de escala, $d = 2$ é a dimensionalidade da rede e $D = 3/2$ é a dimensão fractal dos laços para $n = 2$. Assim, se fizermos um gráfico de $l_M L^{d+D}$ em função de M/L^D , os dados para diferentes valores de L devem colapsar sobre uma curva universal, representada pela função de escala $\mathcal{L}$. A figura 3.16 mostra o resultado do colapso para simulações feitas em $K = 1,040$, e para vários valores de L quando usamos o valor esperado $D = 3/2$. Vemos nessa figura que a qualidade do colapso das curvas mostra-se excelente, o que corrobora nossa estimativa de $K_c = 1,040$ para $n = 2$.

A análise do número z_M de vermes de tamanho M , para vários valores de L , é feita com o auxílio da equação (3.12), onde temos que $\vartheta = 1/4$ e $D = 3/2$ para $n = 2$. Nesse caso, ao fazermos o gráfico de z_M/L^ϑ em função de M/L , devemos obter uma curva universal. A figura 3.17(a) mostra o conjunto de curvas de z_M em função de M para vários tamanhos lineares de redes L e a figura 3.17(b) mostra o gráfico de $L^D z_M$ em função de M/L^D para várias curvas. Novamente, obtemos um ótimo colapso das curvas, mostrando que nossa estimativa de $K_c = 1,040$ para $n = 2$ é muito boa.

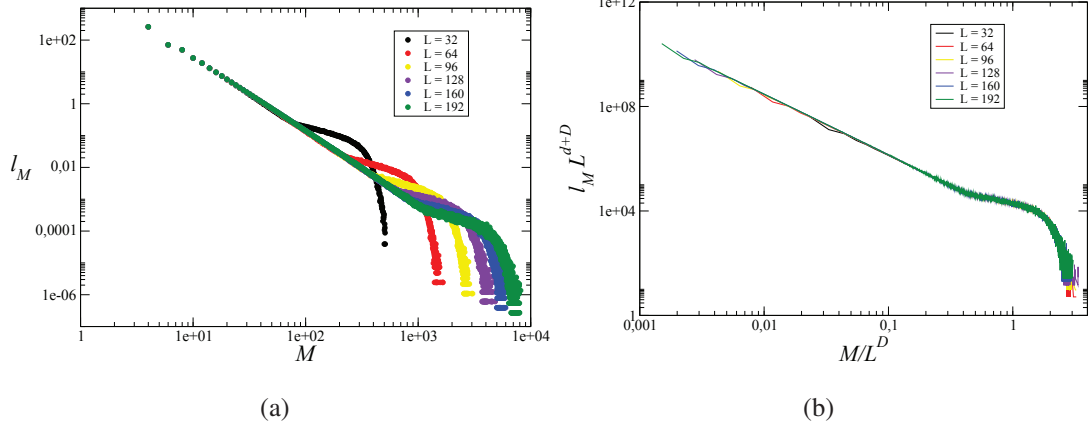


Figura 3.16 (a) Distribuição l_M de laços de tamanho M em função de M , para vários valores de L , para $n = 2$ e $K_c = 1,040$. (b) Gráfico de $l_M L^{d+D}$ em função de M/L^D , para vários valores de L , usando $D = 3/2$. Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica.

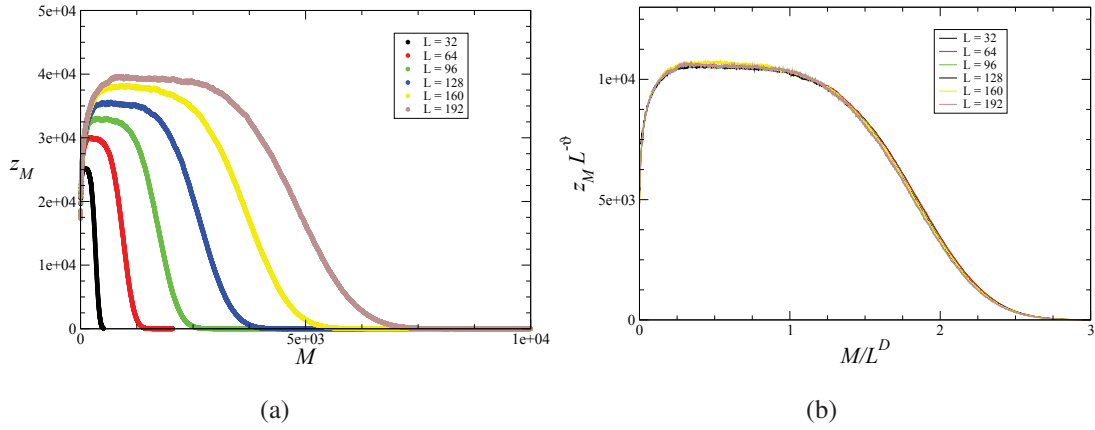


Figura 3.17 (a) Número de vermes de tamanho M , z_M , como função de M para vários tamanhos de rede, para $n = 2$ e $K_c = 1,040$. (b) Gráfico de $z_M L^\vartheta$ como função de M/L^D , usando $\vartheta = 1/4$ e $D = 3/2$.

Note que nossa estimativa de $K_c = 1,040$ para $n = 2$ difere do valor obtido através da equação (3.1) com coeficientes dados por (3.2), cujo valor é $K_c = 1,1365$. Voltaremos a discutir o caso de $K_c = 1,1365$ na próxima seção, onde apresentaremos também uma breve discussão sobre o caso em que $n > 2$.

3.4 Caso $n > 2$

Para finalizar nosso trabalho, apontamos três questões que surgem naturalmente de nossos resultados. Como notamos na seção 3.1, a observável de percolação Π_L , para $K = K_c$, cresce com o número de componentes de spin n . Isso se deve ao fato de que os laços passam a ter uma aparência mais “amassada” quando n aumenta, o que implica que a dimensão fractal desses laços cresce com n . Isto faz surgir a seguinte questão: como se comporta a observável Π_L para o caso em que $n > 2$, já que nesse caso nenhuma transição associada ao surgimento de laços infinitos é esperada e nenhum ponto de cruzamento das curvas de Π_L em função de K para vários tamanhos lineares L estaria presente? A figura 3.18 mostra a observável Π_L para o caso em que $n = 3$. Podemos notar nessa figura que quando K cresce, há um valor de K no qual as curvas tendem a se encontrar. No entanto, ao invés de se cruzarem, elas sofrem uma rápida queda ao passarem por esse ponto, de tal modo que as curvas mantêm a ordem em que se encontravam antes da queda, ou seja, a curva que vinha por cima antes da queda permanece por cima após essa queda, e o mesmo para as demais curvas. Essa rápida queda, por outro lado, contribui para evitar o cruzamento das curvas (que não é possível para $n > 2$). Por outro lado, essa queda brusca em Π_L é inesperada uma vez que muitas arestas povoam a rede quando a fugacidade K cresce. Ingenuamente esperaríamos que a probabilidade Π_L deveria crescer com K . No entanto, ao medirmos o tamanho dos grandes laços que surgem na rede, os quais têm maior probabilidade percolarem a rede, observamos que o tamanho médio deles não varia muito, o que sugere que esses laços tornam-se ainda mais “amassados”, de modo que tendem a colapsar, evitando assim a formação de laços infinitos.

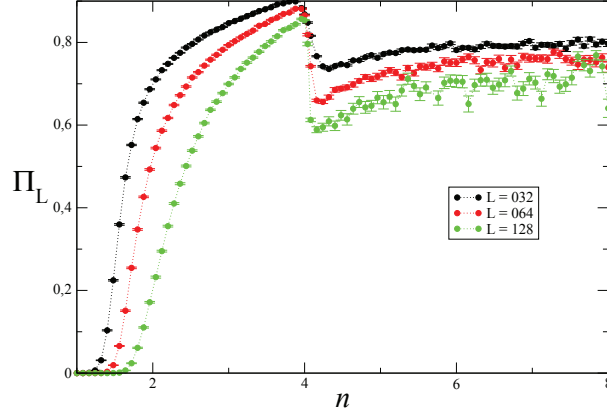


Figura 3.18 A observável Π_L em função da fugacidade de arestas K , para vários tamanhos lineares L de redes, para $n = 3$. Cada ponto do gráfico é a média de 10.000.000 de amostras.

3.4.1 Fase de baixas temperaturas

Uma outra questão a ser levantada é referente à fase de baixas temperaturas do modelo $O(n)$ de laços para $n < 2$. Em redes hexagonais, a fase crítica do modelo $O(n)$ é descrita pela linha crítica dada na equação (3.1) com coeficientes $a = 2$ e $b = 1$. A fase de baixas temperaturas pode ser obtida através de uma continuação analítica da linha crítica, e também é solução da mesma equação quadrática que a linha crítica é. Esse outro ramo para fases de baixas temperaturas é obtido também da equação (3.1), mas agora para os coeficientes $a = 2$ e $b = -1$, como mostra a figura 3.19.

No caso da rede quadrada, vimos que os coeficientes a e b dados em (3.2) descrevem com boa aproximação a linha crítica do modelo $O(n)$ para $0 < n \lesssim 1,8$. É natural, portanto, especular sobre a relevância física da solução obtida para nosso problema quando trocamos o sinal do coeficiente b dado por (3.2). Essa solução, a qual é uma continuação analítica da nossa “linha crítica” (ver figura 3.19), termina em $n = 0,714661\dots$ onde $1/K'_c \rightarrow 0$. Essa solução nos dá uma aproximação para a fase de baixas temperaturas para o modelo $O(n)$ quando não estamos próximos de $n = 2$, o que implicaria que fases de baixas temperaturas terminam em um certo n_c crítico e então entraríamos numa fase onde a rede é completamente preenchida por arestas, uma vez que a fugacidade de arestas K é infinita. Contudo, mais estudos são necessários para validar esse cenário.

A fase de baixas temperaturas do modelo $O(n)$, predita por Jacobsen e outros [47], mostra

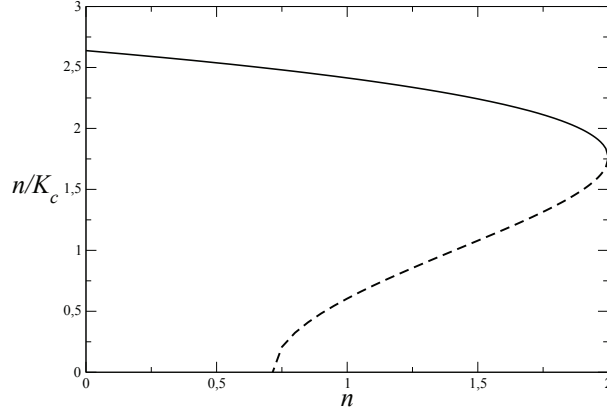


Figura 3.19 n/K_c versus n . A curva tracejada representa a continuação analítica da curva para baixas temperaturas.

correlações spin-spin gaussianas para todo n no intervalo $-2 < n < 2$ (com correções logarítmicas). Para verificar essa predição, nós utilizaremos o resultado de $K_c = 1,1365$, obtido pela “linha crítica aproximada” dada pela equação (3.1). Uma vez que nossa estimativa de K_c para $n = 2$ é 1,040, o valor 1,1365 implicaria que estamos na fase de baixas temperaturas. Podemos verificar isso medindo a dimensão fractal dos laços para $n = 2$ e $K = 1,1365$, o que pode ser feito utilizando a lei de escala (3.6), ou seja, $\langle M_{inf} \rangle \sim L^D$. A figura 3.20 mostra M_{inf} versus L , e obtemos nesse caso que $D = 1,5619(5)$, com $\chi/DOF = 0,77$, o qual está longe do valor gaussiano esperado de $D = 2$. No entanto, $D = 1,5619$ produz um ótimo colapso das curvas da distribuição l_M de laços de tamanho M , como mostra a figura 3.21.

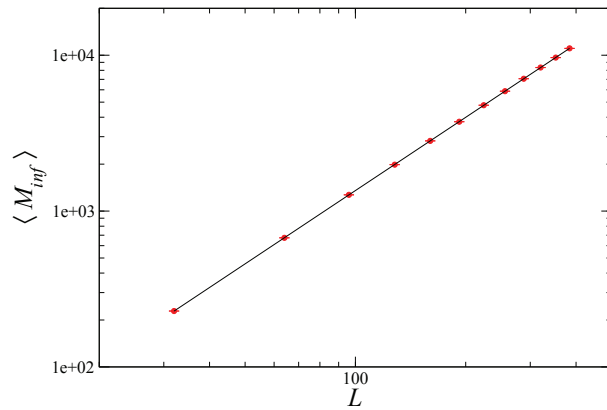


Figura 3.20 Tamanho médio $\langle M_{inf} \rangle$ de laços infinitos em função do comprimento linear L para $n = 2$ e $K = 1,1365$. Cada ponto do gráfico é a média de 10.000.000 amostras.

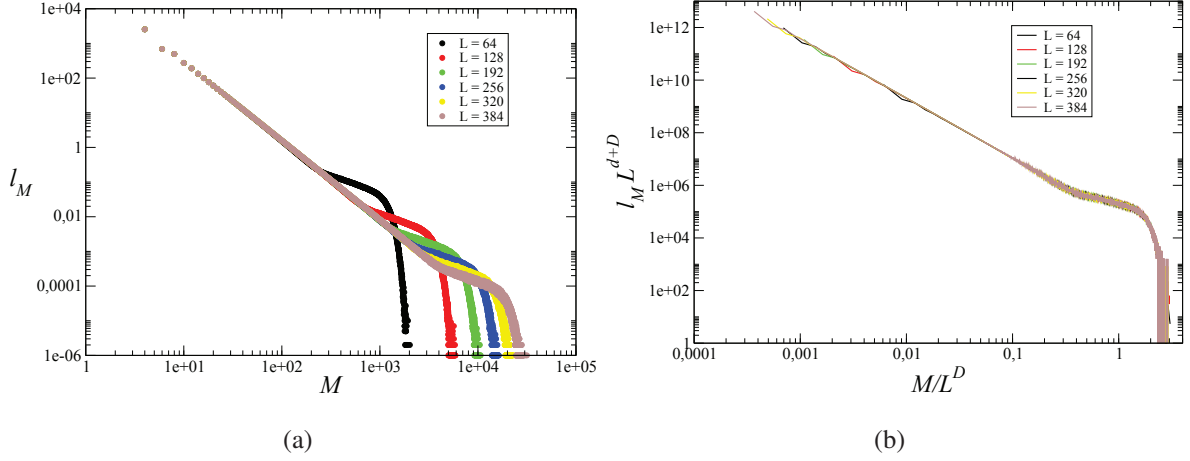


Figura 3.21 (a) A distribuição l_M de laços de tamanho M em função de M , para vários tamanhos lineares L , para $n = 2$ e $K = 1, 1365$. (b) Gráfico de $l_M L^{d+D}$ em função de M/L^D , para vários valores de L , usando $D = 1,5619$. Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica.

Também observamos um ótimo colapso para as curvas da distribuição z_M de vermes de tamanho M , quando usamos $\vartheta = 0,218(2)$; vide figura 3.22. Nós também determinamos o

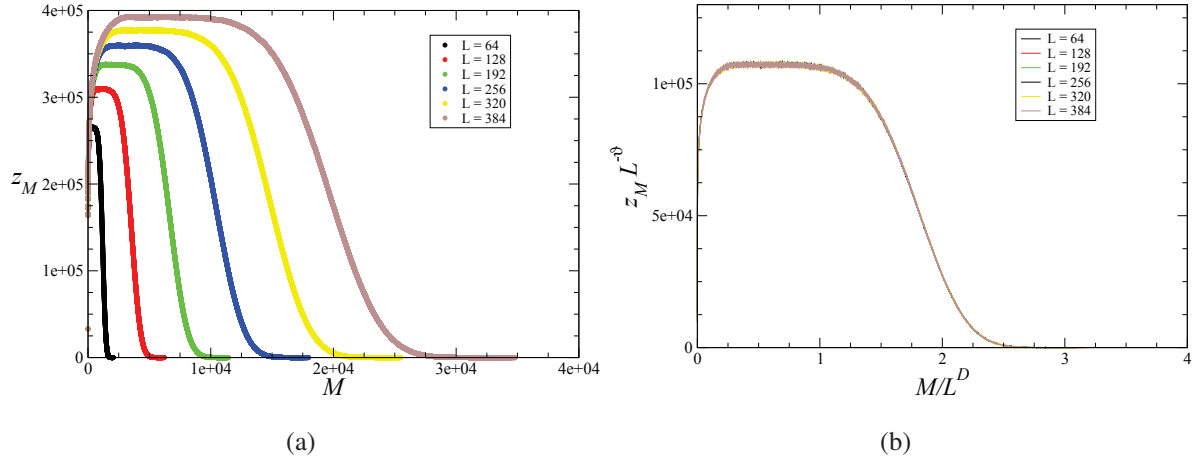


Figura 3.22 (a) A distribuição z_M de vermes de tamanho M em função de M , para vários tamanhos lineares L , para $n = 2$ e $K = 1, 1365$. (b) Gráfico de z_M/L^ϑ em função de M/L^D , para vários valores de L , usando $D = 1,5619$ e $\vartheta = 0,218$.

valor do expoente η usando o fato de que a susceptibilidade escala como $\chi \sim L^\eta$. O gráfico da susceptibilidade χ em função de L é mostrado na figura 3.23, onde o ajuste do tipo lei de potência dá $\eta = 0,2175(5)$ com $\chi/DOF = 0,94$, indicando que esse valor dá um ótimo ajuste para os nossos resultados. Dentro das barras de erro, essas estimativas satisfazem a equação

(3.16), onde temos que $\eta + \vartheta + D = 1,9974$, o qual é próximo de 2. Aparentemente, o ponto $K = 1,1365$ ainda é muito próximo do ponto crítico para exibir o comportamento gaussiano predito para a fase de baixas temperaturas. Isso parece ser o caso pelo menos para os tamanhos de redes considerados em nossas simulações.

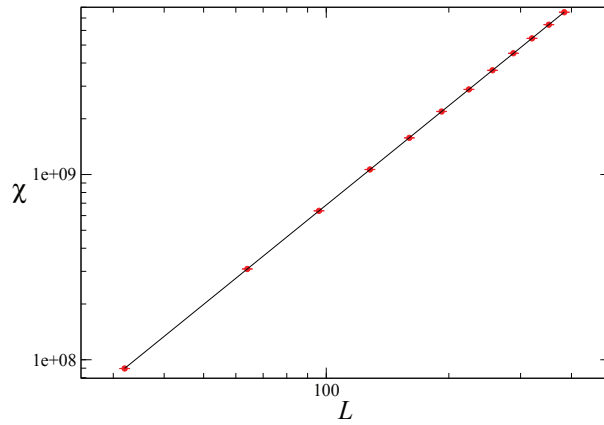


Figura 3.23 A susceptibilidade magnética χ em função do tamanho linear L , para $n = 2$ e $K = 1,1365$. Ambos os eixos da figura estão em escala logarítmica.

Arranjo periódico de bolhas assimétricas numa célula de Hele-Shaw

Neste capítulo apresentaremos uma solução exata para uma fileira periódica de bolhas assimétricas movendo-se com velocidade constante numa célula de Hele-Shaw com a geometria de um canal. Devido à periodicidade do problema, nossa solução descreve uma célula unitária contendo, em geral, um par de bolhas, e o arranjo completo (isto é, infinito) é obtido através de reflexões da célula unitária em relação aos seus lados que são equipotenciais do escoamento. Nenhuma simetria é imposta sobre a forma das bolhas, de modo que a solução apresentada é a mais geral possível. Nossa solução é obtida através de técnicas de transformação conforme para domínios duplamente conexos e se utiliza da fórmula generalizada de Schwarz-Christoffel para esse tipo de domínio.

4.1 Formulação do problema

Considere uma fileira de bolhas movendo-se com velocidade constante U , na direção x , numa célula de Hele-Shaw retangular de largura a , como mostra a figura 4.1. A célula está posicionada na horizontal (plano xy) de modo que a gravidade não realiza trabalho sobre o fluido viscoso contido nela. As laterais do canal estão em $y = 0$ e $y = a$. O fluido viscoso que envolve as bolhas se move na direção x com velocidade média V , onde $V < U$. Para simplificarmos o problema, desprezaremos a viscosidade do fluido no interior das bolhas, os efeitos de tensão superficial e os efeitos tridimensionais devido às camadas de fluido entre as bolhas e as placas da célula. A configuração de bolhas se repete com um período $2L$ ao longo da direção x da célula de Hele-Shaw. Vamos supor ainda que há duas bolhas em cada célula unitária, sendo que cada bolha é uma reflexão especular da outra em relação a um eixo vertical equidistante das bolhas; vide figura 4.1. (Essa simetria de reflexão permite reduzir o problema à metade da

célula unitária como veremos adiante.)

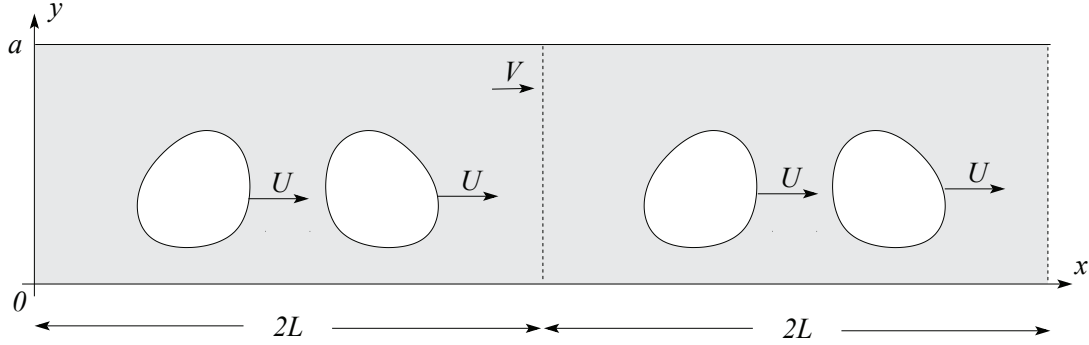


Figura 4.1 Fileira de bolhas em uma célula de Hele-Shaw.

Como é bem conhecido [48], o escoamento de um fluido viscoso numa célula de Hele-Shaw é descrito segundo a lei de Darcy:

$$\vec{v}(x, y, t) = -\frac{b^2}{12\mu} \vec{\nabla} p(x, y, t),$$

onde $v(x, y, t)$ é a velocidade do fluido viscoso, b é a distância entre as placas da célula, μ é a viscosidade do fluido e $p(x, y, t)$ é a pressão do fluido. A equação acima pode ser reescrita como

$$\vec{v}(x, y, t) = \vec{\nabla} \phi(x, y, t),$$

onde $\phi(x, y, t) = -\frac{b^2}{12\mu} p(x, y, t)$ é o potencial de velocidade do escoamento. Devido ao fluido ser incompressível, ou seja, $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$, temos que o potencial de velocidade ϕ obedece à equação de Laplace:

$$\nabla^2 \phi(x, y, t) = 0 \quad \text{na região do fluido.} \quad (4.1)$$

Para definirmos completamente o problema acima, especificaremos a seguir as condições de contorno a serem satisfeitas por ϕ na interface da bolha e nos limites da célula. Denotemos a interface de uma bolha por $\mathcal{C}$ e a região ocupada pelo fluido viscoso (exterior à bolha) por $\mathcal{D}$. A pressão p do fluido viscoso na interface da bolha é dada por

$$p_0 - p = \tau \kappa \quad \text{em } \mathcal{C},$$

onde p_0 é a pressão do fluido dentro da bolha, τ é a tensão superficial e κ é a curvatura da

interface da bolha. Desprezando a tensão superficial ($\tau = 0$), temos que

$$p = p_0.$$

Considerando a viscosidade do fluido dentro da bolha como desprezível, temos que p_0 será constante. Logo, a pressão do fluido viscoso p será constante ao longo da sua interface e igual a p_0 . Logo, temos que

$$p = p_0 \quad \text{em} \quad \mathcal{C} \quad \Rightarrow \quad \phi = \phi_0 \quad \text{em} \quad \mathcal{C}. \quad (4.2)$$

onde ϕ_0 é uma constante. Por outro lado, a bolha é uma superfície material, o que significa que o campo de velocidade $\vec{v}$ do fluido viscoso deve satisfazer à condição de contorno cinemática:

$$\vec{v} \cdot \hat{n} = \vec{U} \cdot \hat{n} \quad \text{em} \quad \mathcal{C},$$

onde $\hat{n}$ é o vetor normal exterior à interface da bolha e $\vec{U} = U\hat{x}$ é a velocidade da bolha. Essa condição pode ser escrita como

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = \vec{U} \cdot \hat{n} \quad \text{em} \quad \mathcal{C}.$$

Temos ainda que a componente normal da velocidade do fluido é nula nas laterais do canal. Logo,

$$v_y = \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad \text{em} \quad y = 0 \quad \text{e} \quad y = a. \quad (4.3)$$

Por fim, devido à periodicidade do escoamento ao longo da direção x , ou seja, $\vec{v}(x, y, t) = \vec{v}(x + 2L, y, t)$, temos que a diferença de potencial $\phi(x + 2L, y, t) - \phi(x, y, t)$ deve ser constante.

Uma vez definido o problema acima, passa a ser conveniente trabalharmos no referencial que se move com as bolhas. Nesse referencial, as bolhas estão paradas e o fluido viscoso escoar da direita para a esquerda com velocidade média $U - V$, como mostra a figura 4.2(a). As coordenadas do novo referencial são dadas por

$$x' = x - Ut \quad \text{e} \quad y' = y,$$

e o novo potencial de velocidade será

$$\phi' = \phi - Ux'. \quad (4.4)$$

Em particular, as velocidades transformam-se, é claro, segundo uma transformação de Galileu:

$$v_{x'} = \frac{\partial \phi'}{\partial x'} = v_x - U \quad \text{e} \quad v_{y'} = \frac{\partial \phi'}{\partial y'} = v_y. \quad (4.5)$$

A vantagem de trabalharmos no referencial das bolhas é que lá o escoamento passa a ser estacionário. Nesse novo referencial, vemos que a região de escoamento do nosso problema reduz-se a uma célula unitária retangular de largura a e comprimento $2L$, a qual contém duas bolhas (ver figura 4.2(a)). Devido à simetria da célula unitária, o domínio relevante do problema passa a ser dado por apenas metade da célula unitária, como mostra a figura 4.2(b).

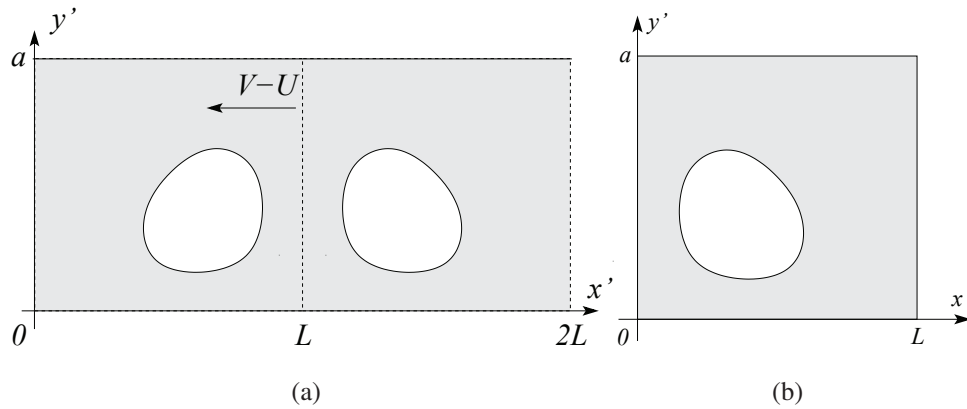


Figura 4.2 Problema no referencial das bolhas: (a) Célula unitária e (b) célula unitária reduzida.

Como no referencial das bolhas o escoamento é estacionário, é conveniente introduzir a função de corrente $\psi(x, y)$ definida por

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -v_y \quad \text{e} \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} = v_x, \quad (4.6)$$

onde omitimos a notação “linha” subentendendo-se a partir de agora que vamos trabalhar no referencial das bolhas. Comparando as equações (4.6) com (4.5), vê-se imediatamente que a função de corrente ψ e o potencial ϕ são funções harmonicamente conjugadas, isto é, satisfa-

zem às condições de Cauchy-Riemann:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad \text{e} \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Vamos agora determinar as condições de contorno a serem satisfeitas pela função de corrente ψ . Como $v_y = 0$ nas laterais do canal (vide equação (4.3)), segue que

$$v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = 0 \quad \text{em} \quad y = 0 \quad \text{e} \quad y = a,$$

que implica que ψ é constante nas laterais do canal. Logo, as laterais do canal são linhas de corrente. Por outro lado, sabemos da mecânica dos fluidos [49] que a diferença de intensidade entre duas linhas de corrente é igual ao fluxo de fluido entre elas, ou seja

$$\psi(x, a) - \psi(x, 0) = \int_0^a v_x dy.$$

Usando agora o fato de que no referencial das bolhas o fluido escoar com velocidade média $-(U - V)$ ao longo da direção x , obtemos que

$$\psi(x, a) - \psi(x, 0) = -a(U - V).$$

Podemos então fazer as seguintes escolhas

$$\psi(x, a) = -a(U - V) \quad \text{e} \quad \psi(x, 0) = 0. \quad (4.7)$$

Como a bolha é obviamente fixa no seu referencial, segue que a sua interface também é uma linha de corrente. Logo

$$\psi = \psi_0 \quad \text{em} \quad \mathcal{C}, \quad (4.8)$$

onde ψ_0 é uma constante. Das equações (4.2) e (4.4) segue ainda que na superfície da bolha o potencial ϕ deve satisfazer à seguinte condição de contorno:

$$\phi = \phi_0 - Ux \quad \text{em} \quad \mathcal{C}. \quad (4.9)$$

Finalmente, segue da periodicidade do problema que

$$\phi(x+L, y) - \phi(x, y) = -\delta,$$

onde δ é uma constante positiva. Burgess e Tanveer [18] mostraram que a constante δ pode ser expressa como

$$\delta = L \left[U - V + \frac{UJ}{aL} \right], \quad (4.10)$$

onde J representa a área da bolha. Podemos então fazer a seguinte escolha

$$\phi(0, y) = 0 \quad \text{e} \quad \phi(L, y) = -\delta. \quad (4.11)$$

Em resumo, temos que o problema formulado acima consiste em obter as funções harmônicas conjugadas ϕ e ψ satisfazendo às seguintes condições de contorno:

$$\phi(x, y) = \phi_0 - Ux \quad \text{e} \quad \psi(x, y) = \psi_0 \quad \text{em} \quad \mathcal{C}, \quad (4.12)$$

$$\phi = 0 \quad \text{em} \quad x = 0 \quad \text{e} \quad \phi = -\delta \quad \text{em} \quad x = L, \quad (4.13)$$

$$\psi = 0 \quad \text{em} \quad y = 0 \quad \text{e} \quad \psi = -a(U - V) \quad \text{em} \quad y = a. \quad (4.14)$$

O problema de escoamentos potenciais em duas dimensões pode ser também formulado em termos do potencial complexo $w(z) = \phi + i\psi$, onde $z = x + iy$ e as funções ϕ e ψ , como mencionado anteriormente, são harmônicas conjugadas. O potencial complexo $w(z)$ deve ser uma função analítica na região $\mathcal{D}$ ocupada pelo fluido viscoso e satisfazer às condições de contorno apropriadas. Reescrevendo a seguir as condições de contorno (4.12)–(4.14) na forma do potencial complexo, obtemos que

$$w = -Ux + \phi_0 + i\psi_0 \quad \text{em} \quad \mathcal{C}, \quad (4.15)$$

$$\text{Im } w = 0 \quad \text{em} \quad y = 0 \quad \text{e} \quad \text{Im } w = -a(U - V) \quad \text{em} \quad y = a, \quad (4.16)$$

$$\text{Re } w = 0 \quad \text{em} \quad x = 0 \quad \text{e} \quad \text{Re } w = -\delta \quad \text{em} \quad x = L, \quad (4.17)$$

onde Im (Re) denota a parte imaginária (real) da função.

Note que as componentes de velocidade v_x e v_y do escoamento podem ser obtidas a partir

da derivada de $w(z)$, ou seja,

$$v_x - iv_y = \frac{dw(z)}{dz}, \quad (4.18)$$

como pode ser facilmente verificado. O lado esquerdo da expressão anterior é conhecido como velocidade complexa e será denotado por

$$v(z) = v_x - iv_y. \quad (4.19)$$

Podemos interpretar $w(z)$ como sendo uma transformação conforme da região ocupada pelo fluido viscoso no plano z para um domínio correspondente no plano w . O domínio no plano w é representado por um retângulo de lados $-\delta < \phi < 0$ e $-a(U - V) < \psi < 0$, o qual contém um corte horizontal em seu interior, como mostra a figura 4.3(b). Como podemos ver nessa figura, o contorno retangular da célula reduzida no plano z é mapeado no contorno retangular do domínio no plano w , enquanto a interface da bolha é mapeada no corte horizontal. As extremidades E e F do corte representam os pontos de estagnação da bolha, ou seja, $v(z) = 0$ em E e F.

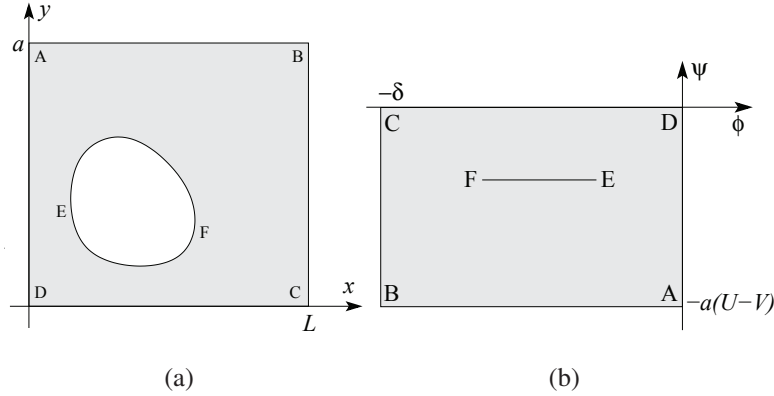


Figura 4.3 Domínios do escoamento: (a) no plano z e (b) no plano w .

Apesar de definirmos nosso problema em termos do potencial complexo $w(z)$, ainda é muito complicado obtermos z como função de w . Na próxima seção apresentaremos um artifício que nos auxiliará na obtenção da nossa solução.

4.2 O potencial complexo no referencial do laboratório

Considere a função $\tilde{w}(z)$ definida como

$$\tilde{w}(z) = w(z) + Uz. \quad (4.20)$$

A relação (4.20) define a transformação de Galileu inversa do referencial das bolhas para o referencial do laboratório. Logo $\tilde{w}(z)$ é o potencial complexo no referencial do laboratório (escrito em função das coordenadas do referencial das bolhas). Usando a equação acima e as condições (4.15)–(4.17), obtemos as seguintes condições de contorno para $\tilde{w}$:

$$\tilde{w} = \phi_0 + i(Uy + \psi_0) \quad \text{em } \mathcal{C}, \quad (4.21)$$

$$\text{Im } \tilde{w} = 0 \quad \text{em } y = 0 \quad \text{e} \quad \text{Im } \tilde{w} = aV \quad \text{em } y = a, \quad (4.22)$$

$$\text{Re } \tilde{w} = 0 \quad \text{em } x = 0 \quad \text{e} \quad \text{Re } \tilde{w} = -\delta + UL \quad \text{em } x = L. \quad (4.23)$$

A função $\tilde{w}(z)$ pode ser vista como efetuando uma transformação conforme da região de escoamento no plano z para um domínio correspondente no plano $\tilde{w}$. Das condições de contorno obtidas acima para $\tilde{w}$, obtemos que o domínio do escoamento no plano $\tilde{w}$ corresponde a um retângulo de lados $0 < \phi < \delta + UL$ e $0 < \psi < aV$, contendo um corte vertical em seu interior, como mostrado na figura 4.4(b). O contorno da célula unitária reduzida no plano z é mapeado no contorno retangular do domínio no plano $\tilde{w}$, ao passo que a interface da bolha é mapeada no corte vertical. Os pontos G e H na figura 4.4(a) representam os valores extremos da coordenada y na interface da bolha e estão associados às extremidades do corte vertical, no plano $\tilde{w}$ (ver figura 4.4(b)). Veremos adiante que o conhecimento das funções $w(z)$ e $\tilde{w}(z)$ nos permitirá obter a solução para a interface de uma forma bastante conveniente.

Na próxima seção apresentaremos uma formulação baseada em técnicas de mapeamento conforme que nos auxiliará na construção dos potenciais complexos $w(z)$ e $\tilde{w}(z)$.

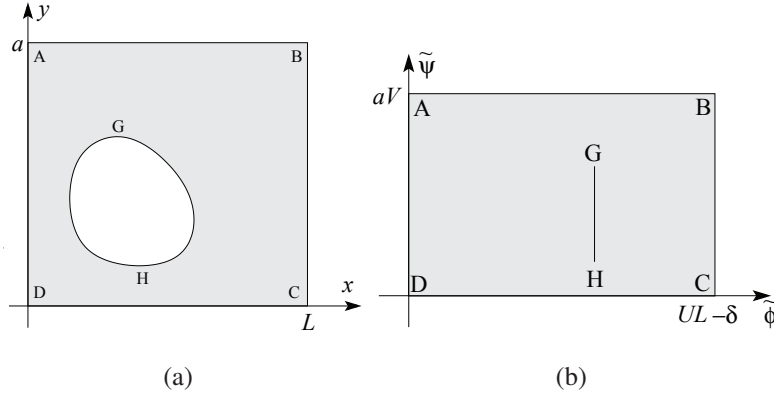


Figura 4.4 Domínios do escoamento: (a) no plano z e (b) no plano $\tilde{w}$.

4.3 Formulação via transformações conformes

Nessa seção apresentaremos uma formulação matemática baseada em técnicas de mapeamento conforme, a qual nos ajudará a construir a solução para o nosso problema. Faremos uso da transformação de Schwarz-Christoffel para domínios duplamente conexos, a qual mapeia um domínio anelar no plano ζ em um domínio duplamente conexo limitado por polígonos. Como as regiões de escoamento nos planos w e $\tilde{w}$ podem ser vistas como domínios poligonais degenerados, torna-se possível usar a fórmula de Schwarz-Christoffel para mapear esses domínios em uma região anelar como veremos a seguir.

Consideremos, portanto, a função complexa $z(\zeta)$ que mapeia a região anelar $q < |\zeta| < 1$ de um plano auxiliar ζ (figura 4.5(d)) na região do fluido $\mathcal{D}$ no plano z (figura 4.5(a)), sendo que o círculo interno, $|\zeta| = q$, é mapeado na interface $\mathcal{C}$ da bolha e o círculo unitário, $|\zeta| = 1$, no contorno retangular da célula unitária reduzida.

Denotemos por α_1 , α_2 , α_3 e α_4 os pontos sobre a círculo unitário cujas imagens no plano z são, respectivamente, os vértices C , B , A e D da célula unitária reduzida, e por β_1 , β_2 , β_3 e β_4 os pontos sobre a círculo interior $|\zeta| = q$, cujas imagens no plano z são, respectivamente, os pontos F , G , E e H sobre a interface da bolha, vide figura 4.5. Para uso posterior, adotaremos a convenção de que os pontos α_k ($k=1,2,3,4$) estão dispostos da seguinte maneira sobre o círculo unitário:

$$0 < \theta_1 < \theta_2 < \theta_3 < \theta_4 \leq 2\pi, \quad (4.24)$$

onde $\theta_k = \arg(\alpha_k)$ são argumentos dos pontos α_k .

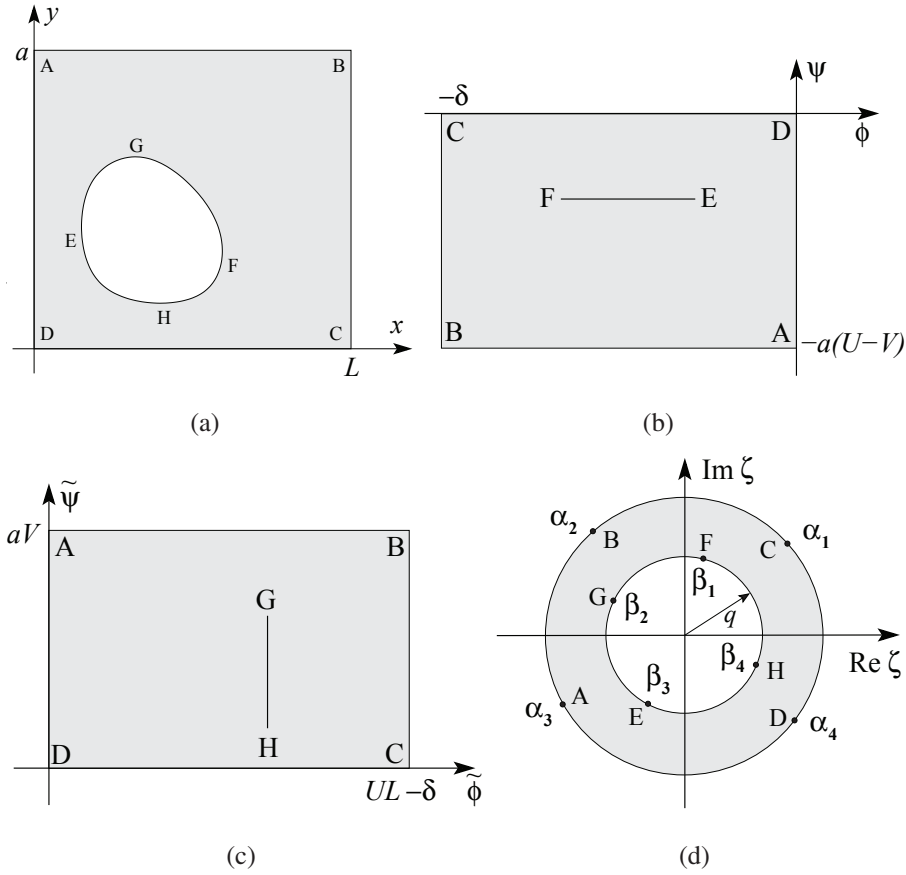


Figura 4.5 Domínios do escoamento: (a) no plano z , (b) no plano w , (c) no plano $\tilde{w}$ e (d) no plano auxiliar ζ .

Sejam agora $W(\zeta) = w(z(\zeta))$ e $\tilde{W}(\zeta) = \tilde{w}(z(\zeta))$ as funções complexas que mapeiam o anel no plano auxiliar ζ nos respectivos domínios do escoamento nos planos w (figura 4.5(c)) e $\tilde{w}$ (figura 4.5(d)). Ambas as funções mapeiam o círculo unitário nos contornos retangulares dos seus respectivos domínios, e o círculo de raio q nos respectivos cortes interiores.

Uma vez definidas as funções $z(\zeta)$, $W(\zeta)$ e $\tilde{W}(\zeta)$, segue da equação (4.20) que $z(\zeta)$ pode ser escrita como

$$z(\zeta) = -\frac{1}{U} [W(\zeta) - \tilde{W}(\zeta)]. \quad (4.25)$$

Segundo a equação (4.25), basta conhecermos as funções $W(\zeta)$ e $\tilde{W}(\zeta)$ para obtermos a solução do nosso problema. Desde que a interface $\mathcal{C}$ da bolha, em z , é mapeada no círculo de raio q , em ζ , segue das equações (4.25), (4.15) e (4.21) que a interface da bolha pode ser descrita

pelas seguintes equações paramétricas:

$$x(\theta) = -\frac{1}{U} \left[\operatorname{Re} W(qe^{i\theta}) - \phi_0 \right], \quad (4.26a)$$

$$y(\theta) = -\frac{1}{U} \left[\psi_0 - \operatorname{Im} \tilde{W}(qe^{i\theta}) \right], \quad (4.26b)$$

onde $0 < \theta < 2\pi$. Vemos assim que é possível obter a forma da bolha a partir do conhecimento das funções $W(\zeta)$ e $\tilde{W}(\zeta)$. Em outras palavras, reduzimos nosso problema original de fronteira livre ao problema equivalente, porém mais simples, de obter duas funções analíticas, $W(\zeta)$ e $\tilde{W}(\zeta)$, que realizam transformações conformes de um anel para domínios com fronteiras fixas.

As soluções para as funções W e $\tilde{W}$ podem ser obtidas agora fazendo uso da transformação de Schwarz-Christoffel para domínios duplamente conexos (ver Apêndice B). Os procedimentos para obtê-las são mostrados na próxima seção.

4.4 Solução Geral

4.4.1 A função $W(\zeta)$

Uma vez que $W(\zeta)$ mapeia o anel no plano ζ em um domínio poligonal no plano w , vamos usar a equação (B.2) do Apêndice B para obter uma expressão explícita para essa função. Fazendo as seguintes substituições em (B.2): $n_0 = 4$, $\zeta_1^0 = \alpha_1$, $\zeta_2^0 = \alpha_2$, $\zeta_3^0 = \alpha_3$, $\zeta_4^0 = \alpha_4$, $\omega_1^0 = \omega_2^0 = \omega_3^0 = \omega_4^0 = \pi/2$ e $n_1 = 2$, $\zeta_1^1 = \beta_1$, $\zeta_2^1 = \beta_3$, $\omega_1^1 = \omega_2^1 = 2\pi$, obtemos a seguinte expressão:

$$W(\zeta) = W_0 + \mathcal{K} \int_{\zeta_0}^{\zeta} \frac{P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_1}, q) P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_3}, q)}{\sqrt{\prod_{k=1}^4 P(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q)}} d\zeta, \quad (4.27)$$

onde W_0 e $\mathcal{K}$ são constantes complexas e a função complexa $P(s, q)$ é definida como

$$P(\zeta, q) = (1 - \zeta) \prod_{k=1}^{\infty} (1 - q^{2k} \zeta) (1 - q^{2k} \zeta^{-1}). \quad (4.28)$$

Observe que os 4 fatores sob raiz quadrada no denominador de (4.27) nos garantem que os pontos $\zeta = \alpha_k$ no círculo unitário sejam mapeados nos vértices A, B, C e D no plano z com ângulos retos. Além disso, os pontos $\zeta = \beta_1$ e $\zeta = \beta_3$ são mapeados nas extremidades da corte

uma vez $dW/d\zeta = 0$ nesses dois pontos (para ver que $dW/d\zeta|_{\zeta=\beta_1, \beta_2} = 0$, basta notar que $P(q^2, q) = 0$).

A função $P(\zeta, q)$ é relacionada à primeira função teta de Jacobi $\Theta_1(\zeta, q)$ [50] por

$$P(\zeta, q) = -\frac{ie^{-\tau/2}}{Cq^{1/4}}\Theta_1(i\tau/2, q), \quad (4.29)$$

onde $\tau = -\log(\zeta)$ e a constante C é dada por

$$C = \prod_{k=1}^{\infty} (1 - q^{2k}). \quad (4.30)$$

Para uso posterior, listamos algumas propriedades de $P(\zeta, q)$ que valem para $\zeta = e^{i\theta}$:

$$\overline{P(\zeta, q)} = -\frac{1}{\zeta}P(\zeta, q), \quad (4.31a)$$

$$\overline{P(q\zeta, q)} = P(q\zeta, q), \quad (4.31b)$$

$$\overline{P(q^2\zeta, q)} = -\zeta P(q^2\zeta, q), \quad (4.31c)$$

onde a notação barra denota o complexo conjugado.

Para determinar a função $W(\zeta)$ completamente é preciso especificar todos os parâmetros que aparecem na fórmula (4.27). Primeiro notemos que sem perda de generalidade podemos fazer $\zeta_0 = \alpha_4$ e $W_0 = 0$, já que ζ_0 é arbitrária e W_0 apenas fixa a origem do domínio. Por outro lado, sabemos da teoria das transformações conformes [51] que uma transformação entre um domínio duplamente conexo e uma região anular é definida unicamente a menos de um fator de módulo unitário. Em vista desse resultado podemos escolher a constante $\mathcal{K}$ como sendo puramente imaginária: $\mathcal{K} = iK$, onde K é uma constante real que será determinada oportunamente. Notemos agora que nosso problema possui 4 parâmetros livres correspondendo aos parâmetros físicos da solução, a saber: a posição (x_c, y_c) do centroide da bolha (sendo um parâmetro para cada coordenada), a área J da bolha e o meio-período L da célula unitária reduzida. Por outro lado, nossa solução geral em (4.27) possui 8 parâmetros, a saber: a constante $\mathcal{K}$, o raio q , os quatro pontos α_k e os dois pontos β_1 e β_3 . Podemos, portanto, especificar livremente quatro desses parâmetros, sendo que os demais devem ser determinados a partir das condições de contorno para a função $W(\zeta)$, como discutido a seguir.

- **Condição I:** O retângulo do domínio w deve estar orientado apropriadamente.

Analisemos essa condição da seguinte maneira: podemos ver das figuras 4.5(b) e 4.5(d) que a função $W(\zeta)$ tem parte imaginária constante quando percorremos o círculo unitário $\zeta = e^{i\theta}$, de $\theta = \theta_2$ até $\theta = \theta_3$. Dessa forma temos que

$$\operatorname{Im} \left[\frac{dW(e^{i\theta})}{d\theta} \right] = 0, \quad \theta_2 < \theta < \theta_3. \quad (4.32)$$

Usando agora que $\operatorname{Im}[p] = \frac{p - \bar{p}}{2i}$ e que

$$\frac{dW}{d\theta} = \frac{dW}{d\zeta} \frac{d\zeta}{d\theta} = i\zeta \frac{dW}{d\zeta},$$

onde se usou que $d\zeta/d\theta = i\zeta$ para $\zeta = e^{i\theta}$, temos de (4.32) que

$$\begin{aligned} \frac{dW}{d\theta} - \overline{\left(\frac{dW}{d\theta} \right)} &= 0, \quad \zeta = \exp(i\theta), \quad \theta_2 < \theta < \theta_3, \\ i\zeta \frac{dW}{d\zeta} - \overline{\left(i\zeta \frac{dW}{d\zeta} \right)} &= 0, \\ i\zeta \frac{dW}{d\zeta} + i\bar{\zeta} \overline{\left(\frac{dW}{d\zeta} \right)} &= 0. \end{aligned}$$

Após simples manipulação obtemos que a equação (4.32) pode ser escrita como

$$\frac{dW}{d\zeta} = -\frac{1}{\zeta^2} \overline{\left(\frac{dW}{d\zeta} \right)}, \quad \zeta = \exp(i\theta), \quad \theta_2 < \theta < \theta_3, \quad (4.33)$$

onde usamos que $\bar{\zeta} = \frac{1}{\zeta}$ para $\zeta = e^{i\theta}$. A equação (4.33) pode ser resolvida como segue. A partir de (4.27) temos que a função $\overline{(dW/d\zeta)}$ é dada por

$$\overline{\left(\frac{dW}{d\zeta} \right)} = -iK \frac{\overline{P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_1}, q)} \overline{P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_3}, q)}}{\sqrt{\prod_{k=1}^4 P(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q)}}, \quad (4.34)$$

onde já usamos que $\mathcal{K} = iK$. Aplicando a propriedade (4.31b) aos fatores $P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_l}, q)$ no numerador de (4.34), pois o argumento $q^2 \frac{\zeta}{\beta_l}$ tem módulo igual a q , e a propriedade (4.31a) aos fatores $P(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q)$ no denominador da mesma, pois o argumento $\frac{\zeta}{\alpha_k}$ tem módulo

unitário, obtemos respectivamente que

$$\begin{aligned}\overline{P\left(q^2 \frac{\zeta}{\beta_l}, q\right)} &= P\left(q^2 \frac{\zeta}{\beta_l}, q\right), \\ \overline{P\left(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q\right)} &= -\frac{\alpha_k}{\zeta} P\left(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q\right).\end{aligned}$$

Aplicando as duas últimas relações acima na função $\overline{(dW/d\zeta)}$, obtemos que

$$\begin{aligned}\overline{\left(\frac{dW}{d\zeta}\right)} &= -iK \frac{\zeta^2}{\sqrt{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}} \frac{P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_1}, q) P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_3}, q)}{\sqrt{\prod_{k=1}^4 P(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q)}} \\ &= -\frac{\zeta^2}{\sqrt{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}} \frac{dW}{d\zeta}.\end{aligned}\tag{4.35}$$

Substituindo esta última equação em (4.33), obtemos o seguinte resultado

$$\frac{1}{\sqrt{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}} = 1,\tag{4.36}$$

o qual nos dá uma simples relação entre os 4 pontos α_k , a saber:

$$\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 = 1.\tag{4.37}$$

Vemos então que um dos 4 pontos α_k , digamos α_4 , é dependente dos outros 3 pontos e pode ser escrito como

$$\alpha_4 = \overline{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3},$$

onde usamos que $1/\alpha_k = \overline{\alpha_k}$, já que $|\alpha_k| = 1$.

- **Condição II:** O corte no plano w correspondente à bolha deve estar na horizontal.

Essa condição nos diz que a função $W(\zeta)$ deve ter parte imaginária constante ao longo do círculo $\zeta = qe^{i\theta}$ e pode ser expressa da seguinte forma:

$$\text{Im} \left[\frac{dW(qe^{i\theta})}{d\theta} \right] = 0.\tag{4.38}$$

Temos então que

$$\begin{aligned}\frac{dW}{d\theta} - \overline{\left(\frac{dW}{d\theta}\right)} &= 0, \\ i\zeta \frac{dW}{d\zeta} + i\bar{\zeta} \overline{\left(\frac{dW}{d\zeta}\right)} &= 0 \\ i\zeta \frac{dW}{d\zeta} + i\frac{q^2}{\zeta} \overline{\left(\frac{dW}{d\zeta}\right)} &= 0\end{aligned}$$

onde usamos que $dW/d\theta = i\zeta(dW/d\zeta)$ e $\bar{\zeta} = q^2/\zeta$, para $\zeta = qe^{i\theta}$. Portanto, a condição (4.38) pode ser escrita como

$$\frac{dW}{d\zeta} = -\frac{q^2}{\zeta^2} \overline{\left(\frac{dW}{d\zeta}\right)} \quad \text{para } \zeta = q\exp(i\theta). \quad (4.39)$$

Para obtermos $\overline{(dW/d\zeta)}$ em função de $dW/d\zeta$, podemos aplicar a propriedade (4.31c) nos fatores do numerador de (4.34) e a propriedade (4.31a) nos fatores do denominador da mesma, obtendo assim que

$$\begin{aligned}\overline{P\left(q^2 \frac{\zeta}{\beta_j}, q\right)} &= -\frac{\zeta}{\beta_j} P\left(q^2 \frac{\zeta}{\beta_j}, q\right), \\ \overline{P\left(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q\right)} &= P\left(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q\right).\end{aligned}$$

Aplicando as duas últimas equações em (4.34), obtemos, após algumas manipulações, que

$$\overline{\left(\frac{dW}{d\zeta}\right)} = \frac{\zeta^2}{\beta_1 \beta_3} \frac{dW}{d\zeta}. \quad (4.40)$$

Substituindo (4.40) em (4.39), encontramos que

$$\beta_1 \beta_3 = q^2. \quad (4.41)$$

Como vemos, β_1 e β_3 também apresentam uma simples relação entre eles, a qual diz que um é o complexo conjugado do outro:

$$\beta_3 = \overline{\beta_1}, \quad (4.42)$$

onde usamos que $\overline{\beta_l} = \frac{q^2}{\beta_l}$, já que $|\beta_l| = q$.

- **Condição III:** A altura do retângulo no plano w deve ser igual a $a(U - V)$, como visto na figura 4.5(b). Essa condição pode ser escrita como

$$W|_A^D \equiv W(\alpha_4) - W(\alpha_3) = ia(U - V). \quad (4.43)$$

a qual pode ser usada para determinar a constante K através da expressão

$$K^{-1} = \frac{1}{a(U - V)} \int_{\theta_3}^{\theta_4} \frac{P(q^2 \frac{e^{i\theta}}{\beta_1}, q) P(q^2 \frac{e^{i\theta}}{\beta_3}, q)}{\prod_{k=1}^4 \sqrt{P(e^{i(\theta - \theta_k)}, q)}} ie^{i\theta} d\theta. \quad (4.44)$$

Até o momento, conseguimos reduzir o número total de parâmetros na equação (4.27) de 8 para apenas 5 parâmetros, a saber: o raio q e os pontos α_1 , α_2 , α_3 e β_1 (vamos nos referir aos próprios pontos α_k e β_l ao invés de seus argumentos, pois os mesmos dependem apenas de seus respectivos argumentos). Entretanto, apenas 4 desses parâmetros são independentes. Podemos então determinar o parâmetro β_1 a partir da seguinte condição:

$$\oint W_\zeta d\zeta = 0 \quad \text{para } |\zeta| = q. \quad (4.45)$$

Esta última condição é usada para assegurar que a função $W(\zeta)$ seja univalente em seu domínio de definição.

Os quatro parâmetros independentes de $W(\zeta)$, q , α_1 , α_2 e α_3 , estão relacionados com os quatro parâmetros físicos do problema, a saber: a área e as coordenadas do centroide da bolha, e o comprimento da célula unitária reduzida. Apresentaremos a seguir os procedimentos para obter a função complexa $\tilde{W}(\zeta)$.

4.4.2 A função $\tilde{W}(\zeta)$

Vamos agora construir a função $\tilde{W}(\zeta)$ seguindo um procedimento similar ao utilizado acima para obter $W(\zeta)$.

Partindo novamente da equação (B.2) e utilizando os seguintes parâmetros: $n_0 = 4$, $\zeta_1^0 = \alpha_1$, $\zeta_2^0 = \alpha_2$, $\zeta_3^0 = \alpha_3$, $\zeta_4^0 = \alpha_4$, $\omega_1^0 = \omega_2^0 = \omega_3^0 = \omega_4^0 = \pi/2$ e $n_1 = 2$, $\zeta_1^1 = \beta_2$, $\zeta_2^1 = \beta_4$,

$\omega_1^1 = \omega_2^1 = 2\pi$, obtemos que $\tilde{W}(\zeta)$ é dada pela seguinte expressão:

$$\tilde{W}(\zeta) = \mathcal{K} \int_{\alpha_4}^{\zeta} \frac{P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_2}, q) P(q^2 \frac{\zeta}{\beta_4}, q)}{\sqrt{\prod_{k=1}^4 P(\frac{\zeta}{\alpha_k}, q)}} d\zeta, \quad (4.46)$$

onde $\mathcal{K}$ é uma constante complexa a ser determinada mais tarde. Assim como fizemos para $W(\zeta)$, fixamos aqui a origem de maneira tal que $\tilde{W}(\alpha_4) = 0$. Na fórmula (4.46) temos 3 parâmetros não conhecidos, a saber: $\mathcal{K}$, β_2 e β_4 , os quais devem ser determinados a partir das condições de contorno de $\tilde{W}(\zeta)$. Temos que $\tilde{W}(\zeta)$ deve satisfazer às seguintes condições de contorno:

- **Condição I:** O contorno retangular do domínio deve estar apropriadamente orientado.

Segue das figuras 4.5(c) e 4.5(d) que $\tilde{W}(\zeta)$ deve ter parte imaginária constante quando ζ percorre o círculo unitário indo de $\theta = \theta_2$ até $\theta = \theta_3$. Temos portanto que

$$\text{Im} \left[\frac{d\tilde{W}(e^{i\theta})}{d\theta} \right] = 0, \quad \theta_2 < \theta < \theta_3.$$

Seguindo um procedimento similar àquele utilizado para obter a equação (4.36), obtemos que

$$\exp(2i \arg(\mathcal{K})) = -\frac{1}{\sqrt{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}},$$

a qual comparada com (4.36) resulta em $\arg(\mathcal{K}) = \pi/2$, o que implica em

$$\mathcal{K} = i\tilde{K}, \quad (4.47)$$

onde $\tilde{K}$ é uma constante real a ser determinada posteriormente.

- **Condição II:** O corte no plano $\tilde{w}$ correspondente à bolha deve estar na vertical.

Isso significa que a função $\tilde{W}(\zeta)$ deve ter parte real constante ao longo do círculo $|\zeta| = q$. Essa condição pode ser expressa como

$$\text{Re} \left[\frac{d\tilde{W}(e^{i\theta})}{d\theta} \right] = 0,$$

Usando agora que $\text{Re}[a] = \frac{a+\bar{a}}{2}$, temos que

$$\begin{aligned} i\zeta \frac{d\tilde{W}}{d\zeta} - i\bar{\zeta} \overline{\left(\frac{d\tilde{W}}{d\zeta}\right)} &= 0, \\ i\zeta \frac{d\tilde{W}}{d\zeta} - i\frac{q^2}{\zeta} \overline{\left(\frac{d\tilde{W}}{d\zeta}\right)} &= 0, \end{aligned}$$

e portanto, a condição acima implica que

$$\frac{d\tilde{W}}{d\zeta} = \frac{q^2}{\zeta^2} \overline{\left(\frac{d\tilde{W}}{d\zeta}\right)}, \quad (4.48)$$

para $\zeta = qe^{i\theta}$. Após alguns cálculos similares aos que levam à equação (4.41), a última equação resulta na seguinte relação entre os pontos β_l :

$$\beta_2 \beta_4 = -q^2, \quad (4.49)$$

a qual pode ainda ser escrita como

$$\beta_4 = -\overline{\beta_2}, \quad (4.50)$$

ou seja, um parâmetro é igual ao negativo do complexo conjugado do outro.

- **Condição III:** Devemos ter

$$\oint \tilde{W}_\zeta d\zeta = 0 \quad \text{para } |\zeta| = q. \quad (4.51)$$

Essa condição é necessária para garantir que $\tilde{W}(\zeta)$ seja uma função univalente.

- **Condição IV:** A altura do retângulo no plano $\tilde{w}$ deve ser igual a aV , como podemos ver na figura 4.5(c). Essa condição pode ser escrita como

$$\tilde{W}|_A^D = -iaV, \quad (4.52)$$

e será utilizada para determinar a constante $\tilde{K}$ (vide equação (4.47)) através da seguinte

expressão:

$$\tilde{K}^{-1} = -\frac{1}{aV} \int_{\theta_3}^{\theta_4} \frac{P(q^2 \frac{e^{i\theta}}{\beta_2}, q) P(q^2 \frac{e^{i\theta}}{\beta_4}, q)}{\sqrt{\prod_{k=1}^4 P(e^{i(\theta-\theta_k)}, q)}} i e^{i\theta} d\theta. \quad (4.53)$$

As três últimas condições determinam os valores dos parâmetros β_4 , β_2 e $\tilde{K}$. Portanto, a função $\tilde{W}(\zeta)$ dada pela equação (4.46) dependerá apenas dos parâmetros q , α_1 , α_2 e α_3 .

Na próxima seção vamos discutir o caso especial onde $U = 2V$, o qual pode ser usado para gerar soluções para qualquer $U > V$ através de simples transformações de dilatação e contração nas coordenadas x e y da interface da bolha.

4.4.3 Caso especial: $U = 2V$

Como mencionado anteriormente, soluções com $U = 2V$ são especiais pelo fato de poderem gerar outras soluções para qualquer $U > V$. Essa propriedade está discutida em detalhes, por exemplo, nas referências [52, 21], mas por questão de completeza decidimos apresentar aqui uma discussão resumida desse caso. Podemos notar da figura 4.5(b) que a largura do retângulo representando o domínio w é proporcional a $(U - V)$. Desta forma, podemos obter o mapa W_U , para um dado valor de U , em função do mapa W_{2V} para $U = 2V$, através da seguinte expressão

$$W_U(\zeta) = \frac{(U - V)}{V} W_{2V}(\zeta). \quad (4.54)$$

Segue então que a constante real δ (ver figura 4.5(b)) comporta-se também como

$$\delta_U = \frac{(U - V)}{V} \delta_{2V}. \quad (4.55)$$

Seguindo o mesmo raciocínio, vemos da figura 4.5(c) que a altura do retângulo representando o domínio $\tilde{w}$ independe de U . Logo, podemos escrever que

$$\tilde{W}_U(\zeta) = \tilde{W}_{2V}(\zeta). \quad (4.56)$$

Em particular, o meio-período L_U da célula unitária reduzida pode ser obtido a partir da

condição de contorno (4.23) para $\tilde{W}(\zeta)$, usando a propriedade (4.56). Temos então que

$$UL_U - \delta_U = 2VL_{2V} - \delta_{2V},$$

Usando o fato de que δ_U obedece a propriedade (4.55), obtemos que

$$L_U = \frac{\rho}{V} \delta_{2V} + (1 - \rho)L_{2V}. \quad (4.57)$$

onde ρ é uma variável adimensional definida como

$$\rho = 1 - \frac{2V}{U}. \quad (4.58)$$

Pelo fato de $U > V$, temos que $\rho \in (-1, 1)$. Enquanto o comprimento L da célula reduzida varia com a velocidade U , a altura a da célula independe de U , ou seja

$$a_U = a_{2V}.$$

Essa relação é notada quando observamos que a altura aV do retângulo na figura 4.5(c) satisfaz a relação (4.56).

Usando (4.54) e (4.56) em (4.25), obtemos a seguinte expressão para $z_U(\zeta)$:

$$z_U(\zeta) = -\frac{1}{U} \left[\frac{(U - V)}{V} W_{2V}(\zeta) - \tilde{W}_{2V}(\zeta) \right], \quad (4.59)$$

a qual pode ser reescrita em termos de ρ como

$$z_U(\zeta) = -\frac{1}{2V} [(1 + \rho)W_{2V}(\zeta) - (1 - \rho)\tilde{W}_{2V}(\zeta)]. \quad (4.60)$$

As relações para as coordenadas x e y da interface $\mathcal{C}$ da bolha são obtidas, respectivamente, a partir das partes real e imaginária de (4.60), quando $\zeta = q \exp(i\theta)$. Utilizando as equações (4.26a) e (4.26b), para $U = 2V$, e a equação (4.60), pode-se mostrar que a solução para a interface da bolha, para qualquer $U > V$, pode ser obtida a partir da sua solução para $U = 2V$

pelas seguintes equações:

$$x_U(\theta) = (1 + \rho) x_{2V}(\theta) - \frac{\rho}{V} \phi_{0,2V} \quad (4.61a)$$

$$y_U(\theta) = (1 - \rho) y_{2V}(\theta) - \frac{\rho}{V} \psi_{0,2V}. \quad (4.61b)$$

onde $0 < \theta < 2\pi$ e $\phi_{0,2V}$ e $\psi_{0,2V}$ são respectivamente as constantes ϕ_0 e ψ_0 para $U = 2V$. As equações (4.61a) e (4.61b) reescalam as coordenadas das bolhas além de promoverem translações das mesmas. Notemos que quando $\rho > 0$ (ou seja, $U > 2$), ocorre uma expansão da coordenada x das bolhas e uma contração da coordenada y das mesmas. Para $\rho < 0$ ($1 < U < 2$), observamos o contrário. Em vista da propriedade apresentada nessa subseção, apresentaremos na próxima seção apenas soluções com $U = 2V$.

4.5 Exemplos

Nessa seção apresentaremos exemplos concretos de nossa solução apresentada na seção anterior, para o caso em que $U = 2V$. Primeiramente mostraremos como obter soluções já conhecidas na literatura, as quais constituem casos particulares da nossa solução geral. Até agora, consideramos as largura da célula unitária a e a velocidade V do fluido arbitrárias, mas sem perda de generalidade, faremos $a = 1$ e $V = 1$ no restante dessa seção.

Inicialmente consideraremos o caso em que a bolha tem simetria em relação tanto à linha central do canal quanto a um eixo perpendicular a essa linha. Essa solução é obtida pela seguinte escolha de parâmetros:

$$\overline{\alpha_4} = -\alpha_3 = -\overline{\alpha_2} = \alpha_1. \quad (4.62)$$

Esse tipo de solução possui apenas dois parâmetros livres: o raio q e o argumento $\theta_1 = \arg(\alpha_1)$. Devido à simetria do problema, para qualquer valor de q e θ_1 , obtemos $\beta_1 = \pi/2$ e $\beta_2 = 0$, usando as equações (4.45) e (4.51), respectivamente. Um exemplo desse caso é mostrado na figura 4.6, o qual representa a solução obtida originalmente por Burgess e Tanveer [18] para uma fileira de bolhas simétricas na célula de Hele-Shaw. Em razão da sua simetria em relação ao eixo transversal ao canal, a solução apresenta apenas uma bolha por célula unitária, de modo

que a célula unitária reduzida representa a própria célula unitária do problema.

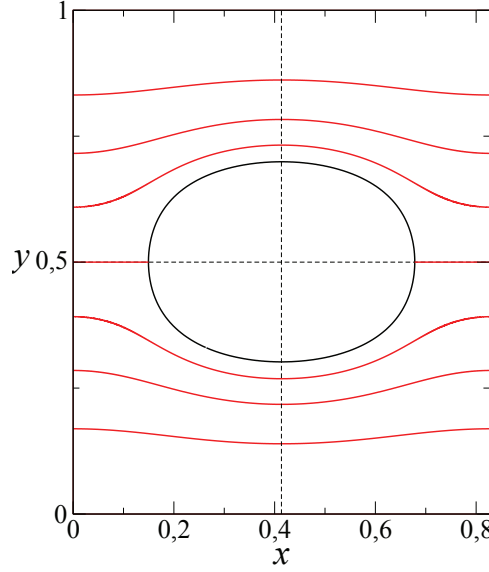


Figura 4.6 Solução de Burgess e Tanveer. Usamos os seguintes parâmetros: $q = 0,5$ e $\theta_1 = 0,5$, e obtemos $2L = 0,83$.

Os parâmetros θ_1 e q estão relacionados respectivamente com o comprimento $2L$ da célula unitária e com a área J da bolha, já que a posição do centroide da bolha é determinada pela simetria da configuração. Tomando o limite em que $\theta_1 \rightarrow 0$, temos que $L \rightarrow \infty$, ou seja, nossa solução passa a representar a solução de Taylor e Saffman [16], onde temos uma única bolha numa célula de Hele-Shaw.

Os próximos dois casos representam soluções onde as bolhas apresentam apenas um dos tipos de simetria citados acima, ou seja, ou apenas simetria em relação ao eixo central do canal, ou apenas simetria em relação a um eixo transversal passando pelo centroide da bolha.

Para obtermos uma bolha simétrica apenas em relação à linha central do canal, basta fazermos a seguinte escolha de parâmetros:

$$\alpha_2 = -\overline{\alpha_1} \quad \alpha_4 = -\overline{\alpha_3}, \quad (4.63)$$

onde θ_1 e θ_3 são independentes. Esse tipo de solução depende apenas de 3 parâmetros: o raio q e os ângulos θ_1 e θ_3 . Assim como no primeiro caso, temos que, por simetria, $\beta_1 = \pi/2$, porém o valor de β_2 dependerá dos parâmetros da solução. Essa solução é um caso particular

da solução devido a Vasconcelos [20], a qual contém um número arbitrário de bolhas por célula unitária.

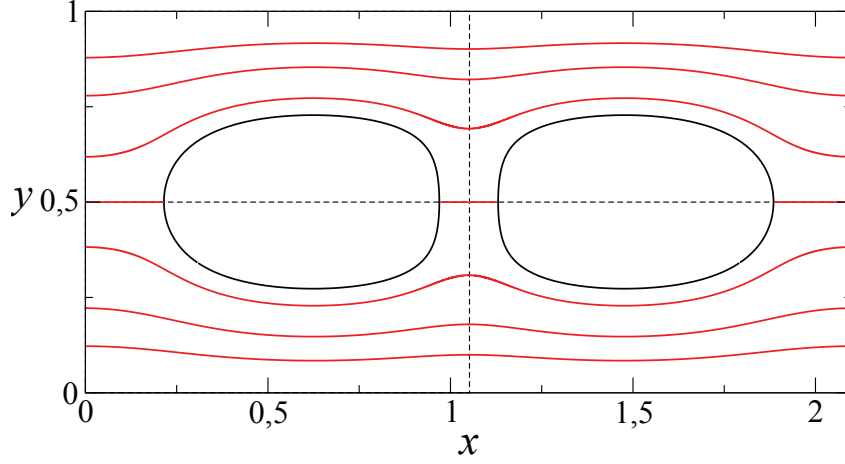


Figura 4.7 Solução simétrica em relação ao eixo $y = 0,5$. Usamos os seguintes parâmetros: $q = 0,6$, $\theta_1 = 0,2$ e $\theta_3 = 1,0$, e obtemos $\beta_2 = 0,29$ e $2L = 2,10$.

Os argumentos θ_1 e θ_3 estão relacionados com a coordenada x_c do centroide da bolha ($y_c = 1/2$ por simetria) e com o comprimento $2L$ da célula unitária, enquanto que o raio q está relacionado com a área J de cada bolha. Um exemplo desse caso é mostrado na figura 4.7. A solução de Taylor e Saffman [16] é novamente obtida quando tomamos os limites $\theta_1 \rightarrow 0$ e $\theta_3 \rightarrow 0$. No entanto, quando tomamos apenas o limite de, digamos, θ_1 tendendo a zero, obtemos uma solução que representa um canal contendo apenas duas bolhas simétricas, a qual foi obtida por Vasconcelos [53, 52].

Para obtermos uma bolha simétrica apenas em relação a um eixo transversal ao canal, basta fazermos a seguinte escolha de parâmetros:

$$\alpha_3 = \overline{\alpha_2} \quad \alpha_4 = \overline{\alpha_1}, \quad (4.64)$$

onde não há relação entre θ_1 e θ_2 . Esse tipo de solução depende de 3 parâmetros: q , θ_1 e θ_2 . Por simetria temos que $\beta_2 = 0$, ao passo que β_1 dependerá dos parâmetros da solução. Assim como no primeiro exemplo, temos somente uma bolha por célula unitária cujo centroide se encontra sobre o eixo de simetria da mesma, como mostra a figura 4.8.

Finalmente chegamos ao caso geral de nossa solução, onde nenhuma consideração de sime-

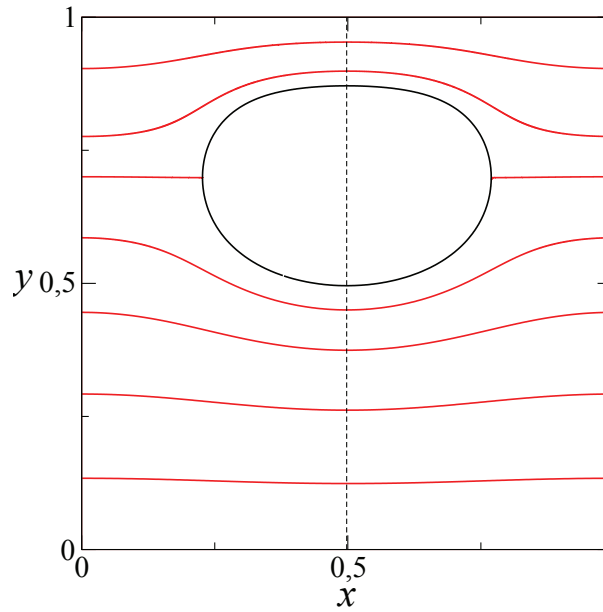


Figura 4.8 Solução simétrica em relação ao eixo $x = L$. Usamos os seguintes parâmetros: $q = 0,5$, $\theta_1 = 0,3$ e $\theta_2 = 1,5$, e obtemos $\beta_1 = 1,21$ e $2L = 1,0$.

tria é feita, e portanto a solução depende dos 4 parâmetros livres. Como mostrado na figura 4.9, os centroides das bolhas não se encontram sobre nenhum eixo de simetria da célula, e a forma das bolhas não possui qualquer simetria. É importante ressaltar que essa é a primeira vez que soluções exatas para bolhas completamente assimétricas são obtidas na célula de Hele-Shaw [54].

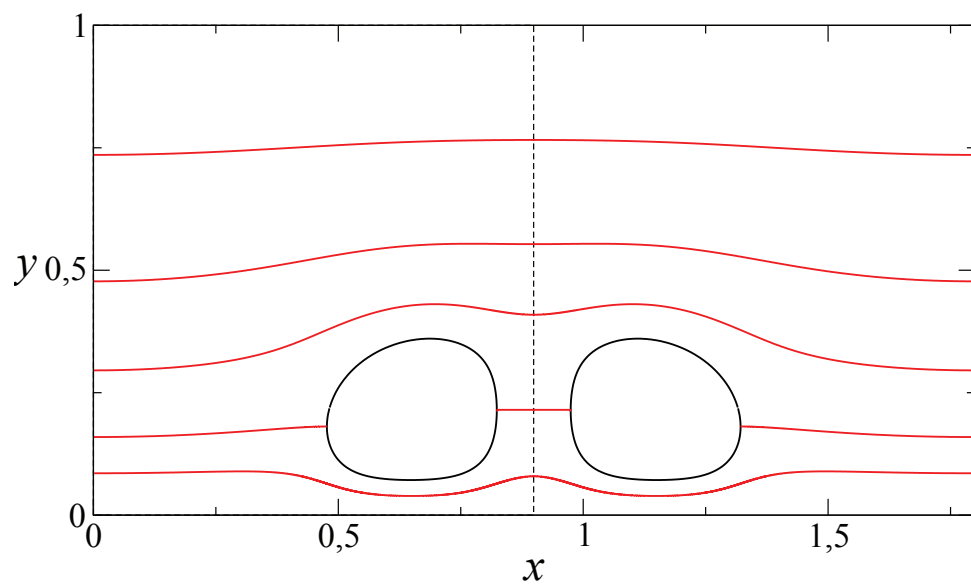


Figura 4.9 Solução geral do problema. Usamos os seguintes parâmetros: $q = 0,55$, $\theta_1 = 1,0$, $\theta_2 = 3,6$ e $\theta_3 = 3,8$, e obtemos $\beta_1 = 1,98$, $\beta_2 = 0,30$ e $2L = 1,8$.

CAPÍTULO 5

Conclusões

Nessa tese apresentamos novos resultados para as duas classes de problemas abordados. No estudo do modelo $O(n)$ de laços na rede quadrada, apresentamos um algoritmo baseado no algoritmo WORM que nos auxiliou de maneira eficiente nas simulações Monte Carlo realizadas. Nosso algoritmo identifica, a cada passo de simulação, o número total de arestas, laços e cruzamentos que constituem as configurações de laços, os quais são necessários para as propostas de atualização da configuração do sistema. A partir dos resultados das simulações Monte Carlo, pudemos obter estimativas para os valores da fugacidade crítica para vários valores de n . Além disso, extraímos alguns expoentes críticos para o modelo através das estatísticas de cadeias abertas (vermes) e fechadas (laços), e mostramos nossos resultados estão em ótimo acordo com os resultados teóricos esperados para o modelo. Particularmente, discutimos os casos para $n \geq 2$, onde muitas questões interessantes surgem de modo a sugerirem uma continuação futura desse trabalho. Enfatizamos mais uma vez que apesar de nosso estudo do modelo $O(n)$ ter sido feito em sistema bidimensionais ($d = 2$) e, em especial, para a rede quadrada, o algoritmo descrito nessa tese pode ser utilizado para realizar simulações em sistemas com dimensionalidades maiores ($d > 2$), além de outros tipos de rede.

No estudo sobre dinâmica de interfaces na célula de Hele-Shaw, apresentamos uma solução exata geral para um arranjo periódico de bolhas que se move com velocidade constante ao longo de uma célula de Hele-Shaw com geometria de canal. Usando a periodicidade da solução, mostramos que o domínio relevante do problema pode ser reduzido a uma célula unitária (reduzida) que contém uma única bolha. Nenhuma imposição de simetria sobre forma das bolhas foi feita, de modo que nossa solução é capaz de produzir bolhas completamente assimétricas. Nossa solução foi obtida por métodos de transformações conformes entre domínios duplamente conexos, onde utilizamos a transformação de Schwarz-Christoffel generalizada para essa classe de domínios. Para obter a solução do problema, construímos os mapas complexos adequados, os quais mapeiam os domínios limitados por polígonos nos planos complexos w e $\tilde{w}$ para um

domínio anelar no plano auxiliar ζ . Mostramos ainda que nossa solução é capaz de reproduzir soluções simétricas já conhecidas, comprovando sua generalidade. Tal problema é ainda passível de generalização, pelo menos para o caso de várias bolhas por célula unitária. No entanto, uma abordagem puramente analítica torna-se bastante complicada, sendo necessário realizar também uma abordagem através de métodos numéricos.

Referências

- [1] H. Zhao e J. V. Maher. Associating-polymer effects in a hele-shaw experiment. *Phys. Rev. E*, **47**: 4278, 1993.
- [2] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. London: Academic Press, 1982.
- [3] S. Rohde e O. Schramm. Basic properties of SLE. *Annals Math.*, **161**, 2005.
- [4] T. A. Witten Jr. e L. M. Sander. Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon. *Phys. Rev. Lett.*, **47**: 1400, 1981.
- [5] M. B. Hastings e L. S. Levitov. Laplacian growth as one-dimensional turbulence. *Physica D*, **115**: 244, 1998.
- [6] H. A. Kramers e G. H. Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. *Physical Review*, **60**, 1941.
- [7] R. G. Bowers e G. S. Joyce. *Phys. Rev. Lett.*, **19**: 630, 1967.
- [8] B. Nienhuis. Exact critical point and critical exponents of $O(n)$ models in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **49**(15): 1062–1065, 1982.
- [9] P. G. de Gennes. *Phys. Lett.*, **38A**: 339, 1972.
- [10] W. Janke, T. Neuhaus e A. M. J. Schakel. Critical loop gases and the worm algorithm. *Nucl. Phys. B [FS]*, **829**: 573, 2010.
- [11] N. Prokof'ev e B. Svistunov. Worm Algorithms for Classical Statistical Models. *Phys. Rev. Lett.*, **87**(16), 2001.

- [12] Y. Deng, T. M. Garoni, W. Guo, H. W. Blote e A. D. Sokal. *Phys. Rev. Lett.*, **98**: 120601, 2007.
- [13] W. Guo e H. W. Blote. *Phys. Rev. E*, **98**: 120601, 2011.
- [14] L. Chayes, Leonid P. Pryadko e Kirill Shtengel. Intersecting loop models on $\mathbb{Z}^d$: rigorous results. *Nucl. Phys. B*, **570**: 590–614, 2000.
- [15] P. G. Saffman e G. I. Taylor. The penetration of a fluid into a porous medium or Hele-Shaw cell containing a more viscous liquid. *Proc. R. Soc. Lond. A*, **245**: 312–320, 1958.
- [16] G. I. Taylor e P. G. Saffman. A note on the motion of bubbles in a Hele-Shaw cell and porous medium. *Q. J. Mech. Appl. Maths*, **12**: 265–279, 1959.
- [17] M. Mineev-Weinstein, P. B. Wiegmann e A. Zabrodin. *Phys. Rev. Lett.*, **84**: 5106, 2000.
- [18] D. Burgess e S. Tanveer. Infinite stream of Hele-Shaw bubbles. *Phys. Fluids A*, **3**: 367–379, 1991.
- [19] E. Brener, H. Levine e Y. H. Tu. Nonsymmetric Saffman-Taylor fingers. *Phys. Fluids A*, **3**: 529–534, 1991.
- [20] G. L. Vasconcelos. Multiple bubbles in a Hele-Shaw cell. *Phys. Rev. E*, **50**: R3306–R3309, 1994.
- [21] Antônio M. P. Silva e Giovani L. Vasconcelos. Doubly periodic array of bubbles in a Hele-Shaw cell. *Proc. R. Soc. A*, **467**: 346–360, 2011.
- [22] G. L. Vasconcelos. Exact solutions for N steady fingers in a Hele-Shaw cell. *Phys. Rev. E*, **58**: 6858–6860, 1998.
- [23] G. L. Vasconcelos. Comment on ‘Two-finger selection theory in the Saffman-Taylor problem.’. *Phys. Rev. E*, **63**: 043101, 2001.
- [24] G. L. Vasconcelos. Motion of a finger with bubbles in a Hele-Shaw cell. *Phys. Fluids*, **11**: 1281–1283, 1999.

- [25] G. L. Vasconcelos. Exact solutions for steady bubbles in a Hele-Shaw cell with rectangular geometry. *J. Fluid Mech.*, **444**: 175–198, 2001.
- [26] S. Richardson. Hele-Shaw flows with time-dependent free boundaries in which the fluid occupies a multiply-connected region. *Eur. J. Appl. Math.*, **5**: 97, 1994.
- [27] D. G. Crowdy. Multiple steady bubbles in a Hele-Shaw cell. *Proc. R. Soc. A*, **465**: 421, 2009.
- [28] Michael C. Dallaston e Scott W. McCue¹. New exact solutions for Hele-Shaw flow in doubly connected regions. *Phys. Fluids*, **24**: 052101, 2012.
- [29] L. J. Cummings. Flows around a wedge of arbitrary angle in a Hele-Shaw cell. *Eur. J. Appl. Math.*, **10**: 547–560, 1999.
- [30] S. Richardson. Hele-Shaw flows with time-dependent free boundaries involving a multiply-connected fluid region. *Eur. J. Appl. Math.*, **12**: 665, 2001.
- [31] G. L. Vasconcelos. Comment on ‘Free surface Hele-Shaw flows around an obstacle: A random walk simulation’. *Phys. Rev. E*, **63**: 043101, 2007.
- [32] Bogoyavlenskiy e Cottis. Free surface Hele-Shaw flows around an obstacle: A random walk simulation. *Phys. Rev. E*, **69**: 016310, 2004.
- [33] G. L. Vasconcelos e L. P. Kadanoff. Stationary solutions for the Saffman-Taylor problem with surface tension. *Phys. Rev. A*, **44**: 6490–6495, 1991.
- [34] D. Kessler, J. Koplik e H. Levine. Pattern selection in fingering growth phenomena. *Adv. Phys.*, **37**: 255–339, 1988.
- [35] P. Pelcé. *Dynamics of curved fronts*. Academic, 1988.
- [36] S. Tanveer. *Viscous displacement in a Hele-Shaw cell. In asymptotics beyond all orders*. Plenum, 1992.
- [37] H. E. Stanley. Exact solution for a linear chain of isotropically interacting classical spins of arbitrary dimensionality. *Physical Review*, **179**(2), 1969.

- [38] F. Winter, W. Janke e A. M. J. Schakel. Geometric Properties of the Three-Dimensional Ising and XY Models. *Phys. Rev. E*, **77**: 061108, 2008.
- [39] A. J. Guttmann e A. R. Conway. Square lattice self-avoiding walks and polygons. *Ann. Comb.*, **5**: 319–345, 2001.
- [40] Wolfhard Janke e Adriaan M. J. Schakel. Fractal structure of high-temperature graphs of $O(n)$ models in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **95**: 135702, 2005.
- [41] D. S. McKenzie e M. A. Moore. Shape of self-avoiding walk or polymer chain. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **4**: L82, 1971.
- [42] N. Prokof'ev e B. Svistunov. Comment on "Hausdorff dimension of critical fluctuations in abelian gauge theories?" *Phys. Rev. Lett.*, **96**: 219701, 2006.
- [43] J. M. Kosterlitz. The critical properties of the two-dimensional XY model. *J. Phys. C*, **7**(6): 1046, 1974.
- [44] K. Harada e N. Kawashima. Kosterlitz-thouless transition of quantum XY model in two dimensions. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **67**: 2768, 1998.
- [45] D. M. Ceperley e E. L. Pollock. Path-integral computation of the low-temperature properties of liquid ^4He . *Phys. Rev. Lett.*, **56**: 351, 1986.
- [46] H. Weber e P. Minnhagen. Monte carlo determination of the critical temperature for the two-dimensional XY model. *Phys. Rev. B*, **37**: 5986, 1988.
- [47] J. L. Jacobsen, N. Read e H. Saleur. Dense loops, supersymmetry, and goldstone phases in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 090601, 2003.
- [48] Antônio Márcio Pereira Silva. Soluções exatas para arranjos periódicos de bolhas na célula de Hele-Shaw. Master's thesis, Universidade Federal de Pernambuco - Departamento de Física, 2008.
- [49] L. M. Milne-Thomson. *Theoretical Hydrodynamics*. Dover Publications, Inc.(New York), 1996.

- [50] D. G. Crowdy. The Schwarz-Christoffel mapping to bounded multiply connected polygonal domains. *Proc. R. Soc. A*, **461**: 2653–2678, 2005.
- [51] M. A. Evgrafov. *Analytic Functions*. Dover, New York, 1978.
- [52] G. L. Vasconcelos. Exact solutions for steady bubbles in a Hele-Shaw cell with rectangular geometry. *J. Fluid Mech.*, **444**: 175–198, 2001.
- [53] G. L. Vasconcelos. Analytic solutions for two bubbles in a Hele-Shaw cell. *Phys. Rev. E*, **62**: R3047–R3049, 2000.
- [54] Antônio Márcio P. Silva e Giovani L. Vasconcelos. Stream of asymmetric bubbles in a Hele-Shaw cell. *Phys. Rev. E*, **87**: 055001, 2013.

APÊNDICE A

Balanço detalhado

Para garantirmos que, no equilíbrio, todos os estados do sistema satisfaçam a distribuição de Boltzmann, devemos satisfazer a condição de balanço detalhado, ou seja,

$$P(\mu \rightarrow \nu)w_\mu = P(\nu \rightarrow \mu)w_\nu, \quad (\text{A.1})$$

onde $P(\mu \rightarrow \nu)$ é a probabilidade de ocorrer a transição do sistema de um estado μ para um estado ν , e w_μ é a probabilidade de que, no equilíbrio, o sistema ser encontrado no estado μ .

Discutiremos a seguir três casos gerais (com possíveis variações).

1. Consideremos inicialmente o balanço entre as configurações mostradas na figura A.1. A figura A.1(a) (configuração E) mostra a uma situação em que há um verme na rede e suas extremidades estão em $i_1 = i$ e $i_2 = j$. Na figura A.1(b) (configuração D) temos a situação em que não há um verme e as extremidades i_1 e i_2 estão no sítio j . Além disso, temos um laço passando por i e j . O balanço detalhado fica:

$$P(E \rightarrow D)w(E) = P(D \rightarrow E)w(D). \quad (\text{A.2})$$

Temos que $P(E \rightarrow D) = P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)$, enquanto $P(D \rightarrow E) = (1 - P_0)P(j \rightarrow i; b-1 \rightarrow b)$, ou seja, $P(D \rightarrow E)$ é igual a probabilidade de i_1 e i_2 não se deslocarem para outro sítio e i_1 mover-se de j para i apagando a ligação entre eles. Os pesos estatísticos de cada configuração são:

$$\begin{aligned} w(E) &= K^b Q(k_i + 1) Q(k_j + 1) \dots n^l / Z_\square, \\ w(D) &= K^{b+1} Q(k_i + 1) Q(k_j + 1) \dots n^{l+1-1} / Z_\square. \end{aligned}$$

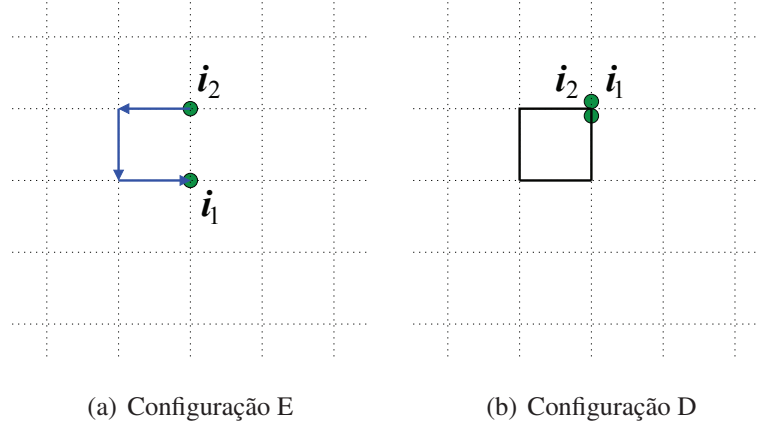


Figura A.1 Balanço entre as situações em que o verme se fecha e forma um novo laço (E→D) e em que um verme nasce destruindo um laço (D→E).

Usando a equação A.2, obtemos que

$$\frac{P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)}{P(j \rightarrow i; b-1 \rightarrow b)} = (1 - P_0)K. \quad (\text{A.3})$$

A relação acima é satisfeita se definirmos

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \min((1 - P_0)K, 1), \quad (\text{A.4})$$

e

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \min\left(\frac{1}{(1 - P_0)K}, 1\right), \quad (\text{A.5})$$

onde a última expressão é obtida fazendo as seguintes trocas: configuração E $\leftrightarrow$ configuração D e $i \leftrightarrow j$. As probabilidades acima não mudam se tivermos algum laço passando pelo sítio i ou j ou em ambos.

2. Consideremos o balanço entre as situações mostradas na figura A.2. A figura A.2(a) mostra a situação em que as extremidades i_1 e i_2 estão no sítio i (configuração E) e não há verme. A figura A.2(b) mostra a situação em que há um verme, com $j = i_1$ e $i = i_2$.

(a) Temos que $P(E \rightarrow D) = (1 - P_0)P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)$ e $P(D \rightarrow E) = P(j \rightarrow i; b +$

$1 \rightarrow b$). Os pesos estatísticos são:

$$\begin{aligned} w(I) &= K^b Q(k_i) Q(k_j) \dots n^l / Z_{\square}, \\ w(D) &= K^{b+1} Q(k_i + 2) Q(k_j + 2) \dots n^{l+1} / Z_{\square}. \end{aligned}$$

Temos então que

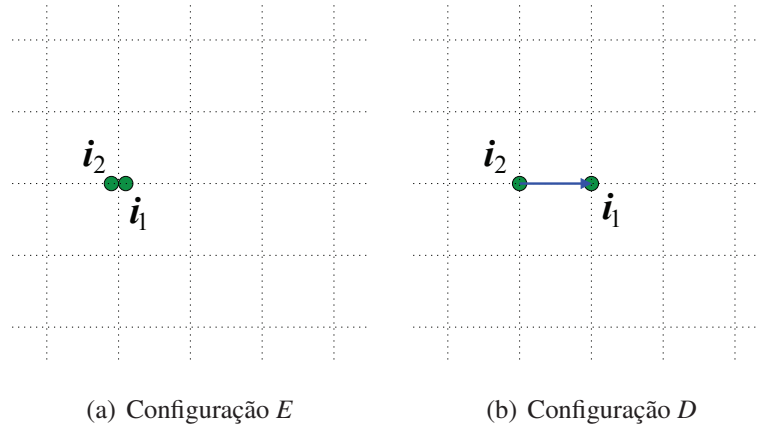


Figura A.2 Balanço entre as situações em que o verme nasce ($E \rightarrow D$) e em que um verme morre ($D \rightarrow E$).

$$\frac{P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)}{P(j \rightarrow i; b+1 \rightarrow b)} = \frac{K}{(1-P_0)} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n, \quad (\text{A.6})$$

e assim definimos que

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \min \left(\frac{K}{(1-P_0)} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n, 1 \right), \quad (\text{A.7})$$

e

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \min \left(\frac{(1-P_0)}{K} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} \frac{Q(k_j-1)}{Q(k_j+1)} n^{-1}, 1 \right). \quad (\text{A.8})$$

Diferentemente da situação mostrada em 1, aqui a presença de laços passando pelos sítios i e j interfere no resultado das probabilidades de transição. Mostraremos isso a seguir.

(b) Considere a situação em que há um laço passando por i (ver figura A.3). Como

podemos observar nas configurações D_1 , D_2 e D_3 , ao movermos i_1 de j para i , obtemos em todos os casos a configuração E . Então, será necessário balancear a probabilidade $P(E \rightarrow D_f)$ da seguinte maneira: definiremos $P(E \rightarrow D_f) = \frac{1}{3}(1 - P_0)P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)$, onde o fator $\frac{1}{3}$ está relacionado com a igual probabilidade de gerarmos qualquer uma das três possíveis configurações. Note também que nas configurações D_2 e D_3 existem l laços enquanto que na configuração D_1 temos $l+1$ laços. A probabilidade $P(D_f \rightarrow E) = P(j \rightarrow i; b+1 \rightarrow b)$ dependerá então da configuração inicial (D_1 , D_2 ou D_3).

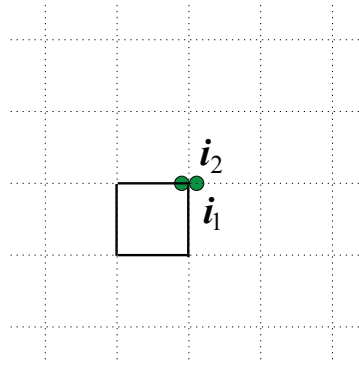
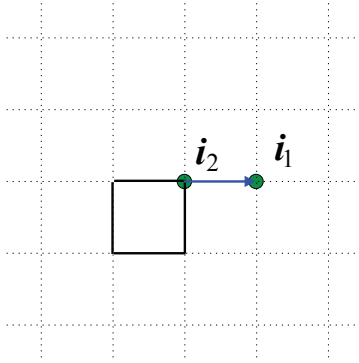
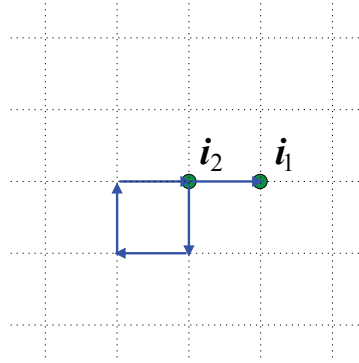
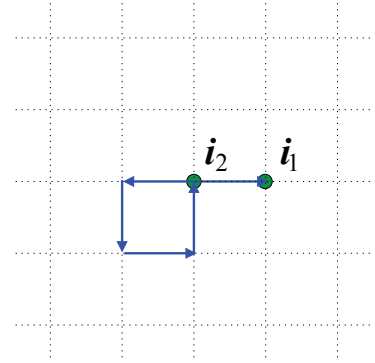
(a) Configuração E (b) Configuração D_1 (c) Configuração D_2 (d) Configuração D_3

Figura A.3 Processo de sorteio de instrução de rota. Balanço entre as situações em que verme nasce e toca um laço ($E \rightarrow D$) e situações inversas ($D \rightarrow E$).

Os pesos estatísticos serão:

$$w(E) = K^b Q(k_i) Q(k_j) \dots n^l / Z_{\square},$$

$$w(D_f) = K^{b+1} Q(k_i+2) Q(k_j+2) \dots n^{l+1+\delta_f} / Z_{\square},$$

onde δ_f é 0 para a configuração D_1 ($f = 1$), e -1 para as configurações D_2 ($f = 2$) e D_3 ($f = 3$). Assim o balanço fica

$$\frac{P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)}{P(j \rightarrow i; b+1 \rightarrow b)} = \frac{3K}{(1-P_0)} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n^{1+\delta_f}. \quad (\text{A.9})$$

Logo, temos que

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \min \left(\frac{3K}{(1-P_0)} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n^{1+\delta_f}, 1 \right), \quad (\text{A.10})$$

e

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \min \left(\frac{(1-P_0)}{3K} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} \frac{Q(k_j-1)}{Q(k_j+1)} n^{-1-\delta_f}, 1 \right). \quad (\text{A.11})$$

As probabilidades de transição obtidas acima não mudam quando o laço passa pelo sítio j ao invés do sítio i . Nesse caso temos também três configurações D_1 , D_2 e D_3 onde cada uma delas difere das outras apenas pela escolha da instrução de rota para o sítio j .

No caso em que temos um laço passando pelo sítio i e outro laço passando pelo sítio j , ou um único laço passando por i e j ao mesmo tempo, teremos 9 configurações do tipo D_f , ou seja, $D_1, D_2, \dots, D_9$, pois teremos 3 possibilidades de instruções de rota tanto para o sítio i como para o sítio j . Nesse caso, as probabilidades de transição mudam para:

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \min \left(\frac{9K}{(1-P_0)} \frac{Q(k_i+2)}{Q(k_i)} \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n^{1+\delta_f}, 1 \right), \quad (\text{A.12})$$

e

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \min \left(\frac{(1-P_0)}{9K} \frac{Q(k_i-1)}{Q(k_i+1)} \frac{Q(k_j-1)}{Q(k_j+1)} n^{-1-\delta_f}, 1 \right). \quad (\text{A.13})$$

onde o fator 3 é substituído pelo fator 9. O valor de δ_f será 0 ou -1 dependendo da configuração do tipo D_f .

3. Consideremos agora a situação mostrada na figura A.4, em que a extremidade do verme,

i_1 , que está em i (configuração E) é deslocada para j ($\neq i_2$) (configurações D).

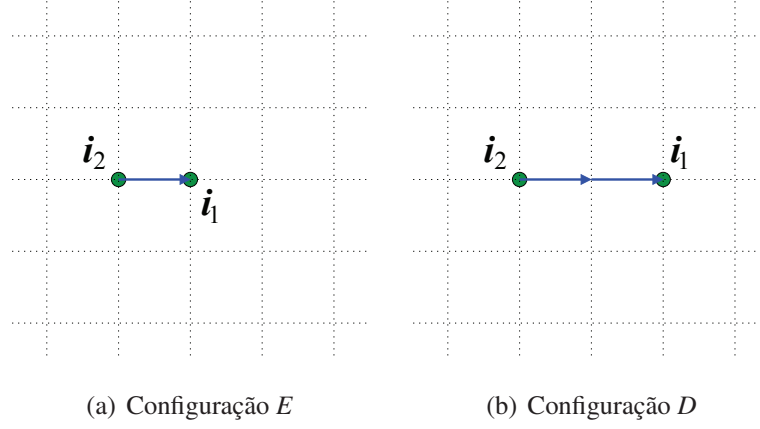


Figura A.4 Balanço entre as situações em que o verme avança ($E \rightarrow D$) e em que um verme apaga uma aresta dele ($D \rightarrow E$).

- (a) Nesta situação, vemos que $P(E \rightarrow D) = P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)$ e $P(D \rightarrow E) = P(j \rightarrow i; b+1 \rightarrow b)$. Os pesos estatísticos são:

$$\begin{aligned} w(E) &= K^b Q(k_i) Q(k_j) \dots n^l / Z_{\square}, \\ w(D) &= K^{b+1} Q(k_i) Q(k_j + 2) \dots n^l / Z_{\square}. \end{aligned}$$

Logo, temos que

$$\frac{P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)}{P(j \rightarrow i; b+1 \rightarrow b)} = K \frac{Q(k_j + 2)}{Q(k_j)}, \quad (\text{A.14})$$

e portanto

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \min \left(K \frac{Q(k_j + 2)}{Q(k_j)}, 1 \right), \quad (\text{A.15})$$

e

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \min \left(\frac{1}{K} \frac{Q(k_j - 2)}{Q(k_j)}, 1 \right). \quad (\text{A.16})$$

- (b) Consideremos também a situação anterior (caso 3a), mas com a diferença de termos um laço passando pelo sítio j . De forma semelhante às das situações discutidas nos casos anteriores, faremos $P(E \rightarrow D_f) = \frac{1}{3} P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)$, $P(D_f \rightarrow E) = P(j \rightarrow$

$i; b+1 \rightarrow b$), onde $f=1,2,3$, e os pesos estatísticos são:

$$\begin{aligned} w(E) &= K^b Q(k_i) Q(k_j) \dots n^l / Z_{\square}, \\ w(D_f) &= K^{b+1} Q(k_i) Q(k_j+2) \dots n^{l+\delta_f} / Z_{\square}, \end{aligned}$$

onde δ_f é 0 ou -1 . Obtemos então que

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \min \left(3K \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n^{\delta_f}, 1 \right), \quad (\text{A.17})$$

e

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \min \left(\frac{1}{3K} \frac{Q(k_j-2)}{Q(k_j)} n^{-\delta_f}, 1 \right). \quad (\text{A.18})$$

(c) Finalmente, considere a situação em que o próprio verme passa pelo sítio j (ver figura A.5, configuração E). Assim como na situação anterior, temos que $P(E \rightarrow D) = \frac{1}{3} P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1)$, $P(D_f \rightarrow E) = P(j \rightarrow i; b+1 \rightarrow b)$, e os pesos estatísticos são:

$$\begin{aligned} w(E) &= K^b Q(k_i) Q(k_j) \dots n^l / Z_{\square}, \\ w(D_f) &= K^{b+1} Q(k_i) Q(k_j+2) \dots n^{l+\delta_f} / Z_{\square}, \end{aligned}$$

onde agora δ_f é 0 para as configurações D_1 e D_2 , e 1 para a configuração D_3 . Assim temos que

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b+1) = \min \left(3K \frac{Q(k_j+2)}{Q(k_j)} n^{\delta_f}, 1 \right), \quad (\text{A.19})$$

e

$$P(i \rightarrow j; b \rightarrow b-1) = \min \left(\frac{1}{3K} \frac{Q(k_j-2)}{Q(k_j)} n^{-\delta_f}, 1 \right). \quad (\text{A.20})$$

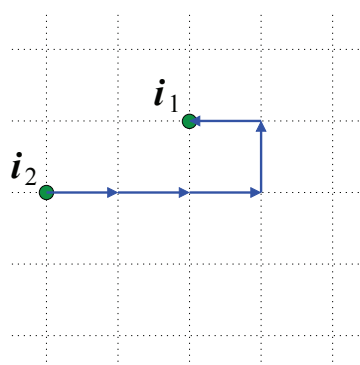
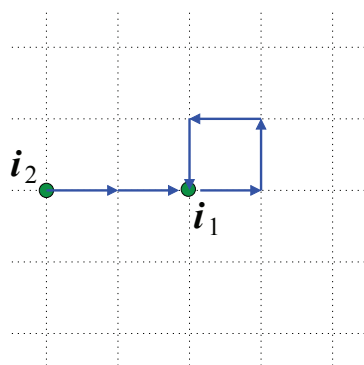
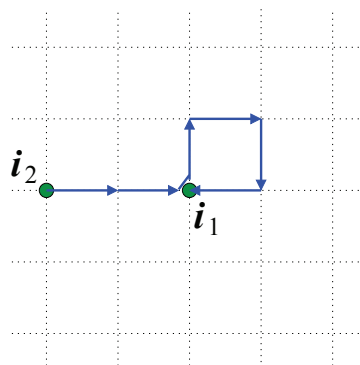
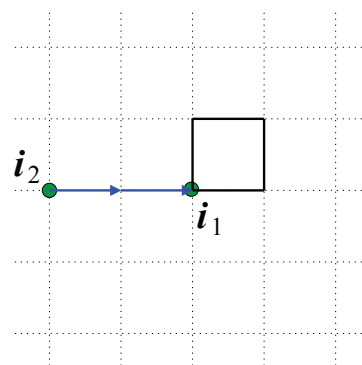
(a) Configuração E (b) Configuração D_1 (c) Configuração D_2 (d) Configuração D_3

Figura A.5 Processo de sorteio de instrução de rota. Balanço entre as situações em que o verme avança e toca a si mesmo ($E \rightarrow D$) e situações inversas ($D \rightarrow E$).

Transformação de Schwarz-Christoffel para domínios duplamente conexos

Considere uma região anelar de raio externo unitário e raio interno q , situada no plano ζ , como mostra a figura B.1(a). Denotemos a circunferência externa $|\zeta| = 1$ por C_0 e a interna $|\zeta| = q$ por C_1 . Sejam agora $\{\zeta_k^0 | k = 1, 2, \dots, n_0\}$ pontos sobre C_0 e $\{\zeta_l^1 | l = 1, 2, \dots, n_1\}$ pontos sobre C_1 .

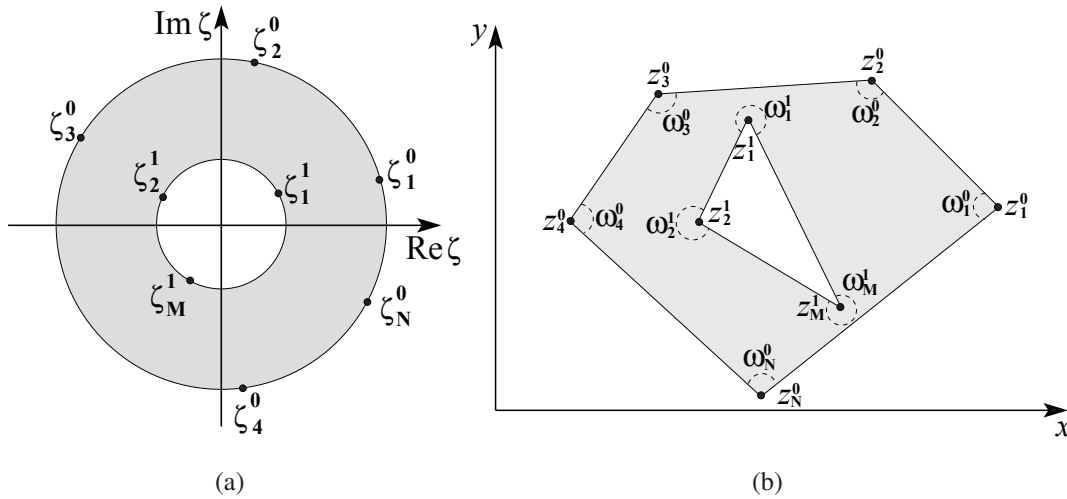


Figura B.1 (a) Domínio correspondente no plano ζ ; (b) Região poligonal no plano z .

Considere também uma região poligonal no plano z limitada por dois polígonos, como mostra a figura B.1(b). Denotemos o contorno externo de n_0 lados ($n_0 \geq 2$) por P_0 , e o contorno interno de n_1 lados ($n_1 \geq 2$) por P_1 . Na figura B.1(b), os vértices de P_0 são indicados pelos pontos $\{z_k^0 | k = 1, 2, \dots, n_0\}$ e seus respectivos ângulos internos por $\{\omega_k^0 | k = 1, 2, \dots, n_0\}$, e os vértices de P_1 por $\{z_l^1 | l = 1, 2, \dots, n_1\}$, enquanto seus respectivos ângulos internos são denotados por $\{\omega_l^1 | l = 1, 2, \dots, n_1\}$. Esses ângulos internos satisfazem as seguintes condições:

$$\sum_{k=1}^{n_0} \omega_k^0 = (n_0 - 2)\pi, \quad \sum_{l=1}^{n_1} \omega_l^1 = (n_1 + 2)\pi. \quad (\text{B.1})$$

Estamos interessados na função complexa $z = z(\zeta)$ que realiza a seguinte transformação conforme:

- o interior do anel, no plano ζ , é mapeado no interior da região poligonal, no plano z ;
- C_0 é mapeado sobre P_0 , de modo que $z_k^0 = z(\zeta_k^0)$, $k = 1, 2, \dots, n_0$, com os respectivos ângulos internos ω_k^0 ;
- C_1 é mapeado sobre P_1 , de modo que $z_l^1 = z(\zeta_l^1)$, $l = 1, 2, \dots, n_1$, com os respectivos ângulos internos ω_l^1 .

A função $z(\zeta)$ é dada por

$$z(\zeta) = A + B \int_{\zeta_0}^{\zeta} \prod_{k=1}^{n_0} \left[P\left(q^2 \frac{s}{\zeta_k^0}, q\right) \right]^{\frac{\omega_k^0}{\pi} - 1} \prod_{l=1}^{n_1} \left[P\left(\frac{s}{\zeta_l^1}, q\right) \right]^{\frac{\omega_l^1}{\pi} - 1} ds, \quad (\text{B.2})$$

onde a função complexa $P(\zeta, q)$ é definida como

$$P(\zeta) = (1 - \zeta) \prod_{k=1}^{\infty} (1 - q^{2k} \zeta) (1 - q^{2k} \zeta^{-1}).$$

A equação (B.2) é a transformação de Schwarz-Christoffel para domínios duplamente conexos. Ela é um caso particular da transformação de Schwarz-Christoffel generalizada para domínios multiplamente conexos, a qual foi recentemente obtida por Crowdy [50].

Em (B.2), o limite inferior de integração ζ_0 pode ser escolhido arbitrariamente. As constantes complexas A e B são determinadas apropriadamente pelas condições de contorno do problema. A constante A está relacionada com a posição da região poligonal no plano z , enquanto que a constante B fixa a escala e a orientação da região. Para domínios duplamente conexos, segue o seguinte teorema [51]:

Teorema 1. *Qualquer domínio duplamente conexo (limitado por curvas suaves por partes) pode ser mapeado conformalmente e univocamente no anel $q < |\zeta| < 1$. A transformação conforme é unicamente determinada a menos de um fator de módulo unitário. (O número q não é pré-assumido, mas é determinado pelo domínio.)*

Por fim, a transformação B.2 permanece ainda válida no caso de polígonos “degenerados”. Como exemplos, podemos citar polígonos com vértices em $z = \infty$, polígonos de área nula, etc.

APÊNDICE C

Artigos publicados

C.1 Artigo 1

RAPID COMMUNICATIONS

PHYSICAL REVIEW E **88**, 021301(R) (2013)

Monte Carlo algorithm for simulating the $O(N)$ loop model on the square lattice

Antônio Márcio P. Silva, Adriaan M. J. Schakel, and Giovani L. Vasconcelos

Laboratório de Física Teórica e Computacional, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife-PE, Brazil

(Received 17 June 2013; published 5 August 2013)

An efficient algorithm is presented to simulate the $O(N)$ loop model on the square lattice for arbitrary values of $N > 0$. The scheme combines the worm algorithm with a new data structure to resolve both the problem of loop crossings and the necessity of counting the number of loops at each Monte Carlo update. With the use of this scheme, the line of critical points (and other properties) of the $O(N)$ model on the square lattice for $0 < N \leq 2$ have been determined.

DOI: [10.1103/PhysRevE.88.021301](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.88.021301)

PACS number(s): 05.10.Ln, 64.60.De, 64.60.Cn, 64.60.F-

The self-avoiding walk together with the Ising and XY models formulated on the square lattice are among the most studied models in statistical physics, with many applications in diverse fields. These spin systems belong to the class of N -vector models with $N = 0, 1$, and 2 , respectively. Their analytic continuation to arbitrary $-2 \leq N \leq 2$ was, until recently, almost exclusively studied on the honeycomb lattice instead. These models undergo a continuous phase transition between a disordered high-temperature phase and an ordered low-temperature phase. Studies for noninteger N are facilitated by the high-temperature (HT) representation of the spin system where contributions to the partition function are represented by even graphs along the links of the underlying lattice. On a honeycomb lattice, even graphs cannot cross and thus automatically form mutually and self-avoiding polygons. This fact greatly simplifies the analysis and explains the “exorbitant amount of work” done on the honeycomb lattice [1]. In most of these studies it was tacitly assumed that the long-distance behavior found on the honeycomb lattice is universal and insensitive to the lattice structure. This turned out to be true for the long-distance behavior controlled by the $O(N)$ critical point with $-2 \leq N \leq 2$ found in Ref. [2]. But in the low-temperature phase, which also displays long-range spin-spin correlations with powerlike decay, the situation changes dramatically. By working on a square lattice, Jacobsen *et al.* [3] argued that allowing for crossings gives rise to a completely different long-distance behavior from that found on a honeycomb lattice [2]. Although several numerical studies of $O(N)$ models for noninteger N on the square lattice recently appeared in the literature (see, for example, [4,5]), a proper account of crossings has not yet been accomplished.

This task is hindered by two main obstacles. The first one is that each even HT graph must be decomposed into an unambiguous set of polygons or *loops*, with each loop carrying a degeneracy factor N that arises because any of the N spin components or colors can be routed through the loop. This problem was formally solved by Chayes *et al.* [1] by resolving each crossing of a HT graph into three routings, with unique instructions as to how to connect the four legs (see Fig. 1). A given even graph configuration then breaks into a set of interlocking colorless loops that can be assigned unambiguous degeneracy factors. To the best of our knowledge, this scheme has never been employed in numerical studies.

The second obstacle is that at each update step the number of loops present on the entire lattice is required. Since this

quantity is nonlocal, the use of a tracing algorithm would slow down simulations in the critical region as well as in the low-temperature phase to the extent of rendering them useless on larger lattices.

In this Rapid Communication, we implement the scheme due to Chayes *et al.* [1] by adopting the worm algorithm [6] and overcome the tracking problem by coding loops into a new data structure, called a *satellite list* [7]. As an application, we determine the line of critical points of the $O(N)$ model on the square lattice for arbitrary $0 < N \leq 2$.

Our starting point is the partition function [8]

$$Z_{\square} = \text{Tr} \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + K \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j), \quad (1)$$

obtained by truncating the series expansion of the conventional Boltzmann factor, $\exp(K \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)$, at the first order in the coupling constant K . In Eq. (1), the N -component spin variable $\mathbf{S}_i$ at each site i is normalized, $|\mathbf{S}_i| = 1$, the trace Tr stands for the (normalized) sum or integral over all possible spin configurations, and the product is restricted to nearest neighbor pairs. Notice that K in Eq. (1) must satisfy the condition $|K| \leq 1$, if the weight of a spin configuration is to be non-negative. In the following, we take $K > 0$.

In the HT representation of the model (1), a factor $K \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ is represented by a bond drawn between the nearest neighbor sites i and j which is given a weight K . The advantage of the truncated model (1) compared to the conventional one is that links cannot be multiply occupied. Unlike crossings, this simplification is believed to be irrelevant both at the critical point and in the low-temperature phase. (For recent numerical support of this assumption, see [5].) Each site carries a weight $Q(k_i)$ that depends on the number of bonds k_i attached to that site. Specifically, $Q(0) = 1$, $Q(2) = 1/N$, and $Q(4) = 1/N(N+2)$ for sites connecting zero, two, or four bonds [1]. The partition function for $N > 0$ can then be written as a sum over configurations, $\mathcal{C}$, consisting of arbitrary many colorless loops [1]:

$$Z_{\square} = \sum_{\mathcal{C}} K^b \left(\frac{1}{N} \right)^{m_2} \left(\frac{1}{N(N+2)} \right)^{m_4} N^{\ell}. \quad (2)$$

Here, b denotes the total number of bonds, K plays the role of a bond fugacity, m_2 is the number of lattice sites connecting two bonds, m_4 is the number of intersections (each with a unique routing instruction), and ℓ is the number of loops in a given loop configuration. Finally, the degeneracy factor N appears

SILVA, SCHAKEL, AND VASCONCELOS

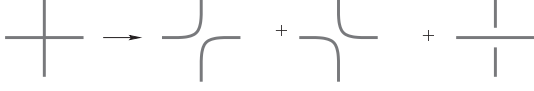
PHYSICAL REVIEW E **88**, 021301(R) (2013)

FIG. 1. Resolving a crossing (left) on a square lattice. The intersections on the right come with unambiguous routings.



FIG. 2. (Color online) A satellite list: two singly-linked lists (the two sidepieces) running through the satellites (dots) of each node (crosspiece).

as a loop fugacity in the HT representation. Whereas in the spin representation (1) K must satisfy the bound $K \leq 1$, no such restriction is required in the HT representation (2) and K can be continued to the region $K > 1$.

We simulate the model (2) on a square lattice (with periodic boundary conditions) for arbitrary $N > 0$ by using the worm algorithm [6], a very efficient Monte Carlo scheme that is not hampered by critical slowing down. This scheme directly generates HT graphs through the motion of an end point of an open chain, or *worm*. When the head of the worm encounters a site that already connects two bonds, our algorithm randomly chooses one of the three possible routings, so that the resulting graphs are always unambiguous. At each time step, the worm attempts to either set or erase a bond, depending on whether the link under consideration was previously empty or not. As time proceeds, the head of the worm shifts through the lattice until it eventually returns to its tail to form a loop. After this, a new worm is attempted to be created by proposing to move both end points together to a randomly chosen site and the process continues for as long as necessary to accumulate sufficient statistics. Notice that although the head shifts smoothly through the lattice, taking steps of one lattice spacing at a time, the worm can change its shape and length abruptly, either by opening up and annexing an existing loop or by intersecting itself and thereby shedding a loop. The latter process is known in polymer physics as *backbiting*. The Metropolis update probabilities for setting or erasing a bond readily follow from detailed balance and will not be discussed here for want of space, save for noting that the existence of multiple routings at intersections complicates matters, for they can lead to different degeneracy factors.

Whereas only loop configurations contribute to the partition function Z , configurations that include a worm with end points i_1 and i_2 contribute to the unnormalized two-point spin-spin correlation function $Z_{i_1 i_2}$. This function is related to the normalized correlation function through $\langle \mathbf{S}_{i_1} \cdot \mathbf{S}_{i_2} \rangle = Z_{i_1 i_2} / Z$. Because of the dot product appearing here, a worm, like a loop, carries a degeneracy factor N . For the truncated model, each lattice site on a square lattice can connect only zero, two, or four bonds, with the exception of the sites housing an end point of the worm which connect one or three bonds. In that case, the site i hosting an additional end point is assigned the weight $Q(k_i + 1)$ for $k_i = 1, 3$, where the extra term “1” in the argument is to indicate explicitly the presence of an end point at that site. Since $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = 1$, a site i housing both end points at the same time acts as if they are absent, and $Z_{ii} = Z$. Note that our convention here differs from that used in Ref. [6]. The critical exponents can be determined directly from the HT graphs through the use of observables known from percolation theory and the theory of self-avoiding walks [9].

We have overcome the problem of keeping track of the number of loops at each Monte Carlo update by coding the

worm (and the loops it generates) into a satellite list [7]. Such a list, which is a variation on the more familiar doubly linked list, is a ladderlike data structure (see Fig. 2). A crosspiece in the ladder represents a node where the relevant information (in our case, an occupied link) is stored. Each node contains two satellites, represented by the end points of the corresponding crosspiece, and the sidepieces represent singly linked lists connecting the respective satellites on the two sides of the ladder. In this way, nodes are linked indirectly through their satellites in such a way that the next node in the list depends on the current direction. The possibility to traverse the list in one direction and, by sidestepping to the complement satellite, also in the reverse direction is crucial for our purposes. As with all linked lists, memory allocation is dynamic so that efficient memory usage is guaranteed.

A backbite is computationally the most costly update. Because the worm breaks into two parts, a new satellite list must be created to accommodate either the detached loop or the remaining, shortened worm. While the cost of cutting a segment out of the old satellite list and pasting it into the new list is independent of the length of that segment, the bonds belonging to the new list must be relabeled to indicate that they are now part of a new list. Since the computational cost of relabeling increases linearly with the number of bonds, it is expedient to move the shortest segment into the new list. To identify this part, we simultaneously iterate through the list, starting at each of the two legs in front of the head of the worm until either the head or the tail is reached. After inserting the shortest segment into the new list and relabeling the bonds involved, we reconnect the loose ends at fixed cost, using the unique properties of a satellite list.

Using the algorithm outlined above, we determine the line of critical points of the $O(N)$ loop model on the square lattice for $0 < N \leq 2$. To locate the critical point for a given N , we measure the probability $\Pi_L(K)$ that one or more loops wrap the lattice as a function of the bond fugacity K on systems of different linear size L . This percolation observable, shown in the top row of Fig. 3 for $N = 0.01, 1, 1.8$, has no scaling dimension so that, when plotted as a function of K or of the rescaled bond fugacity $K' \equiv K/N$, the curves obtained for different L should cross at exactly one point. Being L independent, this crossing point marks the value of K for which wrapping loops first appear on the *infinite* lattice. This percolation threshold of HT loops coincides with the onset of long-range spin-spin correlations K_c . Figure 3 shows that the crossing point can be accurately identified for the Ising model ($N = 1$), but this task becomes increasingly more difficult as N approaches either 0 or 2, where the crossing points move towards the plateaus at the beginning and at the end of the curves, respectively.

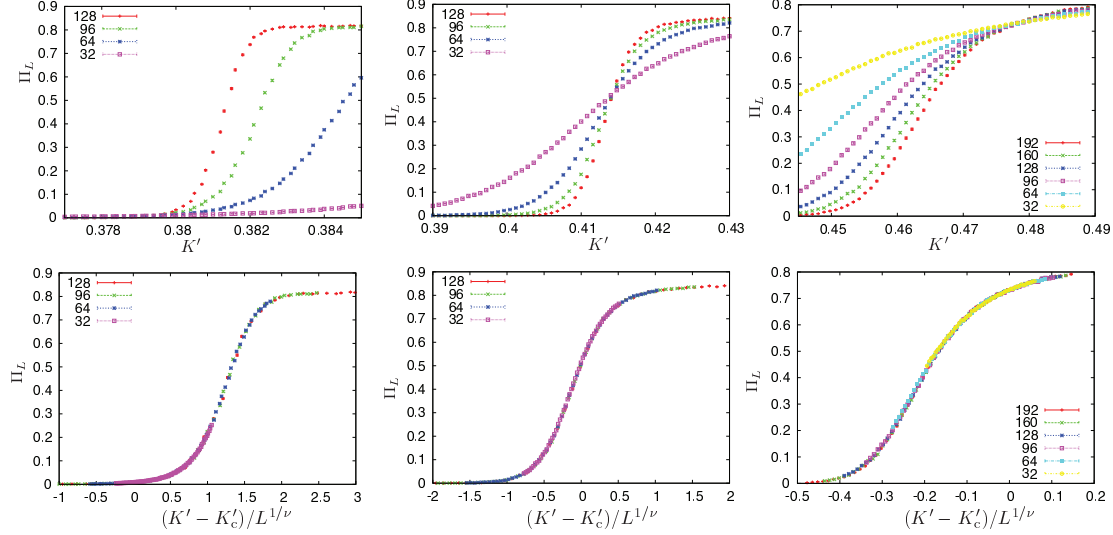


FIG. 3. (Color online) Top: Probability Π_L that one or more loops wrap the lattice as a function of K' for various lattice sizes L and for $N = 0.01, 1$, and 1.8 (from left to right). Bottom: Same data as above, but now plotted as a function of $(K' - K'_c)/L^{1/\nu}$ with the estimated values for K'_c and the exactly known values for ν .

To determine K_c more precisely, we use a second property of Π_L , namely, that it is a function only of the ratio of the two relevant length scales in the problem: the linear lattice size L and the correlation length ξ . The latter diverges as $\xi \sim |K - K_c|^{-\nu}$, for $K \rightarrow K_c$, where ν is the correlation length exponent. When replotted as a function of $(K - K_c)L^{1/\nu}$, the data should consequently collapse onto a single curve. Since ν is exactly known for all $-2 \leq N \leq 2$ [2], we estimate the location of the threshold by keeping ν fixed and varying K_c until the best data collapse is achieved. As an illustration, we plot in the bottom row of Fig. 3 the best collapse achieved for the data shown in the top row of the figure. The quality of collapse is excellent for all values of N we investigated in the range $0 < N \lesssim 1.8$. Table I summarizes our estimates obtained in this way. The error bars represent the range in which the quality of collapse, assessed by visual inspection, remains more or less the same. This simple method turns out to be very sensitive and yields surprisingly precise results [10]. For $N \gtrsim 1.8$, the quality diminishes, with the limiting case $N \rightarrow 2$, where $1/\nu \rightarrow 0$, showing no collapse at all.

TABLE I. Estimates of K'_c for various values of N .

N	K'_c	N	K'_c	N	K'_c
0.01	0.379 30(5)	0.7	0.4014(2)	1.4	0.4374(2)
0.1	0.381 78(3)	0.8	0.4053(1)	1.5	0.4450(2)
0.2	0.384 64(4)	0.9	0.4096(2)	1.6	0.4539(2)
0.3	0.3877(4)	1.0	0.4141(1)	1.7	0.4647(2)
0.4	0.3908(3)	1.1	0.4192(1)	1.8	0.4785(2)
0.5	0.3941(1)	1.2	0.4246(2)	2.0	0.520(4)
0.6	0.3977(2)	1.3	0.4307(1)		

To investigate this issue, we consider in detail the limiting case $N = 2$, corresponding to the XY model. Besides logarithmic corrections to scaling, the XY critical point is special also because the correlation length diverges exponentially instead of powerlike as happens for $N < 2$ [11]. These two complicating factors make it notoriously difficult to determine K_c for $N = 2$ and usually require Monte Carlo simulations on lattices of sizes much larger than those used for $N < 2$ to achieve comparable precisions. One way to circumvent this problem [12] is by analyzing the size dependence of the spin stiffness Υ , which exhibits a universal jump at the critical point that is unique to this phase transition [13]. In the HT representation, the spin stiffness is determined by the average squared winding number of loop configurations, $\langle w^2 \rangle$, where w is the number of times the loops wrap the lattice (in any of the two directions) for a given loop configuration [14]. As shown in Fig. 4, this observable has the expected behavior, namely, it is finite in the low-temperature phase and rapidly falls to zero when $1/K$ increases.

The quantity $\langle w^2 \rangle$ features in the Kosterlitz renormalization group equations [11] through the combination

$$x \equiv 2 - \frac{\pi}{2} \langle w^2 \rangle. \quad (3)$$

For the infinite system, one has $\lim_{K \rightarrow K_c^+} \langle w^2 \rangle = 4/\pi$, so that x vanishes at the critical point in the thermodynamic limit. On a finite lattice, x remains finite at the critical point and its size dependence is known [12] to be given by

$$\lim_{K \rightarrow K_c^+} x = -\frac{1}{\ln(L/L_0)}, \quad (4)$$

where L_0 is a characteristic length of the order of the lattice spacing. Relation (4) can be used to estimate the critical point

SILVA, SCHAKEL, AND VASCONCELOS

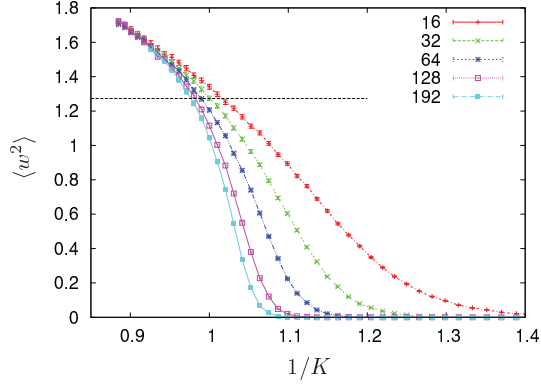
PHYSICAL REVIEW E **88**, 021301(R) (2013)

FIG. 4. (Color online) The (scaled) spin stiffness $\langle w^2 \rangle$ as a function of $1/K$ for various L . The horizontal line denotes the value $\langle w^2 \rangle = 4/\pi$.

of the infinite lattice as follows [12]. First one measures x on lattices of different sizes for different values of K and then fits the size dependence (4) to the data for each K , using L_0 as the only free parameter (see Fig. 5). The value of K that produces the best fit is taken as an estimate of the critical point of the infinite lattice. We in this way arrive at the estimate $K_c = 1.040(7)$ and $L_0 = 0.88(5)$, for which $\chi^2/\text{DOF} = 0.25$ (see inset of Fig. 5).

In conclusion, taking full account of crossings, we have simulated the $O(N)$ loop model on the square lattice with the worm algorithm. By representing the worm and the loops it generates by satellite lists, we have succeeded in monitoring the number of loops present on the lattice, a nonlocal quantity, throughout the simulations in a very efficient way. This enabled us to determine the critical point (and other properties) of the

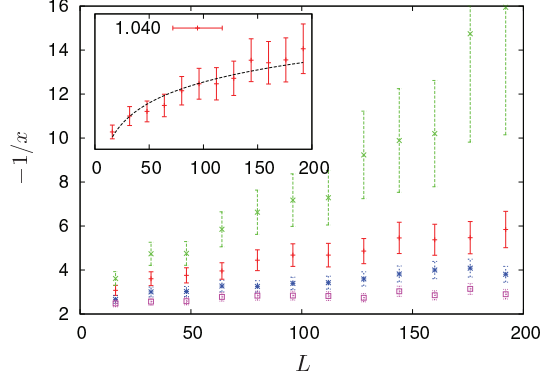


FIG. 5. (Color online) The negative of the inverse of the renormalization group variable x , defined in Eq. (3), as a function of lattice size L for $K = 1.030, 1.040, 1.050, 1.060$ (from top to bottom). The curve in the inset is the best fit to the data at $K = 1.040$.

$O(N)$ model on the square lattice for arbitrary $0 < N \leq 2$. We presently investigate the behavior of the model in the low-temperature phase for $0 < N \leq 2$ and that for $N > 2$, where no transition associated with the appearance of loops wrapping the infinite lattice is expected. The algorithm presented here is by no means restricted to the square lattice, and can be used to simulate the $O(N)$ model for arbitrary $N > 0$ on any (higher-dimensional) lattice.

The work of A.M.J.S. was financially supported by CAPES, Brazil through a visiting professor scholarship. That author would like to thank Wolfhard Janke for helpful discussions. A.M.P.S. and G.L.V. acknowledge financial support from CNPq and FACEPE (Brazilian agencies).

- [1] L. Chayes, L. P. Pryadko, and K. Shtengel, *Nucl. Phys. B* **570**, 590 (2000).
- [2] B. Nienhuis, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1062 (1982).
- [3] J. L. Jacobsen, N. Read, and H. Saleur, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 090601 (2003).
- [4] Y. Deng, T. M. Geroni, W. Guo, H. W. J. Blöte, and A. D. Sokal, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 120601 (2007).
- [5] W. Guo and H. W. J. Blöte, *Phys. Rev. E* **83**, 021115 (2011).
- [6] N. Prokof'ev and B. Svistunov, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160601 (2001).
- [7] C. Osterman and C. Rego, *The Satellite List and New Data Structures for Symmetric Traveling Salesman Problems* (unpublished); C. Osterman, C. Rego, and D. Gamboa,

in *Adaptive and Natural Computing Algorithms*, edited by B. Ribeiro *et al.* (Springer, Vienna, 2005), p. 542.

- [8] E. Domany, D. Mukamel, B. Nienhuis, and A. Schwimmer, *Nucl. Phys. B* **190**, 279 (1981).
- [9] W. Janke, T. Neuhaus, and A. M. J. Schakel, *Nucl. Phys. B* **829**, 573 (2010).
- [10] F. Winter, W. Janke, and A. M. J. Schakel, *Phys. Rev. E* **77**, 061108 (2008).
- [11] J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **7**, 1046 (1974).
- [12] H. Weber and P. Minnhagen, *Phys. Rev. B* **37**, 5986 (1988).
- [13] D. R. Nelson and J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 1201 (1977).
- [14] D. M. Ceperley and E. L. Pollock, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 351 (1986).

C.2 Artigo 2

PHYSICAL REVIEW E **87**, 055001 (2013)

Stream of asymmetric bubbles in a Hele-Shaw channel

Antônio Márcio P. Silva and Giovani L. Vasconcelos*

*Laboratório de Física Teórica e Computacional, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco,
50670-901 Recife, PE, Brazil*

(Received 18 April 2013; published 20 May 2013)

Exact solutions are reported for a stream of asymmetric bubbles steadily moving in a Hele-Shaw channel. From the periodicity along the streamwise direction, the flow region is reduced to a rectangular unit cell containing one bubble, which is conformally mapped to an annulus in an auxiliary complex plane. Analytic expressions for the bubble shape as well as for the velocity field are obtained in terms of the generalized Schwarz-Christoffel formula for doubly connected domains.

DOI: [10.1103/PhysRevE.87.055001](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.87.055001)

PACS number(s): 47.15.gp, 47.15.km, 47.55.db, 47.55.Ca

I. INTRODUCTION

The study of interface dynamics in a Hele-Shaw cell, where the fluids are confined between two closely spaced glass plates, has been a topic of great interest since the seminal work by Taylor and Saffman [1]. More recently, the Hele-Shaw system was shown to have an integrable structure and to possess deep connections with other branches of mathematical physics [2]. This rich mathematical structure lies behind the fact that numerous exact solutions have been obtained both for time-dependent interfaces (listed in [3]) and for steady shapes (see [4] and references therein). Most of these exact solutions were obtained for situations where the flow domain is (or can be mapped to) a simply connected region. Hele-Shaw flows in multiply connected regions remain a problem of considerable difficulty and only a few solutions are known [5–7]. One particular instance where multiply connected fluid domains naturally appear is in the case of multiple steady bubbles in a Hele-Shaw channel. This class of problems, besides being mathematically challenging, is also of practical interest in connection, for instance, with the problem of clustering in bubbly Hele-Shaw flows [8,9]. Periodic arrays of bubbles in a Hele-Shaw channel are also of interest in view of similar arrangements found in the flow of vesicles and red blood cells in microcapillaries [10–12]. For example, the “zigzag” phase [10,12] observed in the flow of red blood cells in microvessels has a counterpart in the Hele-Shaw system as a staggered two-file array of bubbles [13].

In the present paper we report exact solutions for a periodic stream of asymmetric bubbles steadily moving in a Hele-Shaw channel. Because of the lack of symmetry, one has to deal with a fluid domain (within a unit cell) that is doubly connected. We tackle the problem by conformally mapping the fluid domain to an annulus in an auxiliary complex plane. An explicit solution for the bubble shape and the corresponding velocity potential is then obtained in terms of the generalized Schwarz-Christoffel formula for doubly connected domains, and several specific examples of bubble configurations are discussed. We emphasize that this is an instance of exact solutions for completely asymmetric bubbles in a Hele-Shaw channel.

It is worth noting that exact solutions for a single asymmetric bubble in a Hele-Shaw channel have been obtained by using both conformal mapping techniques [14] and Riemann-Hilbert methods [15]. In this case, however, the bubble has fore-and-aft symmetry and so the flow region can effectively be reduced to a simply connected domain [4]. Solutions for multiple steady bubbles in an unbounded Hele-Shaw cell were reported in Ref. [6]; here the bubbles also had fore-and-aft symmetry but the flow domain was multiply connected. An attempt at extending these solutions to include bubbles with no assumed symmetry in a channel was made in Ref. [16], but it was subsequently found that part of the argument used there was not valid [17]. On the other hand, it seems possible to extend the method presented herein to the case of a finite number of asymmetric bubbles in a Hele-Shaw channel. This requires conformal mappings between domains of arbitrary connectivity and will be presented elsewhere [18].

II. MATHEMATICAL FORMULATION

We consider the problem of a periodic stream of bubbles moving with a constant velocity U along the x direction in a Hele-Shaw channel of width a . As usual, we will work in a frame comoving with the bubbles. The array of bubbles has a spanwise period denoted by $2L$, and in each period cell there are two bubbles that are mirror reflections of one another with respect to a midline perpendicular to the channel walls, chosen as the y axis. This ensures that both the y axis and the lateral edges, $y = \pm L$, of the period cell are equipotentials of the flow, which implies in turn that the problem can be reduced to a rectangular unit cell corresponding to one half, say the right half, of the original period cell; see Fig. 1(a).

We recall that the motion of a viscous fluid in a Hele-Shaw cell is governed by Darcy’s law, $\vec{v} = -(b^2/12\mu)\vec{\nabla}p$, where b is the gap between the cell plates, μ is the viscosity, and p is the fluid pressure. Since the fluid is incompressible, i.e., $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$, it follows that p is a harmonic function $\nabla^2 p = 0$. It is thus convenient to introduce the complex potential $w(z) = \phi + i\psi$, where $z = x + iy$, $\phi = -(b^2/12\mu)p - Ux$ is the velocity potential in the comoving frame, and ψ is the associated stream function. In terms of the complex potential $w(z)$ the problem can be formulated as follows. Let $\mathcal{D}$ be the domain occupied by the viscous fluid within the reduced cell and let $\mathcal{C}$ be the bubble interface. The complex potential $w(z)$ must then be analytic in the fluid domain $\mathcal{D}$ and

*giovani@df.ufpe.br

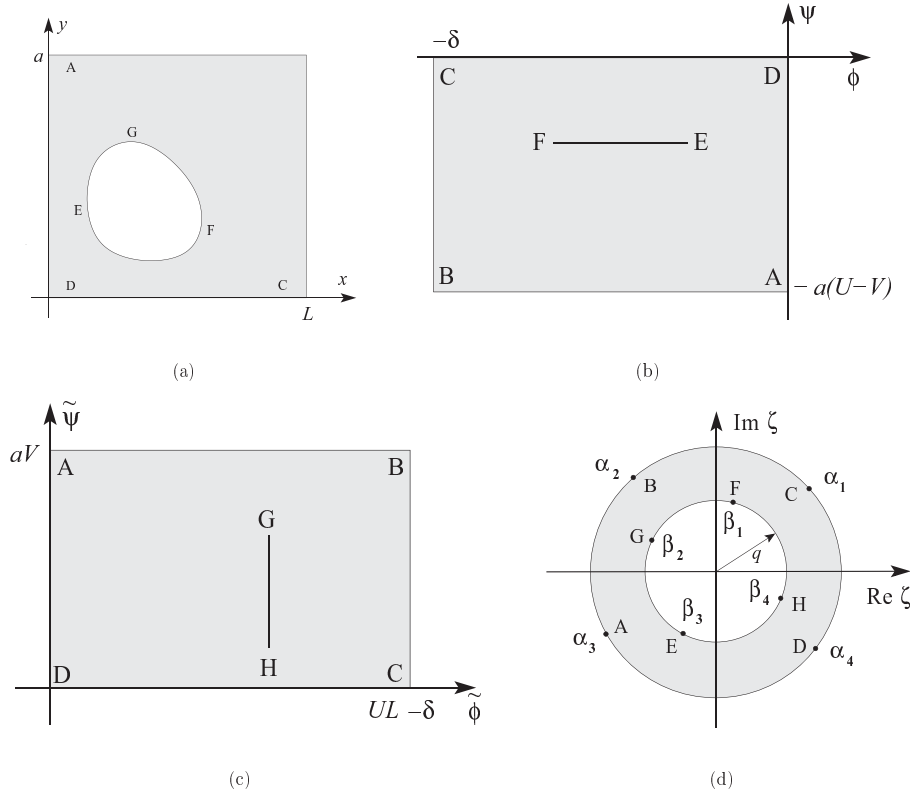


FIG. 1. The flow domains for a reduced unit cell: (a) the z plane, (b) the w plane, (c) the $\tilde{w}$ plane, and (c) the auxiliary ζ plane.

satisfy the following boundary conditions on $\mathcal{C}$:

$$w = -Ux + \text{constant}, \quad (1)$$

which follows from the combined facts that the bubble surface $\mathcal{C}$ is a streamline of the flow, the pressure inside the bubble is constant (taken to be zero), and surface tension effects are neglected.

Additional boundary conditions follow from the fact that the upper and lower edges of the unit cell are streamlines of the flow, that is,

$$\text{Im} w = -a(U - V) \quad \text{on} \quad y = a, \quad (2)$$

$$\text{Im} w = 0 \quad \text{on} \quad y = 0, \quad (3)$$

whereas the left and right edges of the unit cell are equipotentials:

$$\text{Re} w = 0 \quad \text{on} \quad x = 0, \quad (4)$$

$$\text{Re} w = -\delta \quad \text{on} \quad x = L, \quad (5)$$

where δ is a real-valued constant whose value is related to the period L and to the bubble area [13]. The flow domain in the w plane thus corresponds to a rectangle with a horizontal slit in its interior, as shown in Fig. 1(b).

To solve the free-boundary problem formulated in Eqs. (1)–(5), it is convenient to introduce the following function:

$$\tilde{w}(z) = w(z) + Uz, \quad (6)$$

which corresponds to the complex potential in the laboratory frame. From the definition (6) and Eqs. (1)–(5), it follows that $\tilde{w}(z)$ satisfies the following boundary conditions:

$$\tilde{w} = iUy + C \quad \text{on} \quad \mathcal{C}, \quad (7)$$

$$\text{Im} \tilde{w} = aV \quad \text{on} \quad y = a, \quad (8)$$

$$\text{Im} \tilde{w} = 0 \quad \text{on} \quad y = 0, \quad (9)$$

$$\text{Re} \tilde{w} = 0 \quad \text{on} \quad x = 0, \quad (10)$$

$$\text{Re} \tilde{w} = UL - \delta \quad \text{on} \quad x = L. \quad (11)$$

From these conditions, one sees that the flow domain in the $\tilde{w}$ plane is a rectangle with a vertical slit in its interior, as shown in Fig. 1(c).

Let us now consider the conformal mapping $z(\zeta)$ from an annulus, $q \leq |\zeta| \leq 1$, in an auxiliary complex ζ plane onto the fluid domain in the z plane, in such a way that the inner circle, $|\zeta| = q$, is mapped to the bubble $\mathcal{C}$ and the unit circle, $|\zeta| = 1$, is mapped to the edges of our unit cell in the z plane; see Fig. 1(d). The corners of the rectangular cell in the z plane are the preimages of four points, denoted by α_i , on the unit circle (i.e., $|\alpha_i| = 1$, for $i = 1, 2, 3, 4$). Similarly, the rightmost, leftmost, topmost, and lowermost points on the bubble are the preimages of four points β_i on the inner circle (i.e., $|\beta_i| = q$, for $i = 1, 2, 3, 4$), as indicated in Fig. 1.

Defining the functions

$$W(\zeta) = w[z(\zeta)] \quad \text{and} \quad \bar{W}(\zeta) = \bar{w}[z(\zeta)], \quad (12)$$

it follows from (6) that the conformal mapping $z(\zeta)$ can be written as

$$z(\zeta) = \frac{1}{U} [\bar{W}(\zeta) - W(\zeta)]. \quad (13)$$

We have thus reduced our original free-boundary problem to the more amenable problem of obtaining two analytic functions, $W(\zeta)$ and $\bar{W}(\zeta)$, that map an annulus onto respective rectangular domains with linear slits in their interior. The latter problem can conveniently be handled in terms of the generalized Schwarz-Christoffel formula for doubly connected domains, as discussed below. Note, furthermore, that once the conformal mapping $z(\zeta)$ is known, the bubble shape can be readily computed in parametric form by setting $x(\theta) + iy(\theta) = z(qe^{i\theta})$ for $0 < \theta < 2\pi$.

III. THE GENERAL SOLUTION

A. The function $W(\zeta)$

Since the conformal mapping $w = W(\zeta)$ maps an annulus in the ζ plane onto a (degenerate) polygonal domain in the w plane, an explicit solution for this mapping can be obtained by a direct application of the Schwarz-Christoffel formula for doubly connected regions [19]. In this case, one finds that $W(\zeta)$ is given by the following expression:

$$W(\zeta) = \mathcal{A} + \mathcal{K} \int_{\zeta_0}^{\zeta} \frac{P(q^2\zeta/\beta_1, q)P(q^2\zeta/\beta_3, q)}{\sqrt{\prod_{i=1}^4 P(\zeta/\alpha_i, q)}} d\zeta, \quad (14)$$

where $\mathcal{A}$ and $\mathcal{K}$ are complex constants, and the function $P(\zeta, q)$ is defined by

$$P(\zeta, q) = (1 - \zeta) \prod_{k=1}^{\infty} (1 - q^{2k}\zeta)(1 - q^{2k}\zeta^{-1}). \quad (15)$$

Note that the four factors of $P(\zeta/\alpha_i, q)$ under the square root in (14) ensure that each point α_i is mapped to a right-angle corner in the z plane. Similarly, the points $\zeta = \beta_1$ and $\zeta = \beta_3$ are mapped to the slit endpoints in the w plane, as implied by the fact that $dW/d\zeta = 0$ at these two points. [To see this, note that $P(q^2, q) = 0$.]

The function $P(\zeta, q)$ is related to the Jacobi elliptic functions, but we shall not exhibit this relation here; see, e.g., [19]. For later use, we list the following properties of $P(\zeta, q)$ that hold for $|\zeta| = 1$:

$$\overline{P(\zeta, q)} = -\frac{1}{\zeta} P(\zeta, q), \quad (16)$$

$$\overline{P(q\zeta, q)} = P(q\zeta, q), \quad (17)$$

$$\overline{P(q^2\zeta, q)} = -\zeta P(q^2\zeta, q), \quad (18)$$

where the overline indicates complex conjugate.

To completely specify the solution for $W(\zeta)$, we need to determine the parameters appearing in Eq. (14). Without loss of generality, we can set $\mathcal{A} = 0$ and $\zeta_0 = \alpha_4$, since this merely fixes the origin. Now, recalling that the mapping function between a doubly connected domain and an annulus

is uniquely defined up to a factor of modulus one [20], we can choose the constant $\mathcal{K}$ to be purely imaginary, i.e., $\mathcal{K} = iK$, where K is a real constant to be determined later.

Next, we note that there should be four free parameters corresponding to the four physical parameters of our solution, namely, the length L of the unit cell, the centroid of the bubble, and the bubble area. The radius q of the inner circle is one such free parameter, which mainly governs the bubble area. For convenience, we choose the other three free parameters to be the points α_1 , α_2 , and α_3 on the unit circle. The remaining point α_4 is then determined by imposing the condition that the rectangle in the w plane has the proper orientation. This can be done by requiring, for instance, that the upper edge of the unit cell in the w plane is horizontal, a condition that can be written as

$$\text{Im} \left[\frac{dW}{d\theta} \right] = 0 \quad \text{on} \quad \zeta = \exp(i\theta), \quad \text{for} \quad \theta_2 < \theta < \theta_3, \quad (19)$$

where $\theta_i = \arg(\alpha_i)$. Using the fact that $dW/d\theta = i\zeta(dW/d\zeta)$ on $|\zeta| = 1$, Eq. (19) becomes

$$\frac{dW}{d\zeta} = -\frac{1}{\zeta^2} \overline{\left(\frac{dW}{d\zeta} \right)} \quad \text{on} \quad \zeta = \exp(i\theta), \quad \text{for} \quad \theta_2 < \theta < \theta_3. \quad (20)$$

Using Eq. (14) and the relations (16) and (17) in the preceding equation, one obtains after straightforward algebra the following relation between the α_i 's:

$$\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4 = 1, \quad (21)$$

which can be solved for α_4 in terms of the other three (freely specified) parameters: $\alpha_4 = \overline{\alpha_1\alpha_2\alpha_3}$, where we have used that $1/\alpha_i = \bar{\alpha}_i$, since $|\alpha_i| = 1$.

Similarly, from the condition that the slit in the w plane is horizontal, one obtains the following relation:

$$\text{Im} \left[\frac{dW}{d\theta} \right] = 0 \quad \text{for} \quad \zeta = qe^{i\theta}, \quad (22)$$

or alternatively,

$$\frac{dW}{d\zeta} = -\frac{q^2}{\zeta^2} \overline{\left(\frac{dW}{d\zeta} \right)} \quad \text{for} \quad \zeta = qe^{i\theta}, \quad (23)$$

where we have used that $dW/d\theta = i\zeta(dW/d\zeta)$ and $\bar{\zeta} = q^2/\zeta$ for $\zeta = qe^{i\theta}$. Using Eqs. (14), (17), and (18) in Eq. (23) yields the relation

$$\beta_1 = \overline{\beta_3}. \quad (24)$$

We must also ensure single-valuedness of the function $W(\zeta)$ by applying the condition

$$\oint_{|\zeta|=q} W(\zeta) d\zeta = 0. \quad (25)$$

Equations (24) and (25) thus determine the parameters β_1 and β_3 . Finally, the value of K is determined by the following condition:

$$\Delta W|_A^D \equiv W(\alpha_4) - W(\alpha_3) = ia(U - V), \quad (26)$$

as follows from Fig. 1(b).

B. The function $\tilde{W}(\zeta)$

Since the flow domain in the $\tilde{w}$ plane is a polygonal region with a vertical slit in its interior [see Fig. 1(c)], the function $\tilde{W}(\zeta)$ can also be obtained from the Schwarz-Christoffel formula:

$$\tilde{W}(\zeta) = i\tilde{K} \int_{\alpha_4}^{\zeta} \frac{P(q^2\zeta/\beta_2, q)P(q^2\zeta/\beta_4, q)}{\sqrt{\prod_{i=1}^4 P(\zeta/\alpha_i, q)}} d\zeta, \quad (27)$$

where, as before, we have chosen the premultiplying constant as purely imaginary, meaning that $\tilde{K}$ is a real constant.

The requirement that the slit in the $\tilde{w}$ plane be vertical [see Fig. 1(c)] yields the following relation:

$$\operatorname{Re} \left[\frac{d\tilde{W}}{d\theta} \right] = 0 \quad \text{for} \quad \zeta = qe^{i\theta}, \quad (28)$$

or alternatively,

$$\frac{d\tilde{W}}{d\zeta} = \frac{q^2}{\zeta^2} \overline{\left(\frac{d\tilde{W}}{d\zeta} \right)} \quad \text{for} \quad \zeta = qe^{i\theta}. \quad (29)$$

Now, carrying out similar steps as those that led to Eq. (24) from (23), one finds that

$$\beta_2 = -\bar{\beta}_4, \quad (30)$$

which together with the single-valuedness condition,

$$\oint_{|\zeta|=q} \tilde{W}(\zeta) d\zeta = 0, \quad (31)$$

determine β_2 and β_4 . Lastly, the constant $\tilde{K}$ is fixed by the condition

$$\Delta \tilde{W}|_D^A \equiv \tilde{W}(\alpha_3) - \tilde{W}(\alpha_4) = iaV. \quad (32)$$

IV. EXAMPLES

Without loss of generality, we shall set $a = 1$ and $V = 1$ throughout this section. We also recall that solutions for any $U \neq 2$ can be obtained by a proper rescaling of the solutions with $U = 2$ [13]. We shall thus restrict ourselves to the case $U = 2$.

It is easy to verify that the general solution presented above reproduces, as a particular case, the solution obtained by Burgess and Tanveer [21] for an infinite stream of symmetrical bubbles. To see this, it suffices to choose the four points α_i to be symmetrically located with respect to the vertical and horizontal axes, i.e., $\alpha_1 = -\bar{\alpha}_2 = -\alpha_3 = \bar{\alpha}_4$. One then finds that $\beta_1 = -\beta_3 = i$ and $\beta_2 = -\beta_4 = -1$, implying that the bubble is symmetric with respect both to the channel centerline and to the fore-and-aft direction, as in the Burgess-Tanveer solution [21].

If one requires instead only that $\alpha_4 = \bar{\alpha}_1$ and $\alpha_3 = \bar{\alpha}_2$, with no assumed relation between α_1 and α_2 , one obtains a stream of bubbles with fore-and-aft symmetry but no centerline symmetry. An example of this case is shown in Fig. 2 for $\theta_1 = 0.3$, $\theta_2 = 1.64$, and $q = 0.5$. (In this figure some streamlines of the flow are also shown for illustration purposes.) We note, in particular, that in the limit that the cell period goes to infinity, i.e., $L \rightarrow \infty$, the family of solutions shown in Fig. 2 reproduces the exact solutions for a single asymmetric bubble

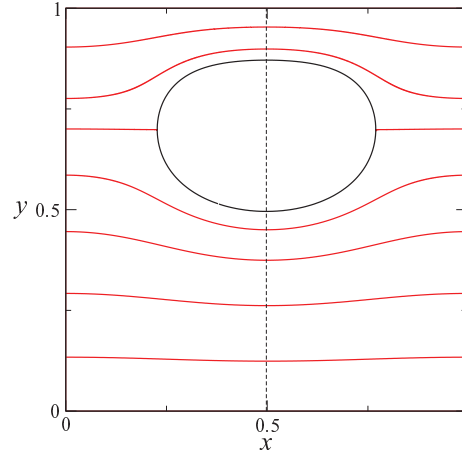


FIG. 2. (Color online) Period cell for a stream of bubbles with fore-and-aft symmetry. Here the parameters are $\theta_1 = 0.3$, $\theta_2 = 1.64$, and $q = 0.5$, and the resulting period is $L = 0.996$.

in a Hele-Shaw cell [14,15]. The limit $L \rightarrow \infty$ is accomplished in our formulation by setting $\alpha_1 = \alpha_2$ and $\alpha_3 = \alpha_4$; see Fig. 1.

Similarly, a stream of bubbles with centerline symmetry (but not with fore-and-aft symmetry) is obtained by imposing the conditions $\alpha_1 = -\bar{\alpha}_2$ and $\alpha_3 = -\bar{\alpha}_4$. It is worth pointing out that solutions with either centerline or fore-and-aft symmetry can also be obtained by reducing the problem to a simply connected domain and applying the standard Schwarz-Christoffel formula [13,22]. The formalism presented here, however, is more general in that it naturally accounts for asymmetric bubbles. Indeed, if one chooses the parameters α_i arbitrarily, i.e., with no symmetry relations between them, then the resulting bubble has no symmetry whatsoever. One example of such solutions is shown in Fig. 3 for the parameters $\theta_1 = 0.87$, $\theta_2 = 3.0$, $\theta_3 = 3.9$, and $q = 0.5$.

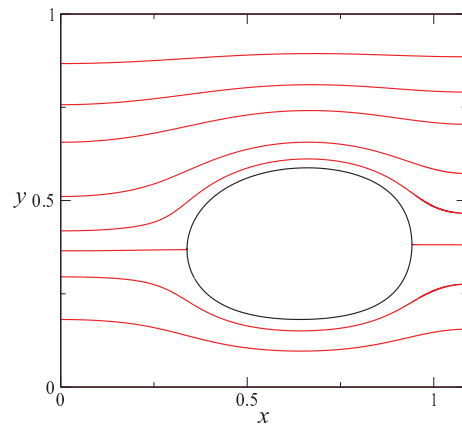


FIG. 3. (Color online) Asymmetric solution for $\theta_1 = 0.87$, $\theta_2 = 3.0$, $\theta_3 = 3.9$, and $q = 0.5$. The resulting half-period is $L = 1.09$.

V. CONCLUSIONS

We have presented an exact solution for a steady stream of asymmetric bubbles cotraveling in a Hele-Shaw channel. From the periodicity along the streamwise direction, the original flow domain was reduced to a rectangular unit cell containing only one bubble. The complex potentials $w(z)$ and $\bar{w}(z)$ in the comoving frame and in the laboratory frame, respectively, were computed in terms of conformal mappings from an annulus in an auxiliary complex ζ plane onto the respective flow domains in the w and $\bar{w}$ planes. Both

these domains turn out to be given by degenerate polygonal regions, so that the desired mappings could be constructed explicitly by making use of the Schwarz-Christoffel formula for doubly connected domains. As an important extension of the present work, it would be interesting to consider periodic solutions with several (asymmetric) bubbles per unit cell, in which case one needs to employ the generalized Schwarz-Christoffel formula for polygonal domains of arbitrary connectivity. This more difficult problem is currently under investigation.

-
- [1] P. G. Saffman and G. I. Taylor, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **245**, 312 (1958); G. I. Taylor and P. G. Saffman, *Q. J. Mech. Appl. Maths* **12**, 265 (1959).
 - [2] M. Mineev-Weinstein, P. B. Wiegmann, and A. Zabrodin, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5106 (2000).
 - [3] B. Gustafsson and A. Vasil'ev, *Conformal and Potential Analysis in Hele-Shaw Cell* (Birkhäuser, Basel, 2006); M. Mineev-Weinstein, M. Putinar, and R. Teodorescu, *J. Phys. A* **41**, 263001 (2008).
 - [4] G. L. Vasconcelos, *J. Fluid Mech.* **444**, 175 (2001).
 - [5] S. Richardson, *Eur. J. Appl. Math.* **5**, 97 (1994).
 - [6] D. G. Crowdy, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **465**, 421 (2009).
 - [7] M. C. Dallaston and S. W. McCue, *Phys. Fluids* **24**, 052101 (2012).
 - [8] R. Zenit, D. L. Koch, and A. S. Sangani, *J. Fluid Mech.* **429**, 305 (2001).
 - [9] B. Figueroa-Espinoza and R. Zenit, *Phys. Fluids* **17**, 091701 (2005).
 - [10] M. Sugihara-Seki and B. M. Fu, *Fluid Dyn. Res.* **37**, 82 (2005).
 - [11] C. Pozrikidis, *Phys. Fluids* **17**, 031503 (2005).
 - [12] J. L. McWhirter, H. Noguchi, and G. Gompper, *PNAS* **106**, 6043 (2009).
 - [13] A. M. P. Silva and G. L. Vasconcelos, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **467**, 346 (2011).
 - [14] S. Tanveer, *Phys. Fluids* **30**, 1589 (1987).
 - [15] R. Combescot and T. Dombre, *Phys. Rev. A* **38**, 2573 (1988).
 - [16] D. Crowdy, *Nonlinearity* **22**, 51 (2009).
 - [17] D. Crowdy (private communication).
 - [18] C. C. Green and G. L. Vasconcelos (unpublished).
 - [19] D. G. Crowdy, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **461**, 2653 (2005).
 - [20] M. A. Evgrafov, *Analytic Functions* (Dover, New York, 1978).
 - [21] D. Burgess and S. Tanveer, *Phys. Fluids A* **3**, 367 (1991).
 - [22] G. L. Vasconcelos, *Phys. Rev. E* **50**, R3306 (1994).