



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

VICTOR HUGO DE HOLANDA CAVALCANTI

**ESTUDO DE PROCESSOS DE EMPACOTAMENTO E DESEMPACOTAMENTO
DE ARAMES EM CAVIDADES TRIDIMENSIONAIS**

Recife
2017

VICTOR HUGO DE HOLANDA CAVALCANTI

**ESTUDO DE PROCESSOS DE EMPACOTAMENTO E DESEMPACOTAMENTO
DE ARAMES EM CAVIDADES TRIDIMENSIONAIS**

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. Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes
Universidade Federal de Pernambuco

Recife
2017

Catálogo na fonte
Bibliotecário Jefferson Luiz Alves Nazareno CRB 4-1758

C376e Cavalcanti, Victor Hugo de Holanda.
Estudo de processos de empacotamento e desempacotamento de arames em cavidades tridimensionais / Victor Hugo de Holanda Cavalcanti . – 2017.
100f.: fig., tab.

Orientador: Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes.
Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, Recife, 2017.
Inclui referências.

1. Física estatística. 2. Matéria macia . 3. Fractais. 4. Empacotamento de arames. I. Gomes, Marcelo Andrade de Filgueiras. (Orientador). II. Título.

530.1595 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2017-28

VICTOR HUGO DE HOLANDA CAVALCANTI

**ESTUDO DE PROCESSOS DE EMPACOTAMENTO E DESEMPACOTAMENTO
DE ARAMES EM CAVIDADES TRIDIMENSIONAIS**

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.

Aprovada em: 29/03/2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Pedro Valadão Carelli
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Sérgio Galvão Coutinho
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. André de Pinho Vieira
Examinador Externo
Universidade de São Paulo

Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior
Examinador Externo
Universidade Federal do Ceará

Dedico este trabalho à minha mãe, Wenie Barros.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos os deuses, deusas, heróis, criaturas mágicas e todos os seres que protegem a vida na Terra. Quem sabe o que seria de nós na noite e no escuro sem a vigilância de todos eles. Em especial, agradeço aos Cavaleiros do Zodíaco por protegerem a Terra na última guerra santa. Apesar de nem todos existirem de fato, sua presença é bastante importante nos momentos de frustração e cansaço, exaltação e desespero, que surgem nos anos de formação acadêmica. Durante estes anos nos quais me dediquei ao doutorado em física, tive o apoio, incentivo e a ajuda de diversas pessoas aos quais agradeço agora.

A primeira pessoa dessa lista é minha mãe, Wenie Barros. Por seu esforço em garantir a minha educação e a de meu irmão. Pelo carinho, apoio, compreensão e pelas longas conversas sobre religião e ciência. Muito obrigado, mãe. Agradeço à Lohanna Savino, minha companheira e meu alicerce em todos os momentos, por estar sempre acreditando e me incentivando, e por fingir que ouvia todos os meus monólogos sobre os problemas que eu estudava. E, principalmente, por aguentar meu estresse durante a escrita desta tese. Ao meu filho, Nicolas, cuja necessidade por histórias alimentou minha criatividade, elemento crucial para o trabalho científico.

Agradeço aos meus sogros Rui e Vana Cristo e ao meu cunhado Lucas por me fazerem sentir parte da família. Principalmente, sou grato a Vana e Enilza pelos inúmeros cafés sem os quais essa tese teria ficado pela metade e o meu computador, babado de sono.

Aos meus colegas Leozinho, Marcone, Hugo, Tiago Araújo, Alexandre Sena, Alejo Fonseca, Florentino, Eglânio e Antônio Márcio que participaram de inúmeras discussões dentro ou fora de uma mesa de bar. Aos companheiros de laboratório André De' Carli, Tiago Saraiva, Francisco Rocha e Felipe Costa que contribuíram com discussões e trabalhos paralelos que garantem a diversidade na formação acadêmica. Agradeço ao Departamento de Física da UFPE por disponibilizar o necessário ao estudo e formação e também por proporcionar espaço para a realização do Encontro Fractal. O CNPq e a CAPES proporcionaram o apoio financeiro indispensável ao doutoramento e, por isso, os agradeço.

Muito obrigado ao meu amigo Thiago Sobral por sua parceria na realização do Encontro Fractal, pelas inúmeras discussões no laboratório e por ter me ajudado com a revisão desta tese. Agradeço ao professor Marcelo Gomes pela orientação, pela sugestão de trabalhos e acompanhamento de todo o processo e, principalmente, pela paciência.

Por último, agradeço ao meu irmão pelo conselho que me deu quando tive uma ideia e não sabia o que fazer:

"Começa colocando o lápis no papel."

Igor de Holanda

"The important thing is not to stop questioning. Curiosity has its own reason for existing. One cannot help but be in awe when he contemplates the mysteries of eternity, of life, of the marvelous structure of reality. It is enough if one tries merely to comprehend a little of this mystery every day. Never lose a holy curiosity."

Albert Einstein

RESUMO

Esta tese apresenta um estudo do confinamento de arames em cavidades tridimensionais. Nosso trabalho foi dividido em duas partes, sendo a primeira dedicada ao empacotamento de arames e a segunda à sua extração. Inicialmente, realizamos experimentos para caracterizar o arame empacotado. Para isso, inserimos arame galvanizado em cavidades cilíndricas até o limite de empacotamento rígido, ou seja, quando o experimentador não consegue mais introduzir arame na cavidade. Observamos que a estrutura adotada pelo arame depende da forma da cavidade e definimos *fases morfológicas* baseadas nessas estruturas. Estudamos também a probabilidade de ocorrer duas dessas fases morfológicas e suas frações de empacotamento ρ , definidas como a razão entre o volume do fio empacotado e o volume da cavidade. Apesar das fases serem distintas, encontramos que o comprimento de fio injetado e o volume da cavidade se relacionam por uma lei de escala em ambas as fases com o mesmo expoente, independente da fase. Os resultados obtidos com arames são comparados com dados de uma extensa literatura sobre o empacotamento de material genético em cápsulas virais que mostram que ambos os sistemas, arames e genomas virais, se comportam de forma bastante similar. Numa parte subsequente do experimento a extração do material empacotado é estudada. Quando tentamos retirar o arame da cavidade percebemos que ocorre um "travamento" de forma que a força necessária para puxá-lo é tão grande que o arame chega a romper. Estudamos a probabilidade de ocorrer estes travamentos e o pedaço residual que fica preso na cavidade quando o travamento ocorre, que chamamos de *núcleo*. Constatamos que a estrutura do núcleo obedece a mesma lei de escala entre o comprimento e o volume obtida no empacotamento máximo, conectando, assim, os resultados da primeira parte do trabalho e da segunda.

Palavras-chave: Empacotamento. Desempacotamento. Amassamento de arames. Congestionamento. Fractais.

ABSTRACT

This thesis presents a study of the confinement of wires in three-dimensional cavities. Our work was divided in two parts, a first one dedicated to the packaging of wires and a second one for its extraction. First we perform experiments to characterize the packaged wire. To do this, we insert galvanized wire into cylindrical cavities up to the limit of rigid packaging, that is, when the experimenter can no longer inject wire in the cavity. We observed that the structure adopted by the wire depends on the shape of the cavity and we define *morphological phases* based on these structures. We also studied the probability of occurrence of two of these morphological phases and their packaging fractions ρ , defined as the ratio between the volume of packed wire and the volume of the cavity. Although the phases are distinct, we find that the length of the injected wire and the volume of the cavity are related by a scaling law in both phases with the same exponent, independent of the phase. The results obtained with wires are compared with data from an extensive literature on the packaging of genetic material into viral capsules and we show that both systems, wires and viral genomes, behave quite similarly. In a subsequent part of the experiment the extraction of the packaged material is studied. When we try to remove the wire from the cavity we realize that a "blockage" occurred so that the force required to pull it is so great that the wire breaks. We studied the probability of occurrence of these locks and the residual piece that gets stuck in the cavity when a locking occurs, and we call it a *core*. We find that the structure of the core obeys the same scaling law between the length and volume obtained in the maximum packaging, thus connecting the results of the first part of the work and the second.

Keywords: Packing. Unpacking. Crumpled wires. Jamming. Fractals.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – O terror do viajante.	20
Figura 2 – Caixa com poucas laranjas (a) que se movem quando são chacoalhadas (b). Porém, quando o número de laranjas aumenta (c) as laranjas movem-se bem menos (d) devido às colisões entre si.	21
Figura 3 – Laranjas de diversos tamanho cujo conjunto se torna rígido devido à grande densidade.	21
Figura 4 – (a) Fotografia de uma folha e suas ramificações; se olharmos mais de perto, veremos que elas continuam em diversos níveis (b). (c) Aglomerado formado em um eletrodo pela eletrólise de uma solução de sulfato de cobre (imagem de Kevin R Johnson e disponível em https://commons.wikimedia.org/wiki/File:DLA_Cluster.JPG).	23
Figura 5 – (a) A função $f(x) = x^2$ é mostrada no intervalo $[-1,1]$. (b) O intervalo é reescalado por um fator 0,5 e os valores da função mudam por um fator $0,5^2$	24
Figura 6 – (a) Triângulo de Sierpinski e curva de Koch (b) são dois exemplos de fractais matemáticos formados através de algoritmos iterativos.	24
Figura 7 – A primeira iteração para a formação da curva de Koch é mostrada em (a) e em (b) e (c) temos a segunda e terceira iterações, respectivamente.	25
Figura 8 – Em (a) esquematizamos uma rede quadrada onde os vértices são sítios que podem ser ocupados (brancos) ou vazios (pretos). Em (b), uma rede quadrada de lados 1000x1000 foi ocupada com probabilidade $p = 0,5928 \geq p_c$ e o aglomerado de percolação, o maior da rede, está colorido em amarelo. Na imagem (c) o aglomerado de percolação é visto isoladamente.	26
Figura 9 – Desenhos de movimento randômico de Perrin que mostram o movimento de três partículas coloidais de raio $0,53\mu m$ vistas em um microscópio. Os pontos, unidos por linhas retas, são as posições sucessivas das partículas a cada 30 s. A escala do gráfico é tal que cada divisão equivale a $1\mu m$ [18].	29
Figura 10 – (a) Caminhada aleatória com 10000 passos em duas dimensões. (b) Caminhada aleatória na qual a autoexclusão está presente. Nesta última, o caminhante dá apenas 121 passos antes de ficar sem possibilidade de se mover.	29
Figura 11 – (a) Esquema da compressão de uma bola de laminado de alumínio realizada no estudo de Gomes et al.[24]. Na figura, o diâmetro ϕ é comprimido até atingir a dimensão y . São medidos o comprimento equatorial x e a força F necessária para gerar a deformação. (b) Camada de nata depositada em uma placa logo após ser retirada do leite fervido [25].	32

Figura 12 – Fio de náilon confinado em uma cavidade bidimensional constituída de duas placas de acrílico separadas mantidas a $\approx 1\text{mm}$ de distância uma da outra [27]. A seta indica por onde o fio foi inserido na cavidade.	33
Figura 13 – Na figura (a), discos são dispostos em uma rede quadrada e (b), eles são acomodados em uma rede hexagonal onde se consegue a maior fração de empacotamento para este problema.	34
Figura 14 – Cilindros distribuídos em uma rede quadrada (a) e rede hexagonal de toroides (b) como limites para o empacotamento de arames em um suposto empacotamento regular.	35
Figura 15 – (a) Formação do primeiro laço no empacotamento de um fio de cobre em uma cavidade de acrílico [28]. (b) O fio de náilon é preso na parte inferior da cavidade e a injeção ocorre pelo canal localizado na parte superior da cavidade. A rede de laços na imagem se forma no limite do empacotamento rígido [27]. As setas apontam na direção dos canais de injeção utilizado nos experimentos.	36
Figura 16 – (a) Relação massa-tamanho calculada através do algoritmo de contagem de caixas para obtenção da dimensão fractal. (b) Comparação entre o modelo hierárquico e os pontos experimentais na referência [30]. O eixo das abscissas corresponde à fração de empacotamento.	38
Figura 17 – Extração de um laço da cavidade mostrada através de fotos de um experimento real [32].	39
Figura 18 – A energia elástica do empacotamento de arames em (a) se concentra em uma região unidimensional do espaço, vista como arcos de circunferência em (b).	40
Figura 19 – (a) Representação de diferentes morfologias obtidas em cavidades não-simplesmente conexas [34], ou seja, devido a uma alteração na sua topologia. Da esquerda para a direita e de cima para baixo temos redes com 1, 4, 9, 16, 25, 36, 64, 144 e 196 pinos, respectivamente. Observe que os pinos atuam como uma <i>temperatura efetiva</i> , congelando o sistema e inibindo a formação de laços. (b) Cavidades retangulares são preenchidas com discos móveis [35], que atuam como paredes efetivas. De cima para baixo, as cavidades possuem 38, 76, 114, 214, 283 e 318 discos, respectivamente.	41
Figura 20 – (a) Relação entre o diâmetro médio R de esferas de fio de solda e o comprimento L necessário para as confeccionar [7]. A relação de escala entre L e R tem expoente $D = 2,75$. Na figura, x_i é o diâmetro do arame. (b) Lei de escala entre $100\xi\Omega$ e o diâmetro R das esferas, onde Ω é a resistência elétrica e ξ o diâmetro médio das esferas.	42

Figura 21 – Sequência mostrada em (a) relacionadas a simulações do empacotamento de fios em cavidades flexíveis com coeficiente de atrito $\mu = 0$ (linha superior) e $\mu = 0,5$ (linha inferior) [36]. O comprimento injetado é 2,5; 5; 10; 20; 40 e 250 em cada coluna. Na figura (b) vemos experimentos do mesmo trabalho onde são usados balões de borracha como cavidade (nas duas figuras da esquerda o coeficiente de atrito é, aproximadamente, 0,5).	43
Figura 22 – Transição entre empacotamento toroidal e desordenado mostrado através do parâmetro de ordem D (veja texto para detalhes) obtido pela curvatura média ao longo do fio [36]. Na esquerda vemos D como função da flexibilidade da cavidade ε , com coeficiente de atrito $\mu = 1$ e na direita o parâmetro é marcado contra o coeficiente de atrito, quando a cavidade tem flexibilidade $\varepsilon = 10^3$	44
Figura 23 – Bolas de arame obtidas em regime de baixa fricção (esquerda) e alta fricção (direita) [37].	45
Figura 24 – Cavidade cúbica utilizada por Gomes, Pereira e Brito[38] no empacotamento de arame em cavidade não simplesmente conexa.	45
Figura 25 – (a) Probabilidade de surgimento de nós em uma corda de tamanho L [39]. (b) Sequencia de imagens mostra, da esquerda para a direita e de cima para baixo, fotografias tiradas a cada dez ciclos de uma placa oscilante onde um nó foi posto no centro [40].	47
Figura 26 – (a) uma das cavidades de PVC usadas nos experimentos. (b) seringa de plástico mostrando o êmbolo e a capa de látex assim como o pino usado para travar o êmbolo. No interior da cavidade é possível ver o arame galvanizado inserido.	50
Figura 27 – Semelhante aos laços em duas dimensões, a figura mostra uma estrutura formada devido a torção acumulada no fio.	51
Figura 28 – À esquerda é mostrada uma fotografia de uma amostra em uma <i>Configuração Desordenada</i> e à direita vemos um exemplo de <i>Configuração Parcialmente Ordenada</i>	52
Figura 29 – A forma da cavidade muda ao variar a taxa de aspecto $t = D/H$, onde D é o diâmetro e H é a altura da cavidade. Mantendo D fixo e variando a altura, (a), ou mantendo H fixo e variando D , (b), obtemos cavidades com perfil semelhantes. Da esquerda para a direita em ambas as figuras são apresentados esquemas de cavidades com $t < 1$, $t = 1$ e $t > 1$	53

Figura 30 – Probabilidade de obter uma das configurações morfológicas como função da taxa de aspecto das cavidades: os círculos pretos são resultados de amostras na <i>Configuração Parcialmente Ordenada</i> enquanto que os quadrados vermelhos estão na <i>Configuração Desordenada</i> e curvas nas mesmas cores dos marcadores foram mantidas para ajudar na visualização de cada configuração. As probabilidades foram obtidas pela razão entre o número de amostras na configuração e o número de amostras total em determinado t .	55
Figura 31 – Fração de empacotamento ρ no limite de empacotamento rígido como resposta à taxa de aspecto das cavidades para a <i>CPO</i> (círculos vermelhos) e <i>CD</i> (quadrados pretos). Nota-se que os valores de ρ na <i>CPO</i> são, em geral, superiores à <i>CD</i> devido ao maior preenchimento do espaço pelos os anéis da <i>CPO</i> .	57
Figura 32 – Resultados experimentais do volume das cavidades versus o comprimento máximo de fio injetado mostram uma lei de potência do tipo $V \sim L^\alpha$ com expoente $\alpha = 1,32 \pm 0,03$. Nos gráficos internos são mostrados os dados da <i>CPO</i> e <i>CD</i> cujos expoentes são $1,28 \pm 0,03$ e $1,33 \pm 0,04$, respectivamente.	58
Figura 33 – Os dois modelos de cavidade usados nas duas diferentes configurações experimentais comparadas aqui: <i>simétrica</i> , de alumínio e aço (esta Tese, lado esquerdo) e <i>assimétrica</i> , de plástico (V. P. Brito, lado direito).	67
Figura 34 – Dependência linear do comprimento L_n do núcleo com o comprimento L injetado. Na figura os círculos pretos foram obtidos na <i>cav1</i> , os triângulo vermelhos na <i>cav2</i> e os quadrados azuis na <i>cav3</i> . No ajuste obtemos a constante $k = 0,71$ com coeficiente de correlação acima de 0,99.	68
Figura 35 – Esquema de medida das dimensões h_1 e h_2 do núcleo em esboços que representam diferentes estruturas de núcleos que visualizamos.	69
Figura 36 – O volume do núcleo V_n é marcado contra o comprimento L_n do mesmo. A linha reta mostra a relação $V_n \sim L_n^{1,32}$, encontrada no capítulo anterior e ajustada visualmente. Círculos pretos representam resultados da <i>cav1</i> , os triângulo vermelhos da <i>cav2</i> e quadrados azuis da <i>cav3</i> .	69
Figura 37 – Esquema da curva de Koch em um espaço limitado representando os pedaços de arame na cavidade na formação do fractal físico. As primeiras (seguintes) iterações da curva correspondem aos maiores (menores) trechos de arame injetado.	70

Figura 38 – Resultado da ocorrência de bloqueios nas cavidades simétricas (a) <i>cav1</i> (círculos pretos), (b) <i>cav2</i> (triângulos vermelhos) e (c) <i>cav3</i> (quadrados azuis). Cada ponto do gráfico representa a realização de $N = 50$ reproduções do experimento nos quais n travamentos ocorreram. A linha tracejada mostra o limiar de $4\pi R$ para o qual os travamentos começam a ocorrer. Na figura (d) esquematizamos os dois laços de perímetro $2\pi R$ cuja formação é necessária para este fenômeno.	72
Figura 39 – Probabilidade de travamentos em (a) <i>cav4</i> , (b) <i>cav5</i> , (c) <i>cav6</i> e (d) <i>cav7</i> . Todas as cavidades possuem perfil assimétrico. A linha tracejada indica o valor $L = 4\pi R$ para iniciar o processo de travamento. Experimentos realizados por V. P. Brito.	73
Figura 40 – Probabilidade de travamentos nas cavidades <i>simétricas</i> (a) <i>cav1</i> , (b) <i>cav2</i> , (c) <i>cav3</i> . Resultados de V. P. Brito são mostrados em (d) <i>cav4</i> , (e) <i>cav5</i> , (f) <i>cav6</i> e (g) <i>cav7</i> . A linha tracejada nas figuras foi obtida pela relação $P \sim L^{0,68}$. Em todos os casos os experimentos foram realizados com arame galvanizado.	75
Figura 41 – Probabilidade de travamentos nas cavidades (a) <i>cav4</i> , (b) <i>cav5</i> , (c) <i>cav6</i> e (d) <i>cav7</i> para arames de cobre. A linha tracejada nas figuras foi obtida pela relação $P \sim L^{0,68}$. (Dados experimentais de V. P. Brito).	76
Figura 42 – Probabilidade de travamentos nas cavidades (a) <i>cav4</i> , (b) <i>cav5</i> , (c) <i>cav6</i> e (d) <i>cav7</i> em experimentos com fios de náilon mostrando que a lei de potência permanece um modelo razoável mesmo com arames mais maleáveis. A linha tracejada nas figuras foi obtida pela relação $P \sim L^{0,68}$. (Dados experimentais de V. P. Brito).	77
Figura 43 – (a) Fotografia de um pedaço de arame galvanizado empacotado manualmente e parcialmente desamassado, mostrando diversas regiões de grande curvatura e trechos aproximadamente retilíneos. Em (b) é esquematizada a aproximação do arame empacotado por uma sequência de trechos e dobras.	80
Figura 44 – Sentido dos processos de empacotamento e desempacotamento. A relação entre o tamanho dos trechos é a "inversa" entre um processo e outro.	81
Figura 45 – Probabilidade experimental de travamentos P em experimentos com arame galvanizado em função comprimento normalizado L/H para a cavidade 1 (a), 2 (b), 3 (c), 4 (d), 5 (e), 6 (f) e 7 (g). As linhas tracejadas são o gráfico da equação 5.9 com os valores de p indicados na tabela 4.	84
Figura 46 – Probabilidade de travamentos obtidas com fio de cobre nas cavidades 4 (a), 5 (b), 6 (c) e (7). A equação 5.9, ajustada com os valores de p da tabela 4, é mostrada pela linha tracejada nos gráficos. Experimentos realizados por Valdemiro P. Brito.	85

Figura 47 – Probabilidade de travamentos obtida nas cavidades 4 (a), 5 (b), 6 (c) e (7) em experimentos com fio de nylon. As linhas tracejadas são o gráfico da equação 5.9 com os valores de p indicados na tabela 4. Experimentos realizados por Valdemiro P. Brito.	86
Figura 48 – Comparação entre a expressão encontrada em 5.15, linha tracejada, e dados experimentais do comprimento do núcleo L_n como função do comprimento injetado L na <i>cav1</i> (a), <i>cav2</i> (b) e <i>cav3</i> (c).	89
Figura 49 – Probabilidade de uma amostra estar na CPO (círculos pretos) ou na CD (quadrados vermelhos) em relação à taxa de aspecto da cavidade.	92
Figura 50 – Nó formado em um cateter peritonal. Figura retirada da referência [65].	93
Figura 51 – Arame de 0,6mm de diâmetro inserido em uma cavidade de 1mm de altura é mostrado em (a). Na figura (b) vemos um laço formado no empacotamento até o congestionamento de um fio de nylon de 0,5mm de diâmetro na mesma cavidade. A injeção é feita através de um canal no centro de uma das superfícies de acrílico.	95

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Quantificação de amostras nas configurações encontradas experimentalmente em intervalos da taxa de aspecto de tamanho 0,2.	54
Tabela 2 – Expoente α para o empacotamento de arames obtido em simulações (S), experimentos (E) obtidos em cavidades de diferentes geometrias.	60
Tabela 3 – Na tabela estão reportados alguns dos resultados apresentados por Cui, Schlub e Holmes[43] para o expoente e o fator de escala da relação entre o volume de uma cápsula viral e o comprimento do material genético do respectivo vírus. Os resultados foram divididos de acordo com características da cápsula (envelopado ou não, esférico ou não esférico) e do material genético (linear ou circular, dsDNA, dsRNA, +ssRNA, -ssRNA). Destacamos em negrito os valores usados na comparação entre o empacotamento de arames em cavidades macroscópicas e o empacotamento de material genético em cápsulas virais.	61
Tabela 4 – Constante q do modelo de crescimento de trechos do arame por uma progressão geométrica obtidas ajustando a probabilidade de travamentos e usando $q = 1 + p$	86

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	Autossimilaridade e leis de escala	23
1.2	Fractais	24
1.3	Processos aleatórios	27
2	CONFINANDO FIOS	31
2.1	Amassamento ou empacotamento?	31
2.2	Fração de empacotamento ρ	33
2.3	O empacotamento bidimensional	36
2.3.1	<i>Formação de laços</i>	36
2.3.2	<i>Mais problemas bidimensionais</i>	38
2.4	Fios em cavidades tridimensionais	41
2.4.1	<i>Nós em fios confinados</i>	46
3	SOBRE ARAMES E DNA	48
3.1	Realização experimental	48
3.1.1	<i>Materiais</i>	48
3.1.2	<i>Procedimento</i>	49
3.2	Análise dos resultados	50
3.2.1	<i>Descrição morfológica</i>	50
3.2.2	<i>Características do arame empacotado</i>	53
3.2.3	<i>Modelo de campo médio</i>	58
3.2.4	<i>Comparações entre o empacotamento de arames e de DNA</i>	60
4	DESEMPACOTAMENTO DE ARAMES DE CAVIDADES: OS EFEI- TOS DE BLOQUEIO	65
4.1	Descrição do experimento	65
4.2	Análise dos resultados	67
4.2.1	<i>O núcleo</i>	68
4.2.2	<i>A probabilidade de travamentos</i>	71
4.2.3	<i>Modelo de travamento baseado em caminhantes aleatórios</i>	74
4.3	Conclusão	77
5	O MODELO HIERÁRQUICO APLICADO AO DESEMPACOTA- MENTO	79
5.1	Empacotamento e desempacotamento: trechos e dobras	79

5.2	Desempacotamento: dobras e eventos de bloqueio	82
5.3	A velocidade de extração e a relação entre travamentos e nós . . .	87
5.4	Distribuição de tamanho do núcleo	88
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	91
	REFERÊNCIAS	96

1 INTRODUÇÃO

Você acorda de noite em sua cama. Está suado, pois está fazendo calor e você acordou com um susto. Se descobre por causa do calor e se senta lentamente. Quando se vira para a porta do quarto você percebe que uma pessoa está de pé segurando uma faca e olhando pra você. De repente ela corre em sua direção, levanta a faca por cima dos ombros e você acorda de noite em sua cama. Está suado, pois está fazendo calor e você acordou com um susto. Se descobre por causa do calor e se senta lentamente. Quando se vira para a porta do quarto você percebe que uma pessoa está de pé segurando uma faca e olhando pra você. De repente ela corre em sua direção, levanta a faca por cima dos ombros e...

Toda vez que fazemos uma viagem nos deparamos com um problema que parece ser universal: as coisas não cabem mais na mala, (Figura 1). A uma altura da vida, todo mundo conhece alguma maneira especial de dobrar meias e camisas e, quando o desespero aperta, a solução é empurrar e forçar as roupas tentando aproveitar todo espaço disponível. Este é apenas um de inúmeros problemas do mesmo tipo a que estamos submetidos em nosso cotidiano: ao organizar vegetais em uma geladeira depois das compras, jogos de tabuleiro em um armário ou ao guardar panelas em caixas para uma mudança. Em todos os casos citados, nos deparamos com a necessidade de acomodar diversos objetos em um volume finito.



Figura 1 – O terror do viajante.

Outros importantes problemas desta natureza e que mostram sua relevância geral são vistos no congestionamento no tráfego com um número grande de veículos, e na geometria das paredes de um corredor que direcionam o fluxo de uma multidão [1], para não mencionarmos os problemas seculares sobre empacotamento de esferas e outros congêneres [2, 3, 4]. Aqui, nós iremos denominá-los de *problemas de empacotamento*.

Esses fenômenos estão relacionados com a perda de graus de liberdade pelo sistema devido ao aumento em sua densidade. Para ilustrar, imagine uma caixa de laranjas com algumas poucas laranjas, como no esquema da figura 2(a). A caixa não está cheia e, quando alguém a chacoalha, as laranjas se movem e chocam uma com as outras (figura 2(b)). Ao colocar mais laranjas e balançar a caixa, cada uma delas irá se mover bem menos (figuras 2(c) e 2(d)), pois

elas irão rapidamente encontrar outras laranjas e se chocar contra elas. Ou seja, o número de contatos que cada laranja possui aumenta quando aumentamos a densidade delas na caixa e isso diminui sua movimentação. Assim, a perda de relevância da energia cinética suscita o aparecimento de outros tipos de energia através da interação entre as partes do sistema.

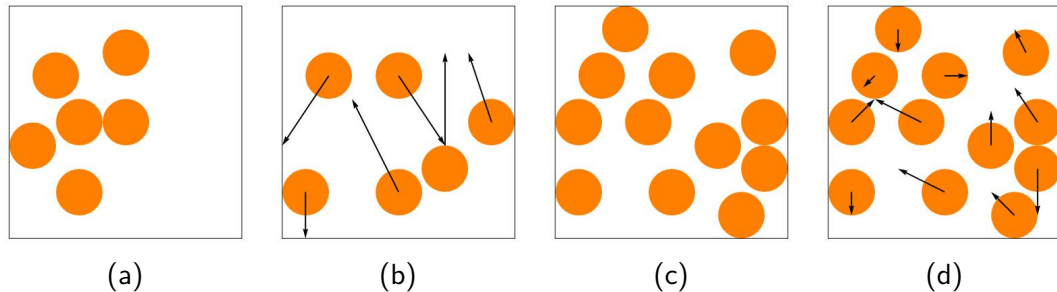


Figura 2 – Caixa com poucas laranjas (a) que se movem quando são chacoalhadas (b). Porém, quando o número de laranjas aumenta (c) as laranjas movem-se bem menos (d) devido às colisões entre si.

Se a caixa fosse infinitamente grande sempre haveria espaço para o movimento das laranjas. Na figura 3 esquematizamos o caso limite em que o número médio de contatos entre as laranjas está tão grande que não conseguimos colocar mais nenhuma outra e se a caixa for chacoalhada as laranjas não irão se mover. Tal fenômeno mostra uma transição entre um regime em que ainda existe mobilidade do sistema e um regime onde o sistema endurece, trava ou perde mobilidade. Essa transição é conhecida como *congestionamento* ou *jamming* [5].

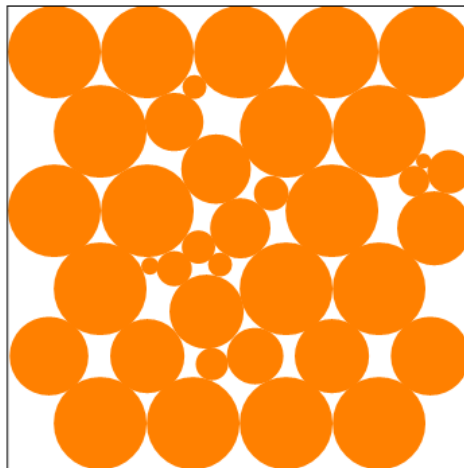


Figura 3 – Laranjas de diversos tamanho cujo conjunto se torna rígido devido à grande densidade.

Além da densidade, outros parâmetros podem levar ao congestionamento, como a *temperatura*, ou ainda, a energia cinética média das partículas. Se a temperatura do sistema diminuir, a mobilidade das partículas será reduzida. No exemplo das laranjas, a perda de mobilidade se reflete na incapacidade de adicionar novas laranjas na caixa, pois as antigas teriam de se mover para acomodar as novas. Até certo ponto, se tivéssemos força suficiente

disponível e as laranjas não estourassem, supomos possível inserir novas laranjas na caixa. A força a que o sistema está submetido pode levar ou tirar um sistema do estado congestionado [5].

Muitas propriedades físicas de sistemas mudam ao serem confinados em uma região. Quando um pedaço de papel é amassado, a bola formada será mais rígida do que o papel liso, tendo mudado sua compressibilidade. E ainda, é mais fácil arremessar a bola amassada do que a folha original. Já um pedaço de fio dobrado irá mudar a resistência que oferece à passagem da corrente elétrica pois surgirão diversos pontos em curto-circuito (contatos) na estrutura formada [6, 7]. Em geral, podemos associar pelo menos dois fatores que devem influenciar na mudança das propriedades físicas em questão. Um deles é a autoexclusão, tanto entre partes do próprio material quanto deste com as paredes que o confinam. Interações de autoexclusão são manifestações complexas do princípio de exclusão de Pauli; usualmente elas são descritas aproximadamente por interações de n -corpos expressas, numa linguagem de campos médios, como a n -ésima potência da densidade média do material. O outro fator corresponde, num sistema em equilíbrio à temperatura T , ao termo entrópico $-TS$ da energia livre. Nesse caso, próximo ao equilíbrio, a entropia é uma função convexa de variáveis conformacionais. Assim, $-TS$ equivale a uma energia potencial elástica hookeana dependente destas variáveis, na primeira aproximação não nula. A constante elástica equivalente é proporcional à temperatura e à derivada de segunda ordem da entropia no ponto de equilíbrio. Uma simulação interessante foi realizada por Smyda e Harvey[8] que confinaram cadeias poliméricas em uma (confinando-as entre placas), duas (limitando as cadeias à uma região cilíndrica) e três dimensões (colocando-as em esferas). Seus resultados mostram que o confinamento leva à perda de entropia do sistema. Nesse sentido, um caso de grande interesse é o empacotamento de moléculas de DNA e RNA em cápsulas virais. Simulações de dinâmica molecular sugerem que a perda de entropia deve contar cerca de 40% da energia livre no confinamento de uma molécula de DNA [9, 10], resultado que não possui corroboração experimental.

Neste capítulo exploraremos alguns conceitos básicos e modelos que serão utilizados na descrição dos fenômenos que estudados. O objetivo deste capítulo não é descrever minuciosamente todos os seus detalhes, mas apresentar os conceitos básicos para que possamos entendê-los. Nos experimentos realizados e apresentados neste trabalho foram confinados pedaços de arames em cavidades, o que nos incita à pesquisa das propriedades de sistemas confinados ou empacotados. Por outro lado, em nossos modelos será usado o fato de que arame confinado é um sistema fractal, conceito apresentado logo depois. Para representar o comportamento do arame ao longo da injeção na cavidade será necessário também usar a ideia de caminhadas aleatórias.

1.1 Autossimilaridade e leis de escala

Uma imagem que se repete em várias escalas e níveis como na história que abre este capítulo é um exemplo simples de autossimilaridade, uma característica encontrada em obras de arte [11], vegetais (figura 4(a) e (b)) e estruturas formadas em soluções sujeitas a eletrólise (figuras 4(c)). Esses objetos surgem pela repetição hierárquica de padrões como numa árvore, por exemplo. O caule da árvore é o primeiro nível da estrutura e dele saem diversos galhos. Dessos galhos, o segundo nível, saem galhos menores e mais finos e que são o nível seguinte. Isso se repete até que surjam as folhas. Mas as folhas também possuem ramificações e o processo continua, como mostra a fotografia na figura 4(b).

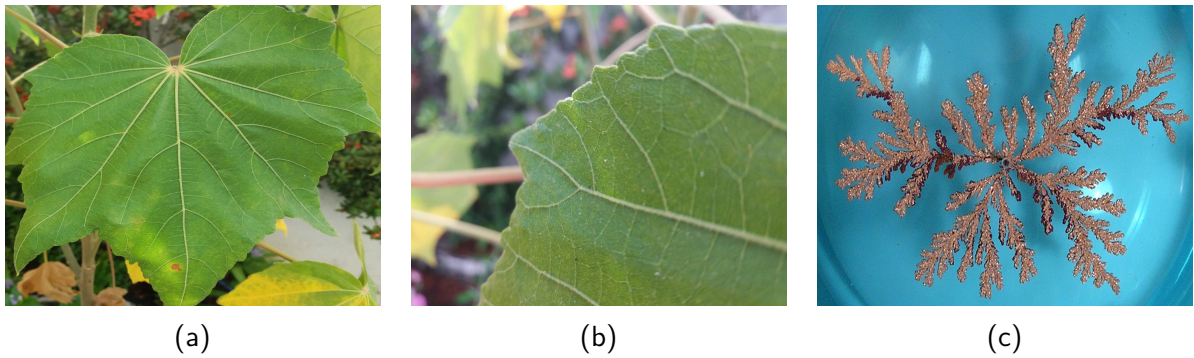


Figura 4 – (a) Fotografia de uma folha e suas ramificações; se olharmos mais de perto, veremos que elas continuam em diversos níveis (b). (c) Aglomerado formado em um eletrodo pela eletrólise de uma solução de sulfato de cobre (imagem de Kevin R Johnson e disponível em https://commons.wikimedia.org/wiki/File:DLA_Cluster.JPG).

A autossimilaridade pode ser representada através de leis de potência, ou seja, por funções do tipo

$$f(x) = Cx^E, \quad (1.1)$$

onde C e E são constantes. O expoente E é chamado grau de homogeneidade da função e, quando o argumento muda por um fator $\lambda > 0$, a função será reescalada pelo fator λ^E ,

$$f(\lambda x) = C(\lambda x)^E = \lambda^E f(x), \quad (1.2)$$

ou seja, a forma da função permanece a mesma, sendo apenas mudada por um fator multiplicativo. Na Figura 5(a) representamos a função $f(x) = x^2$ e em (b) reescalamos o intervalo em x por um fator 0,5. Observe que a mudança que fizemos nos valores de x é equivalente a dar um zoom na imagem, mas a forma no gráfico é mesma. Se não representamos os eixos com os valores de x e $f(x)$ é impossível distinguir as duas imagens.

Conhecemos diversas leis de potência cujo expoente é um número inteiro como a força Coulombiana entre duas partículas carregadas q_1 e q_2 , $F(d) = k_c q_1 q_2 \cdot d^{-2}$, e a lei de Hooke $F(x) = -k_h x$, onde x é a deformação em uma mola. Por outro lado, fractais são estruturas com características representadas por leis de potência com expoente não inteiro.

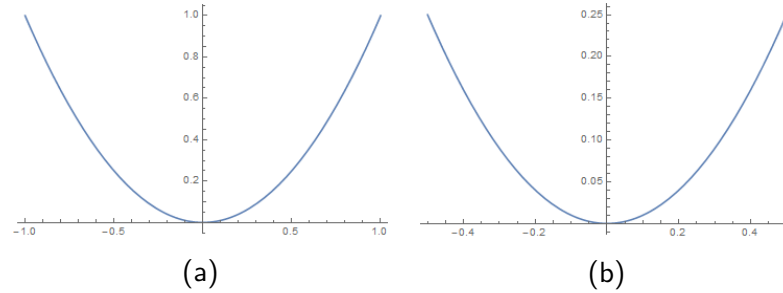


Figura 5 – (a) A função $f(x) = x^2$ é mostrada no intervalo $[-1,1]$. (b) O intervalo é reescalado por um fator 0,5 e os valores da função mudam por um fator $0,5^2$.

1.2 Fractais

O nome fractal foi cunhado por Mandelbrot para designar uma classe de formas autossimilares cuja morfologia não pode ser descrita pela geometria euclidiana [12]. Fractais podem ser formados pela repetição exata de determinado padrão, como o triângulo de Sierpinski, figura 6(a), ou alguma das curvas de Koch, figura 6(b), que são fractais matemáticos, ou podem ter origem na repetição de alguma propriedade estatística. Fractais físicos ou naturais não possuem infinitas iterações, pelo contrário, a quantidade de iterações é limitada pelo tamanho do sistema, seja ele uma árvore ou o sistema vascular de um ser vivo.

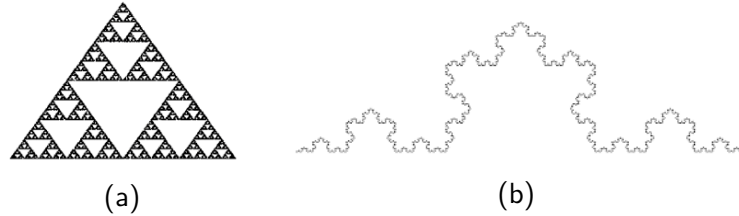


Figura 6 – (a) Triângulo de Sierpinski e curva de Koch (b) são dois exemplos de fractais matemáticos formados através de algoritmos iterativos.

Para construir a curva de *Koch* vista na figura 6(b), começamos com uma reta e dividimos em três partes. A parte central é retirada e, no lugar dela, colocamos dois outros pedaços de mesmo tamanho, como pode ser visto na figura 7(a). Essa estrutura é o gerador do fractal e, a cada nova iteração repetimos o que foi feito na iteração anterior em cada trecho reto. Em 7(b) e 7(c) são mostradas a segunda e terceira iterações, respectivamente. O fractal é definido como o conjunto que se forma após infinitas iterações. Observe que fractais não possuem um tamanho característico a partir do qual a figura não será mais autossimilar.

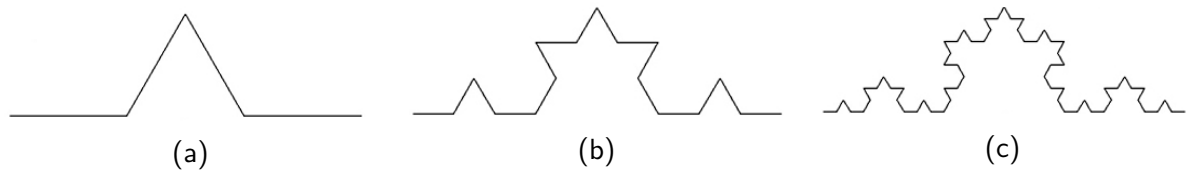


Figura 7 – A primeira iteração para a formação da curva de *Koch* é mostrada em (a) e em (b) e (c) temos a segunda e terceira iterações, respectivamente.

Vamos calcular o comprimento da curva. Se o tamanho da reta original é 1 então, na primeira iteração o perímetro L_1 da curva será

$$L_1 = 4 \cdot \frac{1}{3} > 1,$$

na segunda e terceira iterações, teremos

$$\begin{aligned} L_2 &= 16 \cdot \frac{1}{9} > L_1, \\ L_3 &= 64 \cdot \frac{1}{27} > L_2, \end{aligned}$$

e, após n iterações, o tamanho total da curva será

$$L = 4^n \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^n = \left(\frac{4}{3}\right)^n, \quad (1.3)$$

de forma que a cada nova iteração o tamanho da curva fica maior e, após as infinitas iterações para produzir o fractal, o perímetro da curva é infinito. Observe que para calcular o perímetro da curva a cada iteração são necessários $N_i = n_1^i$ objetos de tamanho $l_i = l_1^i$. Então, temos

$$i = \frac{\log(N_i)}{\log(n_1)} = \frac{\log(l_i)}{\log(l_1)} \rightarrow \frac{\log(N_i)}{\log(l_i)} = \frac{\log(n_1)}{\log(l_1)} \equiv -D. \quad (1.4)$$

No caso da curva de *Koch* do exemplo, $D = -\log(4)/\log(1/3) = \log(4)/\log(3) = 1,2618...$ Este processo de contar o número de objetos n , neste caso foram segmentos de reta, de tamanho l para cobrir determinada figura é chamado de *contagem de caixas* e fornece um algoritmo para calcular a dimensão fractal deste objeto. O nome *contagem de caixas* vem do fato desse algoritmo ser usado para determinar a dimensão de fractal em imagens e matrizes que são divididas em regiões (caixas) de tamanho diferente, formando uma rede. O algoritmo consiste em contar o número de caixas que contêm alguma parte da imagem.

O problema que surge ao calcular o tamanho da curva de Koch se repete quando se tenta calcular o perímetro de uma costa em um mapa, um fractal natural. Ao medir usando uma determinada escala, obtemos um valor, mas quando diminuimos o tamanho de nossa régua, a costa parece ficar maior. O mesmo não aconteceria se a costa tivesse uma forma euclidiana, como um quadrado, por exemplo. Essa característica dos objetos fractais que os distingue dos euclidianos é refletida pela dimensão de autossimilaridade D .

Um exemplo de fractal estatístico bastante conhecido é formado pela ocupação aleatória de uma rede e chamado de *aglomerado de percolação*. Para gerá-lo, começamos com uma rede onde os vértices são sítios que podem estar ocupados (brancos) ou não (pretos), como na figura 8(a). A rede pode ter diversas geometrias como quadrada, triangular ou uma rede aleatória onde um sítio pode ter qualquer posição no espaço real e isso irá influenciar em diversas propriedades estatísticas dela; aqui nós iremos considerar uma rede quadrada como a mostrada na Figura 8(a).

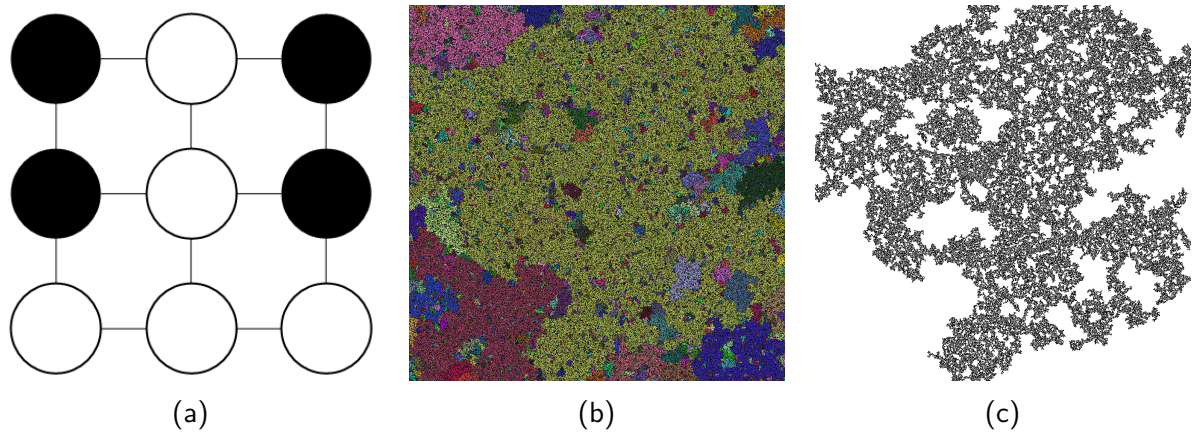


Figura 8 – Em (a) esquematizamos uma rede quadrada onde os vértices são sítios que podem ser ocupados (brancos) ou vazios (pretos). Em (b), uma rede quadrada de lados 1000x1000 foi ocupada com probabilidade $p = 0,5928 \geq p_c$ e o aglomerado de percolação, o maior da rede, está colorido em amarelo. Na imagem (c) o aglomerado de percolação é visto isoladamente.

Essa rede pode ser imaginada como uma grande tubulação onde os sítios ocupados, brancos, permitem a passagem de água e os sítios vazios são conexões fechadas. Vamos agora preencher a nossa rede com probabilidade p . Sorteamos um número e se ele for menor que p o sítio será ocupado e caso não, ele ficará vazio. Quando um sítio possui um vizinho no mesmo estado que ele, ou seja, ocupado ou não, dizemos que eles formam um aglomerado ou *cluster*. Se p for pequeno, serão formados diversos aglomerados de sítios ocupados mas cada um terá poucos sítios. À medida que aumentamos o valor de p , o tamanho desses aglomerados cresce até que, em $p = p_c$, surge um aglomerado que possui sítios que alcançam todos os lados da rede. Quando isso ocorre dizemos que o sistema *percolou*. Na comparação com a tubulação, se água for injetada em um dos lados da rede, ela atravessará todo o agregado de percolação e sairá do lado oposto. Na imagem 8(b) vê-se o agregado de percolação colorido em amarelo. O modelo de percolação pode ser usado para entender diversos sistemas como a sobrevivência de espécies em ambientes fragmentados [13], propagação de incêndios florestais [14] e no estudo sistemas granulares [15].

Na Figura 8(c) vemos apenas o aglomerado de percolação. A imagem mostra uma estrutura cheia de buracos brancos de diversos tamanhos (os aglomerados de vazios). Ao nos aproximar da imagem continuaremos vendo uma estrutura completamente *esburacada*. Se

continuamos dando este zoom a imagem irá se repetir indefinidamente se a rede for infinita. Mais do que isso, não poderemos diferenciar a quantidade de zoom que foi dada se não pudermos ver as laterais da rede. Isso porque a estrutura formada possui autossimilaridade estatística. Para calcular a dimensão fractal do agregado aplicando o método da contagem de caixas, primeiro cobrimos a rede com caixas de tamanho l e contamos o número de caixas n que contém algum sítio do aglomerado. Variamos o tamanho das caixas e repetimos a contagem. No final, a dimensão fractal será dada pelo expoente da relação

$$n \sim l^{-D}, \quad (1.5)$$

para o aglomerado de percolação em uma rede quadrada a dimensão fractal é $D = 91/48$ [16], muito próximo da dimensão fractal encontrada em arames empacotados em duas dimensões [17], que iremos estudar no próximo capítulo. Em fractais autossimilares, a dimensão de similaridade é igual a dimensão de contagem de caixas.

1.3 Processos aleatórios

Vamos voltar ao nosso exemplo da caixa de laranjas, supondo que ela está cheia e que os diâmetros das laranjas variam entre 4 e 8 cm. Ao pegar uma delas sem olhar e sem escolher com o tato podemos encontrar uma laranja cujo tamanho pode ser qualquer um dentro deste intervalo. Sabemos quais os diâmetros possíveis de serem obtidos, mas, o resultado de um evento não pode ser previsto. Uma variável é chamada aleatória quando existe um conjunto de valores S no qual seu valor é escolhido ao acaso. No caso do diâmetro das laranjas, o conjunto pode assumir qualquer valor entre 4 e 8 cm, sendo um intervalo contínuo, mas, o conjunto poderia ser discreto, como o número que um dado assume ao ser lançado e que só pode assumir 6 valores distintos. Dado o número de vezes $n(\phi)$ que encontramos laranjas de diâmetro ϕ em N tentativas independentes, definimos a probabilidade $p_N(\phi)$ de encontrar uma laranja de diâmetro ϕ , pela expressão

$$p_N(\phi) = \frac{n(\phi)}{N}. \quad (1.6)$$

Por outro lado, cada valor da variável aleatória possui uma probabilidade $p_N(\phi)$ de forma que o conjunto de todas as probabilidades define uma distribuição $P(\phi)$. Essa distribuição deve obedecer algumas propriedades como ser positiva e ser normalizada, ou seja,

$$\int_4^8 P(\phi) d\phi = 1. \quad (1.7)$$

Agora suponha que o volume V de suco em uma laranja seja dado por uma função de

seu diâmetro, por exemplo,

$$V = c\phi^3, \quad (1.8)$$

onde c é uma constante. Em nosso experimento de pegar a laranja arbitrariamente a quantidade de suco que iremos obter também irá assumir valores aleatórios. Diversas variáveis podem ser definidas a partir da variável aleatória ϕ , como o volume da laranja, o volume de suco ou a quantidade de casca. Podemos obter informações sobre essas variáveis aleatórias através da distribuição $P(\phi)$. O n -ésimo momento da variável aleatória V é dado por

$$\langle V^n \rangle = \int_4^8 V^n(\phi) P(\phi) d\phi. \quad (1.9)$$

A partir da equação 1.9 podemos obter informações estatísticas da distribuição, como a média, calculada como

$$\langle V \rangle = \int_4^8 V(\phi) P(\phi) d\phi, \quad (1.10)$$

e o desvio padrão, definido por $\sigma_V = \sqrt{\langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2}$, que determina um intervalo centrado na média onde se encontram $\approx 68\%$ dos dados no caso de uma distribuição gaussiana, por exemplo.

Um processo estocástico está associado a uma função que depende de uma variável aleatória e do tempo. Um dos processos estocásticos mais estudados da Física é o movimento browniano. Trata-se de um fenômeno inicialmente descrito numa acepção bem particular por Robert Brown em 1827. Olhando grãos de pólen em suspensão na água usando um microscópio ele percebeu que as partículas se moviam de forma desordenada e, ao realizar o experimento com partículas inorgânicas, ele notou que este movimento não tinha origem biológica, não era ligado à vida. Robert Brown, sendo um botânico, não conseguiu explicar a origem física do fenômeno, tarefa realizada por Einstein em 1905 e comprovada experimentalmente em 1908 por Jean Perrin. Na figura 9 vemos exemplos de trajetórias de partículas de pólen como registradas pelo próprio Perrin em seu livro *Les Atomes*.

Em seu trabalho, Einstein explicou o movimento browniano dos grãos de pólen como sendo um fenômeno de flutuação provocado pelas colisões aleatórias entre as partículas em suspensão e as moléculas do fluido que se movem aleatoriamente. Tal descrição serviu também para comprovar a existência de átomos e dar aos físicos experimentais uma forma de contar átomos e medir suas dimensões além de prover um teste para a teoria cinética da matéria.

O caráter probabilístico do movimento browniano pode ser descrito através de caminhadas aleatórias. Um caminhante aleatório é um objeto que se move num espaço contínuo ou numa rede; no último caso, para dar um passo, é sorteada uma posição entre as posições disponíveis. Na figura 10(a) temos um caminhante aleatório no plano após realizar 10000 passos.

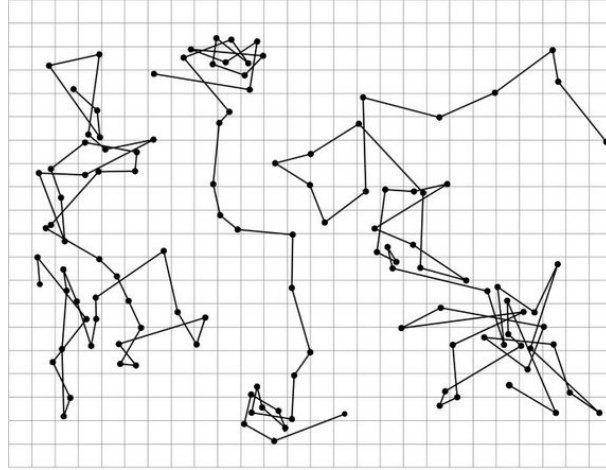


Figura 9 – Desenhos de movimento randômico de Perrin que mostram o movimento de três partículas coloidais de raio $0,53\mu m$ vistas em um microscópio. Os pontos, unidos por linhas retas, são as posições sucessivas das partículas a cada 30 s. A escala do gráfico é tal que cada divisão equivale a $1\mu m$ [18].

A rede em que é feita a caminhada pode estar contida no espaço bi, tri ou n-dimensional, pode ser contínua ou discreta (regular) e ainda ter diversas geometrias e conectividades. Todos esses fatores irão influenciar nas propriedades geométricas do caminhante.

É possível fazer extensões da construção acima, como o *caminhante aleatório autoexcludente*, mostrado em 10(b). Neste tipo de caminhada, não é permitido que ocorram intersecções na trajetória. Assim, cada novo passo não pode ser dado em algum ponto já ocupado. Se não houver nenhuma posição disponível, a caminhada termina. Esse modelo pode simular a autoexclusão em um sistema físico, como um polímero. Chamamos apenas de *caminhante aleatório* aquele em que a autoexclusão não está presente e dizemos que ele possui *memória n* quando o caminhante possui autoexclusão nos últimos n-passos. Já a caminhada autoexcludente tem memória infinita, uma característica que o torna tremendamente difícil de ser estudado.

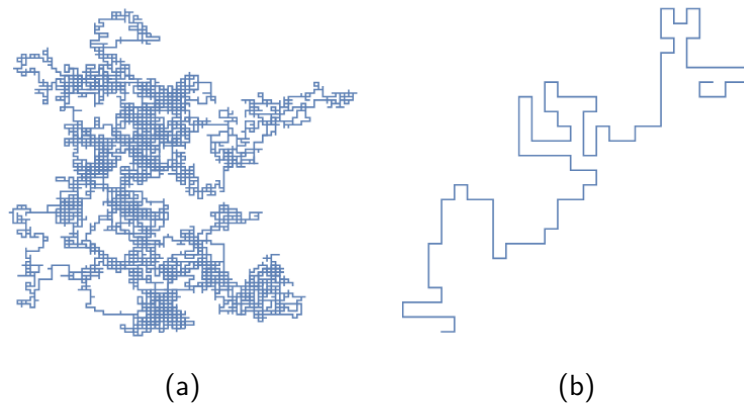


Figura 10 – (a) Caminhada aleatória com 10000 passos em duas dimensões. (b) Caminhada aleatória na qual a autoexclusão está presente. Nesta última, o caminhante dá apenas 121 passos antes de ficar sem possibilidade de se mover.

O caminhante aleatório pode ser usado como modelo para diversos problemas físicos como o movimento browniano, buscas de alimentos por animais e geometria de polímeros. Esses fenômenos possuem em comum o fato de que muitas de suas propriedades físicas podem ser tratadas através de processos aleatórios. Entre as características geométricas desses processos, a dimensão fractal de uma caminhada aleatória, independente da dimensionalidade do espaço, é 2. Para uma caminhada autoexcludente, a dimensão fractal depende da dimensão do espaço, sendo $D = 4/3$, em $d = 2$ (um resultado aceito, embora não provado), $D = 1,70184$, em $d = 3$ e (acredita-se) $D(d = 4) = 2$ [19].

No capítulo seguinte faremos uma revisão do material que tem sido publicado nos últimos anos sobre o confinamento de arames em cavidades bidimensionais e tridimensionais. Os resultados de nosso trabalho serão apresentados nos capítulos 3 e 4 onde estudaremos o empacotamento e o desempacotamento de arames de cavidades cilíndricas, respectivamente. O estudo exposto no capítulo 3 foi publicado na revista *Physical Review E* [20] e estamos preparando para um artigo com os experimentos do capítulo 4 [21]. Por último, faremos uma breve revisão e mencionamos trabalhos em andamento e perspectivas futuras nas Conclusões.

2 CONFINANDO FIOS

"In the beginning there was nothing, which exploded."

Terry Pratchett

Neste capítulo iremos focar no problema do empacotamento de fios em duas e três dimensões. Serão apresentados alguns conceitos básicos utilizados no estudo destes problemas e também revisaremos alguns trabalhos fundamentais publicados nos últimos anos.

Usamos um simples experimento de empacotamento usando laranjas dentro de uma caixa para ilustrar o congestionamento que ocorre devido ao aumento na densidade de matéria num ambiente finito no capítulo anterior. Diversas questões importantes estão ligadas ao problema do empacotamento, como a melhor forma de agrupar as laranjas ou a disposição que desperdiça menos espaço. Por exemplo, Gauss demonstrou que o arranjo regular para o empacotamento de esferas com maior densidade possível tem densidade $\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ e este valor foi conjecturado ser o maior valor possível em um arranjo de esferas idênticas, regular ou irregular. Este problema, conhecido como *conjectura de Kepler*, foi anunciado como resolvido em 2014 e publicado em 2015 [22] pelo projeto *Flyspeck*.

2.1 Amassamento ou empacotamento?

Em nossa ilustração do congestionamento através do aumento da densidade de laranjas, a força empregada para aumentar o número de laranjas é usada para modificar o conjunto que está dentro da caixa, reestruturando a rede de contatos laranja-laranja. Por outro lado, quando uma folha de papel é amassada ou um pedaço de fio é inserido dentro de uma cavidade, a força é utilizada para dobrar as partes dos mesmos, acumulando energia elástica em determinadas regiões. O estudo de sistemas amassados iniciou-se no DF-UFPE com a realização de experimentos em superfícies [23]. Mais especificamente, folhas de papel foram amassadas com as mãos até adquirirem o formato aproximadamente esférico. Depois de amassar o papel foram medidos os raios das bolas R . Sendo a massa de papel proporcional à área $M \sim A$ do papel aberto, encontra-se a relação massa-tamanho

$$M \sim R^{D_{\text{papel}}}, \quad (2.1)$$

para a qual obtiveram a dimensão fractal $D_{\text{papel}} = 2,50 \pm 0,15$. Desde então, foram observadas diversas leis de escala em superfícies sujeitas ao amassamento. Por exemplo, na figura 11(a) vemos um arranjo em que uma bola de papel alumínio amassado está sendo comprimida axialmente. Neste experimento, é imposta uma deformação constante δ à bola e o diâmetro equatorial x é medido, assim como a força F necessária para a compressão. Gomes et al. [24]

demonstraram como o diâmetro varia com a deformação imposta e a força em termos da dimensão fractal do papel alumínio amassado.

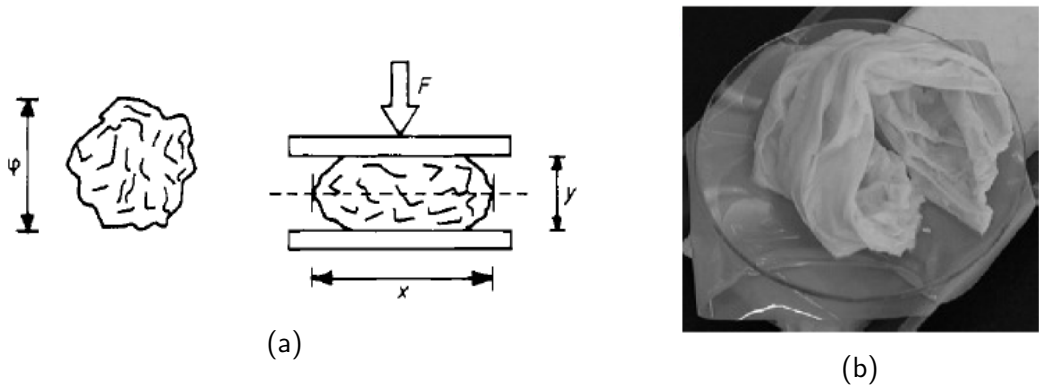


Figura 11 – (a) Esquema da compressão de uma bola de laminado de alumínio realizada no estudo de [Gomes et al.\[24\]](#). Na figura, o diâmetro ϕ é comprimido até atingir a dimensão y . São medidos o comprimento equatorial x e a força F necessária para gerar a deformação. (b) Camada de nata depositada em uma placa logo após ser retirada do leite fervido [\[25\]](#).

Outras superfícies, quando amassadas, tornam-se estruturas complexas com dimensão fractal próxima à do papel amassado [\[25, 26\]](#). Ao retirar a camada de nata que se forma quando o leite é fervido e apoiá-la em uma placa curva, [Gomes et al.\[25\]](#) observaram que a nata colapsa, sob ação da gravidade, em uma estrutura com dimensão anômala $D_{\text{nata}} = 2,45 \pm 0,15$, vista na figura [11\(b\)](#). Dias depois, a dimensão fractal da nata, subiu para $D_{\text{nata}} = 2,65 \pm 0,10$, sugerindo que interações atrativas aumentam a compactação do objeto durante a evaporação da água. De maneira semelhante, uma membrana amassada de grafeno é simulada, obtendo dimensão fractal $D_{\text{graf}} = 2,71 \pm 0,02$ quando todas as interações estão presentes. Ao serem retiradas as interações não-covalentes entre carbonos, a dimensão fractal diminui para $D_{\text{graf}} = 2,30 \pm 0,05$ [\[26\]](#).

Quando uma folha de papel é amassada, sua superfície é dividida em placas, regiões quase planas, como em um processo de fragmentação. Entre duas placas é formada uma dobra e duas ou mais dobras se encontram em um vértice. Dobras e vértices são regiões afiadas onde é concentrada a energia usada para amassar a folha e constituem uma complexa rede ao longo de sua superfície. Por outro lado, dificilmente se consegue voltar ao estado inicial, em que a folha está completamente plana. Desta forma, o processo de fragmentação da superfície durante o amassamento é, em geral, irreversível.

Em artigos sobre injeção de fios ou arames são usados termos como *arames amassados* (ou *crumpled wires*). Observando uma imagem de uma cavidade bidimensional (figura [12](#)) não distinguimos regiões afinadas onde se concentram a energia. Tampouco o arame é dividido em pedaços equivalentes às placas do papel amassado. O fio de náilon na figura [12](#) se dobra suavemente dentro da cavidade e é difícil crer que este arame está "amassado". Assim, supomos que as dobras em sua estrutura irão se desfazer caso as paredes da cavidade sejam retiradas. Por

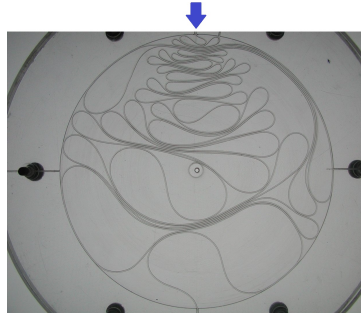


Figura 12 – Fio de náilon confinado em uma cavidade bidimensional constituída de duas placas de acrílico separadas mantidas a $\approx 1\text{mm}$ de distância uma da outra [27]. A seta indica por onde o fio foi inserido na cavidade.

outro lado, se tivéssemos usado fio de solda, bem menos elástico do que o náilon, esperamos a estrutura formada se mantenha no caso do desmonte da cavidade. Apesar de não estar obrigatoriamente *amassado*, tanto o fio de náilon quanto o de solda foram confinados (ou empacotados) dentro da cavidade e, por isso, usaremos esses termos daqui por diante. Observe que a inserção de arames em cavidades tridimensionais também gera dobras suaves, de forma que nem no caso 3D podemos dizer que o arame esteja *amassado*.

2.2 Fração de empacotamento ρ

Uma das quantidades fundamentais em problemas de empacotamento é a relação entre o espaço ocupado pelo objeto e o espaço disponível, conhecida como fração de empacotamento ρ . No caso de arames confinados em cavidades bidimensionais é comum usar a relação entre suas áreas, ou seja, a projeção da seção longitudinal do arame sobre a superfície de uma das placas da cavidade. Nestes experimentos, o arame está limitado a se distribuir em uma única camada numa região limitada pelas dimensões da cavidade. Sendo ξ o diâmetro do arame, L o seu comprimento e R o raio da cavidade, a fração de empacotamento ρ é dada pela projeção do arame sobre a área da cavidade, ou seja,

$$\rho_{2d} = \frac{\text{Área do arame}}{\text{Área da cavidade}} = \frac{\xi \cdot L}{\pi R^2}. \quad (2.2)$$

No entanto, ao tratarmos a mesma cavidade como tridimensional a fração de empacotamento é dada pela relação entre os volumes, ou seja,

$$\rho_{3d} = \frac{\text{Volume do arame}}{\text{Volume da cavidade}} = \frac{\pi(\xi/2)^2 \cdot L}{\xi \pi R^2} = \frac{\xi \cdot L}{4R^2}, \quad (2.3)$$

mostrando que existe uma razão de $\rho_{3d}/\rho_{2d} = \pi/4$ entre os dois casos. Contudo, a maioria dos trabalhos feitos com arames reportam leis de potência encontradas em experimentos ou simulações, cujos expoentes não dependem de ρ . Por outro lado, no caso de experimentos em

cavidades efetivamente tridimensionais (onde é possível injetar mais de uma camada de fio) não ocorre essa dualidade na definição da fração de empacotamento.

No empacotamento bidimensional, os valores de ρ atingidos quando ocorre o congestionamento são baixos. Por exemplo, [Donato, Gomes e Souza\[28\]](#) encontraram $\rho = 0,14 \pm 0,02$ para o empacotamento de fios de cobre em uma cavidade circular de 20 cm de diâmetro. No caso de um material mais maleável como náilon, é possível encontrar valores mais altos, mas, ainda assim, não obteremos nada muito maior do que 0,5 da área da cavidade. Uma vez que atingimos pequenos valores de ρ no empacotamento máximo, não são necessárias forças muito grandes durante o experimento, pois presumimos que a força necessária para injetar o arame cresça com a fração de empacotamento [29]. Assim, o empacotamento manual é suficiente para o experimento, não sendo necessário o uso de máquinas para forçar o arame. Além do material do fio, a forma como ele se acomoda dentro da cavidade influencia nos valores obtidos para ρ . Como uma proposta para a análise dos limites de ρ vamos analisar o empacotamento bidimensional de discos. Dois limites interessantes são mostrados na figura 13 quando discos são dispostos em uma rede quadrada e em uma rede hexagonal.

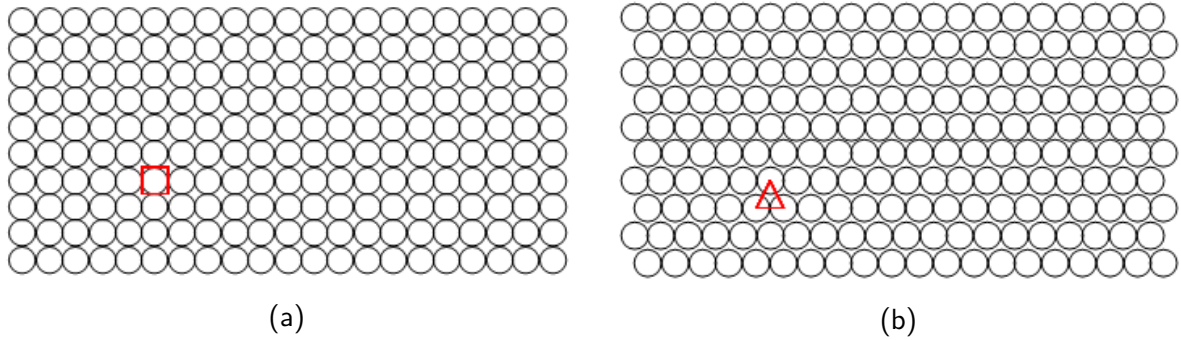


Figura 13 – Na figura (a), discos são dispostos em uma rede quadrada e (b), eles são acomodados em uma rede hexagonal onde se consegue a maior fração de empacotamento para este problema.

Na figura 13(a) os discos são dispostos em uma rede quadrada, onde cada disco mantém contato com quatro vizinhos e o padrão geométrico se estende por todo o plano. Para calcular o valor de ρ nesta rede, consideramos a célula destacada em vermelho. O lado desta célula tem tamanho $2R$, onde R é o raio dos discos. Logo, a área da célula é dada por $4R^2$ enquanto que a área ocupada pelo disco é πR^2 de forma que a fração de empacotamento pode ser calculada como

$$\rho_{quad} = \frac{\pi R^2}{4R^2} = \frac{\pi}{4} \simeq 0,79, \quad (2.4)$$

o mesmo valor encontrado para a relação entre ρ_{3d}/ρ_{2d} . No caso da rede hexagonal, os discos fazem contato com seis outros vizinhos. Definimos uma célula triangular unindo o centro de três discos vizinhos, como na figura 13(b). A célula tem o formato de um triângulo equilátero

e deve conter $1/6$ da área de cada disco e seu lado mede $2R$. Logo,

$$\rho_{cel} = \frac{(3/6) \cdot \pi R^2}{\frac{(2R)^2 \sqrt{3}}{4}} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \simeq 0,907. \quad (2.5)$$

e, uma vez que o empacotamento é uniforme e podemos cobrir o espaço bidimensional com os triângulos equiláteros, a densidade na célula deverá ser a mesma densidade no espaço todo,

$$\rho_{hex} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}}, \quad (2.6)$$

que exhibe que o empacotamento em rede hexagonal deixa menos espaços vazios entre os discos.

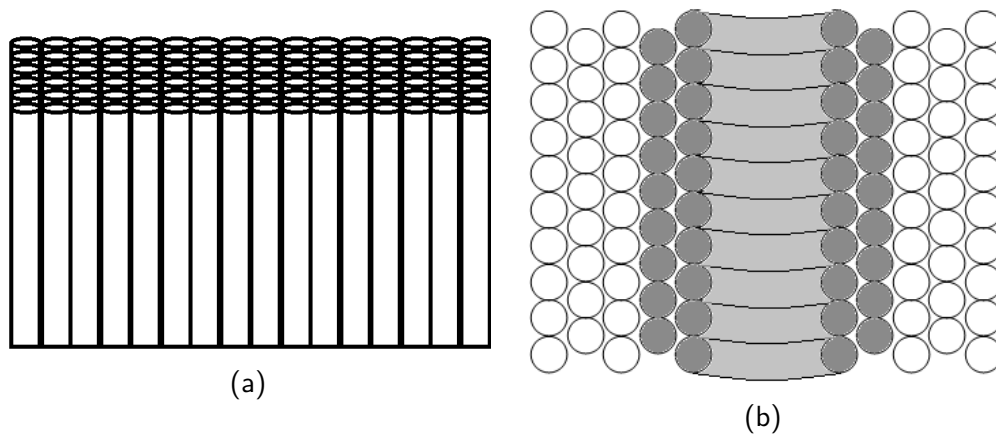


Figura 14 – Cilindros distribuídos em uma rede quadrada (a) e rede hexagonal de toroides (b) como limites para o empacotamento de arames em um suposto empacotamento regular.

Supondo que as figuras são cortes transversais em uma distribuição de cilindros agrupadas ordenadamente (figura 14(a)), a fração de empacotamento tridimensional dos cilindros será a mesma do correspondente bidimensional. O agrupamento de tais cilindros serve como um limite superior para o empacotamento de arame em três dimensões, na situação geométrica ideal onde o arame se dobra com raio nulo nas bordas da cavidade e segue reto no volume interno. É impossível, então, obter uma distribuição de arame com uma fração de empacotamento maior do que a da rede hexagonal $\frac{\pi}{2\sqrt{3}}$.

Naturalmente, este limite é inalcançável do ponto de vista experimental. Na disposição mostrada em 14(a) não contamos com a curvatura do arame próximo às paredes. Nessas regiões a densidade é menor do que no resto da cavidade. Também, a disposição do arame está ligado com a forma das cavidades. Em uma geometria cilíndrica, por exemplo, a estrutura mais ordenada a ser formada serão anéis e o limite superior de ρ é obtido por uma rede concêntrica de toroides, como esquematizado na figura 14(b). Contudo, o raio interno do menor toroide permitido depende das propriedades elásticas do material usado. Em vista disso, a melhor aproximação para o limite superior de ρ é sensivelmente abaixo de $\rho_{m\acute{a}x} \simeq 0,907$.

2.3 O empacotamento bidimensional

O aparato usado para realizar este experimento consta de duas placas de acrílico parafusadas, e mantidas a distância aproximada igual ao diâmetro do arame. As placas são polidas para diminuir o atrito com o fio. O fio é inserido por um ou dois canais de injeção na direção radial, ou seja, pelas laterais da cavidade. Diversas análises do estado do sistema no limite do empacotamento rígido foram feitas, como o estudo de estruturas morfológicas [29], distribuição de energia e de laços [28], além da dimensão fractal [28, 30]. Recentemente, se voltou a atenção para descrever o caminho do processo de injeção até atingir o congestionamento [31].

2.3.1 Formação de laços

O problema pode ser considerado bidimensional pois o arame se distribui ao longo da área limitada pelas paredes da cavidade. À medida que vai sendo inserido, o arame se dobra até encontrar a parede da cavidade. Ao continuar a injeção, a curva no arame irá se tornar mais acentuada e eventualmente, ele formará uma figura fechada, que se assemelha a uma gota, e que é chamada de laço. A figura 15(a) mostra uma fotografia da formação do primeiro laço durante a injeção de um pedaço de fio de cobre. Neste caso, o arame é inserido através de dois canais diametralmente opostos.

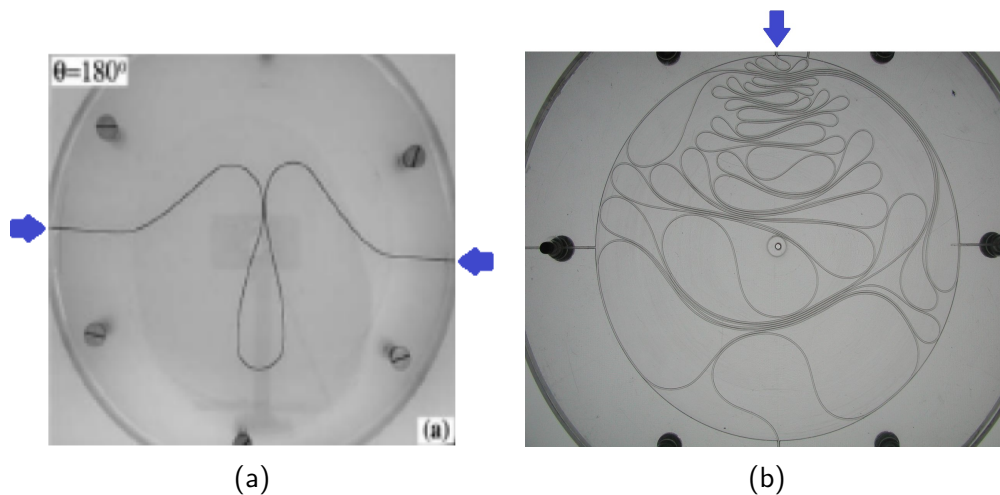


Figura 15 – (a) Formação do primeiro laço no empacotamento de um fio de cobre em uma cavidade de acrílico [28]. (b) O fio de náilon é preso na parte inferior da cavidade e a injeção ocorre pelo canal localizado na parte superior da cavidade. A rede de laços na imagem se forma no limite do empacotamento rígido [27]. As setas apontam na direção dos canais de injeção utilizados nos experimentos.

À medida que mais arame é injetado, mais laços são formados até que o processo é impedido de continuar pois o sistema se torna congestionado. A figura 15(b) mostra uma realização do empacotamento de fio de náilon até o limite em que o sistema se torna rígido. Nesta figura o fio é inserido apenas por um canal. Note que os laços aumentam de tamanho à

medida que se afastam do canal de injeção, ou ainda, os primeiros laços que surgem são os maiores laços na cavidade. O tamanho do primeiro laço, em especial, depende do tamanho da cavidade, uma vez que surge após o fio tocar a parede da cavidade. Já os menores laços têm seu tamanho limitado pela material do fio, desde que a curvatura mínima depende de propriedades elásticas do fio.

Baseado na relação decrescente entre o tamanho dos laços, [Donato, Gomes e Souza\[30\]](#) propôs um modelo no qual o arame se acomoda em uma cascata hierárquica de laços, à medida que vai sendo injetado na cavidade. Nesse modelo, chamado de modelo hierárquico, o tamanho dos laços diminui como uma progressão geométrica. Assim, se o primeiro laço tem um comprimento l_1 , o i -ésimo laço terá comprimento

$$l_i = \lambda^{i-1} \cdot l_1, \quad (2.7)$$

onde $\lambda < 1$ é a taxa de decrescimento. Encontrou-se experimentalmente a relação entre o comprimento do primeiro laço l_1 e o raio R da cavidade, dada por $l_1/2\pi R = 0,684 \pm 0,008$. Mais ainda, deve haver mais de um laço de mesmo tamanho, de forma que o número de laços n de tamanho l aumenta. É conjecturado que o aumento também se dê como uma progressão geométrica. Assim, se n_1 é o número de laços iguais ao primeiro que se forma,

$$n_i = v^{i-1} \cdot n_1, \quad (2.8)$$

é o número de laços de tamanho l_i , com $v > 1$ sendo a taxa de crescimento do número de laços. Nesse trabalho, os autores supõem que o número de laços duplica a cada iteração, de forma que $v = 2$. O número total de laços é dado pela soma

$$N = \sum_{i=1}^I n^i = n_1 \frac{v^I - 1}{v - 1}, \quad (2.9)$$

onde I é o número de famílias de laços de mesmo tamanho. Observe que o processo iterativo proposto no modelo hierárquico reproduz a formação de um fractal onde, a cada iteração, novas partes vão sendo incluídas. Dessa forma, a dimensão fractal do arame empacotado pode ser obtida pela relação entre v e λ ,

$$D = -\frac{\log(v)}{\log(\lambda)}. \quad (2.10)$$

No mesmo trabalho citado [\[30\]](#), a dimensão fractal foi obtida experimentalmente, usando o método de contagem de caixas, como sendo $D = 1,9 \pm 0,1$. Na figura [16\(a\)](#) observamos as medidas publicadas por [Donato, Gomes e Souza\[30\]](#) para obtenção do valor de D . Note que $\lambda = v^{-1/D} = 2^{-1/1,9} = 0,69$, bem próximo do resultado obtido anteriormente.

O comprimento total injetado na cavidade após o surgimento de N laços pode ser obtido somando o comprimento de cada um,

$$L = \sum_{i=1}^I n^i \cdot l_i = n_1 l_1 \sum_{i=1}^I (\lambda v)^{i-1}, \quad (2.11)$$

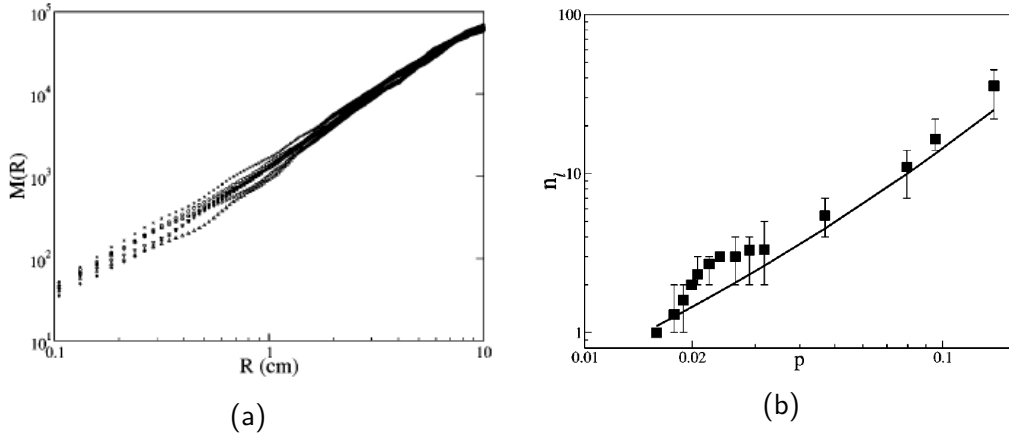


Figura 16 – (a) Relação massa-tamanho calculada através do algoritmo de contagem de caixas para obtenção da dimensão fractal. (b) Comparação entre o modelo hierárquico e os pontos experimentais na referência [30]. O eixo das abscissas corresponde à fração de empacotamento.

Ao resolver o somatório acima, encontramos

$$L = n_1 l_1 \frac{[(\lambda v)^I - 1]}{(\lambda v) - 1}, \quad (2.12)$$

que determina o comprimento total de fio na cavidade L como função do número de iterações I . Podemos relacionar L com o número total de laços N através da equação 2.9 e da dimensão fractal D . Substituindo na equação 2.12 encontramos

$$N(L) = \frac{n_1}{(\lambda^{-D}) - 1} \left[\left(\frac{L}{n_1 l_1} (\lambda^{1-D} - 1) + 1 \right)^{D/(D-1)} - 1 \right]. \quad (2.13)$$

Na figura 16(b) mostramos a comparação entre os resultados experimentais e o modelo proposto, obtido ao assumir que $\lambda = 0,68$ e que $n_1 = 1$, ou seja, só existe um laço de perímetro l_1 .

Donato, Gomes e Souza[28] mencionam que o arame empacotado estudado é uma estrutura bidimensional formada de duas fases que nomeiam *ar* e *sólida*. Para $p < 0,14 \pm 0,02$ a injeção do arame na cavidade é feita sem dificuldade e se torna rapidamente difícil quando $p \simeq 0,14$. No limite $p > p_c = 0,14$ a estrutura se torna rígida. Seus argumentos sugerem a transição de congestionamento que descrevemos no capítulo anterior.

2.3.2 Mais problemas bidimensionais

A força aplicada para realizar a injeção do arame é empregada na formação de dobras e curvas, como na figura 15(b). A energia elástica necessária para dobrar uma haste de comprimento de L e diâmetro ξ em um arco, é dada por

$$E_{\text{elástica}} = \frac{\xi Y}{2} \int_0^L k^2(l) dl, \quad (2.14)$$

onde Y é o módulo flexural e k é a curvatura da haste. Calculando essa integral, encontramos a energia elástica acumulada no processo. Por exemplo, para a formação de um anel de raio R , temos $k = 1/R$ e a integral acima resulta em $E_{\text{anel}} = Y\xi\pi/R$. Para um laço de perímetro λ podemos supor que $E_{\text{laço}} \sim \lambda^{-1}$. A energia elástica acumulada no laço foi estudada por Sobral et al.[32] através da força necessária para extrair o arame de uma cavidade bidimensional. A figura 17 mostra uma sequencia de fotografias do processo de retirada de um laço da cavidade. Durante o processo, a medida da força é feita com um dinamômetro e é registrada para cada laço extraído. Sobral et al.[32] encontraram que a força escala com $\lambda + A$, onde A é uma constante obtida por uma extensão do modelo hierárquico.

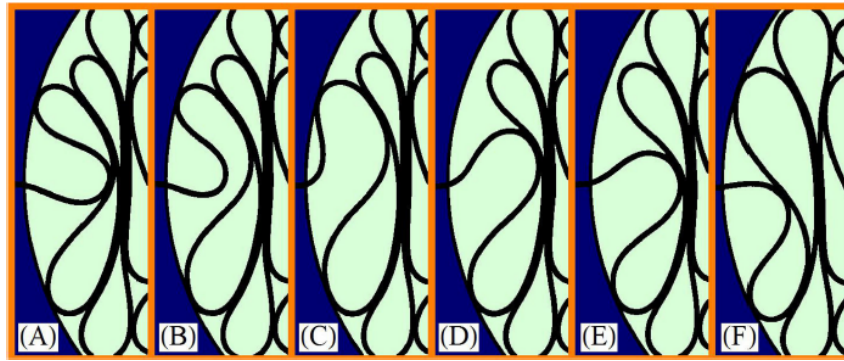


Figura 17 – Extração de um laço da cavidade mostrada através de fotos de um experimento real [32].

A injeção do arame na cavidade pode ser vista como o empacotamento de laços. Estes, porém, não se dispõem de forma regular pela cavidade. Como a energia elástica de curvatura está concentrada, principalmente, na região abaulada dos laços, é de se esperar que também não esteja distribuída uniformemente pelo espaço. De fato, a energia do sistema se concentra em um subconjunto do espaço bidimensional.

Donato e Gomes[33] calcularam a dimensão fractal do suporte no qual a energia elástica está concentrada realizando o processo esquematizado na figura 18: para cada laço em uma fotografia do arame empacotado em duas dimensões, como na figura 18(a), é obtido o ponto de maior curvatura. A partir desse ponto é obtida uma circunferência interna ao laço, gerando a figura 18(b). Observe que o arame ocupa apenas parte do perímetro da circunferência. Assim, o suporte onde a energia está condensada é formado pelos arcos mostrados na figura 18(b). Através da contagem de caixas, Donato e Gomes[33] obtiveram que a dimensão fractal deste suporte é $D_s = 1,0 \pm 0,1$, ou seja, a energia elástica se concentra em uma região unidimensional.

Em 2010 foi estudado o efeito sobre o congestionamento do arame devido à mudança no espaço interno da cavidade [34]. Cavidades não simplesmente conexas foram produzidas introduzindo pinos atravessando as cavidades. Os pinos foram dispostos em nove redes regulares, com n_p^2 pinos, onde $n_p = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 12$ e 14 . A cavidade tem lado $L = 150\text{mm}$ e o fio tem diâmetro $1,5\text{mm}$ para os quais foram obtidas diferentes morfologias para cada rede de pinos, mostradas na figura 19(a).

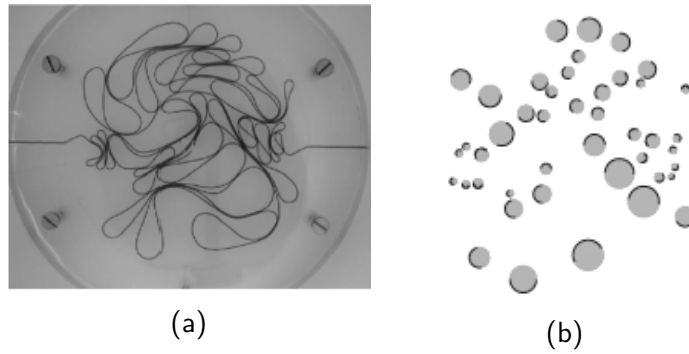


Figura 18 – A energia elástica do empacotamento de arames em (a) se concentra em uma região unidimensional do espaço, vista como arcos de circunferência em (b).

A presença de pinos muda expressivamente a morfologia do arame empacotado, agindo como um elemento entrópico. Observe na figura 15(b) que os laços se alinham predominantemente na direção transversal em relação ao canal de injeção. Contudo, no experimento realizado o fio pode rodear os pinos, se dispondo em diferentes direções. Quando a densidade de pinos é muito alta, a formação dos maiores laços é inibida e a quantidade de arame injetado cai drasticamente. Vemos que se formam laços apenas na região próxima ao canal de injeção. Nesse trabalho, é escrita uma energia livre do sistema $F = E - TS$, onde a energia interna E tem forma quadrática na fração de empacotamento ρ , devido às interações arame-arames, enquanto a entropia do sistema S , é linear com ρ . Assim, temos

$$F = \varepsilon \rho^2 - T \sigma \rho, \quad (2.15)$$

onde ε e σ são constantes de proporcionalidade. A condição de equilíbrio $\partial F / \partial \rho = 0$ resulta em uma "temperatura efetiva" $T = 2\varepsilon \rho / \sigma$. De fato, para um sistema em equilíbrio, em uma temperatura baixa, existe um número reduzido de configurações acessíveis. Da mesma forma, é pequeno o número de configurações acessíveis ao arame para grandes quantidades de pinos.

Por outro lado, ao preencher as cavidades com discos móveis, Sobral e Gomes[35] puderam produzir cavidades com paredes deformáveis, uma vez que os discos se deslocam ao serem empurrados pelo fio injetado. A imagem 19(b) mostra cavidades com diferentes concentrações de discos. Esse trabalho começa com a análise do empacotamento em cavidades sem discos em que suas dimensões Y , na direção transversal ao canal de injeção, e X , na direção da injeção, são variadas. Como resultado, os autores encontraram a expressão

$$L - X = k N^\alpha Y, \quad (2.16)$$

onde k é uma constante e N é o número de laços formados. O expoente $\alpha = 0,75$ é encontrado tanto para cavidades onde se varia Y quanto em cavidades onde se varia a taxa de aspecto X/Y . Os autores mostram que a presença de discos livres afeta a injeção ao diminuir a área da cavidade o que os leva a definir $Y_{\text{eff}} = \sqrt{A_{\text{cavidade}} - A_{\text{discos}}}$, onde A_{discos} é a área ocupada pelos

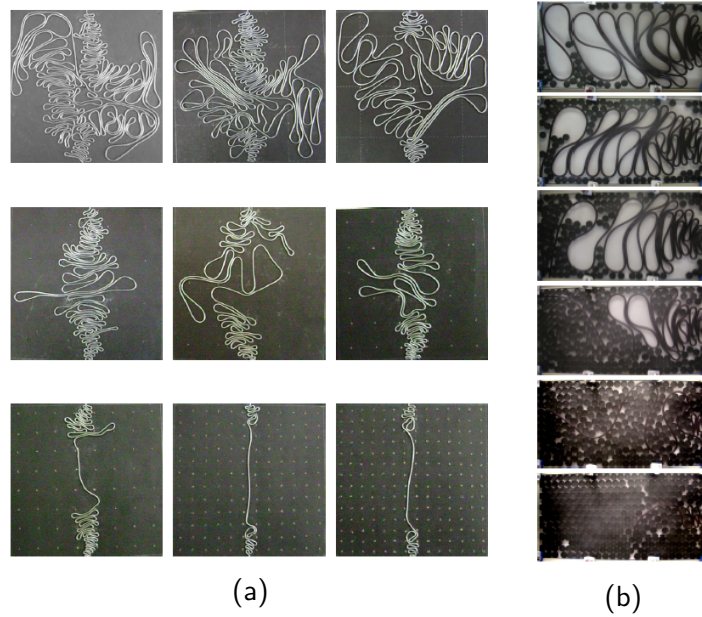


Figura 19 – (a) Representação de diferentes morfologias obtidas em cavidades não-simplesmente conexas [34], ou seja, devido a uma alteração na sua topologia. Da esquerda para a direita e de cima para baixo temos redes com 1, 4, 9, 16, 25, 36, 64, 144 e 196 pinos, respectivamente. Observe que os pinos atuam como uma *temperatura efetiva*, congelando o sistema e inibindo a formação de laços. (b) Cavidades retangulares são preenchidas com discos móveis [35], que atuam como paredes efetivas. De cima para baixo, as cavidades possuem 38, 76, 114, 214, 283 e 318 discos, respectivamente.

discos e A_{cavidade} é a área total da cavidade. Assim, encontra-se uma lei de potência igual a equação 2.16 entre o comprimento injetado L , o número de laços N e Y_{eff} .

2.4 Fios em cavidades tridimensionais

Experimentos de empacotamento de arames em cavidades tridimensionais têm sido realizados em cavidades de diversas geometrias. Além disso, a flexibilidade das paredes das cavidades tem sido estudada de forma direta ou indireta. O primeiro experimento que conhecemos se trata da compactação manual de fios de solda em uma estrutura aproximadamente esférica [7]. As esferas foram divididas em três grupos de acordo com o diâmetro ξ do fio de solda. Para o experimento usou-se fios com diâmetro 0,05, 0,08 e 0,1, todos em centímetros. Para cada grupo, foram criadas sete famílias de esferas de comprimentos diferentes para os quais o diâmetro foi medido. A relação entre o diâmetro médio R (não usamos a letra D para não confundir com a dimensão fractal) e o comprimento L de fio na esfera, mostrado na figura 20(a), dá a dimensão fractal $D = 2,75$.

Aguiar, Gomes e Neto[7] mediram a resistência elétrica como função do diâmetro médio das bolas de arame R , como vemos na figura 20(b). Para isso, usaram um voltímetro digital e uma fonte estável de corrente. Os eletrodos do voltímetro são colocados ao longo

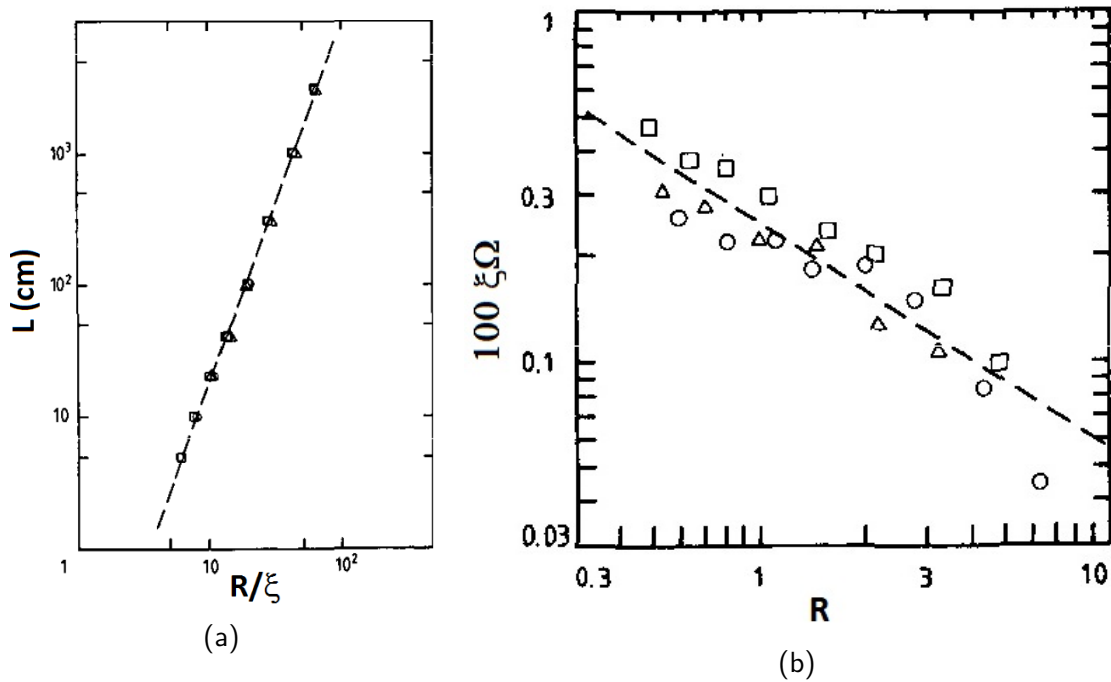


Figura 20 – (a) Relação entre o diâmetro médio R de esferas de fio de solda e o comprimento L necessário para as confeccionar [7]. A relação de escala entre L e R tem expoente $D = 2,75$. Na figura, ξ é o diâmetro do arame. (b) Lei de escala entre $100\xi\Omega$ e o diâmetro R das esferas, onde Ω é a resistência elétrica e ξ o diâmetro médio das esferas.

de um diâmetro particular e mede-se a resistência. A esfera é girada aleatoriamente de forma a selecionar outro diâmetro e realizar uma nova medição. O processo totaliza 49 medições para cada conjunto de esferas de mesmo comprimento de forma a obter $\Omega = \Omega(R)$. Os autores obtiveram a lei de escala

$$100\xi\Omega = 0,25R^{-0,64}. \quad (2.17)$$

A análise da resistência elétrica pode dar informações sobre a topologia do sistema. Para isso, usamos conceitos de difusão, um fenômeno de transporte muito parecido com o movimento browniano. Basicamente, a difusão é a propagação de informação através de uma rede. Essa informação pode ser carregada por elétrons se movendo em um circuito, as partículas de perfume se espalhando no ar ou fofocas em uma rede de amigos. Na *difusão normal* de um objeto, o deslocamento quadrático médio $\langle r^2 \rangle$ cresce linearmente com o número de passos n dado pelo objeto, ou seja, $\langle r^2 \rangle \sim n$. Porém, se a relação não for deste tipo, dizemos que a difusão do objeto é *anômala*. De maneira geral, temos,

$$\langle r^2 \rangle \sim n^\tau, \quad (2.18)$$

onde $\tau = 1$ para a *difusão normal*, o caso $\tau < 1$ é chamado *subdifusivo* e $\tau > 1$ é chamado *superdifusivo*. No caso subdifusivo o meio dificulta a difusão e o objeto precisa dar mais passos

para ter o mesmo deslocamento em relação ao movimento browniano, por exemplo. Por outro lado, no regime superdifusivo, o objeto se desloca pela rede mais rapidamente do que nos outros dois casos. Assim, o expoente de difusão τ dá uma ideia de como a topologia influencia na dispersão do objeto através da rede.

Para relacionar o expoente τ ao encontrado para a resistência elétrica, admitimos que existem M sítios disponíveis na rede para o objeto se deslocar. Ele irá ser espalhado pelos sítios durante seu deslocamento devido à estrutura da rede ou seja, a rede "atrapalha" o movimento. Assim, tendo ele, em média, passado por m sítios, a razão entre os dois $\Omega = m/M$ é uma forma de medir a resistência da rede. No limite de resistência nula o objeto não é espalhado e se desloca balisticamente, ou seja, $m \rightarrow 0$. No limite de resistência infinita, o número de passos dados é muito maior que o tamanho da rede pois o objeto é espalhado um número muito grande de vezes. Em uma rede euclidiana de tamanho L temos $M \sim L^d$, com d inteiro. Contudo, se a rede é fractal, como o caso das esferas de arame compactadas, $d = D$, a dimensão fractal. Por outro lado, seguindo a lei de difusão, o número de sítios visitados $m \sim n \sim L^{2/\tau}$. Logo, reescrevemos a lei para a resistência como

$$\Omega \sim L^{2/\tau - D}, \quad (2.19)$$

que pode ser comparada com a equação 2.17. Para um caminhante em regime difusivo $\tau = 1$ e, usando $D = 2,75$, temos $\Omega \sim L^{-0,75}$, resultado próximo do valor encontrado 0,64 considerando as incertezas estatísticas, segundo [Aguiar, Gomes e Neto\[7\]](#).

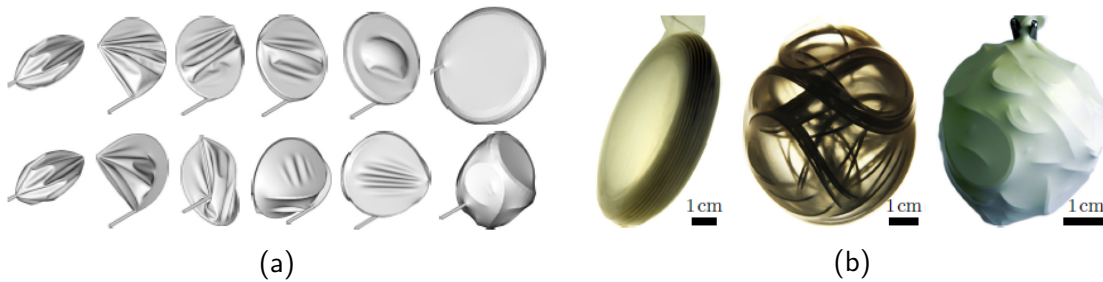


Figura 21 – Sequência mostrada em (a) relacionadas a simulações do empacotamento de fios em cavidades flexíveis com coeficiente de atrito $\mu = 0$ (linha superior) e $\mu = 0,5$ (linha inferior) [36]. O comprimento injetado é 2,5; 5; 10; 20; 40 e 250 em cada coluna. Na figura (b) vemos experimentos do mesmo trabalho onde são usados balões de borracha como cavidade (nas duas figuras da esquerda o coeficiente de atrito é, aproximadamente, 0,5).

A morfologia do arame dentro das cavidades foi muito estudada nos últimos anos. Diferentes estruturas foram encontradas quando são mudadas as propriedades elásticas do arame e da cavidade, assim como o atrito entre ambos. A figura 21(a) mostra fotografias de simulações realizadas por [Vetter, Wittel e Herrmann\[36\]](#) onde o arame é inserido em cavidades sem atrito (linha de cima) e com coeficiente de atrito $\mu = 0,5$ (linha de baixo). Coeficientes de

atrito baixo permitem a acomodação do arame em estruturas toroidais ordenadas. Por outro lado, alta fricção torna o empacotamento completamente desordenado. Em 21(b) reproduzimos as imagens de realizações experimentais do mesmo artigo aqui citado nas quais o arame foi injetado em balões de borracha.

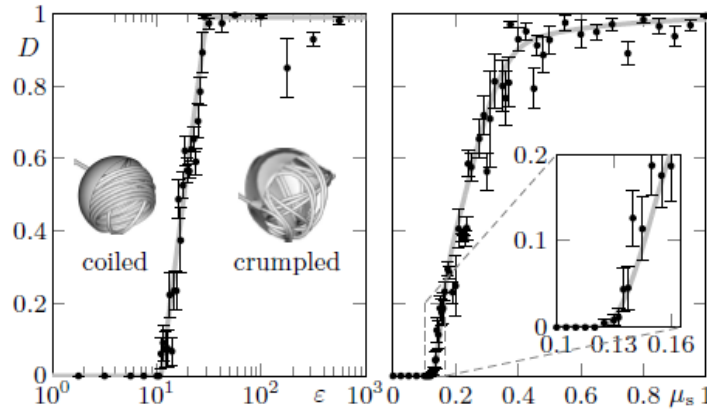


Figura 22 – Transição entre empacotamento toroidal e desordenado mostrado através do parâmetro de ordem D (veja texto para detalhes) obtido pela curvatura média ao longo do fio [36]. Na esquerda vemos D como função da flexibilidade da cavidade ε , com coeficiente de atrito $\mu = 1$ e na direita o parâmetro é marcado contra o coeficiente de atrito, quando a cavidade tem flexibilidade $\varepsilon = 10^3$.

A transição entre o empacotamento toroidal e o desordenado é caracterizada ao medir o sinal da curvatura k . Ao percorrer o fio, a curvatura muda de sinal quando segmentos do fio mudam o sentido no qual estão se dobrando. A média S da curvatura ao longo do fio deve se anular se o sentido das dobras estiverem igualmente distribuídos e assumir os valores ± 1 nos limites em que o arame se dobra apenas em um sentido. Definindo o parâmetro $D = 1 - |S|$, obtêm-se os diagramas mostrados na figura 22.

Shaebani et al.[37] realizou um estudo estatístico do empacotamento de arames através da análise de *dobras* e *trechos* no empacotamento máximo. Os autores inseriram arames em cavidades esféricas em dois regimes de fricção fio-cavidade, obtendo a dimensão fractal $D = 2,62$ no regime de baixa fricção e $D = 2,48$ para alta fricção. O experimento prossegue com a retirada do arame da cavidade. Ao percorrer a estrutura, nota-se a existência de dobras suaves e outras agudas. Definindo como *dobra* apenas aquela em que há um ângulo de giro de 90 graus ou mais, os autores cortam o arame nessas regiões para analisar a estatística das dobras. Um *trecho* é o pedaço de arame entre duas *dobras*. O maior *trecho* de arame encontrado no experimento tem comprimento menor que πR , metade da circunferência ao longo do perímetro da cavidade de raio R . Essa condição garante que o arame está em um estado completamente desordenado, onde não há formação de laços circulares ao redor da estrutura, apenas dobras no arame, como mostrado na figura 23.

Shaebani et al.[37] encontram que o número total de dobras N no limite de rigidez segue a lei de potência $N \sim (R/r)^{1,86}$ onde r é o raio do fio. O tamanho médio dos trechos $\langle l \rangle$



Figura 23 – Bolas de arame obtidas em regime de baixa fricção (esquerda) e alta fricção (direita) [37].

obtidos obedece a relação $\langle l \rangle / R \sim (R/r)^{-0.41}$. Os autores simulam um caminhante aleatório confinado em uma região esférica. Para obter o tamanho dos passos sorteia-se dois pontos aleatórios dentro da esfera e o comprimento é aceito de acordo com a probabilidade

$$P_{n+1}(l) = N^{-1} \exp[-\beta \lambda_n l / R], \quad (2.20)$$

onde N é a normalização, β é uma constante que depende do arame, R é o raio da cavidade e λ é o comprimento acumulado $\lambda_n = L_n / R$ nos n passos anteriores. O método reproduz o fato de que, para grande comprimentos de fio injetado, os novos pedaços inseridos terão tamanho pequeno.

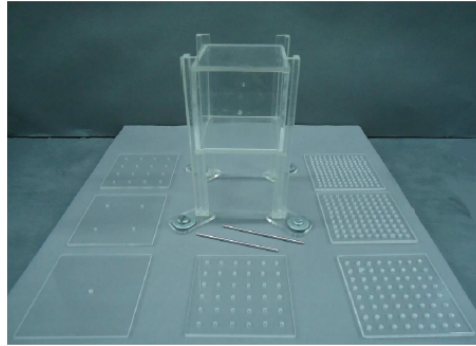


Figura 24 – Cavidade cúbica utilizada por Gomes, Pereira e Brito[38] no empacotamento de arame em cavidade não simplesmente conexa.

A contraparte tridimensional dos experimentos publicados por Gomes et al.[34] foi realizada em cavidades cúbicas, onde uma rede de pinos é fixa na direção transversal ao canal de injeção. A figura 24 mostra o aparato experimental usado. O modelo de campo médio descrito por Gomes, Pereira e Brito[38] considera uma energia livre do sistema através das interações arame-arame e arame-pinos. A primeira tem a forma quadrática na fração de empacotamento do arame ρ_a , representando interações binárias entre partes do arame. Já a interação arame-pinos é modelada como o produto entre as densidades volumétricas de pinos ρ_p e de arame. Assim, a energia livre é escrita como

$$F = \epsilon \rho_a^2 + \xi \rho_p \rho_a - T \sigma \rho_a, \quad (2.21)$$

onde o último termo é o termo entrópico da energia livre, $-TS$. Se supõe, pela aditividade da entropia, que esta é proporcional à densidade ρ_a . A condição de equilíbrio obtida ao minimizar F em relação à ρ_a nos leva a uma temperatura efetiva

$$T = \frac{1}{\sigma} (2\varepsilon\rho_a + \xi\rho_p). \quad (2.22)$$

Os autores obtêm que $\rho_a = kn_p^{-1/4}$, onde k é uma constante e n_p é o número de pinos na cavidade. Dessa forma, temos que $T = (2\varepsilon k/\sigma)n_p^{-1/4} + \xi/\sigma\rho_p \equiv A\rho_p^{-1/4} + B\rho_p$. Se o termo de interação for negligenciável, ou seja $B \rightarrow 0$, a temperatura efetiva é a mesma encontrada no experimento bidimensional. Neste último caso, temperatura alta equivale a densidade baixa de pinos, levando a mais configurações acessíveis para o arame, como obtido experimentalmente.

2.4.1 Nós em fios confinados

Neste capítulo foram discutidos diversos aspectos referentes ao empacotamento de arames em cavidades bidimensionais e tridimensionais. Tais aspectos estão diretamente relacionados aos experimentos e análises teóricas que apresentaremos nos capítulos seguintes. Além do interesse intrínseco no estudo de propriedades físicas de arames confinados, esses sistemas se relacionam com problemas teóricos e técnicos em diferentes disciplinas, como o surgimento de nós, um problema fundamental da matemática. Apesar de termos uma noção cotidiana do que é um nó, devemos ressaltar que a *Teoria dos Nós* lida com curvas que não podem ser desfeitas. Em um exemplo cotidiano, um nó matemático seria formado ao conectar as pontas de um cadarço após amarrá-lo. Este problema pode ser estendido ao estudo do confinamento de arames. Quando uma corda é confinada em um volume finito, é possível que suas partes gerem formas próximas a de nós matemáticos. Ou ainda, esse fenômeno pode ocorrer se elas se moveram devido a algum agente externo, sendo chacoalhadas, por exemplo. Ao unir as pontas da corda encontramos figuras idênticas a complexos nós matemáticos, como no experimento realizado por [Raymer e Smith\[39\]](#). Os autores depositaram uma corda de tamanho L em uma caixa e estudaram a probabilidade de surgirem nós ao rotacionar a caixa com velocidade angular constante. Depois das rotações, as pontas da corda são unidas e é observado se foi formado algum nó. A figura 25(a) mostra que a probabilidade de formação de nós satura em $\approx 50\%$.

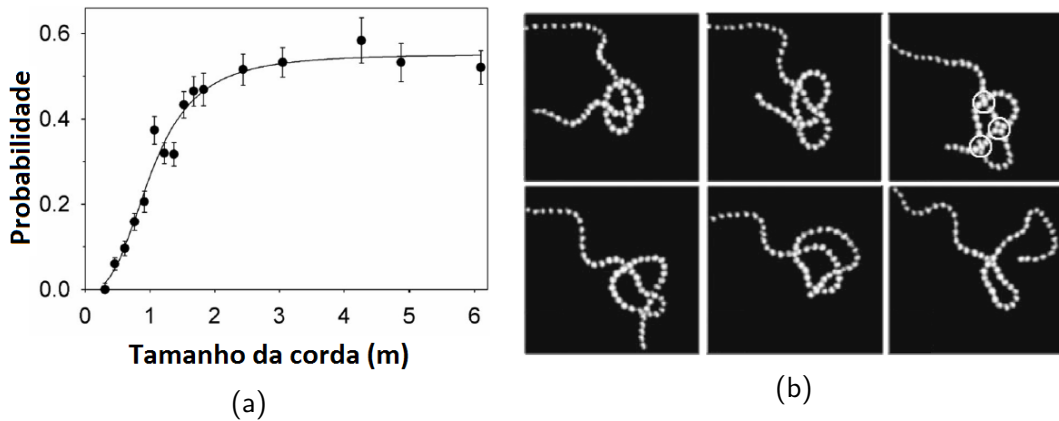


Figura 25 – (a) Probabilidade de surgimento de nós em uma corda de tamanho L [39]. (b) Sequencia de imagens mostra, da esquerda para a direita e de cima para baixo, fotografias tiradas a cada dez ciclos de uma placa oscilante onde um nó foi posto no centro [40].

Ben-Naim et al.[40] mostraram que o deslocamento de um nó em uma cadeia obedece um regime difusivo. Neste experimento, uma cadeia com n contas contendo um nó é acomodada em uma placa que vibra verticalmente com frequência e amplitude constantes. A figura 25(b) mostra uma sequência de fotos tiradas a cada 10 ciclos de oscilação. O número de ciclos t necessários para que o nó se desfaça é medido e os autores obtiveram que $t \sim n^{1.95}$. Comparando o resultado com a equação 2.18, onde o número de passos equivale ao tempo para o nó se difundir pela cadeia e o deslocamento quadrático médio corresponde a n^2 , obtemos o expoente de difusão $\tau \approx 1$, ou seja, uma difusão normal. O mesmo regime difusivo foi proposto por Aguiar, Gomes e Neto[7] e apresentado no começo da seção 2.4 para o deslocamento de uma carga em um bola de fio de solda empacotado manualmente.

3 SOBRE ARAMES E DNA

"Um país se faz com homens e livros."

Monteiro Lobato

No capítulo anterior, fizemos uma revisão sobre o empacotamento de arames em cavidades bidimensionais e tridimensionais. Neste capítulo iremos explorar a possibilidade de relacionar esse processo com outros fenômenos físicos através da analogia entre o empacotamento de arames em cavidades rígidas e o empacotamento de material genético em cápsulas virais. Já havia sido sugerido por [Gomes, Brito e AraÚjo\[41\]](#) que os dois sistemas poderiam ter comportamentos semelhantes pois ambos possuem a mesma topologia e estão submetidos a restrições geométricas impostas pelas cavidades, além da auto-exclusão desempenhar papel importante em suas dinâmicas. Iremos explorar esta analogia estudando as relações entre o comprimento do arame injetado em uma cavidade e as dimensões da cavidade assim como o comprimento do material genético de diversos vírus e as dimensões de suas cápsulas. Para isto, realizamos uma série de experimentos que consistem na injeção de um arame em uma cavidade de volume definido, até que o sistema atinja o *congestionamento*, ou seja, até que a cavidade não suporte mais a injeção. Detalhes experimentais serão descritos na próxima seção.

Deve ser ressaltado que o volume interno de uma cavidade viral varia à medida que o material genético é injetado. Segundo [Comolli et al.\[42\]](#), por exemplo, essa variação para o vírus phi29 está entre 9% e 12%. Tal variação será desconsiderada uma vez que nossa principal referência sobre o empacotamento viral [\[43\]](#) não enfatiza se seus dados sobre as cápsulas são pré ou pós empacotamento. Naturalmente, o arame empacotado em cavidades mais ou menos deformáveis irá se acomodar de forma diferente, como mostra o diagrama de fase de [Vetter, Wittel e Herrmann\[44\]](#). Contudo nossos resultados parecem ser independentes da estrutura adotada pelo arame. Por outro lado, o processo de empacotamento ocorre de maneira diferente para *DNA* e *RNA*, mas iremos ignorar essas diferenças, observando apenas aspectos da geometria do problema. Assim "material genético", *RNA* e *DNA* poderão acabar se confundindo durante o texto a seguir.

3.1 Realização experimental

3.1.1 Materiais

Para o experimento foi usado arame galvanizado comum que pode ser encontrado em qualquer loja de materiais de construção. Em particular, este arame, bwg 24, tem o diâmetro $\zeta = 0,56\text{mm}$. Ele costuma ser fornecido em um novelo toroidal com cerca de 500g, possui módulo de ruptura 37 kgf/mm^2 e sua densidade linear foi medida, para a qual encontramos o

valor $1780,6 \pm 0,5$ mg/m. No entanto, não realizamos uma análise de propriedades elásticas como módulos de elasticidade, de torção ou outros. Podemos apenas afirmar que, de forma geral, o arame tem um comportamento elastoplástico e sofre deformações inelásticas.

Os experimentos foram realizados em dois tipos diferentes de cavidades, porém, não fizemos distinção quanto as amostras provenientes de um tipo ou do outro. Ao todo foram 14 amostras produzidas nas cavidades do Tipo 1 e 66 amostras produzidas nas do Tipo 2, conforme descrito a seguir.

1. Tipo 1: cavidades de PVC.

A oficina mecânica do Departamento de Física da UFPE confeccionou 5 cavidades cilíndricas feitas de PVC cujos diâmetros(alturas), em milímetros, foram: 42(42), 45(45), 50(20), 53(98), 72,5(72,5). Uma dessas cavidades é mostrada na figura 26a. Elas possuem uma tampa que pode ser retirada na qual um canal de injeção central foi construído. O canal tem as mesmas dimensões do canal das seringas (Tipo 2, abaixo).

2. Tipo 2: seringas de plástico.

Seringas comuns de diversos diâmetros usualmente compradas em farmácias. A extremidade que é feita para encaixar a agulha foi usada como canal de injeção. Essa parte possui 2 mm de diâmetro interno e 10 mm de comprimento. As seringas possuem um capa de látex que cobre a ponta do êmbolo. Essa capa é, portanto, de um material diferente daquele usado nas demais partes da seringa. Contudo, não observamos experimentalmente nenhuma tendência devido a ela. Mais especificamente, iremos descrever duas fases morfológicas a seguir e nós encontramos ambas as fases em seringas com a capa de látex, mostrando que tais configurações não dependem de um eventual maior atrito entre arame e capa, ou que o coeficiente entre capas plásticas e capas de látex são próximos.

Foram usadas seringas com os seguintes diâmetros internos: 8,7; 8,9; 12,1; 12,5; 14,5; 16,0; 18,8 e 20,6, em milímetros. Um pino de ferro trespassante foi acrescentado para travar o êmbolo de forma a obter cavidades de alturas diferentes. Um exemplo dessa construção pode ser vista na figura 26b.

3.1.2 Procedimento

A ponta livre do arame é inserida manualmente pelo canal de injeção. O fio vai sendo inserido de forma gradual em passos. Cada passo tem, em média, 1cm, comprimento que foi estimado visualmente. A duração de um passo é de cerca de 1s de forma que a injeção é feita a uma velocidade média de 1cm/s. À medida que o processo segue surge uma força interna que resiste a injeção de mais arame devido à auto-exclusão e às deformações plásticas no arame. Quanto maior a densidade dentro da cavidade, maior é essa força e o arame tende a ser ejetado da cavidade. Não fizemos nenhuma medida de força relacionada a este fenômeno mas,



Figura 26 – (a) uma das cavidades de PVC usadas nos experimentos. (b) seringa de plástico mostrando o êmbolo e a capa de látex assim como o pino usado para travar o êmbolo. No interior da cavidade é possível ver o arame galvanizado inserido.

um experimento interessante seria injetar uma quantidade fixa de arame e observar quanto de arame é ejetado para aquela fração de empacotamento. Dessa forma, teríamos uma medida da pressão interna na cavidade. Mais ainda, o arame pode deslizar por entre os dedos por causa dessa pressão interna e, nestes casos, usamos um alicate para auxiliar no procedimento de injeção. Paramos a injeção quando se torna inviável para o experimentador injetar mais fio, ou seja, no limite humano da força de injeção, cerca de 600N [45]. Note que esta força limita o máximo valor possível atingido por ρ no congestionamento.

3.2 Análise dos resultados

Dando sequência à descrição do experimento, vamos começar a detalhar os resultados experimentais obtidos. Primeiro definiremos duas fases morfológicas nas quais o arame empacotado se acomoda. Para isso caracterizamos a estrutura de arame em cada fase através da formação de anéis de arame ao longo da parede interna da cavidade. Logo depois distinguimos a probabilidade de uma amostra estar em uma das fases e a fração de empacotamento. Proporemos um modelo teórico para explicar a relação obtida entre o comprimento de arame injetado e o volume da cavidade e, por último, faremos uma analogia entre o empacotamento de arames em cavidades rígidas e o empacotamento de material genético em cápsulas virais.

3.2.1 Descrição morfológica

Ao ser injetado na cavidade, o arame se move pelo espaço disponível até que encontra as paredes da cavidade, sendo obrigado a se desviar e, eventualmente, a se dobrar. Durante o processo, cada novo pedaço de arame que é injetado na cavidade empurra e tende a dobrar o material que já está lá dentro, forçando-o a se re-acomodar. Isso é repetido sucessivamente nos contatos arame-cavidade e arame-arame, criando, eventualmente, uma complexa rede de

dobras. Essas dobras podem ter grandes raios de curvatura, por exemplo, no caso de o arame formar anéis acomodados junto a parede interna da cavidade. Nas menores escalas, podem aparecer as estruturas vistas na figura 27, que se assemelham aos laços encontrados em duas dimensões (figura 12), sendo que o raio de curvatura do menor desses “laços” é controlado pelas constantes elásticas do fio e pelo diâmetro do próprio fio. Em princípio, muitos fatores devem influenciar a dinâmica do arame na cavidade e, conseqüentemente, a estrutura que irá se formar. Podemos citar o atrito entre o arame e a cavidade, as propriedades elásticas (módulos de flexão e de torção) do fio e da cavidade além da geometria da cavidade, que é o foco deste capítulo.



Figura 27 – Semelhante aos laços em duas dimensões, a figura mostra uma estrutura formada devido a torção acumulada no fio.

Em um primeiro caso, o arame inicia sua dispersão pela cavidade e vai gerando uma estrutura formada por anéis. Cada anel novo se acomoda por baixo da estrutura de forma que os primeiros anéis estão no topo. Assim, o arame se acomoda como um solenoide cuja altura característica depende das dimensões da cavidade [46]. No nosso caso, conseguimos obter solenoides com quase a altura da cavidade. Logo após completar o solenoide, a região central do arame começa a ser preenchida. Em um possível cenário, seria formado um novo solenoide internamente e assim por diante, em uma sequência concêntrica de solenoides. Contudo, essa *Configuração Ordenada* (CO) não foi obtida integralmente nos nossos experimentos, apesar de ter sido obtida experimentalmente por Piñeirua, M., Adda-Bedia, M. e Moulinet, S.[46]. O máximo que conseguimos foi o princípio do segundo solenoide com dois anéis internos.

Em outra configuração, o arame se espalha pela cavidade de maneira irregular, originando uma *Configuração Desordenada* (CD), como vemos na figura 28(a). Enquanto no caso anterior existem estruturas características, neste caso o arame se organiza em estruturas sem ordenação ou tamanho característico. Contudo, em regiões da cavidade onde a densidade é alta e o arame precisa se dobrar em pequenos raios de curvatura, surgem estruturas como as da figura 27. Stoop et al.[47] observaram que tais “laços” ocorrem porque o fio não consegue relaxar a torção acumulada.

A última configuração que observamos é vista na figura 28(b) e é uma combinação das duas fases morfológicas, sendo chamada de *Configuração Parcialmente Ordenada* (CPO). Devido a dificuldade de contar todos os anéis para cada amostra e as rotular, consideramos como pertencente a esta configuração qualquer exemplar em que houve formação de anéis, independente da quantidade ou de haver completado o solenoide mais externo. Esta foi a configuração mais recorrente em nossos experimentos e supomos que qualquer experimento que se inicia na CO irá formar uma região interna desordenada em um limite de empacotamento denso devido a dificuldade que o arame terá em relaxar torção acumulada.



Figura 28 – À esquerda é mostrada uma fotografia de uma amostra em uma *Configuração Desordenada* e à direita vemos um exemplo de *Configuração Parcialmente Ordenada*.

Diferentes morfologias foram descritas anteriormente na literatura no empacotamento em cavidades bidimensionais e tridimensionais. Stoop, Wittel e Herrmann[29] realizaram experimentos e simulações em cavidades circulares quase-bidimensionais e foram obtidas três diferentes fases dependendo do coeficiente de atrito entre a cavidade e o arame e da plasticidade do último. Stoop et al.[47] mostraram que a torção no arame é fundamental para a ocorrência de estruturas desordenadas em cavidades esféricas. Neste trabalho foram observados dois regimes: alta e baixa torção. No primeiro, uma das pontas do arame é mantida fixa dentro da cavidade de forma que, à medida que o arame é injetado, a ponta não consegue girar, inibindo a liberação da torção. No caso oposto, regime de baixa torção, a ponta é mantida livre. Como mencionamos na seção 3.1.1, o arame sofre deformações inelásticas e não consegue liberar a torção acumulada, assim, apesar de ser inserido com uma ponta livre, o nosso experimento se assemelha a configuração de alta torção da referência [47], porém conseguimos obter as duas configurações descritas acima em nossas cavidades cilíndricas. Uma gama maior de configurações é obtida ao variar a plasticidade das paredes da cavidade, como nas referências [36] e [44].

3.2.2 Características do arame empacotado

Se pararmos para pensar em um fone de ouvido dentro de um bolso, colocado de maneira arbitrária, ao puxá-lo poderemos encontrar um grande novelo embaraçado. Por outro lado, se quisermos guardar esse fone em uma pequena caixa de fósforos vamos precisar dobrá-lo cuidadosamente, minimizando os espaços vazios entre suas dobras. É natural esperar que a geometria favoreça alguma das configurações, pois ao ser injetado o fio deve se curvar sempre que em contato com as paredes da cavidade. Agora, vamos analisar como as configurações descritas anteriormente e como o comprimento do arame, de forma geral, mudam com a geometria da cavidade.

Os dois parâmetros que iremos usar são a taxa de aspecto t , e o volume V da cavidade. A taxa de aspecto pode ser definida como a razão entre o diâmetro D e a altura H da cavidade,

$$t = \frac{D}{H}, \quad (3.1)$$

assim, mudamos a forma da cavidade ao variar este parâmetro, como mostrado na figura 29.

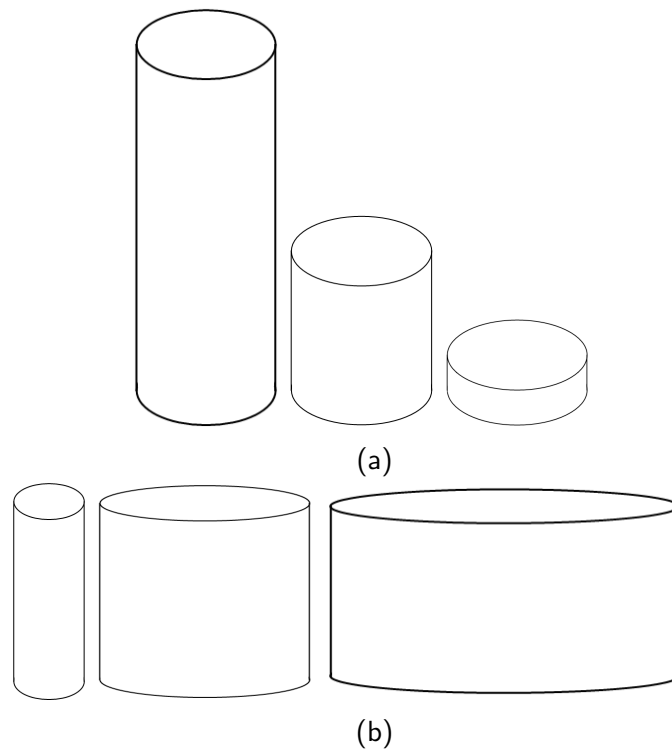


Figura 29 – A forma da cavidade muda ao variar a taxa de aspecto $t = D/H$, onde D é o diâmetro e H é a altura da cavidade. Mantendo D fixo e variando a altura, (a), ou mantendo H fixo e variando D , (b), obtemos cavidades com perfil semelhantes. Da esquerda para a direita em ambas as figuras são apresentados esquemas de cavidades com $t < 1$, $t = 1$ e $t > 1$.

Para $t = 1$, ou seja, $D = H$, a cavidade tem o perfil quadrado. Por outro lado, cavidades com $t < 1$ equivalem a $D < H$ e $D \ll H$ corresponde a uma cavidade que se assemelha a uma

haste. Por outro lado, no limite $t \gg 1$ a forma da cavidade tem a forma próxima a de um disco. No caso em que o diâmetro da cavidade for próximo ao diâmetro do fio teremos uma cavidade efetivamente unidimensional com o fio sendo injetado em linha reta até a encontrar o "chão" da cavidade. E ainda, se a altura da cavidade for próxima da do fio a cavidade será, efetivamente, bidimensional. Longe desses limites, esperamos que experimentos em cavidades com mesma taxa de aspecto sejam equivalentes, independente dos valores de D e H . Como não projetamos o estudo baseado na taxa de aspecto previamente, tomamos todo o intervalo em t correspondente às cavidades que utilizamos e o particionamos em intervalos menores t_i de tamanho 0,2. Assim, o número de resultados experimentais não é necessariamente o mesmo para diferentes intervalos t_i 's. Na tabela 1 listamos o número de amostra obtidas em cada uma das configurações morfológicas que observamos.

t_i	CPO	CD	Total	t_i	CPO	CD	Total
0,0 – 0,2	0	0	0	2,0 – 2,2	0	1	1
0,2 – 0,4	14	0	14	2,2 – 2,4	0	0	0
0,4 – 0,6	9	2	11	2,4 – 2,6	0	4	4
0,6 – 0,8	10	7	17	2,6 – 2,8	0	0	0
0,8 – 1,0	6	9	15	2,8 – 3,0	0	0	0
1,0 – 1,2	6	6	12	3,0 – 3,2	0	0	0
1,2 – 1,4	1	0	1	3,2 – 3,4	1	0	1
1,4 – 1,6	1	2	3	3,4 – 3,6	0	0	0
1,6 – 1,8	0	0	0	3,6 – 3,8	0	0	0
1,8 – 2,0	0	2	2	3,8 – 4,0	0	0	0

Tabela 1 – Quantificação de amostras nas configurações encontradas experimentalmente em intervalos da taxa de aspecto de tamanho 0,2.

Definimos a taxa de aspecto para um determinado resultado como a média das taxas de aspecto das cavidades dentro do intervalo t_i onde o resultado foi obtido. Para determinar as incertezas, avaliamos a imprecisão estatística σ_e dentro de cada intervalo dada por

$$\sigma_e = \sum_{i=1}^K \frac{|x_i - \langle x \rangle|}{K}, \quad (3.2)$$

onde x é a quantidade que estamos calculando (t , L etc.) e K é o número de resultados experimentais dentro do intervalo que estamos observando. Para calcular a incerteza total σ usamos a expressão

$$\sigma = \sqrt{\sigma_e^2 + \sigma_i^2}, \quad (3.3)$$

na qual σ_i representa a imprecisão instrumental.

Temos uma ideia da probabilidade de obter uma amostra em uma determinada configuração ao dividir o número de amostras em naquela configuração pelo total de amostras, ou seja, calculando a quantidade relativa de amostras para determinado valor de t . Naturalmente, a probabilidade só é definida para um número extenso de reproduções de forma que esperamos que as incertezas grandes. Construímos a figura 30 com os dados da tabela 1 e usando como incerteza da quantidade relativa como $\sigma = \sqrt{k}/K$ onde k é o número de amostras na configuração e K é o número de amostras total em cada t_i . Devido ao pequeno peso estatístico resolvemos não considerar os intervalos em que o total de amostras foi apenas um. As linhas ligando os pontos na figura 30 servem como guias visuais para acompanhar a evolução da probabilidade com a taxa de aspecto.

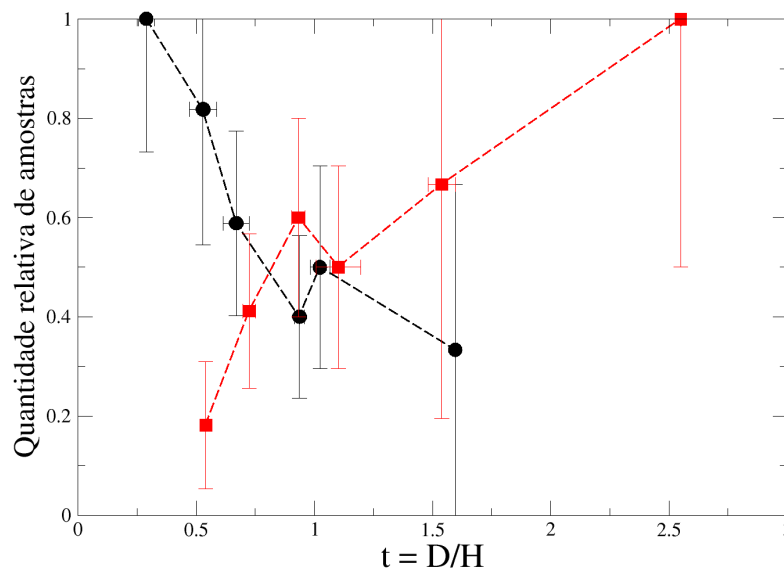


Figura 30 – Probabilidade de obter uma das configurações morfológicas como função da taxa de aspecto das cavidades: os círculos pretos são resultados de amostras na *Configuração Parcialmente Ordenada* enquanto que os quadrados vermelhos estão na *Configuração Desordenada* e curvas nas mesmas cores dos marcadores foram mantidas para ajudar na visualização de cada configuração. As probabilidades foram obtidas pela razão entre o número de amostras na configuração e o número de amostras total em determinado t .

Nota-se na figura 30 que a forma assimétrica da cavidade parece favorecer uma determinada configuração, *CPO* para $t < 1$ e *CD* para $t > 1$. Observe que a probabilidade da *CPO* diminui quando a taxa de aspecto aumenta. Quando o arame é inserido na cavidade e toca no assoalho, ele tende a escorregar para os lados. Em uma cavidade com diâmetro não muito maior que o do arame, não existe muito espaço e o arame se curva. A injeção continua e essa dobra é forçada para baixo, empurrando a ponta do arame, que acaba encontrando as paredes da cavidade. A ponta do arame gira, se deslocando ao longo da parede cilíndrica e originando os primeiros anéis da *CPO*. Entretanto, quando t aumenta, existe muito espaço para o arame se mover antes de encontrar as paredes. Assim, o número de possibilidades aumenta, o que diminui o número de resultados onde existem anéis e ocasiona em mais amostras desordenadas.

De maneira geral, podemos dizer que a minimização da energia elástica leva a uma transição na ordem em que uma configuração mais ordenada passa a ser menos provável de ocorrer do que a configuração mais desordenada. Note que a transição ocorre aproximadamente na região de $0,7 \leq t \leq 1,0$.

Iremos analisar o comprimento máximo L de arame na cavidade. Sabemos que L depende do diâmetro ζ do fio. Por exemplo, se ele tiver o mesmo diâmetro que a cavidade o máximo de arame que seria possível inserir seria a altura da cavidade. Assim, L pode não ser o melhor parâmetro a ser usado para comparar as diferentes morfologias, pois é função tanto das dimensões da cavidade quanto do diâmetro ζ . Uma quantidade que leva em consideração todos esses aspectos é a taxa de ocupação da cavidade ou fração de empacotamento

$$\rho = \frac{\pi(\zeta/2)^2 L}{V}, \quad (3.4)$$

onde V é o volume da cavidade. De forma geral, os intervalos em ρ em que ocorrem as configurações não são muito diferentes: $(0,061 - 0,353)$ para a Configuração Parcialmente Ordenada (*CPO*) e $(0,030 - 0,232)$ para a Configuração Desordenada (*CD*). Apesar disso, ao ordenar ρ em função da taxa de aspecto na figura 31 vemos que, na maior parte do intervalo em t , as frações atingidas pela *CPO* estão acima daquelas para a *CD*, para numa mesma taxa de aspecto. Este resultado se deve à distribuição solenoidal da *CPO* discutida na subseção anterior. Os anéis que caracterizam esta configuração têm pouco espaço entre eles. Já a *CPO* possui muito espaço desocupado na estrutura, o que leva a menores valores de ρ em relação à *CPO*. A figura 31 foi construída usando os mesmos intervalos t_i para calcular médias em ρ e consideramos todos os resultados, mesmo quando o número total de amostras no intervalo foi um. Notamos que no intervalo entre 0 e 1 de t , a fração de empacotamento das amostras da *CPO* tem uma forma aproximadamente parabólica com máximo próximo de $t \simeq 0,7$. Note que o ponto $t \simeq 0,7$ na figura 30 está, aproximadamente, na região onde ocorre a transição na probabilidade de uma amostra estar na *CD* ou na *CPO*.

Observamos na figura 31 que os menores valores em ρ alcançados por amostras na *CPO* ocorrem para $t < 1$. Nos poucos casos ocorridos em taxas de aspecto maiores que 1 a fração de empacotamento salta para mais de 0,2 (com exceção do último ponto, que é um pouco menor do que este valor). Possivelmente isto se deve à ocupação interna do solenoide. Para $t > 1$, os anéis terão diâmetros maiores e, naturalmente, mais espaço interno a ser preenchido, levando a *CPO* atingir frações de empacotamento maiores. Já para $t < 1$, tal configuração fica limitada a anéis de diâmetro menores, com menos espaço interno. Nesses casos, o arame tem dificuldade para se dobrar e deixa mais espaços vazios, atingindo pequenos valores de ρ . Assim as frações de empacotamento obtidas em amostras na *CPO* são comparativamente menores para $t < 1$ em relação a $t > 1$.

No caso da *CD*, ρ aumenta no intervalo entre 0 e 1 e diminui para $t > 1$, tendo máximo em $t = 1$. Esse comportamento deve ocorrer devido a relação entre o diâmetro do fio e o

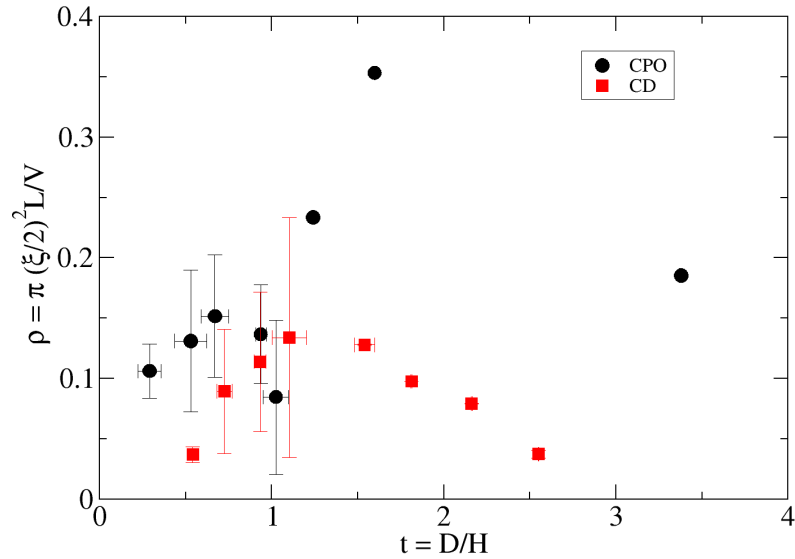


Figura 31 – Fração de empacotamento ρ no limite de empacotamento rígido como resposta à taxa de aspecto das cavidades para a *CPO* (círculos vermelhos) e *CD* (quadrados pretos). Nota-se que os valores de ρ na *CPO* são, em geral, superiores à *CD* devido ao maior preenchimento do espaço pelos os anéis da *CPO*.

diâmetro da cavidade. Dependendo da relação entre os dois, o arame irá sentir mais ou menos intensamente o confinamento pelas paredes da cavidade, o que é essencial para a formação das dobras. Assim, nas cavidades alongadas ele é obrigado a se acomodar em estruturas com grande curvatura, tais como os laços da figura 27. Tais estruturas caracterizam regiões de maior ordem, que levam a maiores frações de empacotamento. Quando o diâmetro da cavidade aumenta, essa restrição geométrica se torna mais fraca, o arame pode fazer dobras com menor curvatura, que levam a menores frações de empacotamento.

Os dois resultados apresentados nas figuras 30 e 31 diferenciam as duas configurações, mostrando comportamentos diferentes da fração de empacotamento e para a probabilidade (o número de amostras) de o arame se acomodar em uma das configurações de acordo com a taxa de aspecto da cavidade. Contudo, a figura 32 mostra um comportamento comum a ambas as configurações.

No gráfico principal, juntamos as amostras de ambas as configurações, apresentadas com círculos azuis, e nos gráficos inseridos na figura 32 são mostrados os resultados experimentais de cada configuração, círculos pretos para *CPO* e quadrados vermelhos para *CD*. A relação entre o comprimento de arame injetado e o volume da cavidade é uma lei de potência que independe da configuração adotada pelo arame. Surpreendentemente, ao analisar amostras separadamente obtivemos o expoente $1,28 \pm 0,03$ no caso da *CPO* e $1,33 \pm 0,04$ para a *CD*, ou seja, dentro das incertezas, o expoente da lei de potência é o mesmo para ambas as configurações. Contudo, o valor obtido para a *CPO* é ligeiramente maior do que o expoente da *CD*. Na extrapolação comentada na seção 2.2 observamos que o valor máximo para $\rho \approx 0,91$, ou seja, em um empacotamento "ideal" teríamos $V \sim L$. O expoente obtido mostra o quão

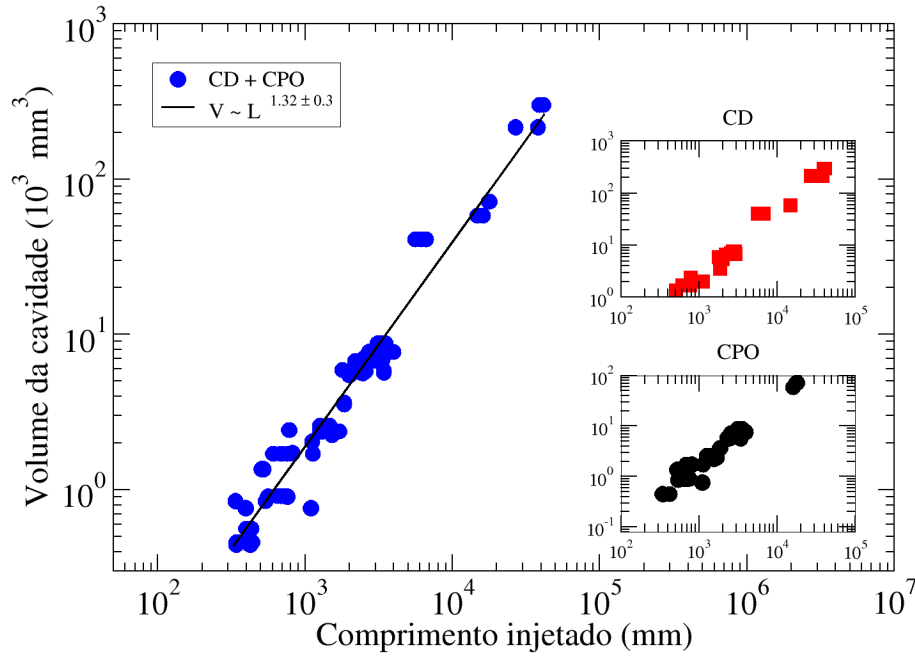


Figura 32 – Resultados experimentais do volume das cavidades versus o comprimento máximo de fio injetado mostram uma lei de potência do tipo $V \sim L^\alpha$ com expoente $\alpha = 1,32 \pm 0,03$. Nos gráficos internos são mostrados os dados da *CPO* e *CD* cujos expoentes são $1,28 \pm 0,03$ e $1,33 \pm 0,04$, respectivamente.

longe essas amostras estão deste limite. Como os expoentes das leis de potência são iguais, não distinguiremos as duas configurações. Assim, o ajuste conjunto apresentado na figura 32 possui expoente $1,32 \pm 0,03$.

3.2.3 Modelo de campo médio

A lei de potência encontrada pode ser explicada lançando mão de um modelo em que a energia interna do sistema é descrita pela contribuição das forças de exclusão e da energia elástica armazenada nas dobras. Imagine um pedaço de fio dobrado manualmente. Ele tenta se desdobrar, relaxando a energia elástica acumulada em suas partes curvadas, se comportando como uma mola com uma constante elástica efetiva k . A forma natural para essa energia é hookeana, ou seja, $U_c = kR_g^2$, onde R_g é o raio de giração. Porém, de forma mais conveniente para nossos fins nós a escreveremos como

$$U_c = kV^{\frac{2}{3}}, \quad (3.5)$$

para uma cavidade tridimensional. Note que aproximamos o volume delimitado pelo raio de giração pelo volume da cavidade V .

Por outro lado, a energia de auto-exclusão depende dos contatos entre partes do arame, levando a um termo quadrático em ρ e, também dos contatos arame-paredes da cavidade, este levando a um termo linear em ρ . Aqui, aproximaremos a soma de ambas as contribuições por

uma energia efetiva

$$U_a \sim \rho^\gamma V, \quad (3.6)$$

onde, $1 \leq \gamma \leq 2$ e V corresponde à integração em todo o volume. Em modelos de campo médio tipo-Flory, para polímeros, a energia de auto-exclusão é escrita como uma média de contatos binários entre partes do polímero apenas, pois não existe cavidade, então $U_a \sim \rho^2$, ou seja, é uma interação de dois corpos, dependendo quadraticamente da densidade.

Reescrevemos U_a em termos do comprimento injetado L usando da equação 3.4,

$$U_a \sim L^\gamma V^{1-\gamma}. \quad (3.7)$$

A energia interna é dada pela soma das duas contribuições $U = U_c + U_a$. Para encontrar o comprimento máximo que pode ser injetado na cavidade, minimizamos U em relação ao volume V , ou seja,

$$\frac{\partial U}{\partial V} \sim (1 - \gamma)L^\gamma V^{-\gamma} + \frac{2}{3}kV^{-\frac{1}{3}} = 0 \implies V \sim L^\alpha, \quad (3.8)$$

onde o expoente α é dado por

$$\alpha = \frac{3\gamma}{3\gamma - 1}. \quad (3.9)$$

Gomes, Brito e AraÚjo[41] sugeriram o valor $\gamma = 2 \rightarrow \alpha = 6/5 = 1,2$ o qual explica a lei de escala entre L e R obtida nos trabalhos apresentados nas referências [37, 48]. Em nossos experimentos, $\alpha = 1,32 \rightarrow \gamma = 1,38$. No primeiro caso, os experimentos foram realizados em cavidades esféricas enquanto que nossos experimentos foram realizados em cavidades cilíndricas, o que sugere que a forma da cavidade influencia na distribuição de arame na cavidade, gerando um número médio de contatos diferente. Em particular, $\gamma_{\text{cilíndrico}} < \gamma_{\text{esférico}}$. Podemos entender a razão de $\gamma_{\text{cilíndrico}}$ ser efetivamente mais próximo de 1 do que de 2 (usado para cavidades esféricas) pelo fato da superfície ser maior que a de uma esfera para um volume fixo, aumentando a importância das interações de auto-exclusão fio-cavidade, as quais são lineares em ρ . Esses expoentes parecem ser robustos e independentes do material do arame, ou seja, de suas propriedades elásticas. Simulações realizadas por Najafi et al.[48] assim como experimentos com fios de nylon e silicone do mesmo trabalho apresentaram o mesmo expoente, assim como Shaebani et al.[37] obteve a mesma lei de potência em experimentos com arames de solda em um limite de alta fricção. Os valores de α para os trabalhos citados estão reportados na tabela 2.

Material (método)	Referência	Geometria	Expoente
Arames (E)	aqui	Cilíndrico	1.32 ± 0.03
Arames (E)	[41]	Esférico	1.11 ± 0.04
Arames (E e S)	[48] e [37]	Esférico	1.2
Arames (E e S)	[47] e [37]	Esférico	1.14 ± 0.02
Arames (E)	[7]	Esférico	1.09

Tabela 2 – Expoente α para o empacotamento de arames obtido em simulações (S), experimentos (E) obtidos em cavidades de diferentes geometrias.

Os experimentos de empacotamento de arames são realizados em cavidades de diversos tamanhos e como resultado é obtida a massa total concentrada naquele determinado volume/raio. Observe que este é exatamente o processo de contagem de caixas descrito no capítulo 1 e mudar o tamanho da cavidade é mudar a escala do sistema. Assim, podemos relacionar o expoente α com a dimensão fractal D , ou dimensão massa-tamanho, desde que $L \sim V^{1/\alpha} \sim R^{3/\alpha} \equiv R^D$. Para as cavidades esféricas temos $\alpha = 1,2 \rightarrow D = 2,5$ de acordo com a suposição teórica de Gomes, Brito e Araújo[41] e calculamos $\alpha = 1,32 \pm 0,03 \rightarrow D = 2,27 \pm 0,05$ nas cavidades cilíndricas, o que mostra que a complexidade das estruturas formadas em cavidades esféricas é maior do que em cavidades cilíndricas.

3.2.4 Comparações entre o empacotamento de arames e de DNA

Neste momento, alguém perspicaz poderia argumentar que em nossos experimentos o volume da cavidade é escolhido previamente e o comprimento de arame é a resposta experimental, de forma que devemos esperar uma relação do tipo $L = L(V)$. Contudo, escolhemos escrever a relação $V = V(L)$ nas seções anteriores para que possamos comparar com os resultados obtidos por Cui, Schlub e Holmes[43]. A relação causal entre o comprimento do material genético e as dimensões da cavidade é um problema biológico em aberto. Existem evidências de ambas as direções: o comprimento do genoma é o máximo que pode ser introduzido na cavidade ou o tamanho da cavidade é determinado pelas dimensões do material genético. Assim, desde que esta relação funcional ainda é desconhecida, o trabalho citado apresentou com liberdade seus dados como $V_v = V_v(L_v)$, onde usamos o índice v para vírus.

Cui, Schlub e Holmes[43] obteve dados do comprimento do material genético L_v , da morfologia e das dimensões de diversos vírus a partir das páginas da ViralZone, NCBI (National Center for Biotechnology Information) e do *Eighth Report of the International Committee on Taxonomy of Viruses*, além de outras publicações. Para calcular o volume das cápsulas virais V_v , quatro aproximações foram feitas a partir de suas morfologias: esféricos (os icosaédricos foram considerados esféricos devido a falta de precisão para o cálculo do volume), ovóides (elipsóides), filamentosos (cilíndricos) e *tijolosos* (com forma de paralelepípedo). Estes três últimos, lato sensu, de simetria cilíndrica, portanto. Por outro lado, o material genético pode ser classificado como dsDNA, ssDNA, dsDNA-RT, ssRNA-RT, -ssRNA, +ssRNA, onde ds e ss

se referem, respectivamente, a fita dupla ou simples de nucleotídeos.

Para a relação entre V_v e L_v foi suposta uma lei de potência $V_v = cL_v^{\alpha_v}$. Na tabela 3 reproduzimos os expoentes α_v e fatores de escala c . Na tabela original de Cui, Schlub e Holmes[43] são apresentados os expoentes máximo e mínimo para os quais 95% dos dados podem ser explicados por uma lei de potência assim como o valores médios. Aqui nós usaremos estas médias e definimos como incerteza a metade da diferença entre os valores máximo e mínimo do expoente. Observe que só escrevemos a incerteza para o expoente que é o resultado no qual estamos interessados. Na seção anterior comparamos o empacotamento de arames em cavidades esféricas e cilíndricas por isso, iremos nos ater aos expoentes para vírus com cápsulas esféricas e não esféricas (mais exatamente, com simetria cilíndrica). Os expoentes das leis de potência relacionadas a estes tipos de vírus são expressos com 2 algarismos significativos como $1,2 \pm 0,2$ e $1,4 \pm 0,2$, respectivamente. Obviamente, os limites dos intervalos de confiança dos expoentes se sobrepõem em 1/3 do intervalo total de variabilidade do expoente, embora um aumento na base de dados e/ou um refinamento nas técnicas experimentais possa no futuro reduzir essas incertezas. Na suposição de que os valores médios $\alpha = 1,2$ e $\alpha = 1,4$ mantenham-se relativamente consolidados, devemos observar que ambos são bastante próximos dos valores encontrados para o empacotamento de arames em simetrias esférica e cilíndrica, como mostrado na seção anterior. Achamos que este é um primeiro resultado promissor na tentativa de criar uma analogia entre os dois sistemas. Independente da concordância numérica dos expoentes, devemos ressaltar que em ambos os sistemas a relação entre o comprimento injetado e o volume disponível pode ser bem comparada com uma lei de potência.

Grupo	Expoente α_v	Fator de escala c
Todos	$1,43 \pm 0,17$	2,057
Envelopados	$1,37 \pm 0,24$	7,515
Não envelopados	$1,06 \pm 0,18$	3,170
Linear	$1,46 \pm 0,20$	1,775
Circular	$1,74 \pm 0,62$	1,848
Esférico	$1,17 \pm 0,19$	2,785
Não esférico	$1,44 \pm 0,25$	5,697
dsDNA	$1,52 \pm 0,36$	1,182
dsRNA	$0,97 \pm 1,08$	6,760
+ssRNA	$1,95 \pm 0,62$	596
-ssRNA	$2,58 \pm 1,36$	1,314

Tabela 3 – Na tabela estão reportados alguns dos resultados apresentados por Cui, Schlub e Holmes[43] para o expoente e o fator de escala da relação entre o volume de uma cápsula viral e o comprimento do material genético do respectivo vírus. Os resultados foram divididos de acordo com características da cápsula (envelopado ou não, esférico ou não esférico) e do material genético (linear ou circular, dsDNA, dsRNA, +ssRNA, -ssRNA). Destacamos em negrito os valores usados na comparação entre o empacotamento de arames em cavidades macroscópicas e o empacotamento de material genético em cápsulas virais.

O resultado sugere que o empacotamento em cápsulas esféricas é mais compacto do que em cápsulas cilíndricas e isso pode ser um interessante passo evolutivo para os vírus que infectam as células injetando o material genético através da membrana celular, o que é realizado pela maioria dos bacteriófagos. Essa sugestão se deve a ser necessária uma pressão bastante alta para romper a membrana celular e, de fato, se sabe que a pressão interna dentro de uma cápsula viral (de bacteriófagos, pelo menos) é bastante alta e já mencionamos que o motor biológico dos vírus é o mais "forte" conhecido. Corroborando esse argumento, os resultados publicados por Ali, Marenduzzo e Yeomans[49] mostram que a geometria da cápsula afeta a velocidade tanto de injeção quanto de ejeção de um polímero. Nesse trabalho, polímeros flexíveis e semi-flexíveis são simulados como cadeias de contas sendo injetados e ejetados de cavidades esféricas e elipsoides enquanto a velocidade e força são medidas. Os autores conjecturaram que os vírus teriam evoluído de forma a otimizar a velocidade de ejeção. Nesta Tese, nós sugerimos que esta variação ocorre pela otimização da ocupação do espaço interno, refletido pela dimensão fractal.

Em nosso modelo, o expoente γ e, conseqüentemente, α , derivam das forças elásticas e de auto-exclusão. A coisa não é tão simples quando tratamos de vírus pois a auto exclusão não deriva de simples contatos entre o genoma. A molécula de DNA é carregada negativamente, o que resulta em repulsão coulombiana, mas também é envolta por uma camada de água cujas moléculas interagem com íons na solução e afetam as interações entre partes distintas da estrutura (em especial, em vários trabalhos são citados Na^+ , Mg^{2+} e Espermidina³⁺). De fato, é possível minimizar ao extremo a auto-exclusão alterando a concentração iônica na solução onde o vírus está sendo estudado, tornando as interações atrativas, o que pode fazer o DNA compactar e colapsar em estruturas toroidais, bem conhecidas da literatura, cilíndricas ou em redes de fibras [50]. Por outro lado, a energia de interação DNA-DNA costuma ser modelada na literatura tendo a forma $G_{int} = \sqrt{3}F_0Lg(d_s, c)$, onde F_0 é uma constante e $g(d_s, c)$ é uma função que depende das condições iônicas (d_s é a distância entre os anéis de DNA e c é uma constante). Logo, a energia de interação depende linearmente do comprimento e, ao mudarem as condições iônicas, a constante irá mudar mas o expoente da relação não. Contudo, desde que $G_{int} \sim L$, ela se afasta dos expoentes que nós esperávamos do empacotamento para arames e material genético (1,2 e 1,4 para cavidades esféricas e não esféricas, respectivamente)

Fuller et al.[51] observaram que a forma qualitativa desta expressão para a energia interna de interação parece concordar com dados experimentais mas não de forma quantitativa. Diversos fatores que poderiam afetar as diferenças entre a modelagem teórica e os resultados experimentais foram conjecturados por Fuller et al.[51], como a torção da molécula de DNA, a taxa de empacotamento e a forma dos vírus. A forma da cápsula realmente influencia na estrutura do DNA assim como na taxa de empacotamento, como mostrado por Ali, Marenduzzo e Yeomans[49]. Como citamos antes, o efeito da torção no empacotamento de arames foi

estudada por [Stoop et al.\[47\]](#) e [Shaebani et al.\[37\]](#), onde se obteve que o acúmulo de torção no arame leva a estruturas bastante complexas. Em contrapartida, a importância da torção na molécula de DNA ainda é um problema em aberto. Alguns autores sugeriram que o DNA se ordena em forma de solenoide formando camadas concêntricas e, para isso, já havia sido proposto que ele necessitava rotacionar em relação ao motor e/ou à cápsula. [Liu et al.\[52\]](#) obtiveram que para uma sub-unidade do motor da cápsula viral manter o contato periódico com um grupo fosfato do DNA que está sendo empacotado é necessário torcer a molécula, variando inclusive, neste processo, o tamanho e a duração dos passos do motor. No entanto, [Rollins, Petrov e Harvey\[53\]](#) obtiveram que a torção não desempenha nenhum papel na conformação do bacteriófago P4 e, conseqüentemente, na energia livre correspondente do processo.

O arame galvanizado que nós utilizamos sofre deformações inelásticas, como pode ser visto nas figuras 27 e 28, uma vez que o arame está fora da cavidade e nada o impediria de se "desdobrar". Da mesma forma, [Berndsen et al.\[54\]](#) sugeriram que a dinâmica do empacotamento do DNA é dissipativa e fora do equilíbrio e concluíram que a descrição através de modelos termodinâmicos quasi-estáticos não capturariam inteiramente a Física do fenômeno. Eles perceberam que a velocidade de injeção do material genético aumenta ao dar uma pausa no processo, o que sugere que essa pausa permite ao DNA empacotado relaxar dentro da cápsula viral. Essa conclusão é coerente com as imagens de crio-microscopia eletrônica feitas por [Comolli et al.\[42\]](#) que mostram que o empacotamento do DNA no bacteriófago $\phi 29$ parece ocorrer de forma aleatória. Nesse trabalho foram obtidas imagens em diversos estágios do empacotamento do genoma que mostram que não existe um caminho único determinístico para o empacotamento do DNA tal qual um motor que ordena o DNA dentro da cápsula. Durante a maior parte do empacotamento, o DNA ocupa todo o volume da cápsula e não há evidências de um núcleo vazio, o que seria esperado se o DNA se ordenasse dentro da cavidade formando a bem conhecida estrutura solenoidal. Suas análises revelam que não há padrões na estrutura do DNA empacotado até pelo menos $\sim 78\%$ do material ter sido empacotado, quando começam a surgir as camadas mais externas em algumas amostras. Os autores sugerem uma transição na ordem que ocorre por volta dessa percentagem, dado a falta de ordem global até então e o alto nível de organização encontrado nos estágios finais do empacotamento. Esse fenômeno é acompanhado por um aumento na força que resiste ao empacotamento, que é um pouco menor do que 1pN durante a injeção dos primeiros 70% do material até que sobe para até ~ 23 pN, quando o DNA está próximo do empacotamento total [55]. É possível que esse crescimento abrupto da força seja necessário para a reconfiguração do material genético dentro da cavidade.

Os arames o DNA sofrem uma transição de *congestionamento* devido ao aumento na densidade durante o empacotamento. Em um experimento onde são alteradas as condições iônicas de uma solução contendo moléculas de DNA e cápsulas virais, [Keller et al.\[56\]](#) perceberam que a molécula de DNA colapsa devido ao congestionamento. A quantidade de experimentos em que ocorrem os colapsos depende das condições iônicas. Nesses casos, a injeção para devido ao

colapso do DNA. Tal pausa ocorre quando as frações de empacotamento do DNA estão entre 0,05 e 0,4, que é aproximadamente o mesmo intervalo de fração onde ocorre o *congestionamento* do arame. Portanto, supomos que os dois processos obedecem a uma dinâmica parecida até que, devido ao aumento na densidade, sofrem uma transição de *congestionamento* aproximadamente na mesma densidade. Enquanto ao DNA é permitido relaxar durante um certo tempo até voltar e terminar seu empacotamento, nunca se fez um experimento deste tipo com arames em três dimensões. Contudo, [Gomes\[57\]](#) realizou experimentos em cavidades bidimensionais obtendo que o comprimento máximo aumenta logaritmicamente com o tempo.

4 DESEMPACOTAMENTO DE ARAMES DE CAVIDADES: OS EFEITOS DE BLOQUEIO

"writing about a writer's block is better than not writing at all."

Charles Buckowski

Neste capítulo vamos estudar o processo oposto ao empacotamento, ou seja, o que ocorre quando tentamos retirar o arame da cavidade. Esse parece ser o passo intuitivo natural após se ter estudado o confinamento de arames. Em duas dimensões, esse tema foi discutido no trabalho de Sobral et al.[32]. Uma vez que a retirada do arame da cavidade depende da estrutura formada dentro da cavidade, esperamos aspectos distintos entre o problema bidimensional e sua contraparte em três dimensões. A primeira diferença está relacionada com o fato de que em duas dimensões, o material empacotado se dispõe em uma única camada bidimensional, um cilindro cuja altura é o diâmetro do arame. No caso tridimensional existe a possibilidade do arame se acomodar em mais de uma camada e atravessá-las perpendicularmente, o que permite a formação de estruturas muito mais complexas. Então, ao se tentar retirar o arame da cavidade acontece um fenômeno impossível de ocorrer em duas dimensões: enquanto na última o arame não trava e a extração do arame se dá continuamente, em três dimensões o arame pode ficar bloqueado dentro da cavidade. O surgimento de bloqueios na extração do arame é similar a importantes problemas técnicos, como a dinâmica de nós em estruturas filamentosas [40, 39], a dinâmica do desempacotamento do genoma de uma cápsula viral [58] e ainda, o surgimento de nós em cateteres [59, 60].

Experimentos de desempacotamento de fios a partir de cavidades tridimensionais foram feitos inicialmente na UFPI, tendo sido objeto da dissertação de Sousa[61] em 2011 e, posteriormente, de experimentos realizados por V. P. Brito, também na UFPI. Aqui, no entanto, realizamos experimentos diferentes em ao menos três aspectos em relação a esse trabalho inicial que serão descritos na próxima seção. Também incorporamos um modelo teórico para o processo de travamento inexistente nos estudos anteriores. O conteúdo deste capítulo está sendo editado para publicação em revista científica [21].

4.1 Descrição do experimento

O objetivo deste capítulo é estudar a ocorrência dos travamentos durante o processo de extração do arame da cavidade e propriedades estatísticas do resíduo que permanece na cavidade. Para isso, realizamos uma série de experimentos utilizando o mesmo arame galvanizado descrito no capítulo anterior. O procedimento se inicia com a injeção de um determinado comprimento L dentro da cavidade. Observe que, para comprimentos grandes, a injeção pode ser impedida

pelo congestionamento do arame antes que se consiga inserir todo o comprimento L . Nesses casos, a "amostra" é descartada.

Com o arame injetado, damos prosseguimento ao experimento puxando-o pelo mesmo canal de injeção até que seja completamente extraído ou ocorra o bloqueio. Esse processo é repetido N vezes e contamos o número n de vezes que o arame trava. Quando a extração é interrompida nós cortamos o arame com um alicate ou uma tesoura. O material residual que fica bloqueado dentro da cavidade foi chamado de *núcleo*. Obtivemos 110 amostras de núcleos para diferentes comprimentos L em empacotamentos feitos na montagem simétrica.

Duas diferentes montagens experimentais foram comparadas:

- **Simétrica:** foram construídas na Oficina Mecânica do DF-UFPE três cavidades de alumínio de perfil quadrado (diâmetro igual a altura) mostradas na figura 33. As cavidades possuem altura e diâmetro iguais a 7,2; 14,4 e 21,6 mm e serão chamadas de *cav1*, *cav2* e *cav3*, respectivamente. Ressaltamos que Sousa[61] não usou cavidades de perfil simétrico (seção quadrada) em seu experimento. Escolhemos aquelas dimensões, pois planejamos o experimento com arame galvanizado de 0,36 mm de diâmetro em uma configuração onde as dimensões das cavidades seriam 20, 40 e 60 vezes maiores que o diâmetro do fio. Porém, a injeção manual deste arame é complicada pois ele escorrega entre os dedos, tornando necessário usar de muita força para fazer o arame se dobrar dentro da cavidade. Assim, o fundo da cavidade é arranhado, sendo danificado pelo arame. O arame de 0,56 mm era mais maleável e optamos por utilizá-lo. As cavidades possuem uma tampa de aço com um canal no meio que possui 10 mm de comprimento e 2 mm de diâmetro, semelhante às cavidades mencionadas no capítulo 3. O aço na tampa evita o desgaste do canal de injeção durante o experimento. Nesta montagem, o arame é injetado com uma das pontas livre e realizamos 50 repetições para cada comprimento L . Os experimentos com essas cavidades simétricas possuem mais duas diferenças relativas aos de Sousa[61]: (I) o fio injetado tem a extremidade solta no interior da cavidade; (II) ademais, pela diferença de material, essas cavidades não são sujeitas às quebras observadas anteriormente.
- **Assimétrica:** Experimentos realizados na UFPI por Valdemiro P. Brito com quatro seringas de altura (diâmetro) 64,1(11,5), 86,2(13,8), 94,7(18,5) e 132,6(25,0), em milímetros. As seringas foram rotuladas como *cav4*, *cav5*, *cav6* e *cav7*, respectivamente. Elas são parafusadas em uma superfície de madeira, como mostra a figura 33. Aqui, a ponta livre do arame é presa no fundo da cavidade, diferentemente do que é feito com as cavidades simétricas. A montagem experimental onde a ponta do arame é presa na cavidade foi estudada por Stoop et al.[47] e nomeada como configuração de "alta torção". Segundo esses autores, esta montagem impede que o arame libere a torção acumulada pela ponta presa, gerando estruturas desordenadas. Contudo, mencionamos no capítulo

anterior que o arame galvanizado é elastoplástico e não permite a liberação da torção pela ponta livre, de forma que esperamos que o efeito da ponta presa não seja sentido pelo arame no limite de grandes comprimentos. Assim, as duas montagens experimentais descritas aqui são equivalentes com respeito a ponta do arame e se diferenciam apenas quanto a simetria da cavidade. Nessa configuração foram feitas 10 repetições para cada comprimento L injetado.

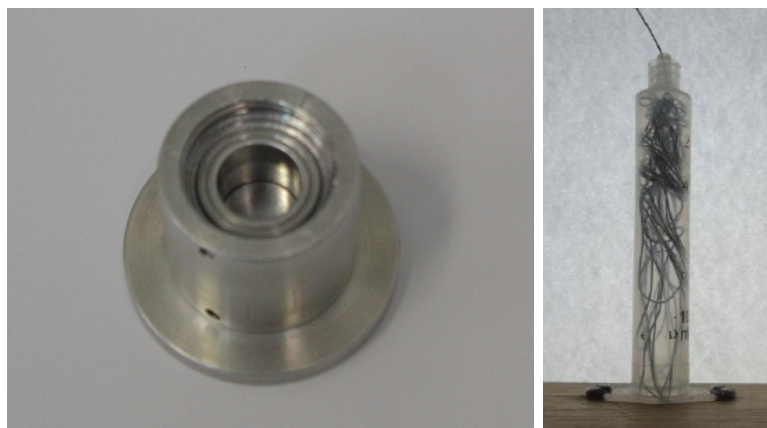


Figura 33 – Os dois modelos de cavidade usados nas duas diferentes configurações experimentais comparadas aqui: *simétrica*, de alumínio e aço (esta Tese, lado esquerdo) e *assimétrica*, de plástico (V. P. Brito, lado direito).

É natural supor que existe um importante fator humano neste tipo de experimento que não está sendo considerado: a força de extração. Quando puxamos o arame e ele acaba preso, podemos esperar que ele consiga se desvencilhar e sair da cavidade ao ser puxado com mais força. Já na situação em que o arame fique realmente bloqueado é impossível retirá-lo e, ao ser puxado com mais força, ele irá se romper. A força utilizada na extração não foi medida de forma que o travamento é determinado apenas pelo experimentador que realizou experimentos teste para "sentir" que o fio ficou bloqueado. Contudo, como o arame tem módulo de ruptura de 37 kgf/mm^2 , podemos afirmar que, para um arame de $0,56 \text{ mm}$ de diâmetro, do tipo usado no experimento, as forças de ruptura são próximas de 90 N .

4.2 Análise dos resultados

Quando acontece o bloqueio na extração do arame, uma parte fica retido na cavidade. Chamamos esse resíduo de *núcleo*. Por outro lado, em N tentativas de extração, ocorrem travamentos apenas em um número $n < N$, para o mesmo comprimento L injetado. Nesta seção descreveremos características da estrutura do núcleo e da probabilidade de travamentos. Devemos ressaltar que a ocorrência de bloqueios é um evento relativamente raro. Ao analisar todos os experimentos realizados nas cavidades simétricas contabilizamos cerca de 34% de travamentos. Essa quantidade dá uma ideia do número de núcleos obtidos em uma série de experimentos deste tipo.

4.2.1 O núcleo

Em primeiro lugar vamos observar o tamanho topológico do núcleo, i.e. sem considerar dobramento do fio. Para cada comprimento L injetado, obtemos um número n de núcleos, que são pesados de forma a obter o comprimento L_n . Tomamos a média de L_n para as n amostras e comparamos com L na figura 34. O gráfico mostra que L_n cresce linearmente com L .

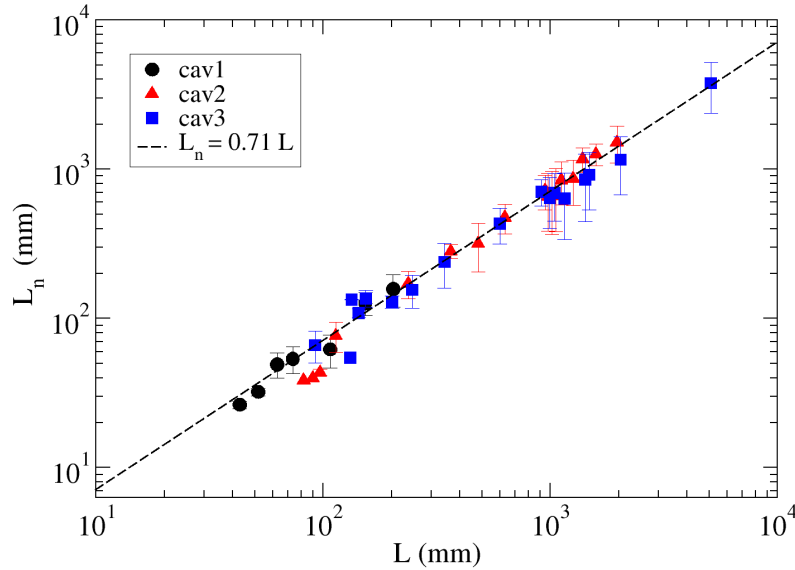


Figura 34 – Dependência linear do comprimento L_n do núcleo com o comprimento L injetado. Na figura os círculos pretos foram obtidos na *cav1*, os triângulo vermelhos na *cav2* e os quadrados azuis na *cav3*. No ajuste obtemos a constante $k = 0,71$ com coeficiente de correlação acima de 0,99.

No capítulo anterior encontramos que o comprimento de arame que cabe em uma cavidade de volume V obedece uma lei de potência (equação 3.8) com expoente $\alpha = 1,32$. Para definir um volume, as dimensões do núcleo foram medidas da seguinte forma: observamos o pedaço de arame que fica dentro do canal injeção. Esse pedaço é um pequeno trecho aproximadamente reto que esquematizamos na figura 35. Com o auxílio deste trecho é definida as direções paralela e perpendicular ao canal de injeção. A medida da estrutura do núcleo na direção paralela ao canal de injeção é chamada h_1 e a direção perpendicular a esta será o diâmetro h_2 , mostrados na figura 35. O pedaço de arame que fica dentro do canal de injeção não é contabilizado nas dimensões de h_1 .

Fizemos oito medidas de h_1 e h_2 e obtemos o valor médio, aproximando a amostra por um cilindro, de forma a obter o volume $V_n = \pi(h_2/2)^2 h_1$. A figura 36 mostra a comparação dos dados do volume e do comprimento do núcleo com a expressão $V_n \sim L_n^{1,32}$ para as 110 amostras de núcleo nas cavidades *cav1*, *cav2* e *cav3*. Vemos que a relação entre o comprimento de fio no núcleo (sua massa) e o volume da estrutura pode ser descrito como uma lei de potência com o mesmo expoente encontrado no congestionamento do arame (o pré-fator, contudo, muda entre os dois casos). O que é notório é que esta relação é encontrada no limite de congestionamento e não precisa ser obedecido à todo momento durante o empacotamento.

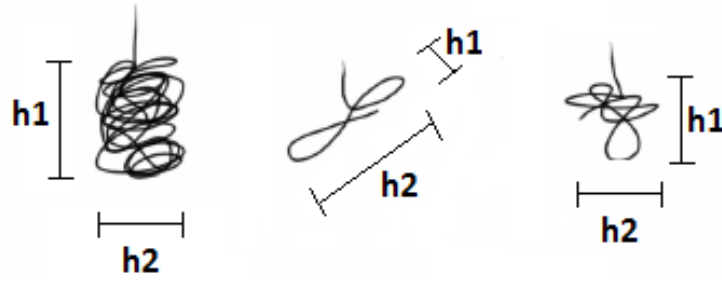


Figura 35 – Esquema de medida das dimensões h_1 e h_2 do núcleo em esboços que representam diferentes estruturas de núcleos que visualizamos.

Isto acontece por que os núcleos são estruturas densas, pois o processo de extração tende a aumentar a sua compactação e também a deslocá-lo rumo ao canal de entrada/retirada de arame. Vale ressaltar ainda que a relação entre V_n e L_n implica que estatisticamente a massa do núcleo é $\approx L_n \sim R_g^{2,27}$, onde R_g é o raio de giração do núcleo e $R_g \sim V_n^{1/3}$.

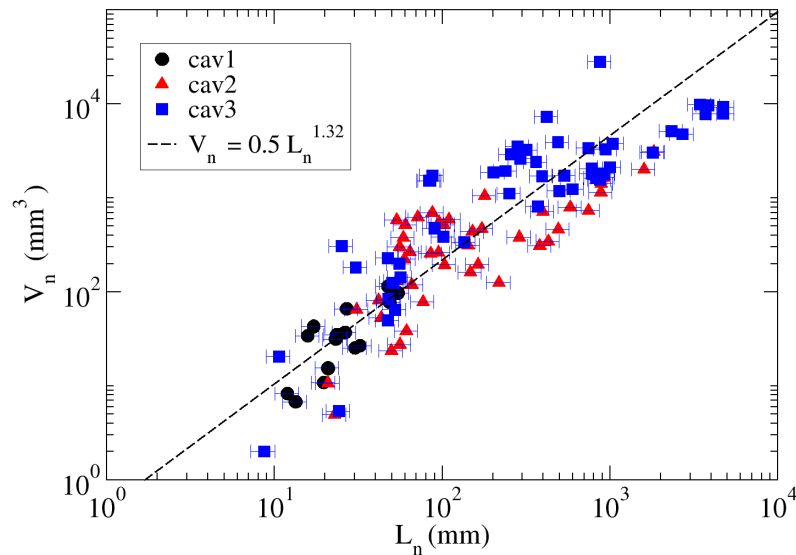


Figura 36 – O volume do núcleo V_n é marcado contra o comprimento L_n do mesmo. A linha reta mostra a relação $V_n \sim L_n^{1,32}$, encontrada no capítulo anterior e ajustada visualmente. Círculos pretos representam resultados da *cav1*, os triângulo vermelhos da *cav2* e quadrados azuis da *cav3*.

Para analisar a relação entre o comprimento do núcleo L_n e o comprimento de arame injetado L assim como com o seu volume V_n , vamos começar observando o empacotamento comparando com o processo iterativo da geração da curva de Koch que mostramos na introdução. Durante a injeção do arame, ele se curva apenas quando entra em contato com as paredes da cavidade. Assim, os primeiros pedaços introduzidos tem o tamanho próximo ao das dimensões da cavidade (a altura mais especificamente). Imagine as quatro partes do gerador da curva como esses grandes pedaços de arame. Observe na figura 37(a) que eles se espalham por todo o "volume" disponível. À medida que a densidade aumenta, fica mais difícil inserir pedaços tão longos, o arame é obrigado a se dobrar em partes menores pois o número de contatos

arame-arame está aumentando, e o material que já está dentro da cavidade se torna cada vez mais rígido. Tal processo é equivalente à formação das estruturas menores à cada iteração da curva de Koch, como em 37(b). Observe que eles ocupam regiões menores do volume da "cavidade".

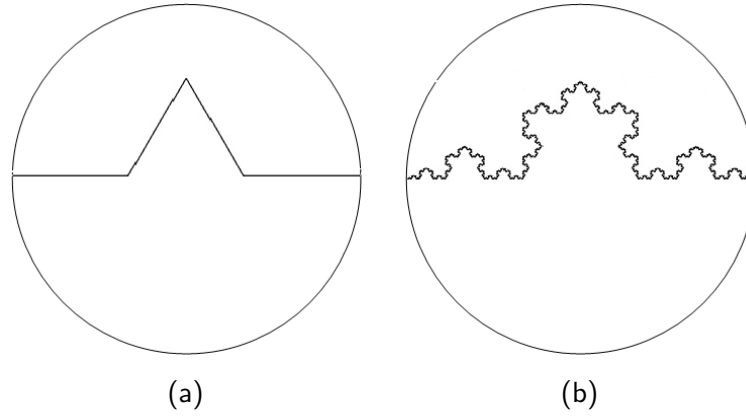


Figura 37 – Esquema da curva de Koch em um espaço limitado representando os pedaços de arame na cavidade na formação do fractal físico. As primeiras (seguintes) iterações da curva correspondem aos maiores (menores) trechos de arame injetado.

Quando começa a extração, são esses últimos pedaços formados, os pedaços pequenos de arame, ou ainda, na comparação, as estruturas formadas na última iteração, que são retirados primeiro. Podemos tirar duas conclusões dessa construção:

- as dimensões do núcleo, em média, são as mesmas da cavidade pois são determinadas pelos pedaços maiores, que são os últimos a sair.
- O núcleo irá se comportar como um fractal com a mesma dimensão fractal do material previamente empacotado. Por um lado, sabemos que um fractal real só ocorre quando as iterações tendem a infinito; por outro, aqui temos um fractal físico com um número finito de iterações. Assim, dimensão fractal do núcleo deve ser a mesma encontrada no empacotamento máximo.

Pelo exposto acima, temos que o comprimento do núcleo segue a lei de potência $L_n = k_1 V_n^{D/3} \equiv k_1 V^{\frac{1}{\alpha}}$. Da mesma forma, notamos a mesma lei para o material empacotado, $L = k_2 V^{\frac{1}{\alpha}}$. O resultado da divisão das duas equações nos leva a relação linear esperada:

$$L_n/L = k_1/k_2 \rightarrow L_n = \frac{k_1}{k_2} L. \quad (4.1)$$

Observe que o comprimento do núcleo é uma fração fixa do comprimento injetado, k_1/k_2 . Esta razão pode ser obtida por um ajuste conforme mostrado na figura 34, que nos dá $k = k_1/k_2 = 0,71$. Este resultado, $L_n = 0,71L$, indica que a maior parte do arame, em média, fica presa na cavidade quando ocorre um bloqueio. Em outras palavras, que a origem do

travamento, um nó, uma dobra acentuada ou algum tipo de defeito no arame, por exemplo, aparece relativamente tarde no processo de injeção.

Os polímeros de poli-tetrafluoretileno (PTFE) foram observados em conformações complexas com dimensões fractais entre 2,23 e 2,27, num amplo intervalo de rugosidade [62]. Este é um bom exemplo de estrutura microscópica de topologia unidimensional que apresenta uma dimensão fractal anômala. De fato, sua dimensão fractal é igual à do núcleo de arame aqui discutido assim como a do arame no limite de rigidez. Por outro lado, os processos de coagulação tendem a gerar, por diversos mecanismos, um repertório de estruturas tênues floculares bastante complexas. Um exemplo são os flocos de hidróxido de ferro obtidos pela hidrólise de soluções de FeCl_3 . Jung, Amal e Raper[63] mostraram em 1996 através de estudos de espalhamento de luz que eles possuem uma dimensão fractal de $2,25 \pm 0,05$, igual, portanto àquelas observadas nas estruturas de arame observadas nesta tese.

4.2.2 A probabilidade de travamentos

Agora passaremos para a análise da ocorrência dos bloqueios. Desde que existem n núcleos, sabemos que ocorreram n bloqueios nas N injeções para o comprimento L . Assim, estimamos a probabilidade de haver um bloqueio $P(L)$ pela razão n/N . Ao escrever a probabilidade desta forma não distinguimos bloqueios que ocorrem no começo, meio ou fim do processo. A probabilidade depende apenas de ocorrer ou não o evento. Na figura 38 são mostrados os resultados obtidos na configuração *simétrica* e na figura 39 os resultados da configuração *assimétrica*, respectivamente. Para calcular as incertezas na probabilidade supomos que a incerteza é a mesma de um evento de contagem sem correlação temporal (a ocorrência de um evento está completamente descorrelacionada da tentativa anterior), de forma que a incerteza será simplesmente $\sigma_n = \sqrt{n} \rightarrow \sigma_P = \sqrt{n}/N$.

A primeira coisa que notamos na figura 38 é que existe um limiar em L acima do qual $P(L) \neq 0$ e abaixo do qual $P(L) = 0$. Este limiar, L_0 é muito próximo de $4\pi R$, onde definimos $2R$ como a média entre o diâmetro e a altura da cavidade. Nas figuras 38 e 39, o valor de $4\pi R$ está assinalado com uma linha tracejada. O motivo dessa expressão é que $4\pi R$ equivale ao comprimento para gerar dois laços circulares de perímetro médio aproximado $2\pi R$, como no esquema mostrado na figura 38(d). Tal par de estruturas representa o requerimento mínimo para a ocorrência do travamento no processo de se retirar o fio da cavidade. A ocorrência de limiares para a formação de nós físicos em problemas envolvendo estruturas com topologia unidimensional, como cordas, já foi notado por Hickford et al.[64] e também por Raymer e Smith[39]. No trabalho de Eftekhari e Hunn[59] é observado o surgimento frequente de nós no cordão umbilical de chimpanzés, que são relativamente maiores do que o cordão umbilical de humanos. Esse fato sugere um tamanho mínimo característico para este fenômeno.

Ademais, como deveria se esperar, a probabilidade de ocorrer um bloqueio é crescente em quase todos os experimentos, apesar de algumas flutuações. Contudo, nas cavidades

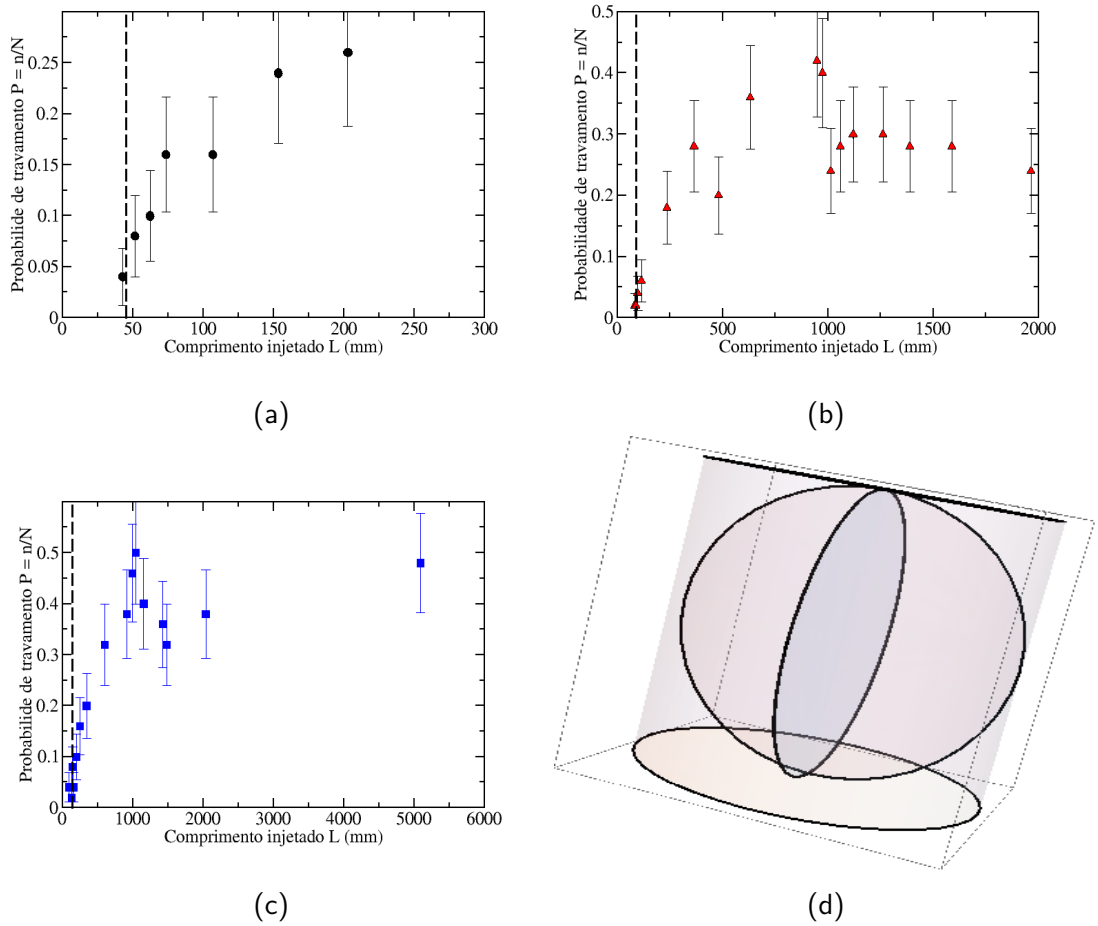


Figura 38 – Resultado da ocorrência de bloqueios nas cavidades simétricas (a) *cav1* (círculos pretos), (b) *cav2* (triângulos vermelhos) e (c) *cav3* (quadrados azuis). Cada ponto do gráfico representa a realização de $N = 50$ reproduções do experimento nos quais n travamentos ocorreram. A linha tracejada mostra o limiar de $4\pi R$ para o qual os travamentos começam a ocorrer. Na figura (d) esquematizamos os dois laços de perímetro $2\pi R$ cuja formação é necessária para este fenômeno.

simétricas *cav2* e *cav3*, $P(L)$ possui um máximo seguido de uma aparente queda brusca, sem sequer voltar a atingir o mesmo máximo na cavidade *cav2* (Na *cav3*, P volta a se aproximar do máximo). Por que esse fenômeno não ocorre nas cavidades com geometria assimétrica, como mostrado na figura 39, a seguir?

Notamos que a probabilidade de ocorrer um bloqueio se mantém baixa durante um longo intervalo de comprimentos. Por isso, supomos ser característico do fenômeno e não resultado de interferência humana. Além disso, todas as cavidades assimétricas possuem taxa de aspecto (a razão entre o diâmetro e a altura da cavidade) menor do que 0,2, ou seja, estão na região dominada pela *CPO*, descrita na seção 3.2.2. Ao calcular a fração de empacotamento do comprimento máximo que foi inserido nelas iremos obter, aproximadamente, valores menores do que 0,1 (a maior obtida foi cerca de 0,08), ou seja, estão abaixo do limite onde ocorre o congestionamento para esta configuração, segundo a figura 31. Já as cavidades simétricas

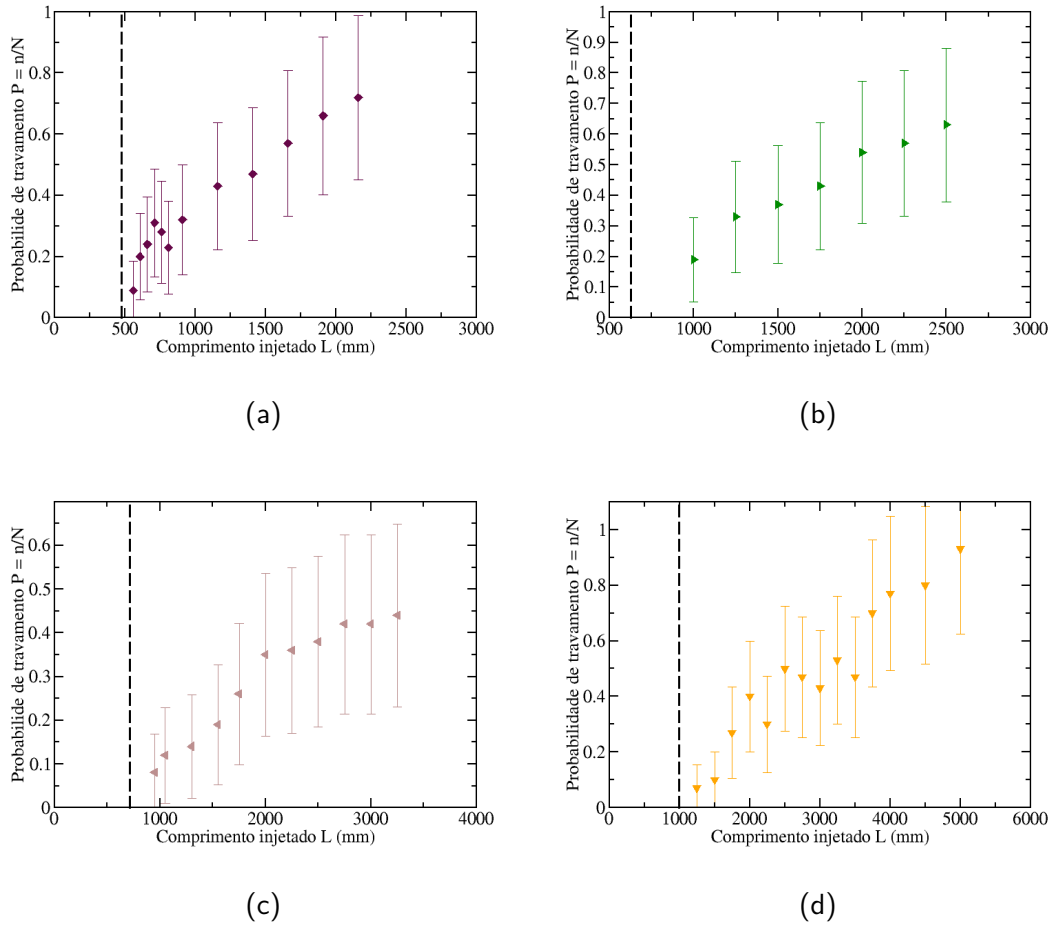


Figura 39 – Probabilidade de travamentos em (a) *cav4*, (b) *cav5*, (c) *cav6* e (d) *cav7*. Todas as cavidades possuem perfil assimétrico. A linha tracejada indica o valor $L = 4\pi R$ para iniciar o processo de travamento. Experimentos realizados por V. P. Brito.

estão na região de transição na ordem entre a *CPO* e a *CD* e, independente da configuração na qual esteja acomodado o arame, devemos observar que as barras de erro na fração de empacotamento (razão entre o volume injetado e o volume da cavidade) são muito grandes, levando a crer que o arame nessas cavidades possa estar próximo do limite de empacotamento rígido, e consequentemente, mais rígido. Tal qual um pedaço de arame dobrado passando entre dois apertados, a estrutura rígida de arame facilita que algumas dobras sejam desfeitas, diminuindo o número de travamentos. Os experimentos nas cavidades *assimétricas* foram realizados longe do regime de congestionamento e, por isso, não observamos este fenômeno.

Uma vez que a redução na probabilidade ocorre apenas em duas cavidades, não vamos nos arriscar a tentar um modelo matemático para essa região. Já a região antes do congestionamento pode ser analisada em ambos os tipos de cavidade, independente da configuração do arame já que ambas possuem a mesma dimensão fractal.

4.2.3 Modelo de travamento baseado em caminhantes aleatórios

Em uma cavidade bidimensional podemos visualizar o arame sendo injetado através das placas da cavidade. Contudo, o mesmo não ocorre em cavidades tridimensionais e não temos acesso à dinâmica do arame em nossos experimentos. No procedimento experimental descrito na seção 3.1.2 relatamos que o arame é introduzido em trechos de tamanho $\approx 1\text{cm}$. Assim, esperamos que ele se desloque pela cavidade chocando-se com as paredes e com ele mesmo e se dobrando. Assim, é tentador fazer a hipótese de que o arame execute algum tipo de caminhada aleatória auto excludente onde cada pedaço de arame injetado equivale a um passo dado pelo caminhante. Tal caminhada possui dimensão fractal $D = 2,27$, discutida no capítulo anterior. Note que a dimensão fractal caracteriza o sistema quando o arame está próximo do limite de rigidez. Isso indica que a analogia proposta aqui deve ser válida no limite assintótico de grandes comprimentos.

Supomos que no m -ésimo passo do caminhante (m -ésimo pedaço de arame injetado) existe uma probabilidade $p(m)$ de haver um contato com outra parte do arame. Esperamos que $p(m)$ seja proporcional da quantidade de arame que já está na cavidade, ou seja, do comprimento $L(m)$ previamente injetado. Se a cavidade fosse infinitamente grande, $p(m)$ iria a zero, pois o arame se deslocaria aproximadamente em linha reta e nunca se tocaria. Assim, $p(m)$ depende não de $L(m)$, mas da fração de empacotamento $\rho \sim L(m)/V$. Para obtermos a probabilidade total de haver um contato fio-fio depois de injetarmos o comprimento $L(M)$ somamos $p(m)$ para todos os M pedaços de arame. Isso nos leva à equação

$$P(L) \sim \frac{L^2}{V} \sim \frac{L^2}{L^\alpha} \sim L^{2-1,32} \sim L^{0,68}, \quad (4.2)$$

onde usamos o resultado do capítulo anterior $V \sim L^\alpha \sim L^{1,32}$. A simulação de um caminhante em uma região limitada para comparação com a equação 4.2 é uma forma de estudar a analogia. Por outro lado, presumimos que um travamento ocorre devido aos contatos entre partes do fio. O arame deve realizar novos contatos e também desfazer alguns ao se mover pela cavidade durante à injeção e extração. Assim, a probabilidade de ocorrer o bloqueio na extração é proporcional à $P(L)$. Na figura 40 comparamos $P(L)$ com resultados experimentais nas cavidades *cav1*, *cav2*, *cav3*, *cav4*, *cav5*, *cav6* e *cav7*, respectivamente, onde vemos que o comportamento parece ser bem descrito pelo modelo proposto. Por outro lado, o expoente da lei de potência na equação 4.2 não depende do material do qual é feito o arame, o que pode ser verificado realizando experimentos com arames de materiais diferentes. Tais experimentos foram executados nas cavidades *cav4*, *cav5*, *cav6* e *cav7* nas quais foram usados arames de cobre e náilon e seguindo o procedimento descrito para cavidades assimétricas na seção 4.1. Na figura 41 mostramos os resultados com arames de cobre e, em 42, com fios de náilon.

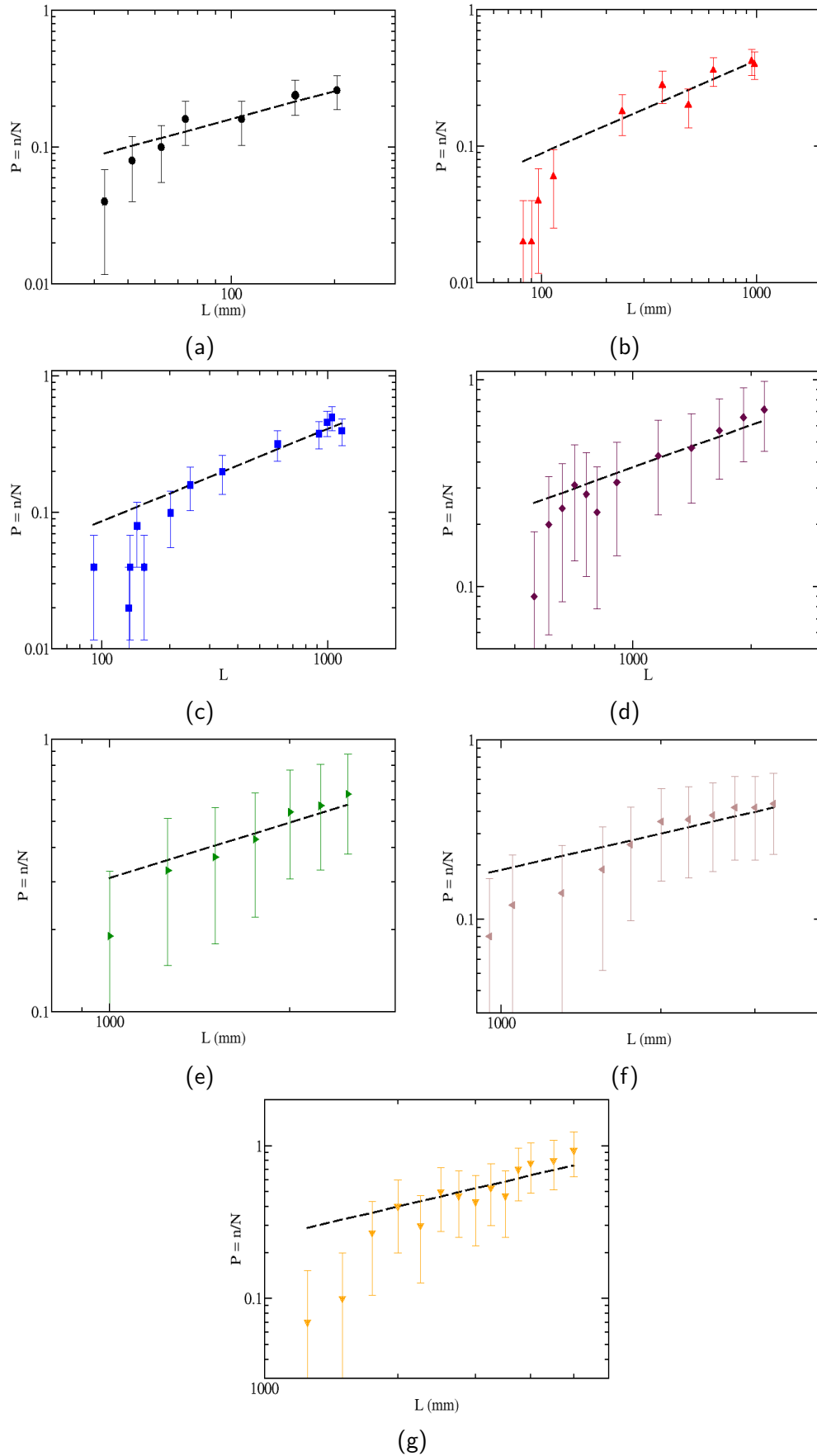


Figura 40 – Probabilidade de travamentos nas cavidades *simétricas* (a) *cav1*, (b) *cav2*, (c) *cav3*. Resultados de V. P. Brito são mostrados em (d) *cav4*, (e) *cav5*, (f) *cav6* e (g) *cav7*. A linha tracejada nas figuras foi obtida pela relação $P \sim L^{0.68}$. Em todos os casos os experimentos foram realizados com arame galvanizado.

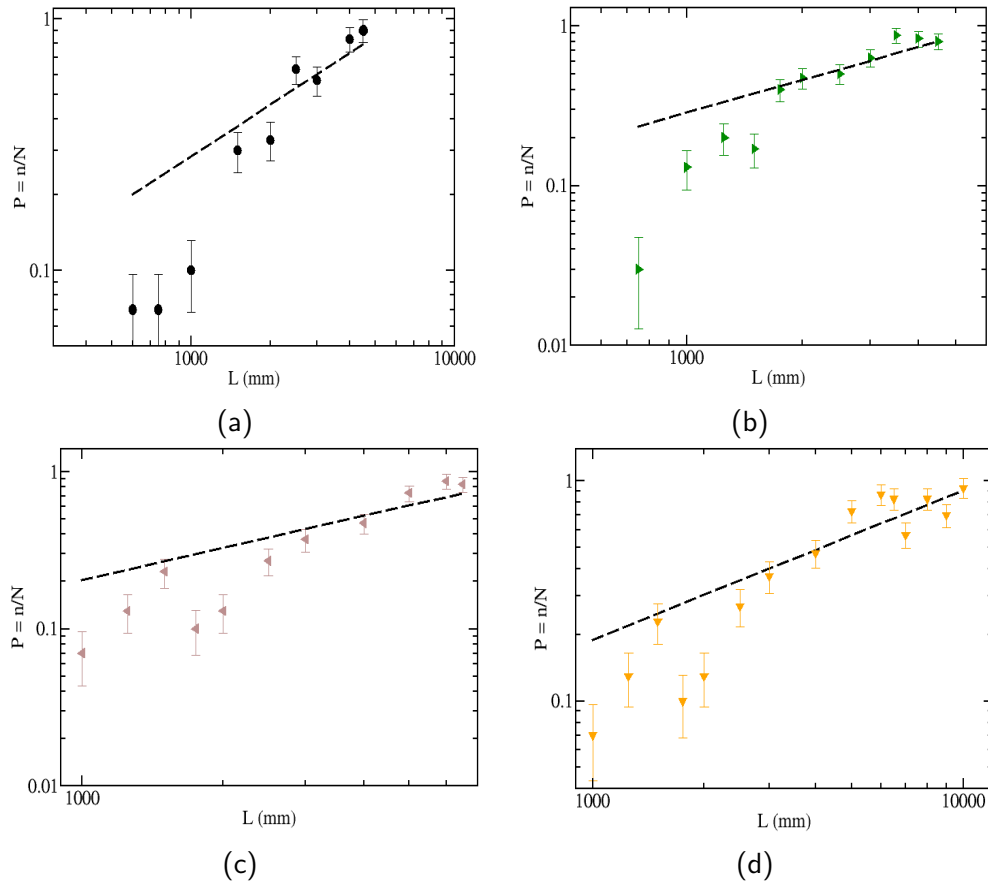


Figura 41 – Probabilidade de travamentos nas cavidades (a) *cav4*, (b) *cav5*, (c) *cav6* e (d) *cav7* para arames de cobre. A linha tracejada nas figuras foi obtida pela relação $P \sim L^{0.68}$. (Dados experimentais de V. P. Brito).

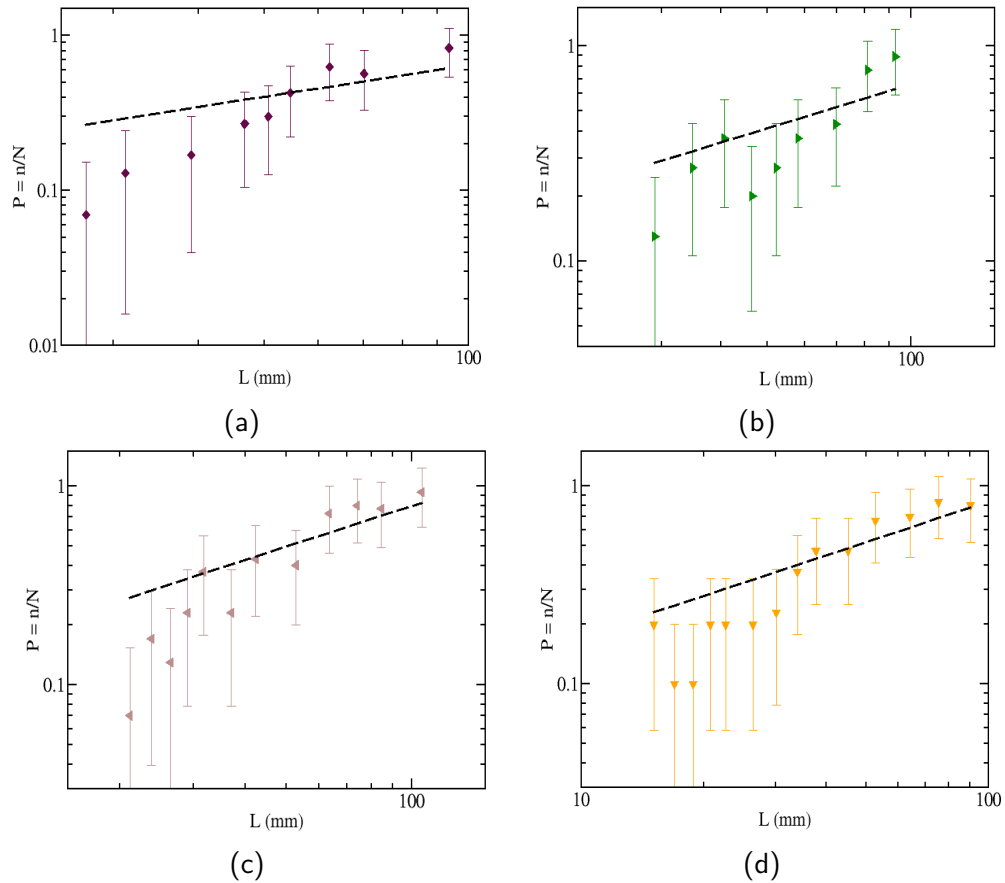


Figura 42 – Probabilidade de travamentos nas cavidades (a) *cav4*, (b) *cav5*, (c) *cav6* e (d) *cav7* em experimentos com fios de náilon mostrando que a lei de potência permanece um modelo razoável mesmo com arames mais maleáveis. A linha tracejada nas figuras foi obtida pela relação $P \sim L^{0.68}$. (Dados experimentais de V. P. Brito).

O conjunto de resultados mostrados nas figuras 40, 41 e 42 sugere que a modelagem do arame como um caminhante e a hipótese de que a probabilidade de travamentos é dependente da probabilidade de haver contatos no arame é bastante promissora. Nos três gráficos onde os pontos parecem mais distantes do modelo teórico, as imagens em 41(a), 41(b) e 41(d), o coeficiente de correlação está acima de 0,9. Em todos os outros resultados o coeficiente é acima de 0,95.

4.3 Conclusão

A extração de um pedaço de arame de uma cavidade cilíndrica pode ser impedida pela ocorrência de um bloqueio. Neste capítulo nós estudamos este fenômeno, que é exclusivo de cavidades tridimensionais. Descrevemos o núcleo, o comprimento residual que fica bloqueado na cavidade e mostramos que este forma uma estrutura fractal com a mesma dimensão fractal $D_n = 2,27$ do arame no empacotamento rígido, assunto do capítulo anterior. Também vimos que o comprimento topológico do núcleo é proporcional à quantidade de arame injetada na cavidade. Discutimos a probabilidade de travamentos à luz de um modelo similar a um

caminhante aleatório, o que nos permite obter a forma da dependência da probabilidade $P(L)$ com L no limite de grandes tamanhos $P(L) \sim L^{0.68}$. O modelo indica uma aproximação para o comprimento mínimo em que ocorre o surgimento de travamentos, que também pode ser entendido pela formação de dois laços de comprimento $2\pi R$, onde R é o raio médio da cavidade.

5 O MODELO HIERÁRQUICO APLICADO AO DESEMPACOTAMENTO

“As invenções são, sobretudo, o resultado de um trabalho teimoso.”

Santos Dumont

No capítulo 2 foram discutidos diversos aspectos do empacotamento bidimensional e tridimensional de arames. Dada a vasta literatura que existe na área, com diversos modelos aplicados ao entendimento dos fenômenos observados, é natural a tentativa, por vezes frustrante, de encontrar uma descrição que possa ser aplicada aos fenômenos bidimensionais e tridimensionais. Neste momento, ressaltamos que hipóteses de campo médio, como a discutida na seção 3.2.3, têm sido utilizadas com sucesso para obter relações de escala como a dimensão fractal [41, 20] e explicar mudanças morfológicas na estrutura de arame [34, 38], tanto no caso bidimensional quanto tridimensional. Por outro lado, o modelo hierárquico surge da descrição do arame empacotado como uma rede de laços e tem sido utilizado nos últimos anos para caracterizar experimentos bidimensionais [30, 32]. Este capítulo se dedica à utilização deste modelo ao empacotamento tridimensional, aos problemas que surgem nesta descrição e sua aplicação à ocorrência de travamentos discutida no capítulo 4. Assim, discutiremos o modelo proposto vis-à-vis os resultados experimentais descritos no capítulo anterior.

5.1 Empacotamento e desempacotamento: trechos e dobras

O arame injetado na cavidade se desloca até que encontre uma parede. Nesse momento ele é obrigado a se dobrar para que o processo continue. Então, com o avançar da injeção, o arame irá encontrar uma outra parede e terá de se dobrar novamente. Em um estágio bem avançado do empacotamento partes da estrutura de arame se tornará rígidas e novos pedaços de arame injetados serão forçados a se dobrar ao encontrar alguma parte dessa estrutura. Na figura 43(a) temos uma foto de um pedaço de arame que foi dobrado manualmente e desdobrado em seguida, essa deve ser uma imagem aproximada do arame dentro da cavidade. Uma boa aproximação é considerar, então, que o arame pode ser dividido em *trechos* retilíneos ou pedaços de curvatura pequena, quase retilíneos, separados por *dobras* (regiões de grande curvatura), como esquematizado na figura 43(b). Dessa forma, teremos N trechos e $N - 1$ dobras.

Mesmo considerando as dobras entre os trechos, a curvatura muda de uma para outra. É possível que dobras mais suaves desfaçam-se durante o empacotamento ou novas dobras

surjam no arame já empacotado, quando um trecho "empurra" outro. Essa dinâmica de criação e destruição de dobras será desconsiderada e supomos que, uma vez inserido um trecho de arame, a configuração se mantém estática.

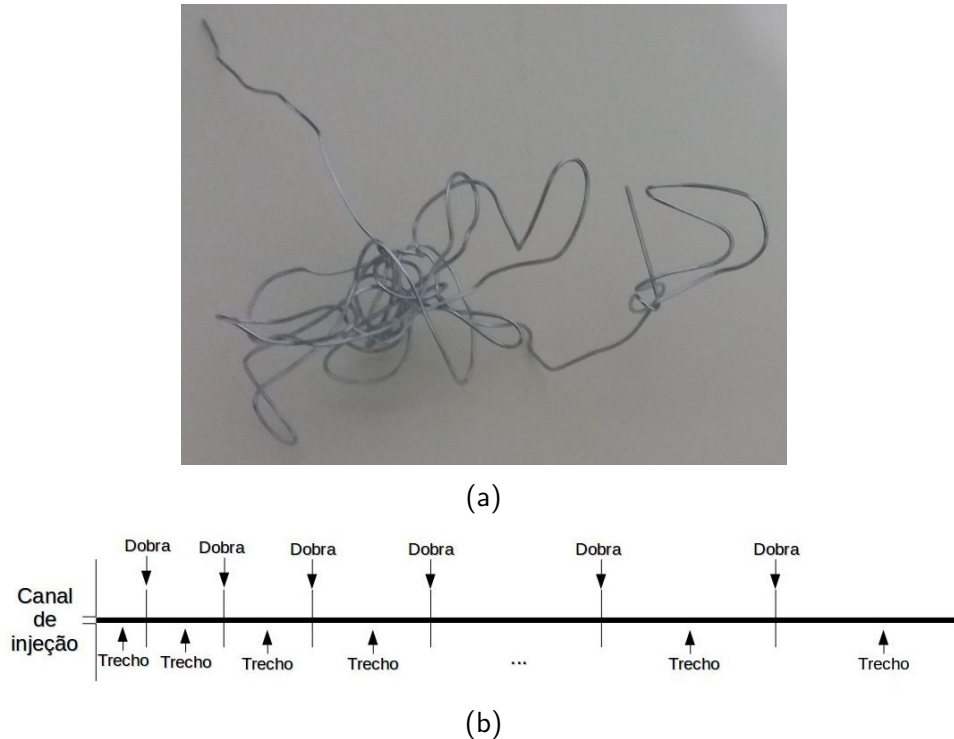


Figura 43 – (a) Fotografia de um pedaço de arame galvanizado empacotado manualmente e parcialmente desamassado, mostrando diversas regiões de grande curvatura e trechos aproximadamente retilíneos. Em (b) é esquematizada a aproximação do arame empacotado por uma sequência de trechos e dobras.

Nosso modelo se baseia na conjectura de que os primeiros trechos que surgem na cavidade possuem maior tamanho, pois quando a cavidade vai ficando mais preenchida e o espaço disponível é menor, o arame desloca-se cada vez menos antes de ser obrigado a se dobrar, ou seja, os trechos vão ficando menores à medida que a injeção prossegue. Naturalmente, o arame pode escorregar entre os pedaços previamente injetados e dar origem a um trecho grande mesmo em uma parte avançada de um experimento de forma que a nossa conjectura é apenas uma aproximação. Com respeito ao desempacotamento, continuando com a ideia proposta, o experimento procede no sentido inverso: os primeiros trechos a sair da cavidade são os últimos trechos que foram injetados, como esquematizado na figura 44. Ou seja, o tamanho dos trechos de arame que saem da cavidade são cada vez maiores.

No modelo hierárquico, discutido na seção 2.3.1, o comprimento dos laços obedece uma progressão geométrica [30, 32]. Aqui supomos mesma relação de tamanho entre os trechos de arame. Seja l_1 o comprimento do menor trecho, o primeiro a sair. Então, o comprimento de n -ésimo é, simplesmente $l_n = q^{n-1} \cdot l_1$, onde a razão $q > 1$. O comprimento total do arame

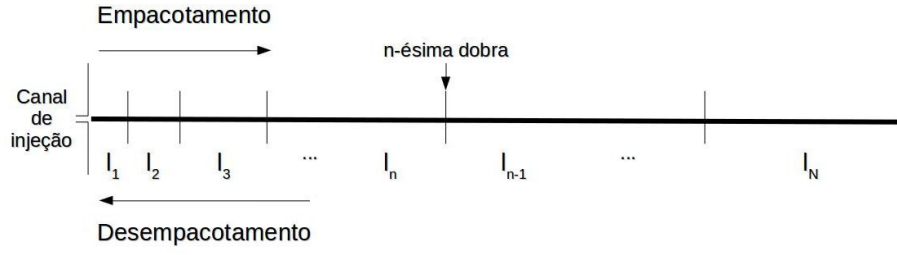


Figura 44 – Sentido dos processos de empacotamento e desapacotamento. A relação entre o tamanho dos trechos é a "inversa" entre um processo e outro.

extraído é dado pela soma do comprimento de todos os n trechos retirado da cavidade,

$$L_n = \sum_{v=1}^n l_v = \frac{l_1 \cdot (q^n - 1)}{q - 1}, \quad (5.1)$$

sendo que o limite superior na equação acima pode ser mudado para o número total (N) de trechos na cavidade, obtendo o comprimento injetado $L = L_N$. A diferença fundamental entre o modelo que estamos propondo e aquele apresentado na seção 2.3.1 para o empacotamento bidimensional é que não estamos considerando que existe mais de um trecho de mesmo tamanho l_n . Dessa forma, o número de iterações I na equação 2.9 é igual ao número de trechos de arame n . Nossa descrição do arame empacotado como um fractal físico na seção 4.2.1 assim como nossa analogia com a curva de Koch sugerem a utilização da expressão 2.13. Contudo, como uma primeira prospecção na utilização deste modelo, preferimos simplificar nossa descrição. Notamos que, mesmo considerando que existe apenas um trecho de cada tamanho obtemos um bom ajuste para a probabilidade de travamentos. Com esta observação, prosseguimos invertendo a equação 5.1, de forma a obter a relação $n = n(L)$, dada por

$$n = \left(\frac{1}{\log(q)} \right) \log \left(\frac{(q - 1) \cdot L_n + l_1}{l_1} \right), \quad (5.2)$$

ou seja, o número de trechos na cavidade cresce logaritmicamente com o comprimento injetado. De forma semelhante, Gomes[57] observou um crescimento logarítmico no comprimento máximo injetado. Em seu experimento, um pedaço de arame foi injetado em cavidades bidimensionais até atingir o empacotamento máximo e, após permitir ao sistema relaxar, notou-se possível inserir um comprimento maior. Na equação acima é possível fazer $n \rightarrow N$ obtendo a relação entre o número total de dobras e o comprimento total injetado L_N .

Neste momento faremos a seguinte aproximação: a primeira dobra que surge no arame ocorre logo após este encontrar a superfície interna da cavidade, ou seja, quando o arame injetado tem comprimento de $L = H$, onde H é a altura da cavidade. Supomos que esta primeira dobra não se desfaz, ou seja, o último trecho do desapacotamento tem tamanho $l_N = H$.

Assim,

$$l_N = H = l_1 * q^{N-1}, \quad (5.3)$$

que, ao ser substituída em 5.1 para $n = N$, se torna

$$L = \frac{l_1 * q^N - l_1}{q - 1} \rightarrow (q - 1) \cdot L = H \cdot q - l_1 \rightarrow l_1 = H \cdot q + (1 - q) \cdot L, \quad (5.4)$$

uma relação entre o comprimento total injetado, a altura da cavidade e o último trecho de arame a entrar na cavidade. Observe que, no limite de alta densidade de empacotamento, esperamos que o comprimento do último trecho a entrar na cavidade l_1 dependa de propriedades elásticas do arame apenas. Apesar disso, a maioria dos experimentos de extração de arames realizados não atingiu esse limite, assim, l_1 mudará de acordo com o comprimento total injetado. A equação 5.4 permite eliminar o "parâmetro" l_1 em 5.2 de forma que

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{\log(q)} \log \left(\frac{(q - 1) \cdot L_n + H \cdot q + (1 - q) \cdot L}{H \cdot q + (1 - q) \cdot L} \right) = \\ &= \frac{1}{\log(q)} \log \left(\frac{H \cdot q + (1 - q) \cdot (L - L_n)}{H \cdot q + (1 - q) \cdot L} \right) = \\ &= \frac{1}{\log(q)} \log \left(\frac{1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L-L_n}{H}}{1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L}{H}} \right), \end{aligned} \quad (5.5)$$

e, fazendo $n \rightarrow N$ e $L_n \rightarrow L_N \equiv L$, temos

$$N = \frac{1}{\log(q)} \log \left(\frac{1}{1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L}{H}} \right) = \frac{-1}{\log(q)} \log \left(1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L}{H} \right), \quad (5.6)$$

equação equivalente à equação 5.2 com a substituição do comprimento l_1 pela altura H . Uma das vantagens de utilizar a equação acima é o fato de que para acessar o comprimento l_1 do último trecho, é necessário abrir a cavidade e realizar a medição. Por outro lado, a altura da cavidade é escolhida antes do experimento. Na próxima seção usaremos a equação 5.6 além de conceitos simples de estatística para descrever a probabilidade de travamentos encontrada na extração do arame.

5.2 Desempacotamento: dobras e eventos de bloqueio

Vamos observar o processo do desempacotamento a partir da figura 44. Em nosso modelo, os trechos são regiões lisas e, portanto, devem sair rapidamente ao serem puxadas através do canal de injeção. Por outro lado, as dobras concentram energia elástica e podem se curvar ou enganchar em outros pedaços do arame durante o processo. Logo, o bloqueio da extração é um evento dependente da dinâmica das dobras no decorrer do experimento.

A v -ésima dobra terá uma probabilidade p_v de travar e esperamos que, de forma geral, p_v dependa do raio de curvatura da dobra e da concentração de arame. Por um lado, a curvatura da dobra é determinada por propriedades elásticas do arame e pelo estágio do empacotamento (ou quantidade de material injetado) [44, 29]. As primeiras dobras a serem formadas são mais suaves, desde que se formam predominantemente sob a restrição do espaço finito da cavidade. À medida que o processo segue, o espaço disponível para as novas dobras se formarem diminui e as curvas entre os trechos são mais acentuadas. As dobras mais suaves têm maior facilidade de se desfazer e atravessar o canal de injeção, mas, isso não ocorre com as dobras de grande curvatura. Assim, mantendo o material do arame fixo, p_v deve diminuir da esquerda para direita na figura 44.

Por outro lado, uma dobra de grande curvatura, por ser mais fechada, tem menor probabilidade de enganchar no resto do arame enquanto as dobras com menor curvatura prendem-se mais facilmente. Assim, p_v deve aumentar no sentido estabelecido anteriormente. Supomos que as duas contribuições se cancelam de forma que $p_v \equiv p$ é constante. Logo, a probabilidade de que o travamento ocorra na v -ésima dobra deve ser a probabilidade de todas as $v - 1$ dobras anteriores não travem e a v trave, ou seja,

$$P_v = (1 - p)^{v-1} \cdot p, \quad (5.7)$$

e a probabilidade P de que o ocorra um travamento é a soma de todos os P_v ,

$$\begin{aligned} P &= \sum_{v=1}^{N-1} P_v = \sum_{v=1}^{N-1} p \cdot (1 - p)^{v-1} = 1 - \frac{(1 - p)^N}{1 - p} \\ &= 1 - (1 - p)^{N-1}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde lembramos que existem $N - 1$ dobras no total. Usando a relação entre N e L dada na equação 5.6, obtemos a equação que relaciona P e o comprimento injetado L ,

$$\begin{aligned} P &= 1 - (1 - p)^{\frac{-1}{\log(q)} \log(1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L}{H}) - 1} = 1 - \frac{1}{1 - p} \cdot e^{-\frac{\log(1-p)}{\log(q)} \log[1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L}{H}]} = \\ &= 1 - \frac{1}{1 - p} \cdot \left[1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L}{H} \right]^{-\frac{\log(1-p)}{\log(q)}}, \end{aligned} \quad (5.9)$$

onde p e q dependem do tipo de arame. As figuras 45, 46 e 47 mostram os ajustes dos resultados experimentais expostos na seção 4.2.2 pela função dada por 5.9. Na primeira são reproduzidos os dados obtidos com arame galvanizado nas cavidades (a)cav1, (b)cav2, (c)cav3, (d)cav4, (e)cav5, (f)cav6 e (g)cav7. Nas figuras 46 e 47 vemos os resultados obtidos com arame de cobre e fio de náilon nas cavidades (a)cav4, (b)cav5, (c)cav6 e (d)cav7, respectivamente. O ajuste nos gráficos dos experimentos 2 e 3 na figura 45 não contempla a região onde a probabilidade de travamentos tem uma queda brusca e, portanto, essa região não é mostrada na figura. Ao ajustar a equação 5.9 aos resultados experimentais notamos que existe uma relação entre a probabilidade de travamento p e a taxa de crescimento q dada por $q = 1 + p$. Assim, q é o único parâmetro a ser ajustado em nosso modelo.

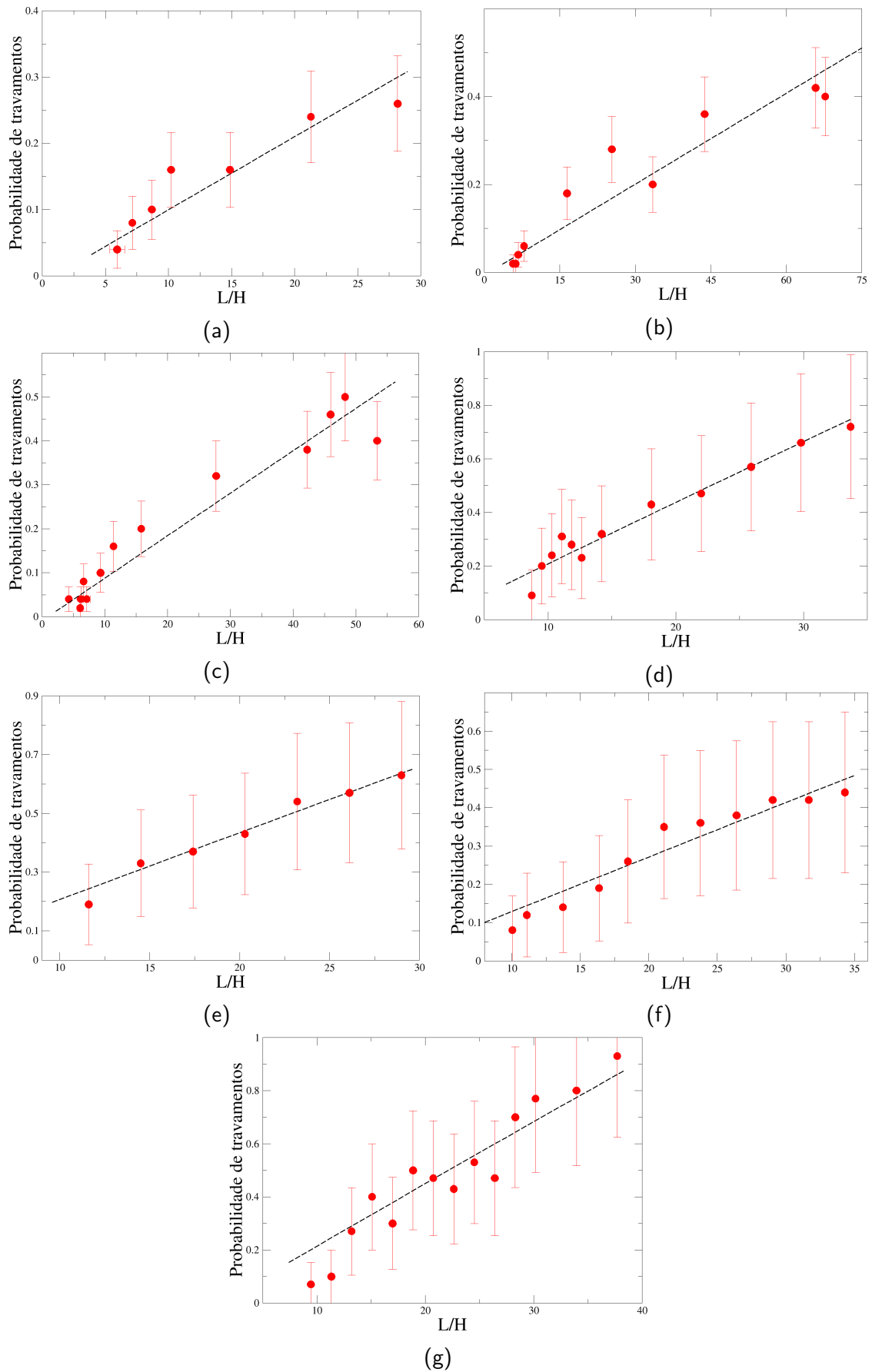


Figura 45 – Probabilidade experimental de travamentos P em experimentos com arame galvanizado em função comprimento normalizado L/H para a cavidade 1 (a), 2 (b), 3 (c), 4 (d), 5 (e), 6 (f) e 7 (g). As linhas tracejadas são o gráfico da equação 5.9 com os valores de p indicados na tabela 4.

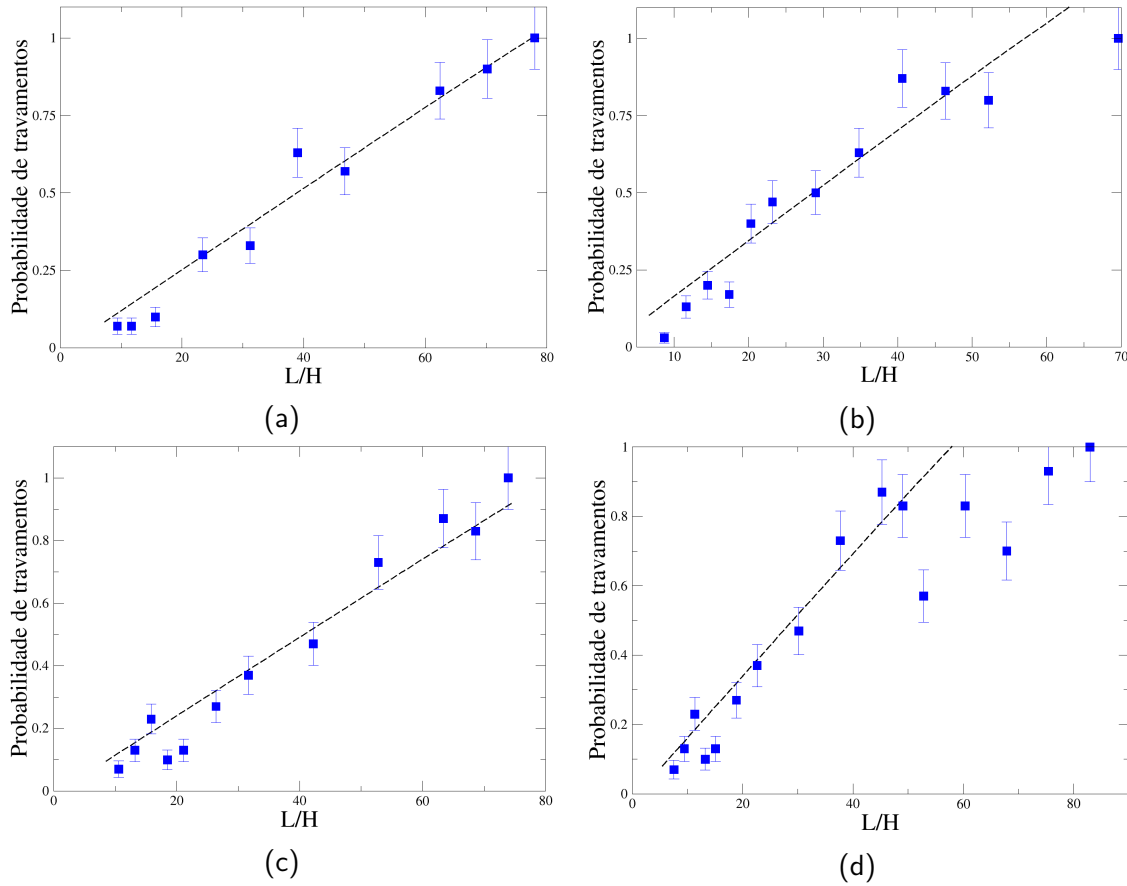


Figura 46 – Probabilidade de travamentos obtidas com fio de cobre nas cavidades 4 (a), 5 (b), 6 (c) e (7). A equação 5.9, ajustada com os valores de p da tabela 4, é mostrada pela linha tracejada nos gráficos. Experimentos realizados por Valdemiro P. Brito.

Os valores de q são mostrados na tabela 4. As taxas de crescimento q encontradas são bem menores do que as apresentadas em trabalhos anteriores para experimentos em cavidades bidimensionais, como 1,36 [30] e 4,22 e 6,30 [32]. Essa diferença pode ser atribuída a dois fenômenos: (I) a cavidade tridimensional permite uma gama muito maior de tamanhos dos trechos em relação aos laços, que podem diminuir a taxas bem menores; (II) o modelo não incorpora degenerescências nos tamanhos l_n . Contudo, a curvatura da menor dobra depende apenas do material do arame, sendo assim, deve ser independente da geometria da cavidade. Notamos que os valores de p são bastante baixos, o maior é, aproximadamente, 2,3%. Tais valores resultam em uma probabilidade pequena de haver um travamento. De fato, quando consideramos todos os experimentos realizados nas cavidades 1, 2 e 3, a quantidade de travamentos é da ordem de apenas 34%. Sob a perspectiva do surgimento de nós em derivações cirúrgicas, supondo que o experimento e modelo descrevam a física do problema, também existe uma baixa ocorrência do fenômeno quando se compara com a quantidade de procedimentos realizados, fato mencionado por Eftekhari e Hunn[59].

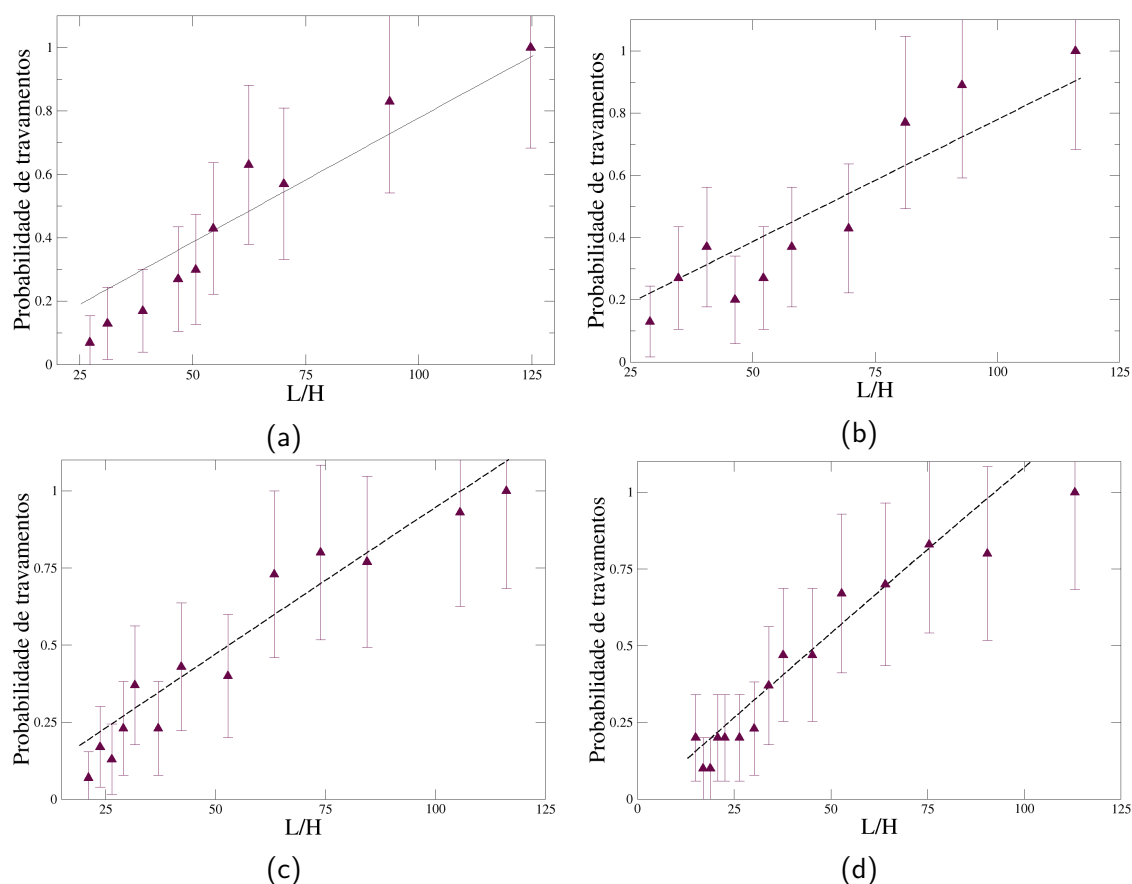


Figura 47 – Probabilidade de travamentos obtida nas cavidades 4 (a), 5 (b), 6 (c) e (7) em experimentos com fio de nylon. As linhas tracejadas são o gráfico da equação 5.9 com os valores de p indicados na tabela 4. Experimentos realizados por Valdemiro P. Brito.

Material	Experimento	q	$p = q - 1$	$\log(1 - p)/\log(q)$
Arame Galvanizado	Cavidade 1	1,0109314	0,0109314	-1,01099
	Cavidade 2	1,00686524	0,00686524	-1,00689
	Cavidade 3	1,00959441	0,00959441	-1,00964
	Cavidade 4	1,0225963	0,0225963	-1,02286
	Cavidade 5	1,0224347	0,0224347	-1,02269
	Cavidade 6	1,0140877	0,0140877	-1,01419
	Cavidade 7	1,023245	0,023245	-1,02352
Cobre	Cavidade 4	1,01306	0,01306	-1,01314
	Cavidade 5	1,01782	0,01782	-1,01798
	Cavidade 6	1,01246	0,01246	-1,01254
	Cavidade 7	1,01756	0,01756	-1,01772
Nylon	Cavidade 4	1,00783	0,00783	-1,00786
	Cavidade 5	1,00784	0,00784	-1,00787
	Cavidade 6	1,00954	0,00954	-1,00958
	Cavidade 7	1,01094	0,01094	-1,011

Tabela 4 – Constante q do modelo de crescimento de trechos do arame por uma progressão geométrica obtidas ajustando a probabilidade de travamentos e usando $q = 1 + p$.

É notável também que, até a primeira casa decimal, o expoente $\log(1-p)/\log(q) \approx -1,0$, ou, fazendo a média dos valores da tabela 4, obtemos $-1,014 \pm 0,005$, onde a barra de erro é tomada como a média do intervalo entre os valores extremos. Aproximando o valor $-1,0$ para o expoente segue que $1-p = \frac{1}{q}$ e,

$$P = 1 - q \left[\left(1 + (1-q) \cdot \frac{L}{H} \right) \right] = (1-q) \left[1 - q \cdot \frac{L}{H} \right], \quad (5.10)$$

de forma que as curvas nas figuras 45, 46 e 47 estão visivelmente próximas de uma relação linear.

5.3 A velocidade de extração e a relação entre travamentos e nós

Na contramão do que costuma ser reportado na literatura de "arames empacotados" em que a velocidade de injeção é assumida ser aproximadamente constante vamos supor que, em nosso experimento, a velocidade com que o arame é puxado muda à medida que o arame sai. Apesar de não muito intuitiva essa assunção é bastante razoável em virtude da modelagem que estamos fazendo até aqui. De fato, supomos que o arame é feito de trechos de tamanhos diferentes. Entre cada trecho existe uma dobra, uma região de concentração de energia elástica e que dificulta a extração. Imaginemos agora que alguém está puxando esse arame. Ao encontrar uma dobra é preciso aumentar a força que exerce no fio enquanto tenta retirá-lo. Quando a dobra se desfaz, é sentido um solavanco que faz puxar mais rápido o trecho seguinte até que chegue em outra dobra. Assim, devido aos solavancos na extração, o tempo necessário para a extração dos trechos é constante t , independente do tamanho do trecho. Essa consideração implica que o tempo total t_n até que a n -ésima dobra trave é dado simplesmente pelo produto de t pelo número n de trechos, $t_n = n \cdot t$, que pode ser escrito para o número de dobras,

$$n = \frac{t_n}{t}. \quad (5.11)$$

Substituindo a expressão 5.11 na equação 5.7 obtemos

$$\begin{aligned} P_n &= p \cdot (1-p)^{\frac{t_n}{t}-1} = \frac{p}{1-p} \cdot (1-p)^{\frac{t_n}{t}} = \\ &= \frac{p}{1-p} \cdot e^{\frac{t_n \cdot \log(1-p)}{t}} = \\ &= \frac{p}{1-p} \cdot e^{-\frac{\frac{t_n}{t}}{\log(1-p)}} = \\ &\equiv \frac{p}{1-p} \cdot e^{-\frac{t_n}{\tau}}, \end{aligned} \quad (5.12)$$

onde a constante τ é positiva já que $\log(1 - p) < 0$. A equação acima relaciona a probabilidade de um travamento ocorrer na n -ésima dobra com o tempo até que esse travamento ocorra. Ou seja, a expressão 5.12 dá a distribuição dos tempos de travamentos para cada dobra n . Se supormos que o travamento ocorre por um defeito na n -ésima dobra, como um nó, por exemplo, e que esse defeito pode andar pelo arame, a distribuição acima determina o tempo para que esse defeito se desfaça ao percorrer a estrutura, evitando que ocorra o travamento. Não realizamos medidas experimentais da distribuição de tempo, mas é possível realizar uma série de experimentos em uma cavidade inserindo um comprimento de arame determinado. Ao obter um travamento durante a extração, relacionamos o comprimento extraído, o comprimento injetado e as dimensões da cavidade através da equação 5.5 para obter a dobra em que ocorreu o travamento. Medindo o tempo de cada realização teremos o resultado experimental para comparar com a equação 5.12. Apesar de ser de fácil realização o experimento demanda bastante tempo devido à baixa probabilidade de ocorrer travamentos.

Na literatura de nós físicos em cordas e cadeias de contas encontramos expressão semelhante. De fato, Ben-Naim et al.[40] obtiveram que o comportamento limite para a distribuição do tempo de sobrevivência de um nó em uma cadeia de contas agitada sobre uma placa vibrante diminui exponencialmente. Com essas observações vemos que os eventos de travamentos que ocorrem no desempacotamento de arames podem ser entendidos como devido ao surgimento de nós na região das dobras. Dado que o tempo para que o nó na n -ésima dobra evanesça é maior do que t_n , ele não consegue e a extração trava.

5.4 Distribuição de tamanho do núcleo

A equação 5.7 dá a probabilidade de que o travamento ocorra na v -ésima dobra, mas, ela pode ser reinterpretada em termos do comprimento que é extraído da cavidade. De fato, como o travamento ocorre nesta dobra esperamos que todo o comprimento antes dela saia. Usando 5.5 obtemos a probabilidade em função do comprimento como

$$P_v = \frac{p}{1-p} \cdot \left(\frac{1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L-L_v}{H}}{1 + \frac{1-q}{q} \cdot \frac{L}{H}} \right)^{\frac{\log(1-p)}{\log(q)}}, \quad (5.13)$$

o que é uma expressão trabalhosa do ponto de vista experimental dado que ela depende de L , ou seja, para cada comprimento injetado temos uma probabilidade diferente. Contudo, podemos calcular o comprimento extraído pela equação

$$\bar{l} = \frac{\sum_{v=1}^M l_v * P_v}{\sum_{v=1}^M P_v}, \quad (5.14)$$

usando P_v como peso estatístico. Note que usamos M como limite superior para evitar confusão com as N reproduções experimentais. O comprimento médio do núcleo L_n é obtido ao subtrair

$\bar{l}$ do comprimento injetado L . Resolvendo o somatório com auxílio do programa Mathematica, obtemos

$$L_n = L - \frac{H \cdot q}{1 + q(p-1)} \left\{ \left[1 + \left(\frac{1-q}{q} \right) \frac{L}{H} \right] + \frac{p \frac{L}{H}}{1 - \left[1 + \left(\frac{1-q}{q} \right) \frac{L}{H} \right]^\beta} \right\}, \quad (5.15)$$

onde definimos o expoente β para visualizar melhor a equação. O expoente é, simplesmente

$$\beta = \frac{\log(1-p)}{\log(q)}, \quad (5.16)$$

cujos valores experimentais estão listados na tabela 4. Na figura 48 são mostrados os tamanhos médios dos núcleos L_n em relação ao comprimento injetado L nas cavidades *cav1*, *cav2* e *cav3*. A linha tracejada na figura é o gráfico da equação 5.15 usando os valores de H , p e q para cada cavidade. Alguns resultados experimentais para L superiores a 2000 mm, pois se desviavam muito do modelo experimental. Contudo, esta equação é válida antes da queda na probabilidade comentada na subseção 4.2.2, ou seja, até cerca de 1000 mm para as cavidades *cav2* e *cav3*.

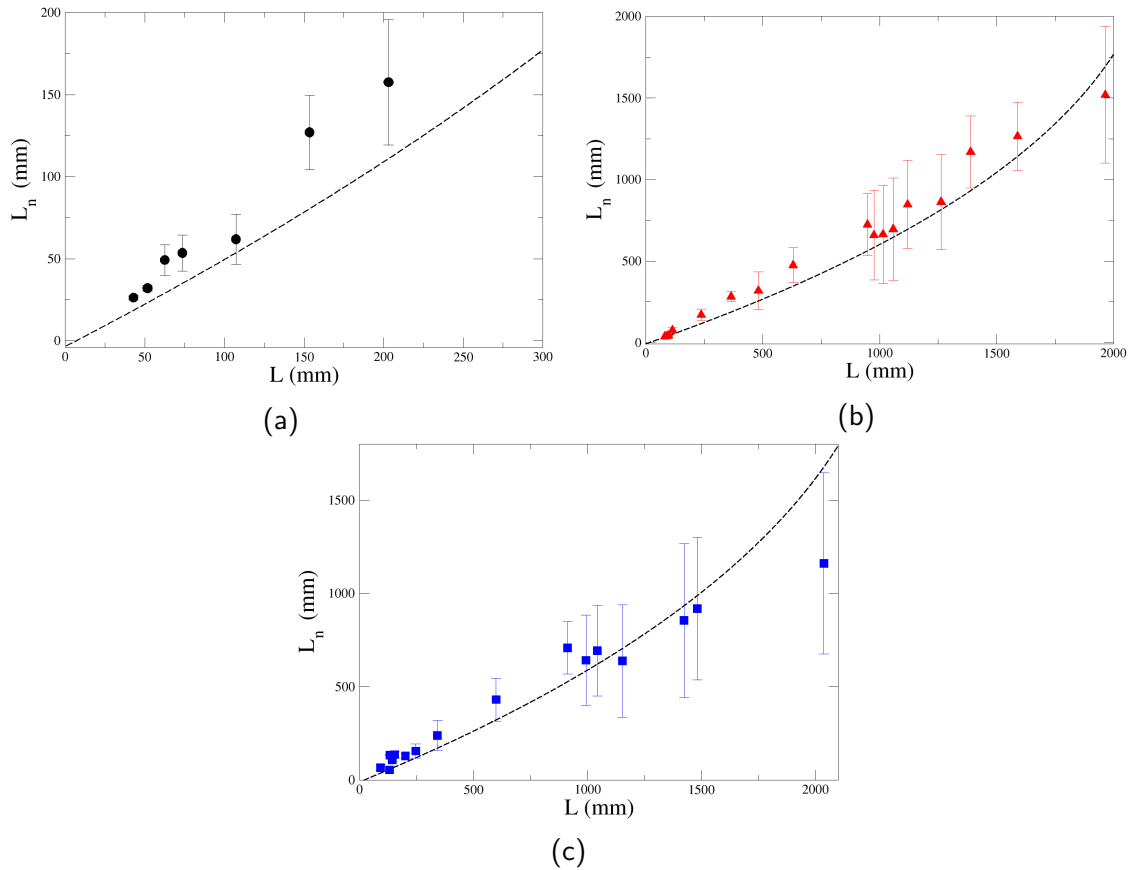


Figura 48 – Comparação entre a expressão encontrada em 5.15, linha tracejada, e dados experimentais do comprimento do núcleo L_n como função do comprimento injetado L na *cav1* (a), *cav2* (b) e *cav3* (c).

Usamos o modelo hierárquico para descrever teoricamente o empacotamento de arames em cavidades tridimensionais. Para analisar a ocorrência de travamentos durante o desempacotamento do arame empregamos noções simples de estatística e a conjectura de que o fenômeno origina-se nas dobras do arame com probabilidade constante em cada dobra. Com isso, conseguimos reproduzir com o mesmo modelo tanto a probabilidade de ocorrer um travamento quanto o comprimento do material residual que fica preso na cavidade. Os resultados sugerem que o empacotamento de arames pode ser descrito pelo mesmo modelo teórico, independente da dimensão do sistema. Possibilidades futuras deste estudo são a implementação da degenerescência, não usada em nossos cálculos e a análise das constantes no limite em que o sistema muda de duas para três dimensões.

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

*"This is the end
 Beautiful friend
 This is the end
 My only friend, the end"*
 The Doors

O trabalho que é apresentado nesta tese lida com o confinamento de arames em cavidades tridimensionais. Este problema está presente no cotidiano de diversas formas, ao guardar um fone de ouvido no bolso e ao tentar tirar o nó de um fio de tomada. No primeiro capítulo são apresentados conceitos necessários ao entendimento e análise dos experimentos que foram realizados. Entre eles, o congestionamento do arame dentro da cavidade é um fator essencial aos fenômenos que encontramos e ocorre devido ao aumento do número de contatos entre as partes do arame. Diversas propriedades interessantes surgem quando o arame é confinado em cavidades como, por exemplo, o surgimento de uma complexa rede de laços que se forma em cavidades bidimensionais. Laços são objetos que se parecem com gotas e se formam devido ao contato com a cavidade. Apresentamos uma revisão da literatura do empacotamento bidimensional e tridimensional no capítulo 2.

Nós estudamos o empacotamento de arames em cavidades cilíndricas e analisamos a estrutura que o arame adota durante o processo. Os experimentos realizados mostram que a forma da cavidade induz o aparecimento de duas fases morfológicas nas quais o arame pode se acomodar. Em uma delas, a *Configuração Parcialmente Ordenada*, CPO, surge uma estrutura solenoidal em que uma camada externa formada de anéis tem seu interior preenchido de forma desordenada. Na *Configuração Desordenada*, CD, todo o arame se distribui de forma aleatória pela cavidade. Analisamos a probabilidade de ocorrer cada configuração e mostramos que existe uma transição na ordem, que pode ser vista na figura 49, e que ocorre quando a taxa de aspecto t , a razão entre o diâmetro e a altura da cavidade, está próximo de 1,0. Em tal transição, a probabilidade de uma amostra estar na CPO, que é maior do que ela estar na CD para cavidades com taxa de aspecto menor do que 1,0, passa a ser menor para $t > 1,0$. A entropia do sistema é menor na CPO do que na CD de forma que esta transição pode ser vista como um aumento na entropia do sistema quando a forma da cavidade muda, quando o diâmetro da cavidade passa a ser maior do que a altura.

Com relação a fração de empacotamento ρ , vimos que esta atinge valores maiores para as CPOs, ou seja, as amostras com menor entropia possuem maior taxa de ocupação do espaço. Isso se deve aos anéis que são mais compactos, levando a maiores valores de ρ . Por outro lado, aproximadamente no mesmo ponto onde ocorre a transição da ordem existe um máximo

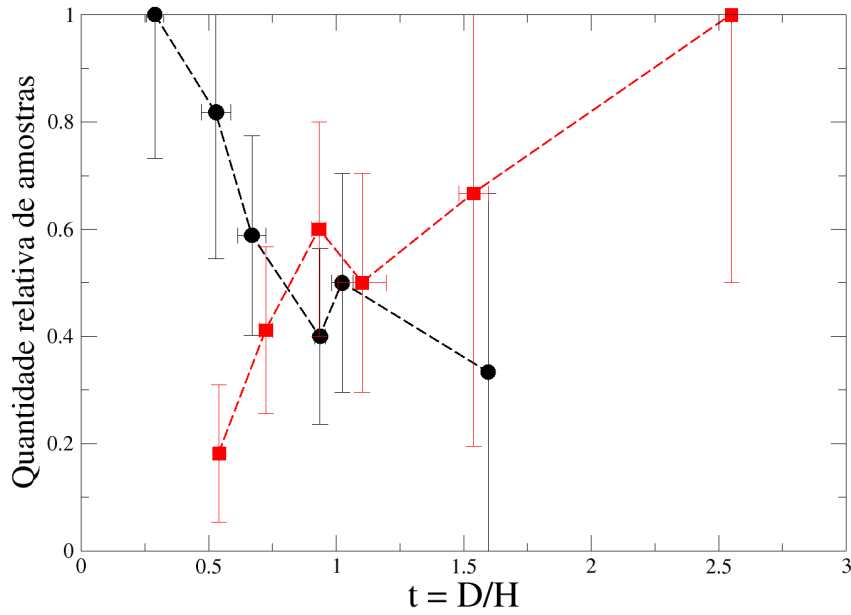


Figura 49 – Probabilidade de uma amostra estar na CPO (círculos pretos) ou na CD (quadrados vermelhos) em relação à taxa de aspecto da cavidade.

em ρ para as CPOs e, a partir dele, a fração de empacotamento decresce. Interpretamos esse fenômeno como uma diminuição na probabilidade de formação de anéis, o que leva a estruturas com menor fração de empacotamento.

O comprimento do arame é limitado pela crescente força gerada pelo aumento do número de contatos do arame com ele mesmo. Tal fenômeno produz uma lei de escala entre o comprimento de arame L e o volume da cavidade V , cujo expoente pode ser relacionado com a dimensão fractal D do arame distribuído na cavidade, $L \sim V^{1/\alpha} \sim V^{D/3}$. Comparamos os resultados de nossos experimentos com a literatura de arames empacotados e mostramos que este expoente depende da geometria da cavidade. Mais ainda, apesar das diferenças citadas acima entre as fases morfológicas, encontramos que o expoente desta lei é o mesmo em ambas as fases, $\alpha = 1,32$. Para explicar este resultado foi construído um modelo que leva em conta a auto-exclusão e o confinamento pela cavidade. Os resultados de nossos experimentos foram comparados com dados de Cui, Schlub e Holmes[43], que fez uma extensa investigação de bancos de dados e da literatura para diferentes formas e tipos de material genético assim como estrutura e geometria da cápsula viral. Nesse trabalho são relatadas diversas leis de potência com expoentes diferentes, dependendo do tipo e estrutura do material genético, assim como da geometria da cápsula viral. Os autores analisaram a relação entre o comprimento do material genético L_v de vírus e o volume correspondente da cápsula viral V_v e encontram a lei de escala $V_v \sim L_v^{1.5}$ para ajuste conjunto de todos os dados que encontraram. Quando conferimos os expoentes obtidos em experimentos de arames empacotados em cavidades de diferentes geometrias, notamos que são os mesmos que a Natureza produz no empacotamento de genoma em cápsulas virais para as respectivas geometrias.

Como perspectiva a esta primeira parte (Capítulo 3), sugerimos um experimento

baseado na analogia entre arames e genomas virais: inserir um comprimento fixo de arame em uma cavidade e esperar que ele relaxe dentro da cavidade. Depois, continuar a injeção até o empacotamento rígido e comparar com as frações de empacotamento obtidas sem o relaxamento. Tais experimentos foram realizados com vírus e sugerem que o empacotamento de DNA segue uma dinâmica de não equilíbrio onde a molécula sofre deformações inelásticas. Recentemente ficamos sabendo que este experimento foi realizado em 2002, mas para duas dimensões, mostrando que a fração de empacotamento cresce logaritmicamente com o tempo [57]. Um outro aspecto interessante a ser investigado é o empacotamento de arames em cavidade com relações área/volume crescentes, de forma a verificar se o expoente α em 3.9 descreve o limite em que $\gamma \rightarrow 1$.

Dando prosseguimento ao trabalho, realizamos experimentos de extração de arame de cavidades cilíndricas. Neste caso, surge um evento que é exclusivo de cavidades tridimensionais. Enquanto em duas dimensões o arame é extraído completamente, em três dimensões ele pode "travar" dentro da cavidade. A quantidade de arame residual que fica presa na cavidade, que chamamos *núcleo*, forma uma estrutura que tem a mesma dimensão fractal do arame no limite empacotamento rígido. Supondo que o arame se comporta como um caminhante aleatório, nós encontramos uma lei de escala que explica os resultados obtidos para a probabilidade de que ocorram tais travamentos.

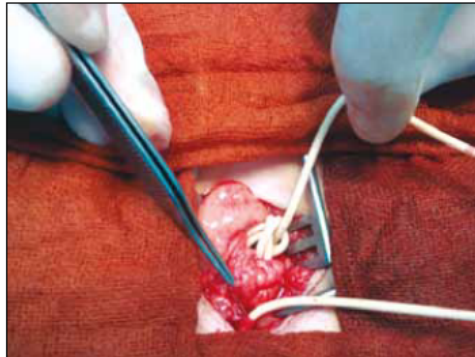


Figura 50 – Nó formado em um cateter peritonial. Figura retirada da referência [65].

Notamos que existe um comprimento mínimo abaixo do qual a probabilidade de travamentos é nula. Este comprimento é próximo de $4\pi R$, sendo o R o raio médio da cavidade, sugerindo a formação de dois laços de tamanho $2\pi R$. Existe uma importância médica no sentido de encontrar tal comprimento devido a ocorrência de nós em cateteres cirúrgicos [59, 60]. Tais cateteres são usados, por exemplo, em casos de hidrocefalia, quando existe excesso de líquido cefalorraquidiano no cérebro do paciente, gerando aumento da pressão sobre os tecidos cerebrais. Cateteres são usados para desviar o excesso de líquido para a cavidade abdominal e o surgimento de nós pode bloquear esse desvio. A Figura 50 mostra a retirada cirúrgica de um nó em um cateter.

Atualmente, estamos implementando uma simulação de um caminhante aleatório auto-

excludente no contínuo e em espaço limitado de forma a reproduzir o empacotamento de arames. Nesta simulação, pretendemos observar o comportamento do número de contatos entre as partes do caminhante e comparar com a lei de potência sugerida no Capítulo 4 para o empacotamento tridimensional de arames. Deve-se ressaltar que, em duas dimensões, [Donato, Gomes e Souza](#)[28] obtiveram experimentalmente uma lei de potência entre o número de contatos fio-fio n , e a densidade de arame empacotado, ρ , de forma que $n \sim \rho^{2.0 \pm 0.1}$.

Na seção 5.1 adaptamos o modelo hierárquico ao empacotamento de arames em cavidades tridimensionais descrevendo o arame como um conjunto de *trechos* e *dobras*. A expressão encontrada permite relacionar o número de trechos N e o comprimento injetado L . Por um lado, é de se esperar que existam famílias de trechos de mesmo tamanho, ou seja, mais de um pedaço de arame de comprimento l_n para um n qualquer. Anteriormente, [Donato, Gomes e Souza](#)[30] descreveram essa "degenerescência" através de uma progressão geométrica, o que permitiu usar a dimensão fractal do empacotamento bidimensional, calcular a distribuição da área de laços e obter o comprimento necessário para formar o primeiro laço em relação ao perímetro da cavidade. Apesar de não considerar a degenerescência, conseguimos reproduzir a probabilidade de travamentos utilizando conceitos simples de probabilidade e o modelo hierárquico adaptado. Comparamos nosso modelo com os resultados descritos no capítulo 4 para a probabilidade de travamentos e observamos boa concordância entre ambos, independente do material do arame injetado. Contudo, não conseguimos reproduzir os resultados experimentais para o comprimento do núcleo. Observaremos se esta descrição concorda com dados publicados por [Shaebani et al.](#)[37] para a relação entre o número de dobras e as dimensões da cavidade. Por outro lado, ao implementar a equação 2.13 devemos considerar que os vários trechos de mesmo tamanho podem ocorrer em posições diferentes do arame. Assim, dada uma distribuição de trechos l_n , existem diversas configurações que respeitam essa distribuição. Neste último caso, supomos possível uma descrição estatística, ao definir uma entropia baseada no número de configurações disponíveis e, a partir daí fazer uma conexão termodinâmica do empacotamento de arame, projeto futuro do grupo.

Relatamos que o processo de injetar arames em cavidades bidimensionais gera estruturas em forma de laços e que objetos semelhantes aparecem no empacotamento tridimensional. Como era de se esperar, a dimensão fractal dos fios em ambos os casos é diferente assim como as frações de empacotamento obtidas, em geral, maiores no caso bidimensional. Também é observado que o arame pode ser bloqueado dentro da cavidade cilíndrica quando se tenta puxá-lo, fenômeno que não ocorre em duas dimensões. A sequência citada acima sugere o estudo do limite em que uma cavidade bidimensional se torna tridimensional. Começamos a estudar esse limite como cavidades cuja altura pode ser variada usando placas. É possível realizar esse experimento em duas diferentes configurações: a) injetando o arame pelo centro da cavidade, como nas cavidades cilíndricas; (b) injetando o arame radialmente, como o experimento costuma ser realizado em duas dimensões. Conseguimos atingir frações de empacotamento maiores do que 0,5 quando um fio de nylon de 0,6mm é inserido em uma cavidade com 1mm de altura,



Figura 51 – Arame de 0,6mm de diâmetro inserido em uma cavidade de 1mm de altura é mostrado em (a). Na figura (b) vemos um laço formado no empacotamento até o congestionamento de um fio de nylon de 0,5mm de diâmetro na mesma cavidade. A injeção é feita através de um canal no centro de uma das superfícies de acrílico.

visto na figura 51(b), ou seja, a cavidade só permite a formação de uma única camada de arame. Na figura 51(b) vemos a formação de um único laço quando inserimos um fio de nylon de 0,5mm de diâmetro na mesma cavidade. Fizemos 10 reproduções do experimento com o arame de 0,6mm e 32 com o arame de 0,5mm de diâmetro. No primeiro experimento encontramos que a fração de empacotamento é $0,440 \pm 0,003$ e no segundo foi obtido $\rho = 0,295 \pm 0,003$, mostrando uma variação grande na mudança do limite de uma para duas camadas de arame. Nos dois casos, a injeção foi feita por um orifício no centro da placa de acrílico que forma a cavidade.

REFERÊNCIAS

- 1 OLIVEIRA, C. L. N.; VIEIRA, A. P.; HELBING, D.; ANDRADE, J. S.; HERRMANN, H. J. Keep-left behavior induced by asymmetrically profiled walls. *Physical Review X*, American Physical Society, v. 6, p. 011003, Jan 2016. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.6.011003>. Citado na página 20.
- 2 WEAIRE, D.; ASTE, T. *The pursuit of perfect packing*. [S.l.]: CRC Press, 2008. Citado na página 20.
- 3 CONWAY, J. H.; SLOANE, N. J. A. *Sphere packings, lattices and groups*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 290. Citado na página 20.
- 4 SLOANE, N. J. A. The packing of spheres. *Scientific American*, v. 250, n. 1, p. 116–125, 1984. Citado na página 20.
- 5 LIU, A. J.; NAGEL, S. R. Nonlinear dynamics: Jamming is not just cool any more. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 396, n. 6706, p. 21–22, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.
- 6 GOMES, M. A. F.; HORA, R. R.; BRITO, V. P. Electrical resistance of complex two-dimensional structures of loops. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 44, n. 25, p. 255401, 2011. Citado na página 22.
- 7 AGUIAR, J. A.; GOMES, M. A. F.; NETO, A. S. Geometrical and electrical properties of crumpled wires. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 24, n. 3, p. L109, 1991. Citado 7 vezes nas páginas 12, 22, 41, 42, 43, 47 e 60.
- 8 SMYDA, M. R.; HARVEY, S. C. The entropic cost of polymer confinement. *The Journal of Physical Chemistry B*, v. 116, n. 35, p. 10928–10934, 2012. PMID: 22905742. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1021/jp302807r>. Citado na página 22.
- 9 LOCKER, C. R.; FULLER, S. D.; HARVEY, S. C. {DNA} organization and thermodynamics during
Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0006349507715394>. Citado na página 22.
- 10 PETROV, A. S.; HARVEY, S. C. Packaging double-helical {DNA} into viral capsids: Structures, forces, and energetics. *Biophysical Journal*, v. 95, n. 2, p. 497 – 502, 2008. ISSN 0006-3495. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0006349508702261>. Citado na página 22.
- 11 TAYLOR, R. P.; MICOLICH, A. P.; JONAS, D. Fractal analysis of pollock's drip paintings. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 399, n. 6735, p. 422–422, 1999. Citado na página 23.
- 12 MANDELBROT, B. B. *The fractal geometry of nature*. [S.l.]: WH freeman, New York, 1982. Citado na página 24.
- 13 BOSWELL, G. P.; BRITTON, N. F.; FRANKS, N. R. Habitat fragmentation, percolation theory and the conservation of a keystone species. *Proceedings of the Royal Society of London B: Biological Sciences*, The Royal Society, v. 265, n. 1409, p. 1921–1925, 1998. ISSN

0962-8452. Disponível em: <http://rspb.royalsocietypublishing.org/content/265/1409/1921>. Citado na página 26.

14 NIESSEN, W. von; BLUMEN, A. Dynamics of forest fires as a directed percolation model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 19, n. 5, p. L289, 1986. Disponível em: <http://stacks.iop.org/0305-4470/19/i=5/a=013>. Citado na página 26.

15 SAHIMI, M. Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing. *Review of Modern Physics*, American Physical Society, v. 65, p. 1393–1534, Oct 1993. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.65.1393>. Citado na página 26.

16 STAUFFER, D.; AHARONY, A. *Introduction to percolation theory*. [S.l.]: CRC press, 1994. Citado na página 27.

17 DONATO, C. C.; OLIVEIRA, F. A.; GOMES, M. A. F. Anomalous diffusion on crumpled wires in two dimensions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 368, n. 1, p. 1–6, 2006. Citado na página 27.

18 PERRIN, J. *Les atomes*. [S.l.]: Librairie Félix Alcan, 1913. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 29.

19 GUTTMANN, A. J. Self-avoiding walks and polygons—an overview. *arXiv preprint arXiv:1212.3448*, 2012. Citado na página 30.

20 HOLANDA, V. H. de; GOMES, M. A. F. Scaling, crumpled wires, and genome packing in virions. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 94, p. 062406, Dec 2016. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.94.062406>. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 79.

21 HOLANDA, V. H. de; GOMES, M. A. F.; BRITO, V. P.; SOUSA, H. J. A. Event of blockage in the unpacking of crumpled wires from three-dimensional cavities. in prep. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 65.

22 HALES, T.; ADAMS, M.; BAUER, G.; DANG, D. T.; HARRISON, J.; HOANG, T. L.; KALISZYK, C.; MAGRON, V.; MCLAUGHLIN, S.; NGUYEN, T. T. et al. A formal proof of the kepler conjecture. *arXiv preprint arXiv:1501.02155*, 2015. Citado na página 31.

23 GOMES, M. A. F. Paper crushes fractally. *Journal of Physics A*, v. 20, p. L283–L284, 1987. Citado na página 31.

24 GOMES, M. A. F.; JYH, T. I.; REN, T. I.; RODRIGUES, I. M.; FURTADO, C. B. S. Mechanically deformed crumpled surfaces. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 22, n. 8, p. 1217, 1989. Citado 3 vezes nas páginas 11, 31 e 32.

25 GOMES, M. A. F.; DONATO, C. C.; CAMPELLO, S. L.; SOUZA, R. E. D.; CASSIA-MOURA, R. Structural properties of crumpled cream layers. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 40, n. 12, p. 3665, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 32.

26 GIORDANELLI, I.; MENDOZA, M.; JR., J. S. A.; GOMES, M. A. F.; HERRMANN, H. J. Crumpling damaged graphene. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 6, 2016. Citado na página 32.

- 27 SOBRAL, T. A.; HOLANDA, V. H. de; LEAL, F. C. B.; SARAIVA, T. T. Deformation of loops in the packing of rods. in prep. Citado 3 vezes nas páginas 12, 33 e 36.
- 28 DONATO, C. C.; GOMES, M. A. F.; SOUZA, R. E. de. Scaling properties in the packing of crumpled wires. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 67, p. 026110, Feb 2003. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.67.026110>. Citado 5 vezes nas páginas 12, 34, 36, 38 e 94.
- 29 STOOP, N.; WITTEL, F. K.; HERRMANN, H. J. Morphological phases of crumpled wire. *Physical Review Lett.*, American Physical Society, v. 101, p. 094101, Aug 2008. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.094101>. Citado 4 vezes nas páginas 34, 36, 52 e 83.
- 30 DONATO, C. C.; GOMES, M. A. F.; SOUZA, R. E. de. Crumpled wires in two dimensions. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 66, p. 015102, Jul 2002. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.66.015102>. Citado 8 vezes nas páginas 12, 36, 37, 38, 79, 80, 85 e 94.
- 31 SILVA, T. de A. S. *Confinamento bidimensional de estruturas filamentosas com ênfase na formação de laços e topologia da cavidade*. 2015. Tese de doutorado, Universidade Federal de Pernambuco. Citado na página 36.
- 32 SOBRAL, T. A.; GOMES, M. A. F.; MACHADO, N. R.; BRITO, V. P. Unpacking of a crumpled wire from two-dimensional cavities. *PLOS ONE*, Public Library of Science, v. 10, n. 6, p. 1–13, 06 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0128568>. Citado 6 vezes nas páginas 12, 39, 65, 79, 80 e 85.
- 33 DONATO, C. C.; GOMES, M. A. F. Condensation of elastic energy in two-dimensional packing of wires. *Physical Review E*, APS, v. 75, n. 6, p. 066113, 2007. Citado na página 39.
- 34 GOMES, M. A. F.; BRITO, V. P.; ARAÚJO, M. S.; DONATO, C. C. Crumpled states of a wire in a two-dimensional cavity with pins. *Physical Review E*, APS, v. 81, n. 3, p. 031127, 2010. Citado 5 vezes nas páginas 12, 39, 41, 45 e 79.
- 35 SOBRAL, T. A.; GOMES, M. A. F. Tight packing of a flexible rod in two-dimensional cavities. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 48, n. 33, p. 335305, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 12, 40 e 41.
- 36 VETTER, R.; WITTEL, F. K.; HERRMANN, H. J. Packing of elastic wires in flexible shells. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 112, n. 4, p. 44003, 2015. Disponível em: <http://stacks.iop.org/0295-5075/112/i=4/a=44003>. Citado 4 vezes nas páginas 13, 43, 44 e 52.
- 37 SHAEBANI, M. R.; FARNUDI, A.; NAJAFI, J.; BONN, D.; HABIBI, M. Self-avoiding walk of plastic wires crumpled into frictional confinements. *arXiv preprint:1509.04179*, 2015. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1509.04179v1>. Citado 7 vezes nas páginas 13, 44, 45, 59, 60, 63 e 94.
- 38 GOMES, M. A. F.; PEREIRA, C. C. S.; BRITO, V. P. Crumpled states of a wire in a cubic cavity with periodic obstacles. *Physical Review E*, APS, v. 87, n. 5, p. 052103, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 13, 45 e 79.

- 39 RAYMER, D. M.; SMITH, D. E. Spontaneous knotting of an agitated string. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 104, n. 42, p. 16432–16437, 2007. Disponível em: <http://www.pnas.org/content/104/42/16432.abstract>. Citado 5 vezes nas páginas 13, 46, 47, 65 e 71.
- 40 BEN-NAIM, E.; DAYA, Z. A.; VOROBIEFF, P.; ECKE, R. E. Knots and random walks in vibrated granular chains. *Physical Review Lett.*, American Physical Society, v. 86, p. 1414–1417, Feb 2001. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.1414>. Citado 4 vezes nas páginas 13, 47, 65 e 88.
- 41 GOMES, M. A. F.; BRITO, V. P.; ARAÚJO, M. S. Geometric properties of crumpled wires and the condensed non-solid packing state of very long molecular chains. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, SciELO Brasil, v. 19, n. 2, p. 293–298, 2008. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1590/s0103-50532008000200014>. Citado 4 vezes nas páginas 48, 59, 60 e 79.
- 42 COMOLLI, L. R.; SPAKOWITZ, A. J.; SIEGERIST, C. E.; JARDINE, P. J.; GRIMES, S.; ANDERSON, D. L.; BUSTAMANTE, C.; DOWNING, K. H. Three-dimensional architecture of the bacteriophage ϕ 29 packaged genome and elucidation of its packaging process. *Virology*, v. 371, n. 2, p. 267 – 277, 2008. ISSN 0042-6822. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0042682207004990>. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 63.
- 43 CUI, J.; SCHLUB, T. E.; HOLMES, E. C. An allometric relationship between the genome length and virion volume of viruses. *Journal of Virology*, Am Soc Microbiol, v. 88, n. 11, p. 6403–6410, 2014. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1128/JVI.00362-14>. Citado 5 vezes nas páginas 17, 48, 60, 61 e 92.
- 44 VETTER, R.; WITTEL, F. K.; HERRMANN, H. J. Morphogenesis of filaments growing in flexible confinements. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 5, n. 4437, 2014. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms5437>. Citado 3 vezes nas páginas 48, 52 e 83.
- 45 MASCULO, F. S.; VIDAL, M. C. *Ergonomia: Trabalho adequado e eficiente*. [S.l.]: Elsevier Brasil, 2013. 118 p. Citado na página 50.
- 46 Piñeirua, M.; Adda-Bedia, M.; Moulinet, S. Spooling and disordered packing of elastic rods in cylindrical cavities. *EPL*, v. 104, n. 1, p. 14005, 2013. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/104/14005>. Citado na página 51.
- 47 STOOP, N.; NAJAFI, J.; WITTEL, F. K.; HABIBI, M.; HERRMANN, H. J. Packing of elastic wires in spherical cavities. *Physical Review Lett.*, American Physical Society, v. 106, p. 214102, May 2011. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.214102>. Citado 5 vezes nas páginas 51, 52, 60, 63 e 66.
- 48 NAJAFI, J.; STOOP, N.; WITTEL, F.; HABIBI, M. Ordered packing of elastic wires in a sphere. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 85, p. 061108, Jun 2012. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.061108>. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 60.
- 49 ALI, I.; MARENDUZZO, D.; YEOMANS, J. M. Polymer packaging and ejection in viral capsids: Shape matters. *Physical Review Lett.*, American Physical Society, v. 96, p. 208102,

- May 2006. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.208102>. Citado na página 62.
- 50 BLOOMFIELD, V. A. et al. DNA condensation by multivalent cations. *Biopolymers*, v. 44, n. 3, p. 269–282, 1997. Citado na página 62.
- 51 FULLER, D. N.; RICKGAUER, J. P.; JARDINE, P. J.; GRIMES, S.; ANDERSON, D. L.; SMITH, D. E. Ionic effects on viral DNA packaging and portal motor function in bacteriophage $\phi 29$. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, National Acad Sciences, v. 104, n. 27, p. 11245–11250, 2007. Citado na página 62.
- 52 LIU, S.; CHISTOL, G.; HETHERINGTON, C. L.; TAFOYA, S.; AATHAVAN, K.; SCHNITZBAUER, J.; GRIMES, S.; JARDINE, P. J.; BUSTAMANTE, C. A viral packaging motor varies its DNA rotation and step size to preserve subunit coordination as the capsid fills. *Cell*, Elsevier, v. 157, n. 3, p. 702–713, 2014. Citado na página 63.
- 53 ROLLINS, G. C.; PETROV, A. S.; HARVEY, S. C. The role of DNA twist in the packaging of viral genomes. *Biophysical Journal*, Elsevier, v. 94, n. 5, p. L38–L40, 2008. Citado na página 63.
- 54 BERNDSEN, Z. T.; KELLER, N.; GRIMES, S.; JARDINE, P. J.; SMITH, D. E. Nonequilibrium dynamics and ultraslow relaxation of confined DNA during viral packaging. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, National Acad Sciences, v. 111, n. 23, p. 8345–8350, 2014. Citado na página 63.
- 55 BERNDSEN, Z. T.; KELLER, N.; SMITH, D. E. Continuous allosteric regulation of a viral packaging motor by a sensor that detects the density and conformation of packaged dna. *Biophysical Journal*, Elsevier, v. 108, n. 2, p. 315–324, 2015. Citado na página 63.
- 56 KELLER, N.; GRIMES, S.; JARDINE, P. J.; SMITH, D. E. Single DNA molecule jamming and history-dependent dynamics during motor-driven viral packaging. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 12, p. 757–761, 2016. Citado na página 63.
- 57 GOMES, M. A. F. 2002. Comunicação pessoal. Citado 3 vezes nas páginas 64, 81 e 93.
- 58 MARENDUZZO, D.; MICHELETTI, C.; ORLANDINI, E.; SUMNERS, D. W. Topological friction strongly affects viral DNA ejection. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 110, n. 50, p. 20081–20086, 2013. Disponível em: <http://www.pnas.org/content/110/50/20081.abstract>. Citado na página 65.
- 59 EFTEKHAR, B.; HUNN, A. Ventriculoperitoneal shunt blockage due to spontaneous knot formation in the peritoneal catheter. *Journal of Neurosurgery: Pediatrics*, v. 1, n. 2, p. 142–143, 2008. PMID: 18352784. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.3171/PED/2008/1/2/142>. Citado 4 vezes nas páginas 65, 71, 85 e 93.
- 60 CHOPRA, I.; GNANALINGHAM, K.; PAL, D.; PETERSON, D. A knot in the catheter – an unusual cause of ventriculo-peritoneal shunt blockage. *Acta Neurochirurgica*, v. 146, n. 9, p. 1055–1057, 2004. ISSN 0942-0940. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/s00701-004-0320-6>. Citado 2 vezes nas páginas 65 e 93.
- 61 SOUSA, H. J. A. *Estudo da produção de laços no empacotamento de um fio em uma cavidade cilíndrica*. 2011. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Piauí. Citado 2 vezes nas páginas 65 e 66.

- 62 LIN, C. W.; DU, Y. C. Effect of surface topographies of ptfe and polyimide as characterized by atomic force microscopy on the heterogeneous nucleation of isotactic polypropylene. *Materials chemistry and physics*, Elsevier, v. 58, n. 3, p. 268–275, 1999. Citado na página 71.
- 63 JUNG, S. J.; AMAL, R.; RAPER, J. A. Monitoring effects of shearing on floc structure using small-angle light scattering. *Powder Technology*, Elsevier, v. 88, n. 1, p. 51–54, 1996. Citado na página 71.
- 64 HICKFORD, J.; JONES, R.; PONT, S. C. D.; EGGERS, J. Knotting probability of a shaken ball-chain. *Physical Review E*, APS, v. 74, n. 5, p. 052101, 2006. Citado na página 71.
- 65 BORCEK, A. O.; CIVI, S.; GOLEN, M.; EMMEZ, H.; BAYKANER, M. K. An unusual ventriculoperitoneal shunt complication: spontaneous knot formation. *Turkish neurosurgery*, v. 22, n. 2, p. 261–264, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 93.