

**Autômatos Celulares e
Crescimento de Interfaces Rugosas**

Thiago Gomes de Mattos

Outubro de 2005

Autômatos Celulares e Crescimento de Interfaces Rugosas

THIAGO GOMES DE MATTOS

Orientador: Prof. JOSÉ GUILHERME MOREIRA
Co-orientador: Dr. ALLBENS ATMAN PICARDI FARIA

Setembro de 2005

Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE
MINAS GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do
grau de MESTRE EM FÍSICA.

Agradecimentos

Ao José Guilherme, pela marcante orientação durante esses cinco anos;

Ao Allbens e Sidiney, pelas proveitosas discussões;

À Nina, pelo companheirismo e carinho, fundamentais na minha caminhada;

À minha família, Rogério, Kátia e Sophia, pelo apoio em casa;

Aos amigos, pelas conversas de boteco;

Aos colegas de trabalho, pelo apoio e incentivo;

Ao CNPq, pelo suporte financeiro.

Sumário

RESUMO	iv
ABSTRACT	v
1 Introdução	1
2 Crescimento de Interfaces Rugosas	4
2.1 Modelos Discretos	4
2.1.1 Deposição Aleatória	5
2.1.2 Modelos Com Correlações	8
2.1.3 Lei de Escala de Family-Vicsek	14
2.2 Equações Estocásticas de Crescimento	15
2.2.1 Princípios de Simetria	16
2.2.2 Equações Lineares	17
2.2.3 Equações Não-Lineares	19
2.2.4 Classes de Universalidade	21
3 Autômatos Celulares	24
3.1 Definições	25
3.2 Autômatos Celulares Determinísticos	26
3.3 Método de Acumulação	29
3.4 Autômatos Celulares Probabilísticos	32
4 Equações de crescimento: uma nova abordagem	35
4.1 O método	36
4.2 Aplicação à equação EW	40
4.2.1 Expoentes de enrugamento	40
4.2.2 Outros resultados	43
4.3 Aplicação à equação de difusão	46
4.3.1 Expoentes de enrugamento	46

4.3.2	Outros resultados	49
4.4	Velocidade de crescimento	51
5	Conclusões e perspectivas	56
APÊNDICE		
	Números Aleatórios	58

Resumo

Neste trabalho, introduzimos um método para estudar a dinâmica de crescimento de interfaces rugosas geradas a partir de regras probabilísticas de autômatos celulares, onde o processo de deposição depende das diferenças de alturas entre sítios vizinhos. Essas regras associam a cada sítio uma probabilidade $p_i(t)$ de receber uma partícula, onde $p_i(t) = \rho \exp[\kappa\Gamma_i(t)]$. Aqui, ρ e κ são dois parâmetros e $\Gamma_i(t)$ é um *kernel* que depende da altura $h_i(t)$ do sítio i e de seus vizinhos. Esse *kernel* corresponde a uma discretização da parte determinística da equação associada a um dado processo de crescimento. Assim, por exemplo, para processos onde a relaxação superficial é preponderante, o termo $\nabla^2 h$ domina - equação de Edwards-Wilkinson - e $\Gamma_i(t) = h_{i+1}(t) + h_{i-1}(t) - 2h_i(t)$. Além dessa equação, analisamos dinâmicas cujas regras dependem de $\nabla^4 h$ - equação de crescimento com difusão. Através de simulações e de estudos estatísticos da distribuição de alturas dos perfis gerados, obtemos o expoente de crescimento β , o de rugosidade α e o dinâmico z , que comprovam que o método proposto simula o processo descrito pela equação diferencial considerada.

Abstract

In this work we apply the methodology of CA modeling to study interface growth processes which depend on height differences between neighbours. The rules associate a probability $p_i(t)$ for site i to receive a particle at time t , where $p_i(t) = \rho \exp[\kappa\Gamma_i(t)]$. Here, ρ and κ are two parameters and $\Gamma_i(t)$ is a kernel that depends on the height $h_i(t)$ of the site i and on the heights of its neighbours, at time t . We specify the functional form of this kernel by the discretization of the deterministic part of the equation associated to a given growth process. For example, in processes where surface relaxation plays a major role, we have a Laplacian as the main term in the growth equation (Edwards-Wilkinson equation) and, in this case, $\Gamma_i(t) = h_{i+1}(t) + h_{i-1}(t) - 2h_i(t)$, which follows from the discretization of $\nabla^2 h$. Furthermore, we study dynamics with rules depending on $\nabla^4 h$ term (equation of growth with diffusion). By means of simulations and statistical analysis of the height distributions of the generated profiles, we obtain the growth, roughness and dynamic exponents, β , α and z , whose values confirm that the defined processes are indeed in the universality class of the original growth equation.

Capítulo 1

Introdução

Na natureza, bem como em laboratórios de Física experimental e em diversas aplicações industriais, encontramos os mais variados tipos de superfícies e interfaces rugosas e o interesse pelo estudo dessas estruturas tem aumentado substancialmente nas últimas décadas [1, 2, 3]. Com o crescente desenvolvimento da tecnologia na área da informática, computadores têm se mostrado ferramentas não somente úteis, mas imprescindíveis no estabelecimento de modelos e métodos para investigar a dinâmica de formação dessas superfícies rugosas.

No estudo do crescimento de interfaces, uma das grandezas de maior interesse é a rugosidade, que fornece uma medida da dispersão de alturas do perfil em torno da altura média. A partir do comportamento temporal dessa grandeza, podemos obter diversas informações acerca dos detalhes da dinâmica de crescimento. Em particular, para superfícies cujas flutuações nas alturas são invariantes por escala (superfícies auto-afins), observamos que, à medida que essas superfícies vão se formando, a rugosidade cresce com o tempo segundo uma lei de potência, com um expoente denominado *expoente de crescimento*. Para a maioria desses casos, a rugosidade não cresce indefinidamente com o tempo; eventualmente a interface atinge um regime estacionário e a rugosidade satura em um valor que depende do tamanho do sistema, segundo uma lei de potência, para a qual definimos o *expoente da rugosidade*. Nesses casos, o tempo que o sistema leva para atingir o regime estacionário, ou o tempo de saturação, também depende do tamanho do sistema segundo uma lei de potência, com o chamado *expoente dinâmico*.

Um conjunto de valores para os três expoentes definidos acima, chamados de expoentes de enrugamento (*roughening exponents*), define uma classe de universalidade. Assim, se dois ou mais processos de crescimento possuem o mesmo conjunto de val-

ores para os expoentes de enrugamento, dizemos que esses processos pertencem a uma mesma classe de universalidade. Isso significa que as dinâmicas subjacentes a eles obedecem às mesmas simetrias e leis de conservação.

Atualmente, diversos resultados analíticos rigorosos, obtidos através de modelos matemáticos que visam descrever as dinâmicas de crescimento de interfaces rugosas, podem ser encontrados em inúmeros textos científicos. Não obstante, a importância dos resultados obtidos através de simulações computacionais tem aumentado significativamente. Assim, as simulações, juntamente com os experimentos e a teoria, constituem as atuais ferramentas disponíveis para os cientistas, em particular os físicos, em sua tarefa de investigar a natureza.

Dentro da perspectiva computacional, podemos destacar uma classe de modelos que, mesmo quando muito simples, podem exibir propriedades complexas: são os chamados autômatos celulares, ou ACs. Esses modelos têm sido amplamente estudados nas últimas décadas [4] e têm mostrado grande utilidade quando aplicados em diversas áreas da ciência.

Neste trabalho, introduzimos um método para estudar equações diferenciais estocásticas associadas a processos de crescimento de interfaces rugosas, utilizando uma dinâmica tipo autômatos celulares. Esta dissertação possui quatro capítulos (além desta introdução) e um apêndice. No capítulo 2, fazemos uma revisão da teoria do crescimento de interfaces rugosas. Apresentamos alguns modelos discretos de crescimento (em rede) e equações estocásticas, que permitem uma abordagem analítica; destacamos as principais grandezas e ferramentas utilizadas no estudo do crescimento de superfícies rugosas. No capítulo 3, discutimos as definições, principais características e algumas aplicações dos autômatos celulares.

No capítulo 4, apresentamos um método para estudar equações de crescimento, utilizando uma dinâmica de autômatos celulares. Em seguida aplicamos esse método ao estudo de duas equações lineares e apresentamos os resultados obtidos para os expoentes de enrugamento. Também discutimos resultados obtidos para a distribuição de alturas dos perfis gerados, tais como sua simetria e decaimento, e fazemos ainda um estudo da velocidade de crescimento das interfaces.

No capítulo 5, apresentamos as conclusões deste trabalho e sinalizamos algumas perspectivas de continuidade do mesmo. Finalmente, no apêndice, discutimos a rotina

geradora de números aleatórios que utilizamos nas implementações computacionais desta dissertação.

Capítulo 2

Crescimento de Interfaces Rugosas

Há muitos séculos que as formas geométricas da natureza têm despertado o interesse dos estudiosos e diversas formulações teóricas para explicá-las têm sido elaboradas desde a antiguidade. O mais recente avanço na busca pelo entendimento da natureza em termos de sua morfologia veio através do surgimento de um novo paradigma, com a introdução da Geometria Fractal. O trabalho interdisciplinar pioneiro de Benoit B. Mandelbrot [5] mostrou que certos conceitos matemáticos, antes considerados irrelevantes para descrever o mundo real, podem (e devem!) ser utilizados como ferramentas para estudar uma enorme gama de fenômenos e estruturas encontradas na natureza, e que não podiam ser explicados pelos métodos desenvolvidos até então.

Neste capítulo apresentaremos alguns métodos desenvolvidos para caracterizar quantitativamente objetos cujas morfologias não dependem da escala de observação. Em particular, estamos interessados principalmente no estudo de interfaces rugosas auto-afins, geradas por processos de deposição de partículas idênticas sobre um substrato inicialmente liso. Definiremos primeiramente alguns modelos discretos de deposição que, do ponto de vista simulacional, permitirão a exposição das principais ferramentas para a análise do crescimento de interfaces rugosas. Em seguida, a partir de princípios de simetria, equações estocásticas de crescimento (contínuas) serão associadas a esses processos. Em alguns casos, um tratamento analítico é possível. Finalmente, discutiremos a idéia de classes de universalidade para esses modelos.

2.1 Modelos Discretos

Os modelos discretos de crescimento de interfaces rugosas que consideraremos neste capítulo são definidos e simulados em redes unidimensionais com L sítios, onde condições periódicas de fronteira são aplicadas (rede em forma de anel). Os processos de de-

posição ocorrem em passos discretos de tempo, onde assumimos como unidade temporal a deposição de L partículas idênticas.

2.1.1 Deposição Aleatória

Consideremos primeiramente o mais simples dos modelos de crescimento, a Deposição Aleatória (DA) sobre uma rede com L sítios indexados por $i = 1, 2, \dots, L$. Escolhemos aleatoriamente uma posição na rede e ali depositamos uma partícula, que cai verticalmente até atingir o topo da coluna associada ao sítio sorteado. Este processo é completamente decorrelacionado, já que cada sítio é escolhido aleatoriamente e as alturas crescem de maneira independente.

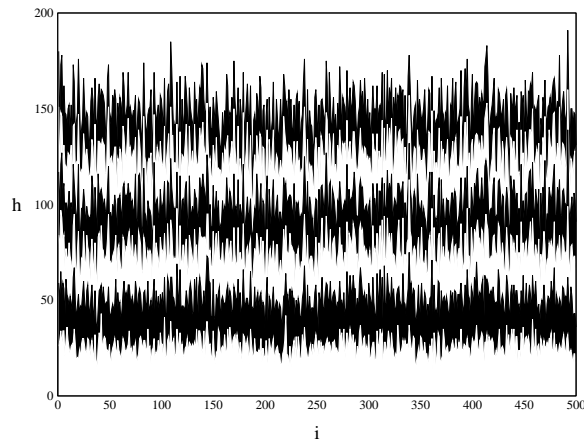


Figura 2.1: Amostra de perfil gerado pela simulação do processo de DA sobre uma rede de comprimento $L = 500$. Definimos um passo de tempo como sendo a deposição de L partículas e mostramos a evolução do perfil até $t = 150$, sendo que a cada 25 passos de tempo trocamos a cor das partículas.

Do ponto de vista computacional é imprescindível a utilização de um bom gerador de números aleatórios para garantir que o processo seja efetivamente decorrelacionado. No Apêndice desta dissertação apresentamos uma breve descrição do algoritmo utilizado para sortear um sítio.

À medida que as partículas são depositadas no substrato, uma superfície rugosa vai se formando, como pode ser visto na figura 2.1. No instante t , a interface é definida pelo conjunto das alturas $\{h_i(t)\}_{i=1, \dots, L}$, onde $h_i(t)$ corresponde ao número de partículas depositadas no sítio i até o instante t . O nosso objetivo é estudar o comportamento desta interface durante o processo de deposição.

As principais grandezas utilizadas para se analisar a dinâmica de crescimento de uma interface são a altura média,

$$\bar{h}(L, t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h_i(t) , \quad (2.1)$$

e a rugosidade $\omega(L, t)$, dada pela expressão

$$\omega^2(L, t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h_i(t) - \bar{h}(L, t)]^2 , \quad (2.2)$$

que é o desvio quadrático médio da distribuição de alturas. O momento de ordem n de uma distribuição estatística é dado pela relação

$$\mu_n(L, t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h_i(t) - \bar{h}(t)]^n . \quad (2.3)$$

Com base nessa expressão, vamos introduzir outras duas grandezas úteis para caracterizar quantitativamente a evolução de uma superfície: o coeficiente de assimetria (*skewness*),

$$S(L, t) = \frac{\mu_3(L, t)}{\mu_2^{3/2}(L, t)} , \quad (2.4)$$

e a curtose (*kurtosis excess*),

$$K(L, t) = \frac{\mu_4(L, t)}{\mu_2^2(L, t)} - 3 . \quad (2.5)$$

O coeficiente de assimetria $S(L, t)$ é nulo para distribuições centrais (simétricas em relação à média). Se o valor mais provável da distribuição for menor que a mediana, temos $S < 0$ e o “rabo” da distribuição é mais pronunciado à direita do valor mais provável. Para o caso contrário, onde o valor mais provável da distribuição é maior que a mediana, indicando que o “rabo” da distribuição é mais pronunciado à esquerda do valor mais provável, temos $S > 0$. Um exemplo de distribuição com *skewness* nulo é a gaussiana, que é perfeitamente simétrica em torno da média.

A curtose é uma medida do “achatamento” (*flatness*) da distribuição e é definida de maneira que a gaussiana possua $K = 0$. Distribuições que possuem $K = 0$ são ditas **mesocúrticas** (*mesokurtics*). Para as distribuições que possuem $K > 0$, chamadas **leptocúrticas** (*leptokurtics*), é possível distinguir claramente um pico em torno do valor médio e um decaimento mais rápido que o da gaussiana. Distribuições com uma

forma mais achatada, onde não é possível distinguir claramente um pico em torno do valor médio, decaem mais lentamente que a gaussiana, possuem $K < 0$ e são chamadas **platocúrticas** (*platykurtic*) [6].

Voltando a considerar o problema da DA, é esperado que a rugosidade da interface gerada por este processo cresça indefinidamente com o tempo e que sua distribuição de alturas seja central ($S = K = 0$), já que não há mecanismos capazes de gerar correlações no sistema (as colunas crescem independentemente). Resultados analíticos mostram [2] que o comportamento temporal da rugosidade é do tipo lei de potência,

$$\omega \sim t^\beta, \quad (2.6)$$

onde β é o expoente de crescimento que, neste modelo, vale $\beta = 1/2$. Na figura 2.2, mostramos o comportamento temporal da rugosidade e, no detalhe, do *skewness* e *kurtosis*. Essas duas últimas tendem a zero, à medida que $L \rightarrow \infty$.

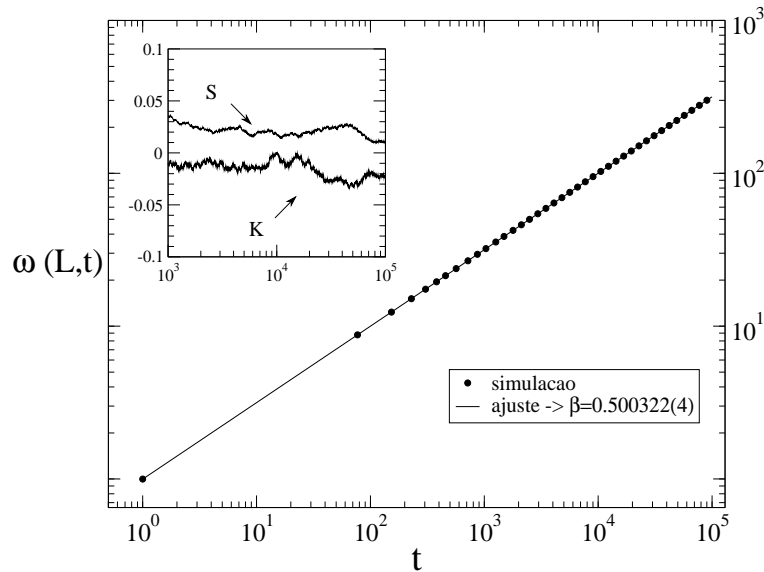


Figura 2.2: Gráfico, em escala logarítmica, mostrando o comportamento temporal da rugosidade para a DA. Cada ponto corresponde à média de 10 amostras simuladas sobre uma rede de tamanho $L = 500$, onde cada passo de tempo corresponde à deposição de L partículas. Também mostramos a regressão realizada sobre esses dados (linha contínua), onde obtivemos $\beta = 0.500322(4)$. No detalhe mostramos o comportamento do coeficiente de assimetria (curva superior) e da curtose (curva inferior) obtidos nessa simulação, onde podemos observar que seus valores são bem próximos de zero.

2.1.2 Modelos Com Correlações

Deposição Aleatória com Relaxação Superficial

Conforme vimos na seção anterior, a DA é um processo completamente decorrelacionado, ou seja, a partícula é depositada no sítio sorteado, independentemente das alturas dos sítios vizinhos. Uma maneira de introduzir correlações no sistema é permitir a relaxação superficial, processo semelhante a uma sedimentação: sorteamos um sítio i , depositamos a partícula e permitimos que ela relaxe, procurando a posição de menor altura, dentre os primeiros vizinhos do sítio sorteado ($i + 1$ e $i - 1$). Se o sítio sorteado for um mínimo local, ou se $h_i = h_{i-1} = h_{i+1}$, a partícula é fixada imediatamente após a deposição.

Esse modelo é conhecido como Deposição Aleatória com Relaxação Superficial (DARS) e sua dinâmica faz com que o perfil gerado seja mais suave ao longo do processo, como podemos ver na figura 2.3, já que pontos de mínimo são favorecidos em detrimento de pontos de máximo. O modelo em rede da DARS foi introduzido por Family em 1986 como uma representação simplificada de processos de deposição de vapor em substratos com baixas temperaturas [7].

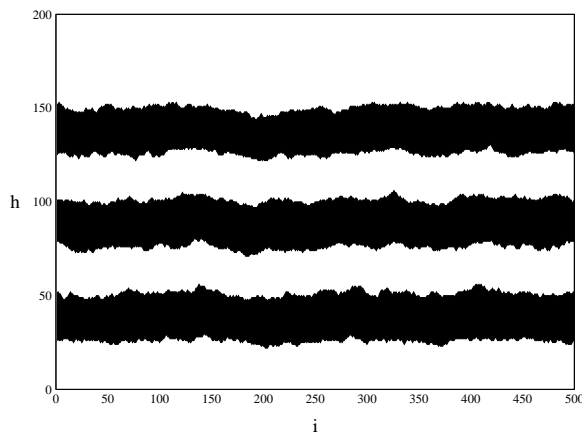


Figura 2.3: Amostra de perfil gerado pela simulação do processo de DARS sobre uma rede de comprimento $L = 500$. Mostramos a evolução do perfil até $t = 150$ e a cada 25 passos de tempo trocamos a cor das partículas. Comparando este resultado com a figura (2.1), observamos nitidamente que o perfil gerado pela DARS é bem mais suave que aquele gerado pela DA.

Como podemos ver na figura 2.4, o comportamento da rugosidade para este modelo apresenta dois regimes distintos. Inicialmente, ω cresce segundo a lei de potência (2.6), até atingir um valor de saturação, $\omega(L, \infty) \equiv \omega_{sat}(L)$. Definimos como tempo

de saturação, $t_x(L)$, o tempo que o sistema leva para atingir este regime.

Variando o tamanho da rede e levantando os gráficos de ω_{sat} e t_x como funções de L , constatamos que

$$\omega_{sat} \sim L^\alpha \quad (2.7)$$

e

$$t_x \sim L^z, \quad (2.8)$$

onde α é chamado expoente da rugosidade e z expoente dinâmico. Para este modelo, em $d = 1$, resultados simulacionais [7] fornecem valores muito próximos de

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{4}, \quad z = 2.$$

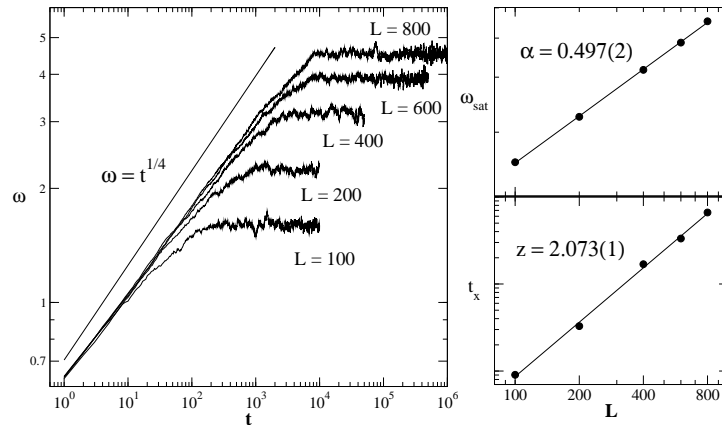


Figura 2.4: *DARS*: À esquerda mostramos o gráfico em escala logarítmica exibindo o comportamento temporal da rugosidade obtido a partir de simulações com $L=100, 200, 400, 600$ e 800 . À medida que aumentamos o tamanho da rede, observamos que a rugosidade estabiliza em valores cada vez mais altos, demorando mais para atingir o regime de saturação. De fato, observamos o comportamento do tipo lei de potência para ω_{sat} e t_x , expresso pelas relações (2.7) e (2.8) respectivamente - gráficos à direita. Os expoentes obtidos estão muito próximos dos valores encontrados em outros trabalhos [2, 7].

O processo de deposição é de não-equilíbrio, pois o sistema recebe novas partículas a todo momento. Contudo, se descrevermos a superfície gerada em termos de um referencial que se move com a velocidade da altura média, veremos que a interface

está em equilíbrio¹.

Podemos ainda introduzir dois parâmetros neste modelo: o número s de passos permitidos no processo de relaxação da partícula e uma tolerância m para a diferença de altura entre primeiros vizinhos antes que ocorra a relaxação. Estudamos a influência desses dois parâmetros no modelo. Nossos resultados mostraram que a variação de s parece não alterar a dinâmica. Esse fato também foi observado por Family em seu trabalho original [7].

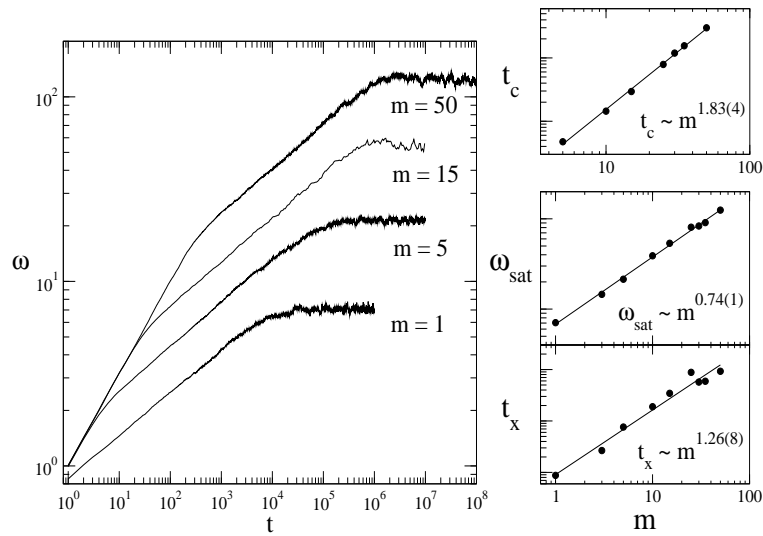


Figura 2.5: *DARS: Comportamento observado ao variar o parâmetro m . Cada curva do gráfico à esquerda é a média de 25 amostras, simuladas sobre uma rede de tamanho $L=500$. Observamos que o tempo de crossover, t_c , a rugosidade de saturação, ω_{sat} , e o tempo de saturação, t_x , dependem de m segundo leis de potência, com expoentes iguais a 1.83(4), 0.74(1) e 1.26(8), respectivamente.*

Já a introdução do parâmetro m na dinâmica implica, em uma dimensão, que se $h_i - h_{i\pm 1} < m$, a partícula será fixada imediatamente após sua deposição, fazendo $h_i(t+1) = h_i(t) + 1$. Assim, o processo de deposição será aleatório - $\beta = 1/2$ - até que as diferenças de altura na interface sejam da ordem de m . A partir daí, a relaxação superficial começa a ocorrer - $\beta = 1/4$ -, indicando o surgimento de correlações no sistema. Aqui definimos t_c como sendo o tempo de *crossover* entre os regimes de DA

¹*Dizemos que uma interface está em equilíbrio quando não há um campo externo agindo sobre ela. Assim, uma interface em equilíbrio separa dois meios - ou domínios - que estejam também em equilíbrio, ou seja, quando um deles não estiver crescendo às custas do outro. No caso de modelos discretos de deposição, o equilíbrio de uma interface é observado quando a taxa de deposição é igual à velocidade de crescimento. [2].*

e DARS; é claro que t_c deve crescer monotonicamente com m já que, quanto maior m , maior será a rugosidade a partir da qual a relaxação começará a ocorrer. De fato observamos que t_c , ω_{sat} e t_x dependem de m segundo leis de potência, com expoentes iguais a 1.83(4), 0.74(1) e 1.26(8), respectivamente. Esses resultados estão mostrados na figura 2.5.

Deposição Aleatória com Recusa

Outra maneira de introduzir correlações é evaporar imediatamente a partícula que for depositada num sítio correspondente a um máximo local. Este modelo, conhecido como Deposição Aleatória com Recusa (DAR), foi introduzido por Kim e Kosterlitz [8] em 1989 e gera perfis como o mostrado na figura 2.6. A rugosidade da interface comporta-se de maneira similar à gerada pela DARS: inicialmente temos o comportamento do tipo lei de potência - equação (2.6) - até que o tempo de saturação é atingido e a rugosidade estabiliza. Aqui observamos também as mesmas leis de potência (2.7) e (2.8). No entanto, os valores simulacionais [8] para os expoentes neste modelo, em $d = 1$, são bem próximos de

$$\alpha = \frac{1}{2}, \beta = \frac{1}{3}, z = \frac{3}{2}.$$

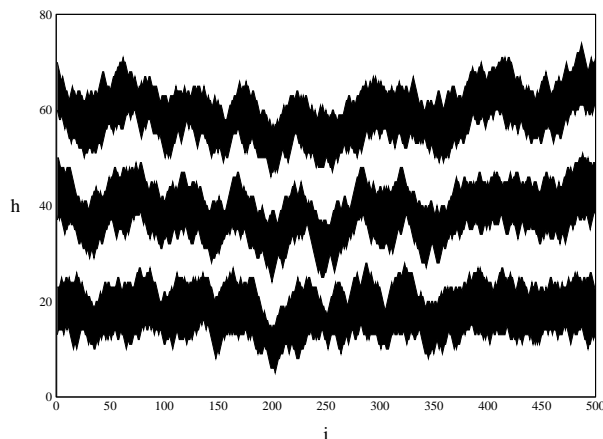


Figura 2.6: Amostra de perfil gerado pela simulação do processo de DAR sobre uma rede de comprimento $L = 500$, para uma única amostra. Mostramos a evolução do perfil até $t = 150$ e a cada 25 passos de tempo trocamos a cor das partículas.

É importante destacar também que a altura média da interface cresce com uma velocidade inferior à taxa de deposição, devido ao fato de que partículas podem evaporar

ao serem depositadas².

Deposição Balística

Outro modelo com correlações que iremos considerar é a Deposição Balística (DB) [9]. Aqui, realizamos o sorteio de um sítio na rede e soltamos uma partícula, que cai verticalmente e se fixa imediatamente ao alcançar o agregado. Assim, se o sítio i for sorteado no instante t , teremos $h_i(t+1) = \max[h_{i-1}(t), h_i(t) + 1, h_{i+1}(t)]$.

Neste modelo, a rugosidade possui o mesmo comportamento observado na DAR, com os mesmos valores para os expoentes de enrugamento. Porém a estrutura produzida por esta dinâmica não é compacta, ocorrendo a formação de reentrâncias nos padrões gerados, como mostrado na figura 2.7, e com isso a velocidade de crescimento supera a taxa de deposição de partículas. Definimos o perfil da estrutura como sendo composto pelas partículas mais altas de cada sítio.

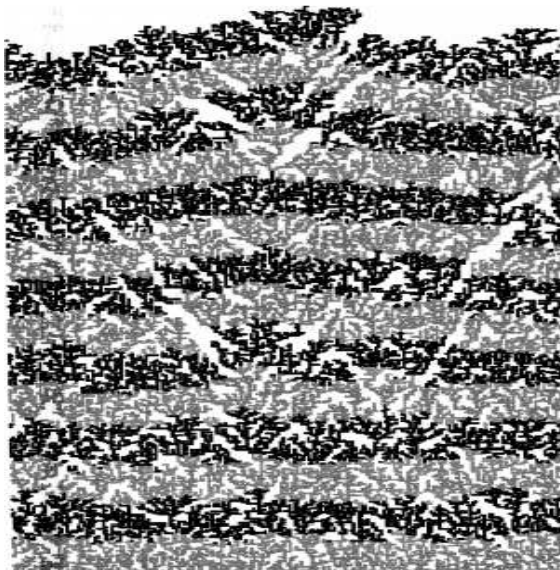


Figura 2.7: Perfil gerado pela deposição de 35000 partículas sobre um substrato de tamanho $L = 200$, utilizando a dinâmica da DB. A cada 2500 partículas depositadas, sua cor é trocada. Podemos observar que a estrutura produzida não é compacta. Retirado de [2], pág. 21.

²Definimos taxa de deposição como sendo o número de partículas por unidade de comprimento que incidem sobre o agregado por unidade de tempo. Na DAR, quando uma partícula é recusada, consideramos sua incidência e, apesar da recusa, ela é computada na determinação da taxa de deposição.

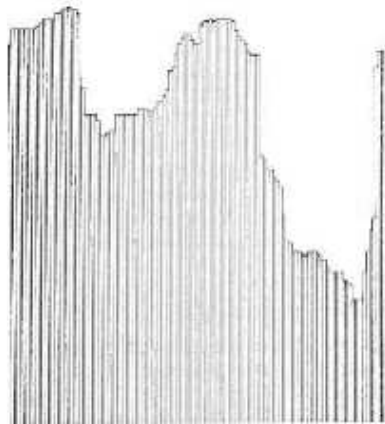


Figura 2.8: Perfil típico produzido pelo processo de DAD num substrato de tamanho $L = 120$. Podemos observar que esta dinâmica gera grandes desníveis nos perfis produzidos. Retirado de [10].

Deposição Aleatória com Difusão

O quarto e último modelo com correlações que iremos considerar nesta seção é a Deposição Aleatória com Difusão (DAD). Neste modelo, a partícula é depositada aleatoriamente numa posição i e procura, dentre os sítios i , $i + 1$ e $i - 1$, a posição que **maximize** o seu **número de ligações**³, desde que a altura do sítio final seja menor ou igual à altura do sítio i .

Esse modelo, que gera perfis como o mostrado na figura 2.8, foi proposto por Wolf e Villain [10] em 1990, com o objetivo de descrever processos de deposição de vapor nos quais as forças de ligação na superfície são preponderantes. Das Sarma e Tamborenea [11] independentemente propuseram em 1991 um modelo similar ao de Wolf-Villain, no qual a partícula procura apenas **aumentar** o seu número de ligações.

Do ponto de vista experimental, esse modelo de deposição tenta descrever diversos aspectos físicos observados em Epitaxia de Feixe Molecular (*Molecular Beam Epitaxy* - MBE) [2]. Em $d = 1$, resultados simulacionais [10] mostram que os valores dos expoentes de enrugamento são bastante próximos de

$$\alpha = \frac{3}{2}, \beta = \frac{3}{8}, z = 4.$$

³O número de ligações de uma partícula corresponde ao número de partículas em contato com a mesma e é sempre um número entre 1 e 4 em $d = 1$.

2.1.3 Lei de Escala de Family-Vicsek

Vimos na seção anterior que, para os modelos discretos nos quais existem correlações espaciais, a rugosidade da interface gerada apresenta dois comportamentos distintos, separados pelo tempo de saturação. Vimos que para os modelos DARS, DAR, DB e DAD são válidas as leis de potência (2.6), (2.7) e (2.8).

Tomando o gráfico $\omega \times t$, é possível colapsar as várias curvas obtidas para diferentes valores de L , em uma única função $f(u)$, chamada função de escala. O método desenvolvido para isso foi proposto por Family e Vicsek [12] em 1985 e consiste, basicamente, no fato de que a rugosidade dividida pela rugosidade de saturação é uma função do tempo dividido pelo tempo de *crossover*:

$$\frac{\omega(L, t)}{\omega_{sat}(L)} \sim f\left(\frac{t}{t_x}\right). \quad (2.9)$$

Substituindo as expressões (2.7) e (2.8) em (2.9), obtemos a relação de escala de tamanho finito de Family-Vicsek,

$$\omega(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (2.10)$$

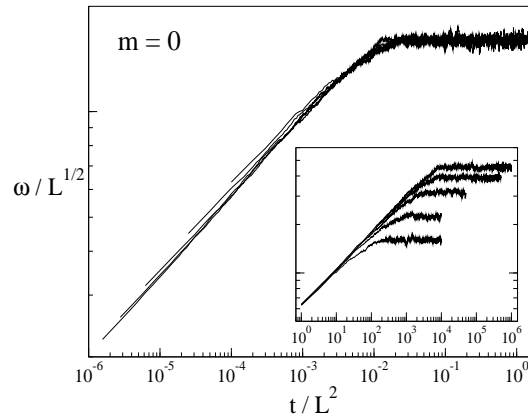


Figura 2.9: Aplicação da lei de escala de Family-Vicsek para a DARS. Aqui temos $m=0$ e variamos o tamanho L da rede. Dividindo as coordenadas horizontais por L^2 e as coordenadas verticais por $L^{1/2}$, obtivemos o colapso das diversas curvas em uma única função e constatamos a validade da expressão (2.9). No detalhe, mostramos os gráficos originais não colapsados.

A função $f(u)$ apresenta dois regimes distintos, dependendo da escala de observação: $f(u) \sim u^\beta$ para $u \ll 1$, e $f(u) = \text{constante}$ para $u \gg 1$. É importante notar que

os dois regimes devem ser coerentes no limite $u \rightarrow 1$ ($t \rightarrow t_x$), o que implica que os expoentes de enrugamento não são completamente independentes. Fazendo $t = t_x$ em (2.6) e substituindo em (2.7), temos que $t_x^\beta \sim L^\alpha$; tendo em vista (2.8) concluímos que

$$z = \frac{\alpha}{\beta} . \quad (2.11)$$

Na figura 2.9 ilustramos este método mostrando o colapso obtido para a DARS em $d = 1$, com $m = 0$ e alguns valores de L .

2.2 Equações Estocásticas de Crescimento

Uma maneira natural de estudar os modelos de deposição descritos na seção anterior é implementar um algoritmo computacional que simule suas principais características. Contudo, uma outra abordagem também é possível: podemos associar equações contínuas aos processos de crescimento e, através de um tratamento analítico, derivar os resultados relevantes para caracterizar esses processos, tais como os valores dos expoentes de enrugamento. Vamos utilizar o caso simples da DA para introduzir o método que, em seguida, será generalizado para os outros modelos, a partir de princípios de simetria.

Inicialmente, introduzimos uma equação diferencial com o objetivo de determinar a variação temporal da altura da interface:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \Phi(\mathbf{x}, t) , \quad (2.12)$$

onde $\Phi(\mathbf{x}, t)$ é o valor instantâneo do número de partículas depositadas na posição \mathbf{x} da superfície, por unidade de tempo. Devido ao caráter aleatório do processo, o fluxo de partículas não é uniforme, de maneira que podemos decompor $\Phi(\mathbf{x}, t)$ em dois termos, reescrevendo (2.12) como

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = F + \eta(\mathbf{x}, t) . \quad (2.13)$$

O primeiro termo, F , é uma constante e representa o número médio de partículas incidentes na posição \mathbf{x} , por unidade de tempo. O segundo termo é um ruído que, para descrever bem as flutuações do processo, deve satisfazer as condições de um ruído branco, ou seja, média nula e ausência de correlações espaço-temporais:

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0 ; \quad (2.14)$$

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D\delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') . \quad (2.15)$$

Se essas condições forem satisfeitas, temos que $\eta(\mathbf{x}, t)$ segue uma distribuição gaussiana. É útil reescrever a equação (2.13) de maneira que a interface seja descrita a partir de um referencial que se move com a mesma velocidade da sua altura média. Para isso, escrevemos

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{\partial (Ft)}{\partial t} + \eta(\mathbf{x}, t) \implies \frac{\partial [h(\mathbf{x}, t) - Ft]}{\partial t} = \eta(\mathbf{x}, t) .$$

onde o termo Ft é devido à velocidade de deslocamento da altura média. Porém, por simplicidade de notação, iremos escrever

$$h(\mathbf{x}, t) - Ft \equiv \tilde{h}(\mathbf{x}, t) ,$$

onde fica subentendido que estamos lidando com a interface num referencial que se move com a velocidade da sua altura média. Assim, temos

$$\frac{\partial \tilde{h}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \eta(\mathbf{x}, t) . \quad (2.16)$$

As propriedades estatísticas da interface descrita pela equação (2.13) são exatamente as mesmas daquela gerada pela DA. Contudo, é importante ressaltar que, rigorosamente falando, o modelo discreto de crescimento não pode ser mapeado diretamente na equação diferencial. Isto ocorre porque a interface gerada não é contínua, mas apresenta saltos e portanto não é diferenciável. Assim, a correspondência correta entre (2.13) e o modelo discreto somente ocorre num regime onde as escalas espaciais sejam muito maiores que o espaçamento entre os sítios da rede (*coarse-graining*).

2.2.1 Princípios de Simetria

Devido à simplicidade da DA, argumentos físicos triviais são suficientes para escrevermos uma equação estocástica de crescimento para este processo. Contudo, é necessário introduzir um método mais abrangente para associar equações estocásticas contínuas a modelos discretos um pouco mais elaborados, como por exemplo a DARS.

O método consiste em escrever uma equação de movimento para a interface que seja a mais simples possível e que preserve as simetrias envolvidas no processo de deposição [2]. Nesta modelagem, a interface é descrita pela função $h(\mathbf{x}, t)$, que assumimos ser unívoca e contínua (diferenciável). Inicialmente, reescrevemos a equação (2.13) de uma forma mais geral

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = G(h, \mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t) , \quad (2.17)$$

onde $G(h, \mathbf{x}, t)$ é uma função determinística e $\eta(\mathbf{x}, t)$ é um ruído. No caso particular em que $G(h, \mathbf{x}, t)$ é uma constante, digamos F , recuperamos a equação (2.13).

Para determinar a forma da função $G(h, \mathbf{x}, t)$ para um modelo específico, devemos elucidar as simetrias envolvidas em sua definição. Para a DARS por exemplo, as seguintes simetrias devem ser preservadas [2]:

- i) **Invariância por translação no tempo.** Neste caso, a equação deve permanecer inalterada pela transformação $t \rightarrow t + \delta_t$, o que impõe uma independência em relação à escolha da origem temporal;
- ii) **Invariância por translação na direção de crescimento.** A equação deve permanecer inalterada pela translação $h \rightarrow h + \delta_h$, o que significa independência em relação a onde definimos $h = 0$;
- iii) **Invariância por translação na direção perpendicular à de crescimento.** A equação deve apresentar a simetria $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \delta_x$, o que implica que G não pode depender explicitamente de \mathbf{x} .
- iv) **Inversão e rotação em torno da direção de crescimento.** Restringe a presença de derivadas espaciais de ordem ímpar e exclui derivadas vetoriais.
- v) **Simetria *Up/Down* para h .** As flutuações da interface devem ser estatisticamente equivalentes nas regiões acima e abaixo da altura média, o que significa que a equação deve permanecer inalterada pela transformação $h \rightarrow -h$. Esta condição de simetria é satisfeita apenas por interfaces em equilíbrio.

Uma vez estabelecidas as simetrias envolvidas no modelo a ser estudado, podemos definir quais termos serão utilizados na construção da equação estocástica de crescimento. Por exemplo, se desejamos estudar um modelo que preserve todas as simetrias descritas acima, devemos excluir da função G o termo não-linear $(\nabla h)^2$, que permanece invariante sob todas as transformações, exceto pela última.

2.2.2 Equações Lineares

Relaxação Superficial

No modelo da DARS temos uma dinâmica em que o fluxo de partículas é maior para posições de mínimo local que, na formulação contínua, correspondem a pontos onde

a segunda derivada é positiva. Assim, a taxa de crescimento neste processo deve ter um termo proporcional ao Laplaciano de $h(\mathbf{x}, t)$

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (2.18)$$

onde ν é chamado de coeficiente linear. Para $\nu > 0$, regiões correspondentes a “vales” ($\nabla^2 h > 0$) crescem a uma taxa maior que aquelas correspondentes a “picos” ($\nabla^2 h < 0$). Nesse caso, ν pode ser associado a uma tensão superficial que tende a suavizar o perfil. A figura 2.10 ilustra esse efeito.

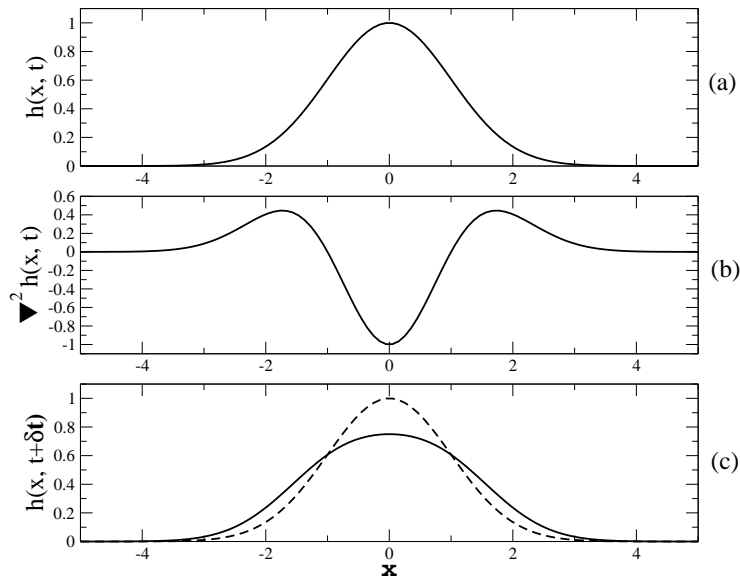


Figura 2.10: *Efeito da tensão superficial sobre a morfologia da interface. Em (a) aproximamos um pico em uma região qualquer da interface por um “bump”, descrito por uma gaussiana $h(x, t)$. Em (b) mostramos a segunda derivada de $h(x, t)$ que, como esperado é mínima quando $h(x, t)$ é máxima. Finalmente, em (c) mostramos $h(x, t + \delta t) = h(x, t) + \delta t \nabla^2 h(x, t)$ - curva contínua. Podemos ver nitidamente a suavização da interface comparando com $h(x, t)$ - curva tracejada.*

A equação (2.18), conhecida como equação EW, foi proposta por Edwards e Wilkinson [13] em 1982, com o objetivo de modelar a evolução de interfaces rugosas onde, além do processo de deposição, ocorrem processos de sedimentação. Esta foi a primeira tentativa de se formular um escalonamento dinâmico (*dynamic scaling*) para superfícies rugosas utilizando uma equação contínua [1]. Esta equação é uma equação de Langevin linear [14] e pode ser resolvida por métodos de Fourier [13] ou por argumentos de escala [2]. Os resultados obtidos para os expoentes são [13]

$$\alpha = \frac{2-d}{2}, \quad \beta = \frac{2-d}{4}, \quad z = 2,$$

em que d é a dimensão do substrato sobre o qual é realizado o processo de deposição. Nossos resultados, obtidos através de simulações em $d = 1$, corroboram estes valores.

Difusão

Na difusão superficial as partículas podem se movimentar em direções paralelas ao substrato, gerando uma corrente $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$, também paralela à superfície. Tendo em vista que o número de partículas não se altera durante o processo difusivo, essa corrente deve obedecer à equação de continuidade

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t). \quad (2.19)$$

Como as partículas buscam maximizar o número de ligações, devemos ter $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \propto -\nabla\mu(\mathbf{x}, t)$, onde $\mu(\mathbf{x}, t)$ é o potencial de ligação ou potencial químico. Porém, regiões com curvatura positiva são mais favoráveis ao aumento do número de ligações do que regiões com curvatura negativa. Assim é razoável escrever $\mu(\mathbf{x}, t) \propto -\nabla^2 h(\mathbf{x}, t)$, donde

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -K\nabla^4 h(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (2.20)$$

Esta é a equação que descreve a DAD e foi introduzida independentemente por Wolf e Villain [10] em 1990, e Das Sarma e Tamborenea [11] em 1991. Na figura 2.11 mostramos o efeito do termo $-\nabla^4 h(\mathbf{x}, t)$ sobre a dinâmica de crescimento da superfície.

A equação de difusão também é linear e pode ser resolvida [2] para se obter

$$\alpha = \frac{4-d}{2}, \quad \beta = \frac{4-d}{8}, \quad z = 4.$$

2.2.3 Equações Não-Lineares

Consideremos agora o problema de escrever uma equação de crescimento para a DB. Neste caso, a teoria linear não é suficiente e devemos introduzir um termo não-linear na equação, devido à existência de um crescimento lateral na dinâmica definida por esse modelo, como podemos ver na figura 2.12.

Como vimos na subseção 2.1.2, neste modelo de deposição a partícula cai verticalmente e se fixa numa altura correspondente a um máximo local. A interface gerada

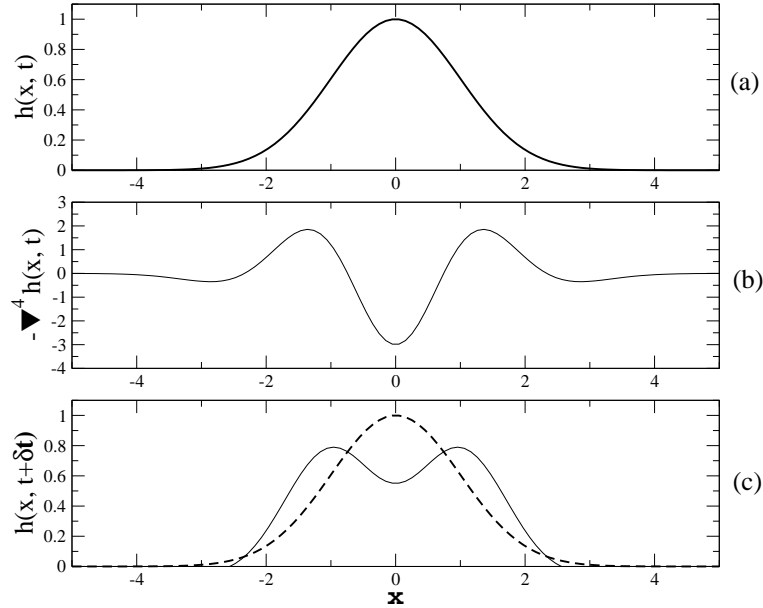


Figura 2.11: Efeito do termo $-\nabla^4 h(\mathbf{x}, t)$ sobre a morfologia da interface. Novamente, em (a) temos uma gaussiana $h(x, t)$, em (b) a função $-\nabla^4 h(x, t)$ e em (c) mostramos $h(x, t + \delta t) = h(x, t) - \delta t \nabla^4 h(x, t)$ - curva contínua - e também, para comparação, $h(x, t)$ - curva tracejada.

por este processo é de não-equilíbrio pois a velocidade de crescimento excede a taxa de deposição. Dizemos que existe uma força motriz (*driving force*) perpendicular à interface que estabelece uma direção preferencial de crescimento e leva à quebra da simetria *up/down*, o que conduz à necessidade de se acrescentar o termo não-linear $(\nabla h(\mathbf{x}, t))^2$ [2]. Acrescentando este termo à equação EW obtemos

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \lambda (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t) , \quad (2.21)$$

conhecida como equação Kardar-Parisi-Zhang, ou equação KPZ, estudada por esses autores em 1986 [15]. O coeficiente λ é chamado de coeficiente não-linear e está relacionado à velocidade de propagação da interface. Na figura 2.13 mostramos o efeito do termo não-linear sobre a morfologia da superfície, em analogia às figuras 2.10 e 2.11.

O modelo da DAR também é descrito pela equação KPZ, cuja não-linearidade não permitiu a obtenção de uma solução exata para os valores dos expoentes de enrugamento em qualquer dimensão. Entretanto, utilizando técnicas de grupo de renormalização [15] pode-se obter, para $d = 1$,



Figura 2.12: Indicação da existência de crescimento lateral na DB. A condição inicial é um substrato liso exceto por uma coluna localizada no centro da rede (em cinza claro). À medida que partículas vão chegando ao sistema, uma estrutura em forma de árvore vai se formando ao redor dessa coluna, indicando que a velocidade de crescimento é localmente perpendicular à interface. Retirado de [2], pág.27.

$$\alpha = \frac{1}{2}, \beta = \frac{1}{3}, z = \frac{3}{2}.$$

Utilizando argumentos de escala, é possível demonstrar que a relação $\alpha + z = 2$ é válida para qualquer dimensão [16].

Para esses modelos discretos descritos pela teoria não-linear exposta nessa seção, é importante observar que, devido à natureza não-conservativa da dinâmica, a velocidade de crescimento é diferente da taxa de deposição. No caso da DB, a velocidade supera a taxa de deposição (devido à formação de um depósito poroso) e o inverso ocorre na DAR (já que partículas podem ser recusadas).

2.2.4 Classes de Universalidade

Classes de universalidade para processos de crescimento são completamente determinadas pelas propriedades de simetria e leis de conservação subjacentes a esses processos. Considerando a expressão geral de uma equação de crescimento, dada por (2.17), já foi discutido que a forma explícita da parte determinística, $G(\mathbf{x}, h, t)$, depende dessas simetrias e leis de conservação atuantes no processo de crescimento. Baseado nisso, podemos distinguir as dinâmicas de crescimento entre conservativas/não-conservativas e lineares/não-lineares. A identificação de uma dinâmica linear ou não-linear pode ser feita a partir da equação que a descreve: obviamente, se houver apenas termos lineares na equação de crescimento, a dinâmica é linear - *e.g.* equação EW ; claro, se houver algum termo não-linear na equação, a dinâmica também será não-linear - *e.g.* equação KPZ.

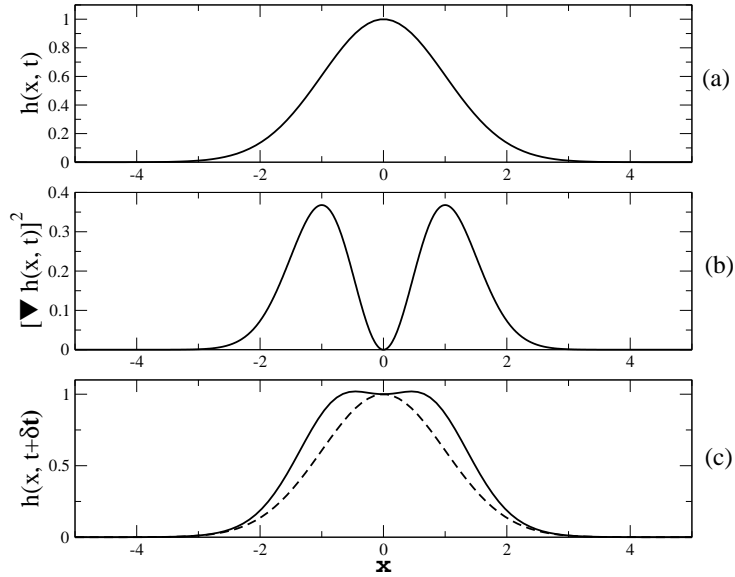


Figura 2.13: Efeito do termo não-linear $(\nabla h(\mathbf{x}, t))^2$ sobre a morfologia da interface. Novamente, em (a) temos uma gaussiana $h(\mathbf{x}, t)$, em (b) a função $(\nabla h(\mathbf{x}, t))^2$ e em (c) mostramos $h(\mathbf{x}, t + \delta t) = h(\mathbf{x}, t) + \delta t (\nabla h(\mathbf{x}, t))^2$ - curva contínua - e também, para comparação, $h(\mathbf{x}, t)$ - curva tracejada. Podemos constatar claramente o crescimento mais acentuado nas laterais do “bump”.

Dizemos que um processo de relaxação é conservativo se ele conserva o número de partículas incidentes sobre o sistema [2]. Na correspondência com as equações contínuas, essa afirmação se traduz no fato de que, se integramos os termos existentes na equação sobre todo o sistema, devemos encontrar um resultado identicamente nulo. Como exemplo de termos conservativos temos $\nabla^2 h$, $\nabla^4 h$ e $\nabla^2 (\nabla h)^2$. Termos que não possuem essa propriedade são não-conservativos e um exemplo seria o termo não-linear da equação KPZ, $(\nabla h)^2$. É importante frisar que um termo não-linear não é necessariamente não-conservativo, como é o caso, por exemplo, do termo $\nabla^2 (\nabla h)^2$.

Quantitativamente, o conjunto dos valores dos expoentes de enrugamento para o processo, define a classe a que ele pertence. Sob esse prisma, se dois sistemas possuem os mesmos valores para os expoentes de enrugamento, dizemos que eles pertencem a uma mesma classe de universalidade e obedecem à mesma equação de crescimento. Consideremos por exemplo a DB e a DAR em $d = 1$. Vimos anteriormente que esses modelos possuem os mesmos valores para os expoentes de enrugamento ($\alpha = 1/2$, $\beta = 1/3$ e $z = 3/2$), o que implica que ambos são descritos pela mesma equação, em particular a equação KPZ (2.21), e dizemos que esses modelos estão na classe de

universalidade KPZ. De maneira análoga, a DARS em $d = 1$ está na classe de universalidade EW, caracterizada pelos expoentes $\alpha = 1/2$, $\beta = 1/4$ e $z = 2$, derivados da equação(2.18). Para a classe da DAD em $d = 1$ temos $\alpha = 3/2$, $\beta = 3/8$ e $z = 4$. Finalmente, a DA define uma quarta classe de universalidade, com $\beta = 1/2$. Neste caso particular, os expoentes α e z não estão definidos, já que não existe saturação nesta dinâmica⁴.

⁴*Se definirmos o expoente de rugosidade a partir da equação(2.7), podemos dizer que $\alpha \rightarrow \infty$, já que $\omega_{sat} \rightarrow \infty$, para qualquer tamanho do sistema.*

Capítulo 3

Autômatos Celulares

De acordo com a segunda lei da termodinâmica, quando removemos um ou mais vínculos internos de um sistema fechado, este atinge um estado de equilíbrio no qual a entropia é máxima (estado desordenado), se o processo for irreversível [17]. Entretanto, sistemas dissipativos, que interagem com um meio, podem evoluir de estados desordenados para estados ordenados¹, nos quais se observa a formação de estruturas complexas. A morfologia de flocos de neve e padrões de escoamento em fluidos turbulentos são alguns exemplos físicos desse tipo de comportamento e inúmeros outros exemplos podem ainda ser retirados de diversas áreas, tais como biologia, química, computação e ciências sociais.

Autômatos celulares (ACs) são modelos matemáticos empregados na investigação de auto-organização e caos em sistemas dinâmicos. Esses modelos são assaz simples para permitir análises matemáticas detalhadas, não obstante complexos o suficiente para exibir uma enorme gama de comportamentos não-triviais. Apesar do enfoque físico que daremos para os ACs neste trabalho, é notável a interdisciplinaridade intrínseca apresentada por esses modelos [4], que também são utilizados para estudar diversos sistemas biológicos, problemas em teoria dos números, processamento de imagens e reconhecimento de padrões visuais, para citar alguns exemplos.

Autômatos celulares podem ser determinísticos (ACDs) ou probabilísticos (ACPs), de acordo com critérios que serão expostos adiante. Neste capítulo inicialmente introduziremos os aspectos gerais que definem um AC. Em seguida, abordaremos alguns exemplos de ACDs e ACPs, apresentando suas características fundamentais e algumas

¹*Note que aqui não há violação da segunda lei da termodinâmica pois, à medida que a entropia do sistema diminui, a do meio que o contém aumenta, de maneira que no balanço final $\Delta S \geq 0$, onde S é a entropia total (sistema mais o meio)*

das ferramentas que podem ser utilizadas para a obtenção de resultados importantes. Finalmente, faremos uma ligação dessa abordagem com o método que apresentaremos nos capítulos seguintes.

3.1 Definições

ACs foram originalmente introduzidos por von Neumann [18] e Ulam [19] com o objetivo de modelar auto-reprodução em sistemas biológicos. Outros nomes para esses modelos podem se encontrados na literatura, tais como “estruturas celulares”, “autômatos tesselários”, “estruturas homogêneas” e “arranjos iterativos” [4].

Segundo Wolfram [4], por definição, um AC possui as seguintes características:

1. **Espaço discreto:** Um AC consiste num arranjo espacial discreto d -dimensional, constituído de um número finito de células ou sítios;
2. **Tempo discreto:** A dinâmica de atualização dessas células ocorre em passos discretos de tempo;
3. **Estados discretos:** O estado de uma célula é definido por uma variável discreta;
4. **Homogeneidade:** Todas as células são idênticas e dispostas em um arranjo regular;
5. **Atualização síncrona:** Todas as células são atualizadas simultaneamente em cada passo de tempo;
6. **Regras de atualização:**
 - São fixas durante todo o processo de evolução do sistema;
 - Dependem apenas dos estados da vizinhança próxima da célula (regras espacialmente locais);
 - Dependem de estados em um número finito de passos de tempo precedentes (regras temporalmente locais);
 - Podem ser determinísticas (ACDs) ou probabilísticas (ACPs).

Em suma, segundo Wolfram, um AC consiste numa rede regular e uniforme, geralmente finita em extensão, onde uma variável discreta é associada a cada sítio. Em

passos discretos de tempo, o sistema evolui segundo regras fixas locais que associam o estado de um sítio no instante t com seu próprio estado e os estados de seus r primeiros vizinhos nos τ instantes de tempo anteriores. Em um dado instante, o estado de um AC é completamente especificado pelo conjunto dos estados de todos os sítios que o compõem. Dizemos que esses modelos são triplamente discretizados: no espaço, no tempo e nos valores que as quantidades físicas podem assumir.

Considerando-se as características enumeradas acima, fica claro que simulações computacionais são ferramentas cruciais na investigação de ACs, que podem ser vistos não só como modelos matemáticos para sistemas físicos (e outros sistemas), mas como modelos essencialmente computacionais. Normalmente, dadas as regras básicas de evolução de um AC, não podemos inferir diretamente suas propriedades gerais, mas seu comportamento *sempre* pode ser determinado a partir de simulações explícitas em um computador. E, baseando-se em tais “experimentos computacionais”, dados empíricos podem ser obtidos e resultados teóricos podem ser inferidos.

Após estabelecer as definições fundamentais, vamos considerar alguns exemplos de ACs nas próximas seções. Primeiramente iremos analisar o caso dos ACDs, através dos autômatos celulares elementares (ou autômatos celulares de Wolfram) que, apesar da enorme simplicidade de sua construção, são capazes de exibir comportamentos de veras complicados. Em seguida, definiremos o método de acumulação introduzido por Sales *et al.* [20], a partir do qual é possível empregar toda a metodologia de estudo de crescimento de interfaces rugosas e mostraremos também os resultados obtidos pela aplicação desta técnica aos ACs elementares. Finalmente, iremos apresentar as principais características de um exemplo clássico de ACP, o autômato celular de Domany-Kinzel, que tem sido amplamente estudado nas últimas décadas.

3.2 Autômatos Celulares Determinísticos

Vamos considerar inicialmente os chamados autômatos celulares elementares [4], ou autômatos celulares de Wolfram, que são definidos em uma rede unidimensional com L sítios, onde aplicamos condições periódicas de fronteira (o sítio 1 é vizinho do sítio L). A cada sítio i associamos uma variável binária $\sigma_i(t) \in \{0, 1\}$ e dizemos que o sítio i está ocupado ou ativo (desocupado ou inativo) no instante t quando $\sigma_i(t) = 1$ (0). Dessa maneira, o estado do AC no instante t é especificado pelo conjunto $\{\sigma_i(t)\}_{i=1,\dots,L}$. Definimos a vizinhança do sítio i no instante t como sendo o próprio sítio mais suas adjacências, os sítios $i + 1$ e $i - 1$, nesse mesmo instante de tempo. Assim, o estado

de um sítio no passo de tempo seguinte, $\sigma_i(t+1)$, depende *deterministicamente* dos estados $\sigma_{i-1}(t)$, $\sigma_i(t)$ e $\sigma_{i+1}(t)$:

$$\sigma_i(t+1) = f(\sigma_{i-1}(t), \sigma_i(t), \sigma_{i+1}(t)) \quad (3.1)$$

Ora, se temos $2^3 = 8$ combinações possíveis para uma vizinhança de três sítios de estados binários, é claro que a regra que determinará a dinâmica evolutiva do AC será dada a partir da especificação de um resultado para cada uma dessas combinações. Na figura 3.1 mostramos uma possível regra para um AC elementar e, na figura 3.2, exibimos alguns passos da sua evolução.

111	110	101	100	011	010	001	000
↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓
0	1	0	1	1	0	1	0

Figura 3.1: *Possível regra local de evolução para um AC elementar. Na primeira linha mostramos cada uma das $2^3 = 8$ combinações possíveis para uma vizinhança de três sítios de estados binários e, na linha de baixo, o valor do sítio central no passo de tempo subsequente. Essa regra pode ser vista como um número binário de oito dígitos, 01011010, cujo valor na representação decimal é 90.*

t	01011011010101011100010 10011011100000101110101 111110111000100110001 000010101101011111010 000100001100010001000
	↓

Figura 3.2: *Evolução de um AC elementar. Todos os sítios são atualizados simultaneamente a partir da aplicação da regra 90, especificada na figura 3.1.*

Dessa maneira, existem $2^8 = 256$ regras distintas que podemos associar a um AC elementar, já que essas são determinadas por qualquer número binário de oito dígitos. Por razões de simplicidade, iremos nos referir a uma regra através do número decimal corresponde à sua representação binária. Na figura 3.3 mostramos os padrões gerados pelas regras 90 e 22, a partir de um estado inicial no qual apenas o sítio central está ocupado.

Em um belo trabalho [4], Wolfram estudou profundamente os ACs elementares, dando maior enfoque às regras que ele definiu como *legais*. Primeiramente, uma regra é *ilegal* a menos que um estado inicial nulo, $\sigma_i(0) = 0 \forall i$, permaneça nulo. Esse critério,

chamado **condição de quiescência**, exclui as regras ímpares (que terminem em 1 na representação binária). Em segundo lugar, regras *legais* devem possuir **simetria de reflexão**, o que significa que as vizinhanças **100** e **001** devem fornecer resultados iguais, o mesmo ocorrendo para **110** e **011**. Dessa maneira, dentre as 256 regras possíveis, Wolfram estudou detalhadamente neste trabalho as 32 regras do tipo $\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4\alpha_2\alpha_5\alpha_4\alpha_0$.

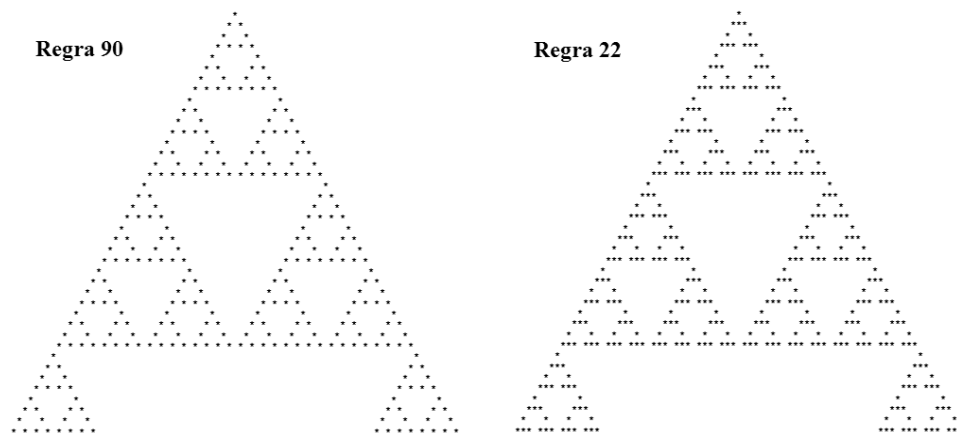


Figura 3.3: *Padrões espaço-temporais produzidos pelas regras 90 e 22 a partir de um estado inicial no qual apenas o sítio central está ocupado. Para melhor visualização desses padrões, um sítio ocupado é representado por um asterisco, enquanto um espaço em branco indica um sítio vazio.*

Na maioria dos casos, ACs elementares evoluem irreversivelmente e, nessas situações, suas trajetórias no espaço de configurações sempre conduzem para regiões atratoras, que contêm tipicamente uma fração muito pequena de todos os estados acessíveis ao sistema. Alguns desses sistemas possuem um comportamento de auto-organização, a partir do qual observa-se a formação de estruturas características, mesmo partindo de configurações iniciais desordenadas. A natureza desses atratores determina a forma e a extensão dessas estruturas, que foram divididas por Wolfram em quatro classes distintas [4]:

- I - Pontos fixos homogêneos:** após um número finito de passos de tempo, o sistema atinge um estado homogêneo, no qual todos os sítios possuem o mesmo valor (*e.g.* regras 0, 16 e 136). Partindo porém de certas configurações iniciais excepcionais, o sistema pode não evoluir para esse estado, ingressando em ciclos não-triviais. Todavia, a fração dessas configurações excepcionais decai rapidamente à medida que o tamanho do sistema aumenta.

- II - Periódicos:** os padrões gerados são constituídos por estruturas estáveis persistentes (*e.g.* regras 8, 24, 40 e 56) ou estruturas periódicas persistentes, com períodos tipicamente curtos (*e.g.* regra 108).
- III - Caóticos:** padrões aperiódicos são produzidos. As regras pertencentes a essa classe possuem forte dependência das condições iniciais, apresentando uma grande instabilidade com relação a pequenas variações nos estados iniciais (*e.g.* regras 18, 45 e 146). Esse comportamento caótico pode ser identificado observando-se a evolução de um AC definido pela diferença entre um AC e uma cópia sua, sobre a qual se aplica um dano, que pode ser por exemplo a alteração dos estados de alguns sítios.
- IV - Complexos:** estruturas complexas localizadas são produzidas (*e.g.* regra 110). O autor considera a possibilidade de que as regras pertencentes a essa classe possam apresentar a propriedade da *universalidade computacional*: configurações iniciais adequadas podem especificar procedimentos algorítmicos arbitrários, fazendo com que o sistema funcione como um computador para aplicações gerais - *general purpose computer* - capaz de avaliar qualquer função computável.

Na figura 3.4 mostramos alguns exemplos de padrões produzidos, para cada uma das quatro classes de Wolfram.

Os ACs de uma mesma classe apresentam comportamentos qualitativos muito similares e a existência de tão poucas classes implica uma universalidade considerável no comportamento desses ACs elementares. Isso significa que muitos dos detalhes da construção de um AC são irrelevantes na determinação de seu comportamento qualitativo.

3.3 Método de Acumulação

A metodologia para análise de crescimento de interfaces rugosas também pode ser empregada no estudo de ACs. Para isso mapeamos a dinâmica de uma regra num processo de crescimento, a partir de um método de acumulação [20] definido através da relação

$$h_i(t) = \sum_{\tau=1}^t \sigma_i(\tau) , \quad (3.2)$$

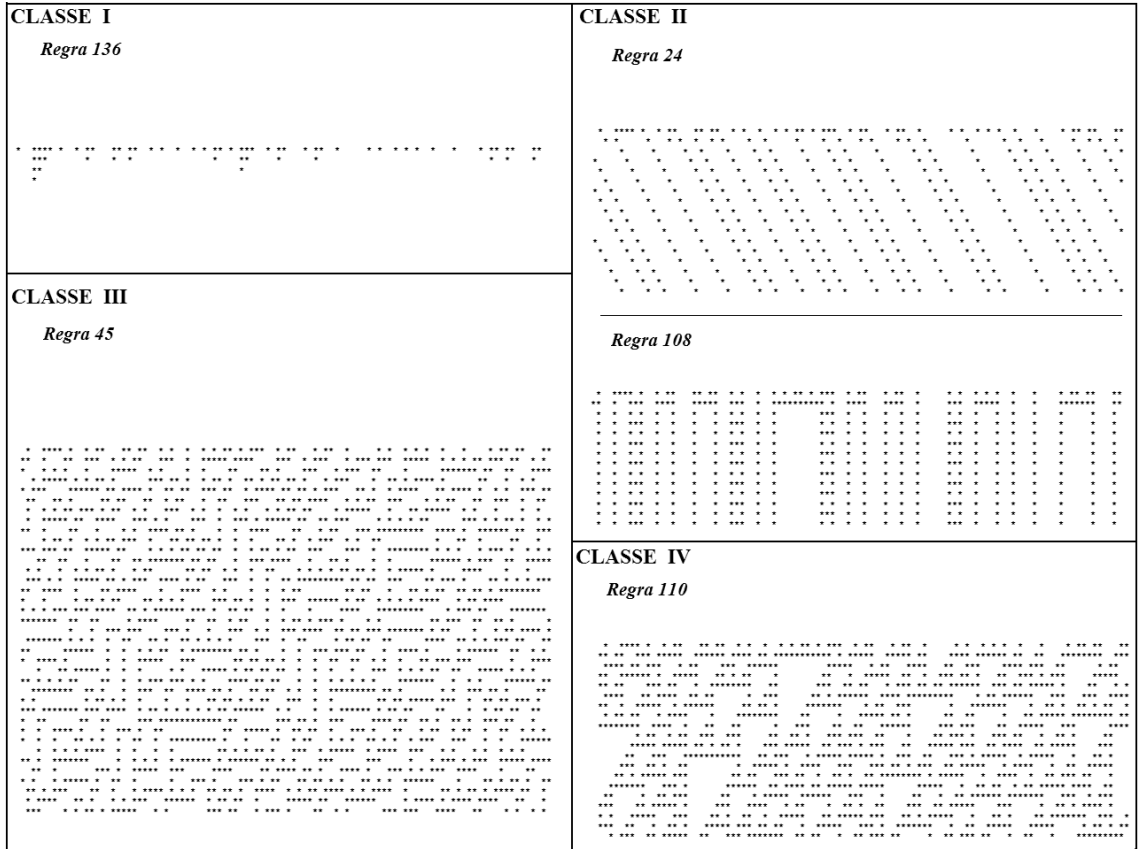


Figura 3.4: *Exemplos de padrões produzidos por regras em cada uma das quatro classes de Wolfram. Aqui utilizamos uma configuração inicial aleatória, com a metade dos sítios ocupada. Novamente empregamos o esquema de visualização no qual um sítio ocupado é representado por um asterisco, enquanto um sítio vazio é representado por um espaço em branco.*

onde $h_i(t)$ é a altura do sítio i no instante t .

Dessa forma, é possível enquadrar regras de ACs elementares em classes de universalidade, de acordo com o valor do expoente de crescimento β , bem como o comportamento do coeficiente de assimetria e da curtose da distribuição de alturas da interface gerada pelo processo de acumulação.

Efetuamos uma análise detalhada dos ACs elementares das classes III e IV de Wolfram utilizando esta abordagem [21]. Algumas regras ilegais, cujos comportamentos são similares aos observados para essas classes, também foram estudadas. Realizamos simulações em redes de tamanho $L = 10^4$, com condições periódicas de fronteira, deixando o sistema evoluir até $t = 10^5$ e tomando a média de 100 amostras. Para

algumas regras fizemos uma análise de tamanho finito para obter maior precisão nos valores dos expoentes, enquanto que para outras fizemos um estudo assintótico com $L = 10^3$ e deixando o sistema evoluir até $t = 10^7$. Utilizamos como condição inicial uma distribuição aleatória de ocupação para os sítios da rede. De acordo com os valores encontrados para o expoente β , observamos quatro comportamentos distintos:

- $\beta = 1 \implies$ correspondente à classe da Percolação Direcionada Compacta (CDP). O comportamento temporal linear da rugosidade ocorre devido à formação de blocos de 0s e 1s nos padrões gerados. Neste caso, as alturas associadas aos blocos constituídos por 1s crescem uma unidade a cada passo de tempo, enquanto as alturas associadas aos blocos formados por 0s não crescem. Assim, a rugosidade da interface cresce uma unidade a cada passo de tempo e a distribuição de alturas obviamente não é simétrica (encontramos valores não-nulos para o *skewness* e a curtose - dados pelas equações (2.4) e (2.5) respectivamente). Apenas duas regras compõem esta classe: 73 e 109.
- $\beta = 0.83 \pm 0.01 \implies$ valor próximo do correspondente à classe da Percolação Direcionada (DP). Este valor também foi obtido para a transição entre as fases congelada e ativa no ACP de Domany-Kinzel (a ser discutido na próxima seção), quando um esquema simétrico de atualização é aplicado [22, 23]. Nesta classe estão as regras 110, 124, 137 e 193 e para elas encontramos $S = 0$ ($t > 10^4$) e $K < 0$ ($\forall t$).
- $\beta = 0.66 \pm 0.01 \implies$ valor próximo do obtido na transição entre as fases congelada e ativa no ACP de Domany-Kinzel [22, 23], porém quando um esquema assimétrico de atualização é aplicado. Para esta classe, constituída pelas regras 54 e 147, obtivemos $S \neq 0$ e $K > 0$. Observamos ainda a existência de um *crossover* independente do tamanho do sistema, a partir do qual $\beta = 0.53 \pm 0.01$ e $S = K = 0$.
- $\beta = 0.50 \pm 0.01 \implies$ valor correspondente à DA. Esta classe pode ser dividida em quatro subclasses, de acordo com os comportamentos observados para S e K :
 - Para a primeira subclasse, constituída pelas regras 30, 45, 60, 75, 86, 89, 90, 101, 120, 105, 106, 120, 135, 149, 150, 153, 165, 169, 195, 225, encontramos $S = 0 \forall t$ e $K \rightarrow 0$ muito rapidamente ($K = 0$ para $t > 10^2$). As regras pertencentes a essa subclasse estão efetivamente na classe de universalidade da DA para todos

os tempos e a equação que descreve a evolução desses sistemas é (2.13).

- As regras pertencentes às outras três subclasses possuem comportamentos diferenciados de S e K no início do processo, mas vão assintoticamente para a classe de universalidade da DA. Na segunda subclasse temos apenas as regras 18 e 183, para as quais observamos oscilações no comportamento inicial de S e K , que atingem um valor nulo para $t > 10^2$ e $t > 10^3$, respectivamente.
- Na terceira subclasse, formada pelas regras 22, 146, 151 e 182, S e K não oscilam no início do processo, mas levam um tempo maior para chegar a zero, da ordem de 10^4 e 10^3 , respectivamente.
- Para a quarta e última subclasse, constituída pelas regras 122, 126, 129 e 161, temos que S e K não oscilam e muito rapidamente atingem um valor nulo ($t \approx 50$).

Assim, podemos concluir que este método de acumulação constitui uma boa ferramenta no estudo de autômatos celulares determinísticos. Conforme veremos na seção seguinte, os ACPs também podem ser estudados utilizando esta metodologia.

3.4 Autômatos Celulares Probabilísticos

Os ACPs possuem exatamente as mesmas características dos ACDs (vide pág. 25), exceto é claro pelas regras de atualização que agora são probabilísticas. Dessa maneira, o estado de um sítio em um dado instante de tempo dependerá *probabilisticamente* dos estados de seus vizinhos no passo de tempo imediatamente anterior.

O autômato celular de Domany-Kinzel (ACDK), introduzido em 1984, é um exemplo clássico dentre os ACPs [24]. O ACDK é definido em uma rede unidimensional (com condições periódicas de fronteira) de estados binários ($\sigma_i(t) \in \{0, 1\}$) e vizinhança de dois sítios ($i + 1$ e $i - 1$). Para as regras de atualização, os autores definiram taxas de transição probabilísticas, segundo as quais p_j é a probabilidade de $\sigma_i(t + 1) = 1$, onde $j = \sigma_{i+1}(t) + \sigma_{i-1}(t)$. Obviamente, a probabilidade de $\sigma_i(t + 1) = 0$ é $1 - p_j$. Essas regras são do tipo totalísticas, pois dependem da soma dos valores correspondentes aos estados dos sítios considerados. Ora, como $\sigma_i(t)$ é uma variável binária, temos que $j \in \{0, 1, 2\}$ e, atribuindo valores a p_0 , p_1 e p_2 , especificamos completamente uma regra de evolução para o ACDK.

Fazendo $p_0 = 0$, critério similar à condição de quiescência discutida para os ACDs, restam dois parâmetros de controle, p_1 e p_2 . O ACDK apresenta dois regimes estacionários distintos, dependendo dos valores desses dois parâmetros: o sistema pode atingir o estado absorvente no qual todos os sítios são inativos, ou permanecer indefinidamente com uma certa densidade de sítios ativos. Denominamos o primeiro e o segundo regimes estacionários respectivamente como fases *congelada* e *ativa*² e, mesmo sendo unidimensional, o ACDK apresenta uma transição contínua entre essas fases.

Com base no método de acumulação (3.2), Atman e Moreira construíram o diagrama de fases para o ACDK, empregando o *método do expoente de crescimento*, introduzido por esses autores [26]. Esse método consiste em estudar a interface gerada pelo processo de acumulação em termos da flutuação da rugosidade, definida como

$$\delta\omega(L, t) \equiv \sqrt{\omega^2(L, t) - \omega^2(L, 0)} . \quad (3.3)$$

onde $\omega^2(L, 0)$ é a rugosidade inicial (estado inicial do sistema). Na fase congelada temos, no início da dinâmica, $\delta\omega(L, t) \sim t^\beta$. Mas com o tempo todos os sítios assumem o valor nulo e a rugosidade satura. Fixando p_2 e variando p_1 , partindo da fase congelada, podemos observar que a rugosidade satura em valores cada vez mais altos, à medida que p_1 vai se aproximando da linha de transição. Além disso, o valor do expoente de crescimento β também vai aumentando. Na transição a rugosidade não satura, crescendo indefinidamente com tempo num regime onde β possui um valor máximo.

Na fase ativa temos $\beta = 1/2$ e, em regiões distantes da criticalidade, a dinâmica de evolução do sistema é descrita pela equação (2.13). Porém, aqui o ruído $\eta(\mathbf{x}, t)$ não é branco, mas possui correlações espaciais e temporais de curto alcance. A autocorrelação do ruído decai exponencialmente e é descrita por [2, 23]

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle \sim e^{-|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|/\xi} e^{-|t-t'|/\tau} , \quad (3.4)$$

onde ξ é o comprimento de correlação e τ o tempo de correlação, ambos finitos nesse regime. Contudo, à medida que nos aproximamos da criticalidade, ξ e τ crescem e, quando atingimos a transição, seus valores divergem e as correlações passam a ser de longo alcance. Assim, a autocorrelação do ruído passa a decair segundo uma lei de potência [2, 23]

² Na verdade, a fase ativa é constituída de duas fases, uma caótica e outra não-caótica [25].

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle \sim |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-2\beta_p/\nu_\perp} |t - t'|^{-2\beta_p/\nu_\parallel}, \quad (3.5)$$

onde β_p , ν_\perp e ν_\parallel são os expoentes críticos do parâmetro de ordem, do comprimento de correlação e do tempo de correlação, respectivamente.

Os autores identificaram uma dependência do valor de β na transição, com relação ao esquema de atualização empregado, que pode ser *simétrico* ou *assimétrico*. Em ambos os esquemas de atualização as taxas de transição probabilísticas são especificadas pelos parâmetros p_j , a distinção residindo [23, 26] no cálculo do índice j : no primeiro caso $j = \sigma_{i+1}(t) + \sigma_{i-1}(t)$ e no segundo $j = \sigma_{i-1}(t) + \sigma_i(t)$. Para o caso simétrico $\beta \simeq 0.83$ e para o caso não-simétrico $\beta \simeq 0.61$ na transição.

Capítulo 4

Equações de crescimento: uma nova abordagem

Nesse ponto iniciaremos a apresentação das principais contribuições originais deste trabalho, como aplicações dos conceitos discutidos nos capítulos precedentes. Iremos introduzir um método[27] para estudar equações estocásticas de crescimento, como as apresentadas no capítulo 2. Como será visto, esse método consiste no estabelecimento de um processo de crescimento de interfaces rugosas, para o qual atribuímos, em cada instante de tempo, uma probabilidade de deposição de uma partícula para cada sítio de uma rede unidimensional. Essa probabilidade depende das diferenças de alturas entre sítios vizinhos, de uma maneira relacionada à parte determinística da equação a ser estudada, e possui ainda dois parâmetros de controle, κ e ρ .

Neste capítulo iremos discutir os resultados obtidos a partir da aplicação desse método ao estudo da equação EW - (2.18) - e a equação de crescimento com difusão - (2.20) -, ambas em $d = 1$. Nosso principal interesse residiu no comportamento temporal da rugosidade, a partir do qual obtivemos os expoentes correspondentes às classes de universalidade das equações estudadas. Além disso, variando o parâmetro κ , observamos um *crossover* entre o regime de DA e o regime descrito por cada equação. Também encontramos leis de potência para a rugosidade e o tempo de saturação, em termos desse parâmetro.

Estudamos ainda o comportamento do coeficiente de assimetria e da curtose, de acordo com os valores dos parâmetros κ e ρ , para cada uma das duas classes de universalidade. Finalmente, detalhamos o comportamento da velocidade de crescimento com os valores desses parâmetros.

4.1 O método

Considere uma rede unidimensional de tamanho L com condições periódicas de fronteira e inicialmente lisa. Em cada passo de tempo, todos os sítios dessa rede são visitados *simultaneamente*, de maneira que o sítio i receberá uma partícula no instante t com probabilidade $p_i(t)$, dada por

$$p_i(t) = \rho e^{\kappa\Gamma_i(t)} . \quad (4.1)$$

Aqui, $0 < \rho < 1$ e $\kappa > 0$ são dois parâmetros de controle, fixos durante a dinâmica, e $\Gamma_i(t)$ é um *kernel* que depende das alturas do sítio i e de seus vizinhos. A forma funcional de $\Gamma_i(t)$ será dada pela discretização da parte determinística da equação de crescimento que desejamos estudar que, no caso da equação EW, é o laplaciano $\nabla^2 h(x)$ e, para a equação de crescimento com difusão, é a derivada de quarta ordem $-\nabla^4 h(x)$.

Lembremos que a derivada de uma função $h(x)$ é definida pelo limite

$$\frac{dh}{dx} \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{h(x + \Delta x) - h(x)}{\Delta x} . \quad (4.2)$$

Para o caso onde o espaço é discreto, substituímos a variável contínua x pela variável discreta i e ainda temos que a menor separação espacial possível é de uma unidade de rede, ou seja, $\Delta x = 1$. Assim, tendo em vista o caso discreto, obtemos

$$\nabla h_i = \frac{dh}{dx} \longrightarrow \Gamma_i = h_{i+1} - h_i . \quad (4.3)$$

No caso da equação EW, cuja parte determinística é proporcional a $\nabla^2 h(\mathbf{x}, t)$, temos

$$\nabla^2 h_i(t) = \nabla(\nabla h_i(t)) \longrightarrow \Gamma_i = h_{i+2}(t) - 2h_{i+1}(t) + h_i(t) . \quad (4.4)$$

Porém, aplicamos a translação $i \rightarrow i - 1$ no lado direito da equação (4.4) para obter uma forma mais simétrica,

$$\Gamma_i(t) = h_{i+1}(t) - 2h_i(t) + h_{i-1}(t) . \quad (4.5)$$

Da mesma maneira, para a equação de crescimento com difusão, na qual a parte determinística é proporcional à derivada de quarta ordem $-\nabla^4 h(\mathbf{x}, t)$, temos

$$\Gamma_i(t) = -h_{i+2}(t) - h_{i-2}(t) + 4[h_{i+1}(t) + h_{i-1}(t)] - 6h_i(t) . \quad (4.6)$$

A parte estocástica das equações EW e de crescimento com difusão, representadas por um ruído branco $\eta(\mathbf{x}, t)$ - propriedades (2.14) e (2.15) -, é incorporada ao método

quando impomos uma natureza probabilística a ele, determinando que o sítio i receba uma partícula no instante t com probabilidade $p_i(t)$. *A priori*, não podemos afirmar que a aleatoriedade presente no nosso método pode ser representada por um ruído branco; esse fato será mostrado a partir dos resultados simulacionais obtidos.

Podemos associar ao sítio i no instante t uma variável de estado $\sigma_i(t) \equiv \nabla h_i(t) = h_{i+1} - h_i$. Dessa forma, podemos reescrever as equações (4.5) e (4.6) em termos dessa variável de estado, para obter expressões mais compactas,

$$\nabla^2 h_i \longrightarrow \Gamma_i(t) = \sigma_i(t) - \sigma_{i-1}(t) , \quad (4.7)$$

$$-\nabla^4 h_i \longrightarrow \Gamma_i(t) = -\sigma_{i+1}(t) + 3[\sigma_i(t) - \sigma_{i-1}(t)] + \sigma_{i-2}(t) . \quad (4.8)$$

Assim, podemos descrever a interface em termos dessa variável de estado, sem perder nenhuma informação relevante para o desenvolvimento do processo de crescimento. Posto que todos os sítios são visitados em cada instante de tempo, com atualização simultânea, podemos afirmar que o nosso método segue uma dinâmica de ACs, já que aqui temos espaço, tempo e estados discretos, representados respectivamente pelas variáveis discretas i , t e $\sigma_i(t)$.

Da maneira como definimos o método, através da equação (4.1), eventualmente teremos $p_i(t) > 1$. Para este caso, impomos a condição

$$p_i(t) \geq 1 \implies p_i(t) = 1 \implies h_i(t+1) = h_i(t) + 1 .$$

Assim, para κ e ρ fixos, existe um valor $\Gamma_{max}(\rho, \kappa)$ tal que

$$\Gamma_i \geq \Gamma_{max} \implies p_i = 1 . \quad (4.9)$$

Fazendo $p_i = 1$ em (4.1), obtemos

$$\Gamma_{max}(\rho, \kappa) = \text{int} \left(-\frac{1}{\kappa} \ln \rho \right) , \quad (4.10)$$

onde $\text{int}(x)$ significa tomar a parte inteira¹ do número x .

Com o intuito de simplificar a implementação computacional do método, definimos

¹ Γ_i é um inteiro por definição, por ser o resultado de somas e/ou subtrações de alturas, que são variáveis inteiras.

também um valor mínimo para o *kernel*, abaixo do qual $p_i = 0$. Esse valor, que denominaremos Γ_{min} , é obtido a partir de (4.1), fazendo $p_i = 10^{-10}$. Assim, temos

$$\begin{aligned}\Gamma_{min}(\rho, \kappa) &= \text{int} \left[-\frac{1}{\kappa} (\ln \rho + 10 \ln 10) \right] \\ \implies \Gamma_{min}(\rho, \kappa) &= \Gamma_{max} - \text{int} \left(\frac{10}{\kappa} \ln 10 \right) .\end{aligned}\quad (4.11)$$

O algoritmo de aplicação do método pode ser representado esquematicamente através do seguinte diagrama:

1. Calcule Γ_{max} e Γ_{min} para o par de valores κ e ρ ;
2. Para $\Gamma = \Gamma_{min} , \dots , \Gamma_{max}$, calcule $p(\Gamma)$;
3. Para $i = 1, \dots , L$:
 - (a) Calcule Γ_i ;
 - (b) Verifique se a condição $\Gamma_i \geq \Gamma_{min}$ é verdadeira ;
 - \implies **Caso negativo**, atribua à variável auxiliar $aux(i)$ o valor 0 ;
 - \implies **Caso positivo**, verifique se a condição $\Gamma_i \geq \Gamma_{max}$ é verdadeira :
 - \longrightarrow **Caso positivo**, faça $aux(i) = 1$;
 - \longrightarrow **Caso negativo**, sorteie um número x no intervalo $0 \leq x < 1$. Se $x < p_i(\Gamma_i)$, faça $aux(i) = 1$. Caso contrário, faça $aux(i) = 0$;
4. Para $i = 1, \dots , L$, faça $h_i = h_i + aux(i)$.
5. Faça $t = t + 1$ e volte para o item 3, até atingir o tempo máximo desejado para o processo de crescimento.

Como podemos observar no diagrama, a primeira condição a ser verificada pelo algoritmo é se $\Gamma_i \geq \Gamma_{min}$. Em seguida, observa-se a condição $\Gamma_i \geq \Gamma_{max}$, para só então realizar o cálculo de p_i . Dessa maneira, devemos estabelecer uma importante restrição sobre Γ_{max} , para que não haja uma incoerência com a definição do método. Pela equação (4.1), temos que

$$\Gamma_i = 0 \implies p_i = \rho .$$

Assim, devemos impor a condição

$$\Gamma_{max} \geq 1 ,$$

já que $\Gamma_{max} = 0$ significaria, de acordo com o algoritmo, que

$$\Gamma_i = 0 \implies p_i = 1$$

e, dependendo dos valores de κ e ρ , a interface nunca deixaria de ser lisa pois, desde o primeiro passo de tempo, cada sítio receberia um partícula com probabilidade 1.

Dessa maneira, obtemos também uma restrição sobre os valores de κ a serem estudados:

$$\begin{aligned} \Gamma_{max}(\rho, \kappa) \geq 1 &\implies -\frac{1}{\kappa} \ln \rho \geq 1 \\ &\implies \kappa \leq \ln \left(\frac{1}{\rho} \right) . \end{aligned} \tag{4.12}$$

Assim, restringiremos a aplicação do nosso método para valores de κ que satisfaçam a condição (4.12).

4.2 Aplicação à equação EW

4.2.1 Expoentes de enrugamento

Inicialmente observamos a evolução da interface para $\kappa = 0.1$, $\rho = 0.5$ e $L = 500$, como pode ser visto na figura 4.1 à esquerda, onde mostramos um perfil típico para esse conjunto de valores dos parâmetros. Em seguida, estudamos o comportamento da rugosidade da interface gerada com $\rho = 0.5$, $\kappa = 0.1$ e $L = 200$. Como pode ser visto na figura 4.1 à direita, constatamos que a rugosidade de fato se comporta inicialmente segundo a lei de potência (2.6), com β próximo de $1/4$ (após um curto transiente), até atingir a saturação. Para confirmar o valor do expoente de crescimento, mostramos no detalhe a rugosidade dividida por $t^{1/4}$ em função de t para os mesmos valores de κ e ρ , porém aumentando o tamanho do sistema, fazendo $L = 10^2$, 10^3 e 10^4 , até $t = 10^6$. Nesse caso, uma curva horizontal implica $\beta = 1/4$ e, como podemos ver, quanto maior o tamanho do sistema, mais próximo de $1/4$ é o valor do expoente de crescimento e mais tempo o sistema permanece neste regime.

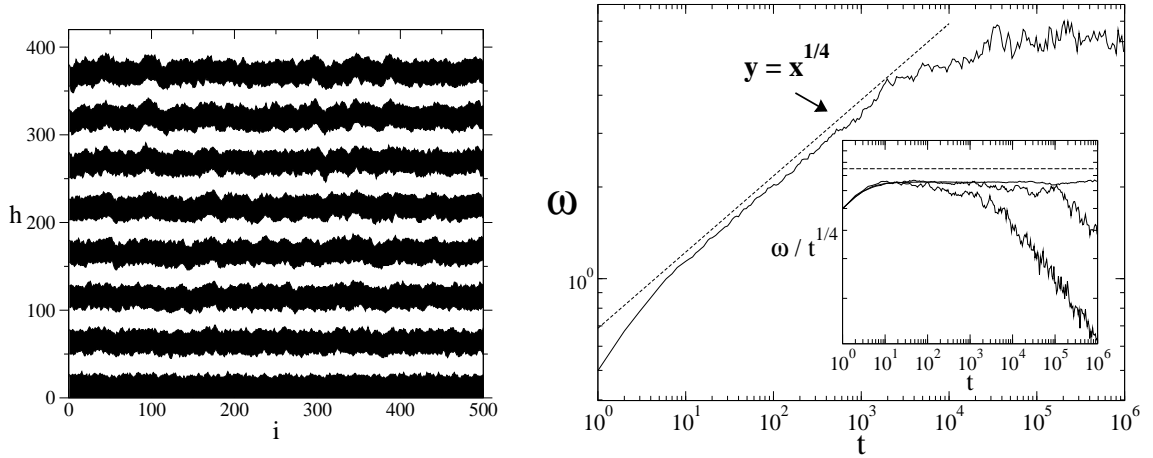


Figura 4.1: À esquerda mostramos a evolução de um perfil típico para $\kappa = 0.1$, $\rho = 0.5$ e $L = 500$, onde trocamos a cor das partículas a cada 50 passos de tempo e deixamos o sistema evoluir até $t = 750$. À direita mostramos o gráfico da rugosidade ω em função do tempo t , para $\kappa = 0.1$, $\rho = 0.5$, $L = 200$ e 20 amostras. A curva tracejada corresponde à função $y = x^{1/4}$. Para confirmar o valor do expoente de crescimento mostramos no detalhe a mesma curva para $L = 10^4$, 10^3 e 10^2 , na qual dividimos ω por $t^{1/4}$. Nesse caso, uma curva horizontal indica $\beta = 1/4$.

Para obter os valores dos expoentes dinâmico e da rugosidade, z e α , deixamos o sistema atingir o regime de saturação para alguns tamanhos de rede entre $L = 25$ e $L = 400$, ainda mantendo fixos os parâmetros $\rho = 0.5$ e $\kappa = 0.1$. Conforme podemos

ver no detalhe da figura 4.2, as curvas apresentaram um bom colapso para $\alpha = 1/2$ e $z = 2$, confirmando a hipótese de que o nosso método, com o *kernel* definido por (4.5), está na classe EW em $d = 1$.

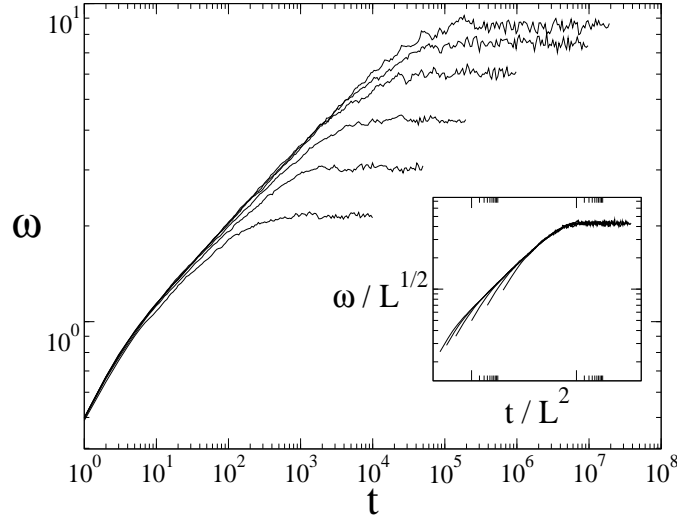


Figura 4.2: Fixamos $\rho = 0.5$ e $\kappa = 0.1$ e variamos o tamanho do sistema, levantando os gráficos da rugosidade ω em função do tempo t , para $L = 25, 50, 100, 200, 300$ e 400 - de baixo para cima. No detalhe mostramos o bom colapso das curvas para os expoentes $\alpha = 1/2$ e $z = 2$.

Em seguida, fixamos $L = 100$ e $\rho = 0.5$ e estudamos os efeitos da variação do parâmetro κ . Como pode ser visto na figura 4.3 à esquerda, identificamos um *crossover* entre os regimes de DA e DARS dependente de κ : a primeira inclinação é $1/2$, indo para $1/4$ em seguida. Denominando o tempo de *crossover* por t_c , observamos que quanto menor o valor de κ , maior o valor de t_c . À direita na figura 4.3, na qual temos $L = 250$ e $\rho = 0.5$, mostramos o tempo de *crossover* t_c como função do parâmetro κ . Como podemos ver, foi possível identificar uma lei de potência,

$$t_c \sim \kappa^{z'_\kappa}, \quad (4.13)$$

com $z'_\kappa = -1.02(2)$.

Assim, para valores baixos de κ , o sistema ficará mais tempo num regime de DA com taxa ρ . De fato, quanto menor o valor de κ , maior deve ser o valor de $\Gamma_i(t)$ para que $p_i(t) \neq \rho$, ou seja, maior deve ser a rugosidade da interface para constatarmos a existência de correlações espaciais no sistema.

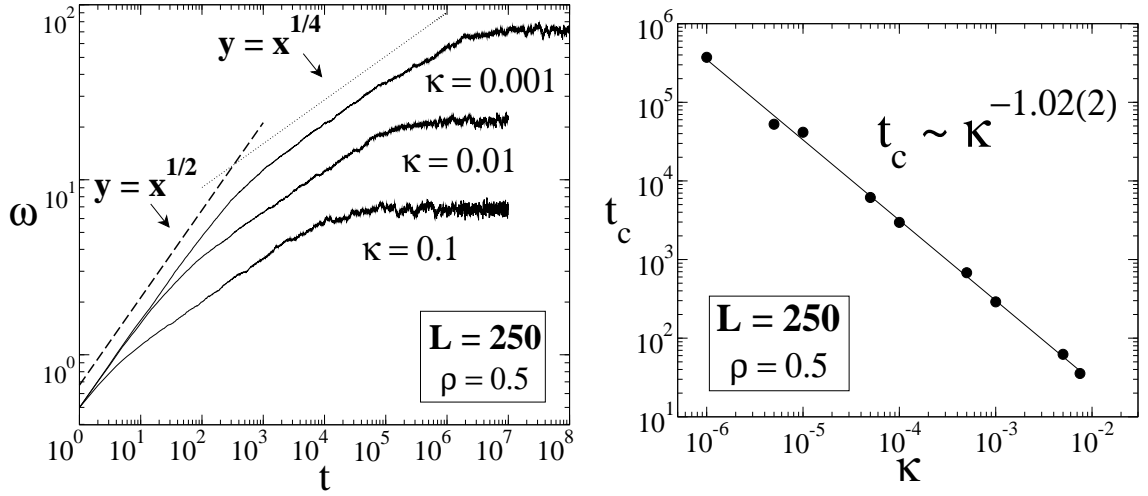


Figura 4.3: À esquerda, mantivemos $L = 250$ e $\rho = 0.5$ e levantamos os gráficos da rugosidade ω em função do tempo t para $\kappa = 10^{-3}, 10^{-2}$ e 10^{-1} e apresentamos a média realizada sobre 50 amostras independentes. Inicialmente temos $\beta = 1/2$ e em seguida $\beta = 1/4$, como podemos constatar a partir da comparação com as linhas tracejada e pontilhada, respectivamente. À direita, mostramos o tempo de crossover t_c em função de κ , para $L = 250$ e $\rho = 0.5$. Para $\kappa > 0.0075$, os valores de t_c são bastante imprecisos.

Aqui percebemos que o parâmetro κ do nosso método desempenha um papel semelhante ao do parâmetro m , discutido na seção 2.1.2: quanto menor (maior) o valor de κ (m), mais tempo o sistema fica no regime de DA. Contudo, existe uma distinção natural entre eles. O parâmetro m impõe uma tolerância para a diferença de altura entre primeiros vizinhos (correspondendo a uma restrição na primeira derivada), antes que correlações manifestem-se no sistema. Já o parâmetro κ impõe uma tolerância para a curvatura local do perfil (restrição na segunda derivada), antes que correlações possam ser identificadas.

Ainda estudamos a dependência da rugosidade de saturação e do tempo de saturação, ω_{sat} e t_x , com o parâmetro κ e constatamos que

$$t_x \sim \kappa^{z_\kappa}, \quad (4.14)$$

$$\omega_{sat} \sim \kappa^{\alpha_\kappa}, \quad (4.15)$$

com $\alpha_\kappa = -0.511(5)$ e $z_\kappa = -1.03(5)$, como pode ser visto na figura 4.4.

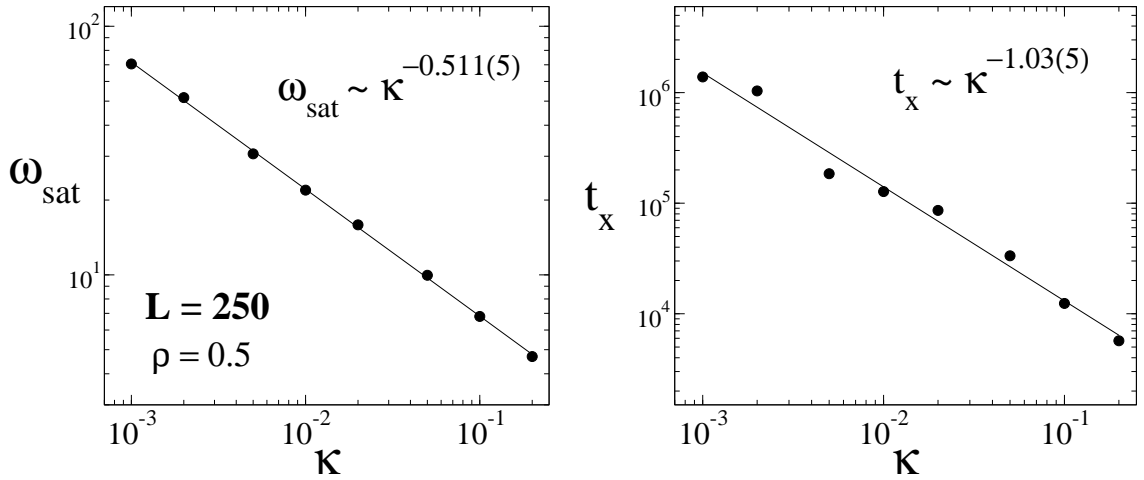


Figura 4.4: Gráficos da rugosidade de saturação e tempo de saturação, ω_{sat} e t_x , como funções do parâmetro κ , em escala logarítmica. Aqui temos $L = 250$, $\rho = 0.5$ e a média realizada sobre 25 amostras. As curvas contínuas representam os ajustes realizados sobre os pontos obtidos por simulações.

4.2.2 Outros resultados

Nesta subseção vamos apresentar os resultados obtidos para o comportamento do coeficiente de assimetria S e para a curtose K , definidos respectivamente em (2.4) e (2.5), de acordo com os valores de κ e ρ . Fixamos $L = 10^5$ e tomamos a média de 25 amostras independentes, nas quais deixamos o sistema evoluir até $t = 10^4$. Como podemos ver na figura 4.5, analisamos três casos separadamente: $\rho = 0.1$, 0.5 e 0.9 . Para cada valor de ρ fizemos $\kappa = 10^{-3}$, 10^{-2} e 10^{-1} . Nos três casos, observamos que $S \rightarrow 0$ e $K \rightarrow 0$ de maneiras distintas, dependendo do valor de κ .

Para $\rho = 0.1$ e $\rho = 0.9$ observamos que S vai a zero tanto mais rápido quanto maior for o valor de κ . Também constatamos que, no primeiro caso, S decresce monotonicamente, enquanto que no segundo caso esta grandeza cresce monotonicamente com o tempo. Para $\rho = 0.5$ observamos que S cresce até atingir um valor máximo, indo a zero em seguida. Esse máximo é tanto maior e ocorre tanto antes, quanto maior for o valor de κ . Os valores estacionários de S oscilam quando $\rho = 0.5$, mas numa escala muito pequena, de maneira que podemos esperar que $S \rightarrow 0$ no limite em que $L \rightarrow \infty$.

Para o comportamento da curtose, constatamos que sempre temos $K \rightarrow 0$, o que ocorre mais rápido para valores maiores do parâmetro κ . Para $\rho = 0.1$, esta grandeza

decrece monotonicamente; para $\rho = 0.5$, K cresce monotonicamente com o tempo. Já para $\rho = 0.9$, observamos que K decrece monotonicamente com o tempo, exceto para $\kappa = 0.1$, quando observamos que essa grandeza assume valores negativos, para em seguida ir a zero. Esse comportamento diferenciado dos demais é devido ao fato de que, para $\rho = 0.9$, $\kappa = 0.1$ é um valor muito próximo do limite definido através da equação (4.12), no final da seção 4.1.

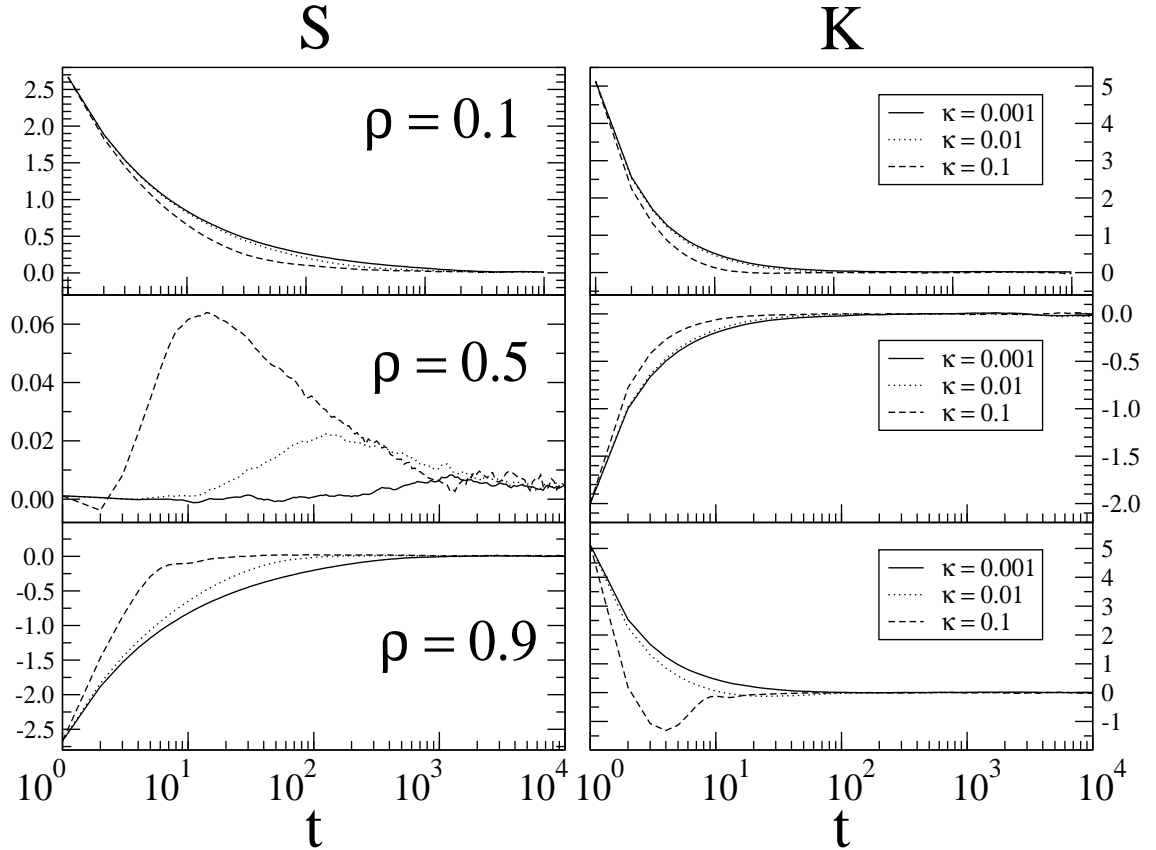


Figura 4.5: Coeficiente de assimetria S e curtose K como funções do tempo t , com $\rho = 0.1$, 0.5 e 0.9 . Para cada caso fizemos $\kappa = 10^{-3}$, 10^{-2} e 10^{-1} , e as simulações foram realizadas sobre uma rede de tamanho $L = 10^5$. Apresentamos a média de 25 amostras independentes.

Desses resultados podemos afirmar que a distribuição de alturas dos perfis gerados pelo nosso método, quando aplicado ao estudo da equação EW, tende a ser simétrica e decair como uma gaussiana, à medida que $t \rightarrow \infty$.

Também identificamos uma simetria no comportamento do *skewness* para $\rho = 0.1$ e $\rho = 0.9$, quando κ é pequeno, conforme pode ser observado na figura 4.6. Quando $\rho = 0.1$, temos que $S \rightarrow 0$ partindo de valores positivos, o contrário ocorrendo para $\rho = 0.9$. Essa observação confirma a idéia de que para $\rho = 0.1$ temos uma taxa de deposição de partículas (sobre regiões localmente lisas) igual à taxa de ocorrências de

“buracos” no caso em que $\rho = 0.9$, ou seja, sítios onde nenhuma partícula é depositada.

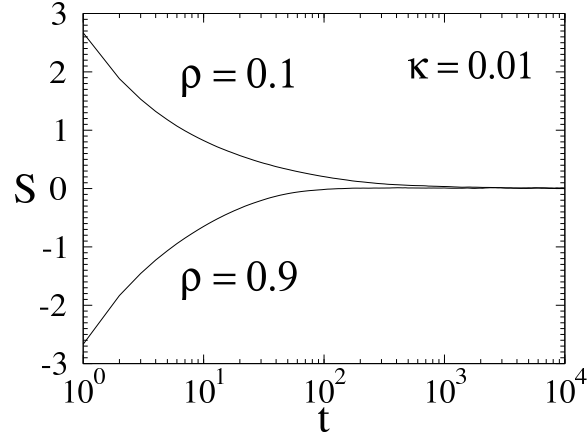


Figura 4.6: *Simetria observada para S quando $\rho = 0.1$ e $\rho = 0.9$. Mostramos esse resultado apenas para $\kappa = 0.01$, mas ele também é válido para valores menores desse parâmetro.*

Nesse ponto, já podemos afirmar sobre a natureza do ruído no processo de crescimento gerado pelo nosso método. Os valores estacionários nulos obtidos para S e K indicam que o ruído presente na dinâmica de crescimento estabelecida pelo método deve ser um ruído branco, ou seja, deve possuir as propriedades (2.14) e (2.15).

A identificação de um *crossover* entre os regimes de DA e DARS corroboram essa inferência acerca da natureza do ruído no processo de crescimento. Pelo resultado obtido para t_c como função de κ , temos que

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} t_c = \infty, \quad (4.16)$$

ou seja, quando $\kappa \rightarrow 0$ temos puramente um regime de DA, com a rugosidade crescendo indefinidamente com o tempo, com $\beta = 1/2$, e para este regime já sabemos que o ruído é branco. Fora do regime de DA, sob o regime da DARS, o que nos garante que o ruído é branco é o fato de termos encontrado os mesmos expoentes da classe de universalidade EW, dentro da qual sabemos que o ruído possui essa natureza [2].

4.3 Aplicação à equação de difusão

4.3.1 Expoentes de enrugamento

Aplicamos a mesma metodologia, apresentada na seção 4.2, ao estudo da equação de crescimento com difusão em $d = 1$, dada pela expressão (2.20). A parte determinística desta equação é proporcional à derivada de quarta ordem $-\nabla^4 h(\mathbf{x}, t)$ e o *kernel* é dado pela equação (4.6).

Também para esta classe de universalidade obtivemos o comportamento esperado para a interface. Inicialmente, observamos o comportamento da superfície gerada com $\rho = 0.5$, $\kappa = 0.01$ e $L = 500$, como pode ser visto na figura 4.7 à esquerda, na qual mostramos um perfil típico para esses valores dos parâmetros. À direita na figura 4.7, mostramos a lei de potência (2.6), com β próximo de $3/8$, obtida como regime inicial para a rugosidade, que vai em seguida para o regime de saturação. Para confirmar o valor do expoente de crescimento, realizamos simulações para sistemas maiores, com $L = 10^2$, $L = 10^3$ e $L = 10^4$, até $t = 10^6$, como mostrado no detalhe da figura 4.7. Nesse gráfico temos a rugosidade dividida por $t^{3/8}$ no eixo vertical, de maneira que uma reta horizontal indica $\beta = 3/8$; como podemos ver, quanto maior o tamanho do sistema, mais tempo este permanece no regime em que $\beta = 3/8$.

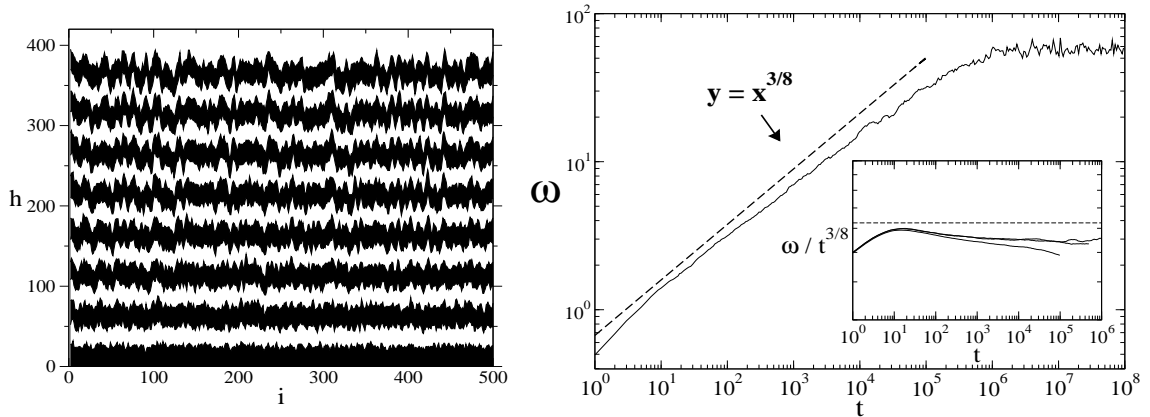


Figura 4.7: À esquerda mostramos a evolução de um perfil típico para $\kappa = 0.01$, $\rho = 0.5$ e $L = 500$, onde trocamos a cor das partículas a cada 50 passos de tempo e deixamos o sistema evoluir até $t = 750$. À direita apresentamos o gráfico da rugosidade ω em função do tempo t , para $\kappa = 0.01$, $\rho = 0.5$, $L = 50$ e 20 amostras. A curva tracejada corresponde à função $y = x^{3/8}$. Para confirmar o valor do expoente de crescimento mostramos no detalhe inferior a mesma curva para $L = 10^4$, 10^3 e 10^2 , na qual dividimos ω por $t^{3/8}$. Nesse caso, uma curva horizontal indica $\beta = 3/8$.

Em seguida, ainda com $\kappa = 0.01$ e $\rho = 0.5$, deixamos a rugosidade saturar para sistemas com diferentes tamanhos, entre $L = 20$ e $L = 60$, para determinar os valores dos expoentes dinâmico e de rugosidade, z e α . Devido ao fato de o expoente dinâmico possuir um valor alto nesta classe de universalidade ($z = 4$) e lembrando que o tempo de saturação cresce com L^z , equação (2.8), o custo computacional para que o sistema atinja a saturação é consideravelmente elevado. Por esse motivo, faz-se necessário trabalhar com sistemas menores, quando se trata da classe do crescimento com difusão.

Como mostrado na figura 4.8, as curvas apresentaram um bom colapso para $\alpha = 3/2$ e $z = 4$, confirmando os valores esperados para os expoentes de enrugamento na classe do crescimento com difusão em $d = 1$.

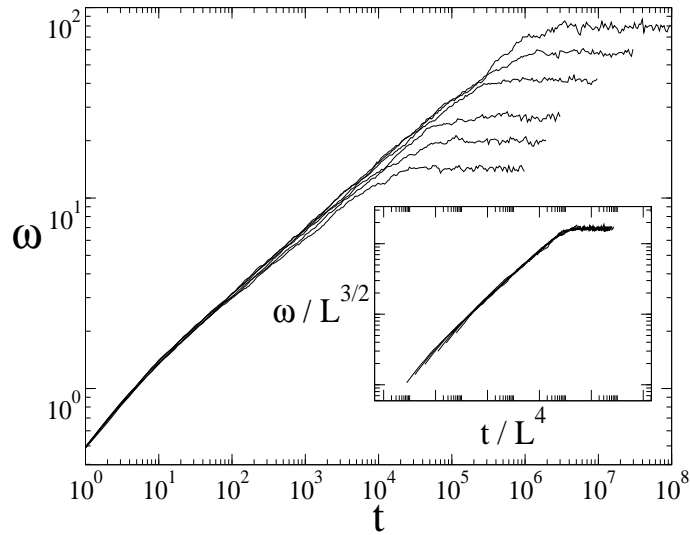


Figura 4.8: *Fixamos $\rho = 0.5$ e $\kappa = 0.01$ e variamos o tamanho do sistema, levantando os gráficos da rugosidade ω em função do tempo t , para $L = 20, 25, 30, 40, 50$ e 60 - de baixo para cima. No detalhe mostramos o bom colapso das curvas para os expoentes $\alpha = 3/2$ e $z = 4$.*

Para estudar os efeitos da variação do parâmetro κ nesta aplicação do método, fixamos $L = 50$ e $\rho = 0.5$ e levantamos o comportamento temporal da rugosidade. Como podemos ver na figura 4.9 à esquerda, obtivemos o comportamento esperado para a interface gerada: à medida que diminuimos o valor de κ , a rugosidade e o tempo de saturação crescem. Também identificamos um crossover entre o regime de DA, com $\beta = 1/2$, e o descrito pela equação de difusão, $\beta = 3/8$. Assim como na aplicação do método à classe EW, notamos que o tempo de crossover t_c cresce à medida que

diminuímos o valor de κ , como pode ser visto na figura 4.9 à direita.

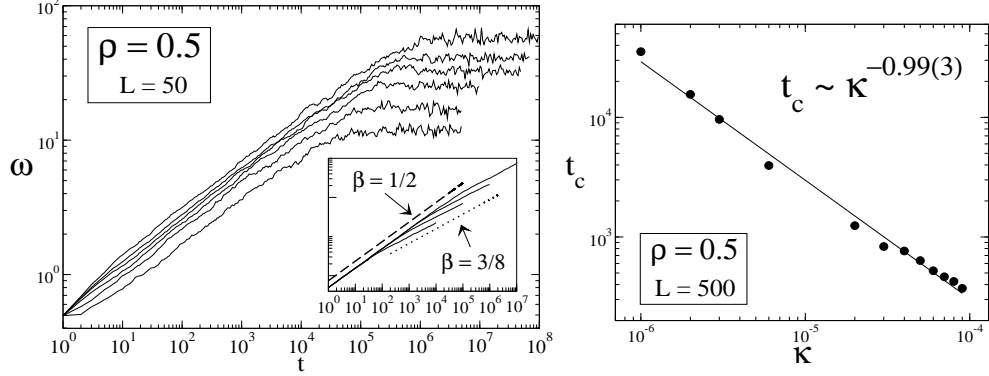


Figura 4.9: À esquerda temos as curvas da rugosidade ω como função do tempo t , com $L = 50$ e $\rho = 0.5$, para $\kappa = 0.01, 0.02, 0.03, 0.05, 0.1$ e 0.2 , de cima para baixo. Apresentamos a média realizada sobre 100 amostras independentes. No detalhe temos $\kappa = 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}$ e 10^{-3} , também de cima para baixo: a primeira inclinação é $1/2$ e a segunda $3/8$, como podemos constatar a partir da comparação com as linhas tracejada e pontilhada respectivamente. À direita mostramos, para um sistema de tamanho $L = 500$, o tempo de crossover t_c como função do parâmetro κ (pontos) e o ajuste obtido (linha contínua).

De fato constatamos as leis de potência (4.13), (4.14) e (4.15) para o tempo de crossover, t_c , e para a rugosidade de saturação e tempo de saturação, ω_{sat} e t_x , respectivamente. Para os expoentes encontramos os valores

$$z'_\kappa = -0.99(3) \quad , \quad \alpha_\kappa = -0.528(5) \quad , \quad z_\kappa = -1.11(6) \quad ,$$

como pode ser observado nas figuras 4.9 (à direita) e 4.10.

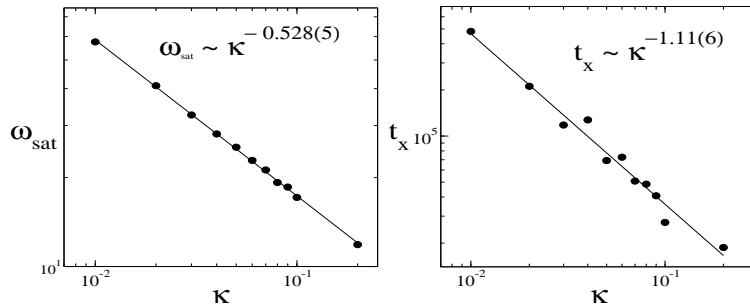


Figura 4.10: Rugosidade e tempo de saturação como funções do parâmetro κ , para $\rho = 0.5$, $L = 50$ e 100 amostras (em escala logarítmica). Encontramos leis de potência com expoentes $\alpha_\kappa = -0.528(5)$ e $z_\kappa = -1.11(6)$.

Comparando os resultados obtidos para os expoentes z'_κ , α_κ e z_κ , observamos que os valores encontrados são bastante próximos nas duas aplicações do método discutidas aqui, considerando a faixa de erro intrínseca à determinação desses valores. Dessa maneira, não podemos utilizar esses expoentes para caracterizar uma classe de universalidade, dado que não obtivemos valores significativamente distintos para as duas classes estudadas.

4.3.2 Outros resultados

Agora vamos apresentar os resultados obtidos para o coeficiente de assimetria S e para a curtose K , a partir da aplicação do método à equação de crescimento com difusão. Assim como a rugosidade, S e K levam mais tempo para entrar no regime estacionário, quando estamos trabalhando nesta classe de universalidade. Dessa maneira, realizamos simulações para sistemas de tamanho $L = 80$.

Assim como fizemos na aplicação do método à classe EW, estudamos o comportamento de S e K para $\rho = 0.1, 0.5$ e 0.9 e, para cada um, fizemos $\kappa = 10^{-3}, 10^{-2}$ e 10^{-1} . Deixamos o sistema evoluir até $t = 10^9$ e, em todos os casos, constatamos que S e K tendem a valores não-nulos, mas muito próximos de zero. É esperado que simulações em larga escala, com sistemas maiores, forneçam valores estacionários nulos para essas grandezas. Entretanto, o elevado custo computacional para obter essa confirmação impede a obtenção de resultados mais rigorosos.

Como pode ser visto na figura 4.11, observamos que para $\rho = 0.1$, o coeficiente de assimetria parte de valores positivos, decresce até atingir um valor mínimo negativo e cresce em seguida, indo para um valor estacionário próximo de zero. Quanto maior o valor de κ , mais rapidamente ocorre a estabilização de S e mais elevado é o valor mínimo atingido por esta grandeza. O comportamento de S para os outros valores de ρ é bastante similar ao observado para $\rho = 0.1$. Todavia, as curvas obtidas para S , nesses casos, começa crescendo a partir de valores negativos, para decrescer em seguida até um valor mínimo, a partir do qual cresce novamente até atingir um valor estacionário próximo de zero. Nessa aplicação do método, não identificamos uma simetria entre os comportamentos de S para $\rho = 0.1$ e 0.9 , como aquela observada na classe EW.

Ainda podemos fazer a seguinte análise dos resultados obtidos para o coeficiente de assimetria. Notamos que os valores obtidos são próximos de zero em dois intervalos de tempo: para $t < t_c$ e $t > t_x$. Esse fato, mais evidente para valores menores de κ e ρ , significa que o ruído presente no processo de crescimento é gaussiano nesses dois

trechos.

Já o comportamento da curtose é bastante similar nos três casos, $\rho = 0.1, 0.5$ e 0.9 . Inicialmente K cresce, até atingir um valor máximo e, em seguida, decai para um valor estacionário negativo, próximo de zero. O valor máximo é tanto maior e ocorre em tempos maiores, quanto menor for o valor do parâmetro κ .

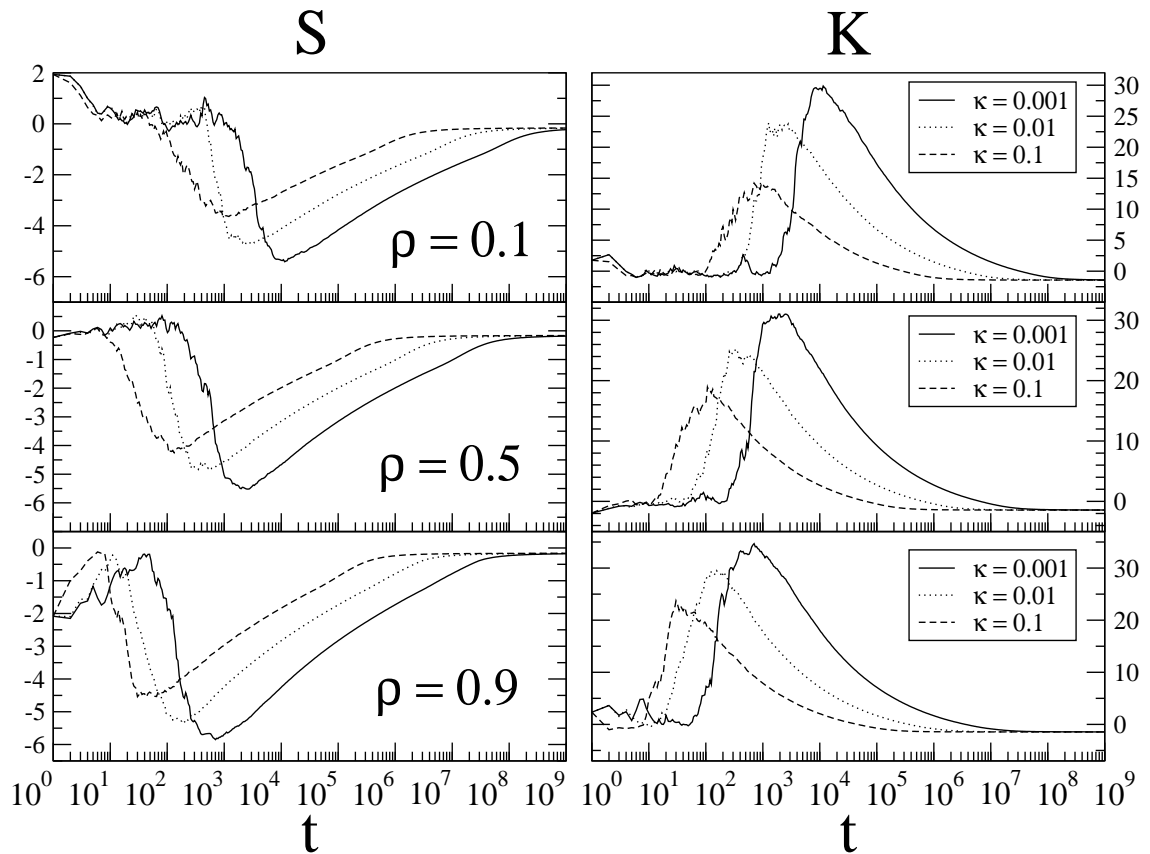


Figura 4.11: Coeficiente de assimetria S e curtose K como funções do tempo t , com $\rho = 0.1, 0.5$ e 0.9 . Para cada caso fizemos $\kappa = 10^{-3}, 10^{-2}$ e 10^{-1} , e as simulações foram realizadas sobre uma rede de tamanho $L = 80$. Cada curva corresponde à simulação de apenas uma amostra.

4.4 Velocidade de crescimento

Definimos a velocidade de crescimento de uma interface como sendo a taxa de deslocamento de sua altura média, ou seja,

$$v \equiv \frac{d\bar{h}(t)}{dt}, \quad (4.17)$$

onde $\bar{h}(t)$ está definido em (2.1). Estudamos a dependência da velocidade de crescimento com os parâmetros κ e ρ nas duas aplicações do método discutidas neste trabalho.

Em primeiro lugar, constatamos que a velocidade de crescimento das interfaces geradas pelas duas aplicações é constante durante todo o processo, como se pode observar na figura 4.12. No detalhe dessa figura, onde temos $L = 25, 50, 100, 500$ e 1000 , vemos que v não depende do tamanho L do sistema, já que os resultados não podem ser distinguidos. A independência da velocidade com o tamanho do sistema já era um resultado esperado, tendo em vista que todos os sítios são visitados e atualizados simultaneamente, em cada instante de tempo. Variando ρ , identificamos uma forte dependência da velocidade com esse parâmetro.

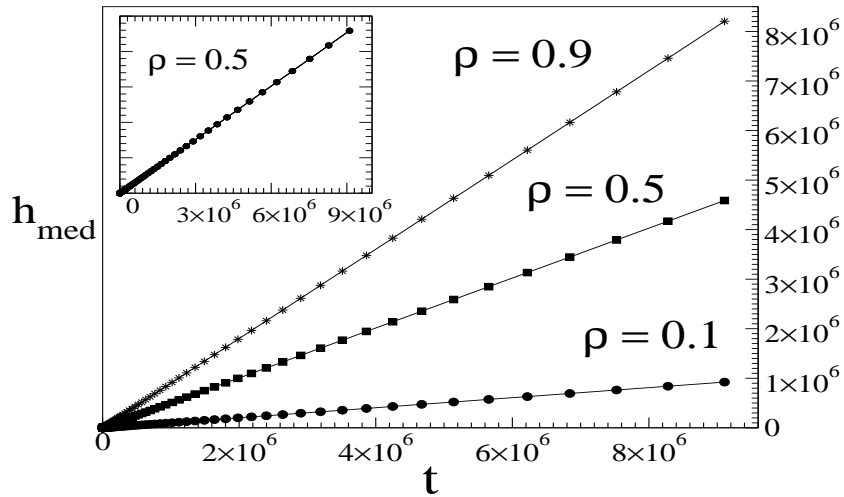


Figura 4.12: *Altura média como função do tempo para $\kappa = 0.01$, na aplicação à equação de crescimento com difusão. Os pontos representam os resultados simulacionais obtidos e as linhas que os conectam são meramente ilustrativas. Como podemos ver no detalhe, fixamos $\rho = 0.5$ e fizemos $L = 25, 50, 100, 500$ e 1000 : os resultados não podem ser distinguidos.*

Em seguida, fixamos $\rho = 0.5$ e $L = 100$ e, variando o parâmetro κ , deixamos o sistema evoluir até $t = 10^3$. Conforme podemos observar na figura 4.13 à esquerda, essa curva

apresenta uma série de descontinuidades. À direita, mostramos o gráfico Γ_{max} como função de κ para $\rho = 0.5$, o qual interpolamos para valores não-inteiros de Γ_{max} . Como pode ser visto, as descontinuidades identificadas ao variarmos κ , correspondem a valores desse parâmetro que, dado um valor fixo para ρ , fornecem Γ_{max} igual a um inteiro.

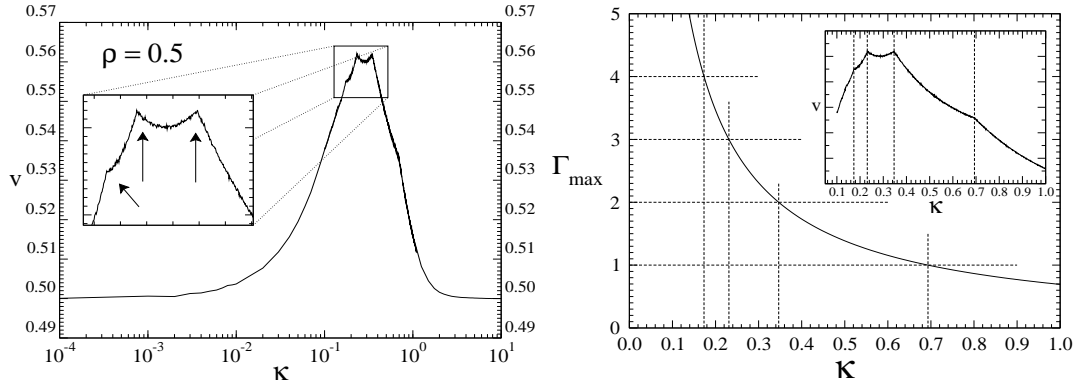


Figura 4.13: À esquerda mostramos o gráfico da velocidade como função do parâmetro κ , para $\rho = 0.5$ e $L = 100$, na aplicação do método à equação de crescimento com difusão. Essa curva é o resultado da média de 100 amostras independentes, nas quais deixamos a interface evoluir até $t = 10^3$. No detalhe destacamos algumas das descontinuidades observadas para essa curva. À direita temos Γ_{max} em função de κ para $\rho = 0.5$. Essa curva foi interpolada para valores não-inteiros de Γ_{max} . As linhas pontilhadas horizontais correspondem a valores inteiros de Γ_{max} e as verticais indicam os valores correspondentes de κ . No detalhe mostramos a velocidade de crescimento como função desse parâmetro, com as mesmas linhas verticais pontilhadas.

Logo depois, levantamos as curvas da velocidade em função de κ , para outros valores de ρ , nas duas aplicações do método, como podemos observar na figura 4.14. Analisamos esses resultados em dois regimes distintos, $\kappa \ll 1$ e $\kappa \gg 1$.

No primeiro caso, $\kappa \ll 1$, temos que $v(\kappa) = \rho$ nas duas aplicações. Isso pode ser facilmente entendido se pensarmos que

$$\kappa \rightarrow 0 \implies e^{\kappa\Gamma_i(t)} \rightarrow 1 \implies p_i(t) \rightarrow \rho \quad (4.18)$$

Dessa maneira, como já foi discutido anteriormente, nesse regime teremos uma DA com taxa ρ e a velocidade de crescimento será dada pelo valor desse parâmetro. Na figura 4.15 mostramos um perfil produzido nos 20 primeiros passos de tempo, a partir da aplicação do método à equação EW, com $\kappa = 0.01$ e $\rho = 0.5$ e 0.99 .

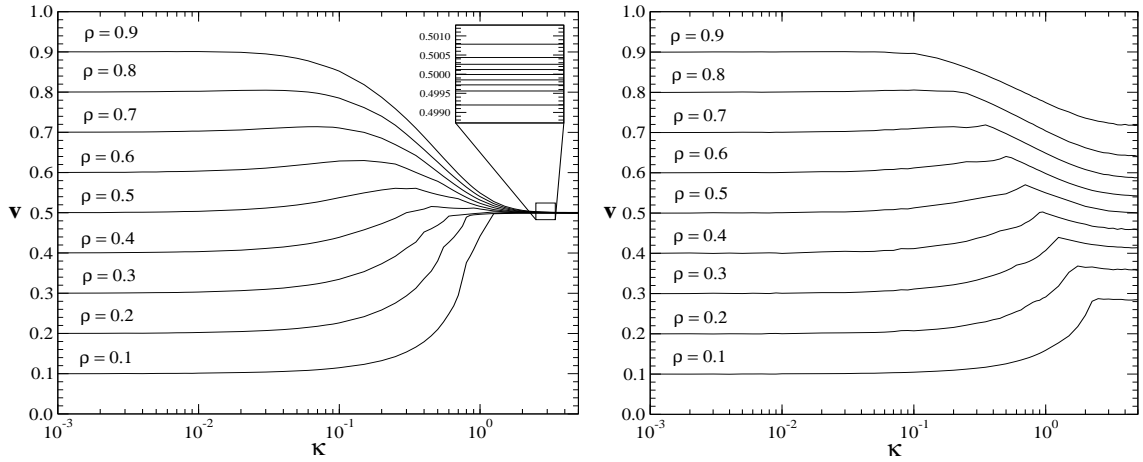


Figura 4.14: Velocidade de crescimento como função de κ , para diversos valores de ρ . À esquerda temos os resultados obtidos para a classe do crescimento com difusão e à direita, os resultados obtidos para a classe EW.

Observamos um nítido aumento na velocidade de crescimento à medida que ρ aumenta. Para $\rho = 0.99$, o perfil chega até uma altura de 20 unidades de rede em $t = 20$, enquanto que, para $\rho = 0.5$, o perfil chega até uma altura de 14 unidades de rede nesse mesmo tempo. Neste último caso vemos um perfil bastante similar ao gerado pela DA, mostrado na figura 2.1. Para o caso $\rho = 0.99$, é necessário deixar o sistema evoluir por mais tempo para que o perfil apresente os mesmos aspectos qualitativos daquele gerado pela DA.

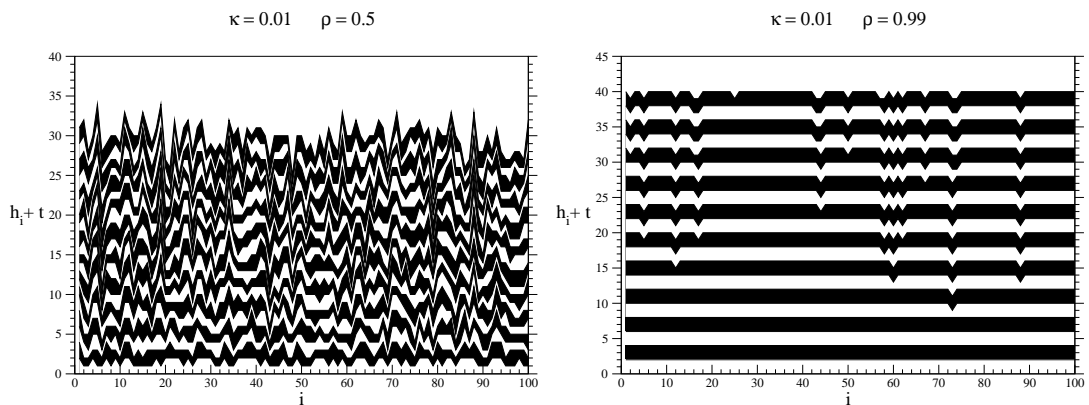


Figura 4.15: Perfis para o caso $\kappa \ll 1$. Trocamos a cor das partículas a cada passo de tempo e imprimimos $h_i(t) + t$ em vez de $h_i(t)$ para que a visualização fique mais clara.

Consideremos agora o segundo caso, no qual $\kappa \gg 1$. Para esse regime do parâmetro

κ , observamos que a velocidade tende para um valor estacionário independente de κ , ou seja $v(\kappa, \rho) \rightarrow v_{est}(\rho)$. Estudamos a dependência de v_{est} com ρ , nas duas aplicações do método, e obtivemos o resultado mostrado na figura 4.16. Como pode ser visto, em ambas as aplicações observamos uma simetria de reflexão centrada no ponto $v_{est} = \rho = 0.5$, como pode ser visto pela divisão ilustrativa fornecida pelas linhas pontilhadas na figura 4.16.

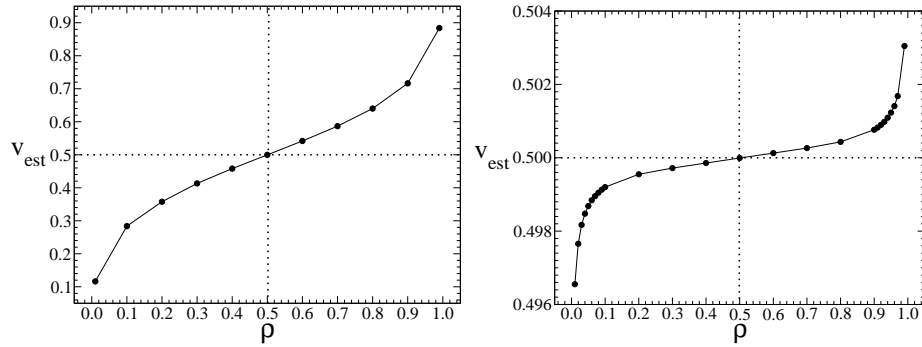


Figura 4.16: Gráfico mostrando a dependência de v_{est} com ρ . À esquerda apresentamos os resultados obtidos na aplicação do método à equação EW e à direita na aplicação à equação de crescimento com difusão.

Para entender o comportamento da interface nesse regime de κ grande, formulamos o seguinte raciocínio. Imediatamente antes do primeiro passo de tempo, o substrato está completamente liso, o que significa que $\Gamma_i(t = 1) = 0$ e $p_i(t = 1) = \rho$, $\forall i$. Assim, após o primeiro passo de tempo, teremos em média ρL sítios escolhidos ao acaso para receber uma partícula. Nesse regime de κ grande, existe um crescimento lateral, que promove a formação de platôs e um subsequente crescimento de monocamadas. Isso pode ser entendido observando-se o esquema mostrado na figura 4.17.

Os perfis para $\kappa = 10$ e $\rho = 0.01$ e 0.99 até $t = 20$, mostrados na figura 4.18, corroboram a idéia da existência desse crescimento lateral quando $\kappa \gg 1$. Quando ρ é muito baixo ($= 0.01$), a taxa de deposição sobre regiões lisas também é muito baixa, o inverso ocorrendo para ρ muito alto ($= 0.99$). Podemos perceber claramente a simetria entre esses dois casos. A densidade de partículas depositadas sobre as regiões lisas quando $\rho = 0.01$ é igual à densidade de “buracos”, ou seja, locais onde não é depositada partícula alguma, quando $\rho = 0.99$.

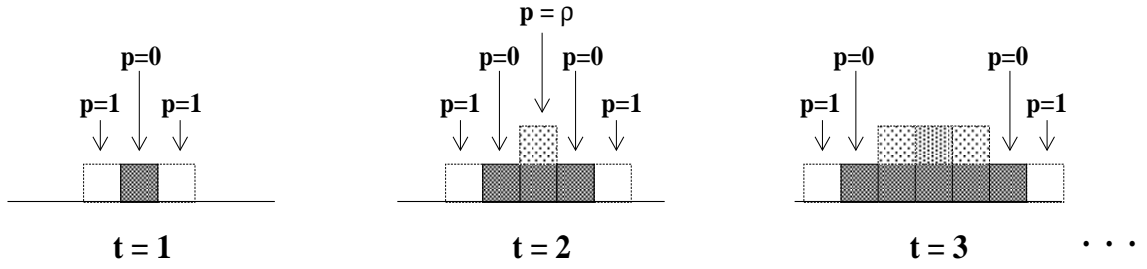


Figura 4.17: Esquema mostrando a existência de crescimento lateral quando $\kappa \gg 1$. Nessa situação temos que $\Gamma_i(t = 2) > \Gamma_{max}$ para os sítios vizinhos àquele que recebeu uma partícula no instante $t = 1$, de maneira que $p_i(t = 2) = 1$ para esses dois sítios, ao passo que $p_i(t = 2) \simeq 0$ para a posição que recebeu a partícula em $t = 1$. Nos passos seguintes, continuamos tendo $p_i = 1$ para os sítios no extremo da camada que vai se formando.

À medida que aumentamos o valor de ρ , observamos um nítido aumento na velocidade de crescimento da interface. Para $\rho = 0.01$, o perfil chega até uma altura de apenas 3 unidades de rede em $t = 20$, enquanto que para $\rho = 0.99$ o perfil chega até uma altura de 19 unidades de rede nesse mesmo intervalo de tempo.

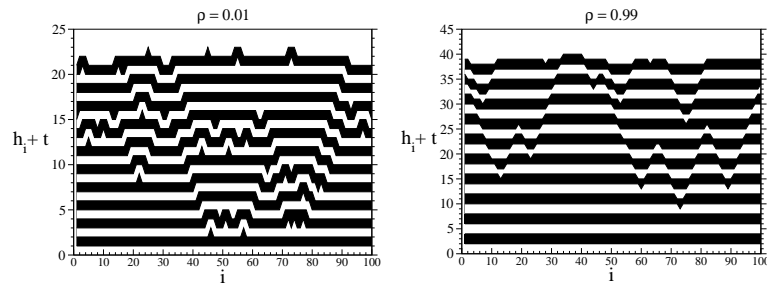


Figura 4.18: Perfis para o caso $\kappa \gg 1$. Novamente trocamos a cor das partículas a cada passo de tempo e imprimimos $h_i(t) + t$ em vez de $h_i(t)$, para facilitar a visualização.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Estabelecemos um novo método para estudar equações de crescimento e o aplicamos às equações EW e de crescimento com difusão, ambas em $d = 1$. Através de simulações computacionais, o método, que possui uma dinâmica do tipo autômato celular, forneceu os resultados esperados para os valores dos expoentes de enrugamento em cada uma das duas classes de universalidade estudadas. Para a classe EW obtivemos

$$\alpha \cong \frac{1}{2} \quad , \quad \beta \cong \frac{1}{4} \quad , \quad z \cong 2 \quad ,$$

enquanto que para a classe do crescimento com difusão encontramos

$$\alpha \cong \frac{3}{2} \quad , \quad \beta \cong \frac{3}{8} \quad , \quad z \cong 4 \quad .$$

Além disso, identificamos um *crossover* dependente de κ entre dois regimes, o de DA e o descrito pela equação estudada. Constatamos que o tempo de *crossover* t_c , bem como o tempo de saturação e a rugosidade de saturação, t_x e ω_{sat} , dependem de κ segundo leis de potência, com expoentes que definimos como z'_κ , z_κ e α_κ , respectivamente. Para a classe EW, obtivemos

$$\alpha_\kappa = -0.511(5) \quad , \quad z_\kappa = -1.03(5) \quad , \quad z'_\kappa = -1.02(2) \quad .$$

Para a difusão, encontramos

$$\alpha_\kappa = -0.528(5) \quad , \quad z_\kappa = -1.11(6) \quad , \quad z'_\kappa = -0.99(3) \quad .$$

Dentro da margem de erro dos resultados obtidos para esses expoentes, podemos dizer que seus valores são os mesmos para as duas classes de universalidade consideradas. Dessa maneira, esses expoentes não podem ser utilizados para se caracterizar uma classe de universalidade, haja visto que os mesmos valores foram obtidos para duas

classes distintas.

Estudamos também o comportamento do coeficiente de assimetria S e da curtose K da distribuição de alturas das interfaces produzidas. Constatamos que essas grandezas tendem a zero à medida que aumentamos o tamanho da rede, correspondendo à nossa expectativa, já que para as classes de universalidade estudadas temos $S = K = 0$ no limite $L \rightarrow \infty$.

Finalmente, estudamos a velocidade de crescimento das interfaces geradas pelo nosso método e identificamos uma dependência desta grandeza com os parâmetros κ e ρ . Observamos que, fixando um valor para ρ , o gráfico da velocidade em função de κ apresenta descontinuidades para valores desse parâmetro que fornecem $\Gamma_{max} = n$, onde n é um inteiro. Também notamos que, dado um valor fixo de κ , a velocidade de crescimento é tanto maior quanto maior for o valor de ρ , donde concluímos que este parâmetro está ligado à taxa de deposição de partículas.

Em suma, foi possível aplicar nosso método com sucesso ao estudo das classes de universalidade EW e da difusão em $d = 1$, já que obtivemos os resultados esperados para cada uma delas. Além disso, novos aspectos surgiram quando variamos os parâmetros que definem o método.

Como perspectivas, apresentamos a possibilidade de aplicação do nosso método a outras classes de universalidade, como por exemplo a classe correspondente à equação KPZ, que possui um termo não-linear do tipo $(\nabla h)^2$. Também acreditamos ser possível aplicar o método com sucesso às classes estudadas (e outras!) em $d = 2$.

Apêndice

Números Aleatórios

Neste apêndice descreveremos sucintamente o algoritmo que utilizamos para gerar números aleatórios em nossas simulações. Consideremos por exemplo a simulação do processo de Deposição Aleatória (DA), no qual um sítio é escolhido aleatoriamente em cada instante de tempo para deposição de uma partícula. Para implementar esse modelo, utilizamos o algoritmo mostrado no diagrama a seguir.

- (i) Escolher um inteiro aleatório $X^{(0)}$ no intervalo $-M \leq X^{(0)} < M$, sendo $M = 2^{31}$ (o maior inteiro de 32 bits é igual a $M - 1$) ;
- (ii) Tomar o módulo para obter $X^{(1)} = |X^{(0)}|$, tal que $0 \leq X^{(1)} \leq M$;
- (iii) Multiplicar por $\frac{L-1}{M}$ para obter $X^{(2)} = \frac{L-1}{M}X^{(1)}$, tal que $0 \leq X^{(2)} < L$;
- (iv) Somar 1 para obter $X^{(3)} = X^{(2)} + 1$, tal que $1 \leq X^{(3)} \leq L$;
- (v) Depositar a partícula no sítio $i = X^{(3)}$, acrescentando uma unidade na variável correspondente à sua altura.

Porém, para realizarmos o passo (i), precisamos de uma rotina que seja capaz de gerar números aleatórios dentro do intervalo indicado. É desejável que essa rotina possua um baixo custo computacional e produza uma seqüência de números aleatórios com um razoável limite de confiabilidade ou seja, um período longo dentro do qual a seqüência seja efetivamente aleatória. Existem diversas rotinas para realizar essa tarefa [28] e neste trabalho optamos por utilizar um gerador *congruencial*, definido pela fórmula recursiva

$$X_{n+1} = AX_n + B , \tag{1}$$

sendo X_n um número inteiro, X_{n+1} o próximo número da seqüência e $A = 843314861$ e $B = 453816693$ são chamados de *números mágicos* [29]. A aleatoriedade da seqüência independe da escolha da *semente*, X_0 . Nos computadores em que realizamos nossas simulações, as variáveis inteiras dispõem de 32 bits de memória, de maneira que podemos escrever 2^{32} números inteiros distintos. Com esses valores para o par de números mágicos A e B , a rotina (1) sorteia cada um desses 2^{32} inteiros exatamente uma vez, antes que a seqüência se repita. Esta rotina claramente apresenta um baixo custo computacional, já que é composta por apenas duas operações básicas, uma multiplicação e uma adição.

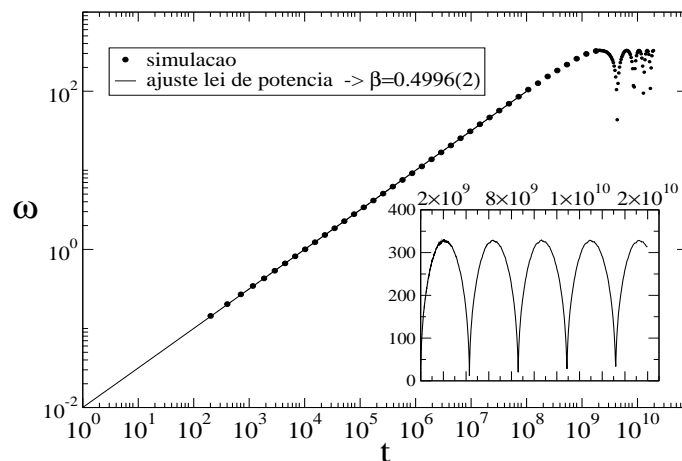


Figura 1: Rugosidade ω em função do tempo t , em escala logarítmica para a DA, utilizando o gerador congruencial definido na equação (1) deste apêndice. Aqui temos $L = 1000$ e definimos a deposição de uma partícula como sendo uma unidade de tempo. Como podemos ver a partir do ajuste representado pela linha contínua, temos $\beta \cong 1/2$ para $t < 10^8$, indicando que esse é o limite de confiabilidade do gerador empregado. No detalhe mostramos o mesmo gráfico em escala linear, onde identificamos que o período de repetição de fato corresponde a $2^{32} \cong 4.3 \times 10^9$, ou seja, todos os inteiros de 32 bits são visitados antes que a seqüência se repita.

Para avaliar o limite de confiabilidade desse gerador, voltemos a considerar a DA. Como sabemos, a rugosidade da interface (equação (2.2)) produzida por este modelo cresce com $t^{1/2}$, indicando a inexistência de correlações no processo de crescimento. Assim, a DA representa um bom teste para geradores de números aleatórios pois, para obtermos o comportamento esperado, precisamos de uma seqüência de números efetivamente aleatórios.

Aplicando o gerador congruencial, definido na equação (1) deste apêndice, na DA obtemos o gráfico mostrado na figura 1. Como podemos ver, a rugosidade cresce com

$\beta \sim 1/2$ até $t = 10^8$, quando vai a zero e volta a crescer, oscilando entre esses dois regimes. Daí podemos concluir que o limite de confiabilidade do gerador utilizado é de aproximadamente 10^8 números.

Entretanto, este limite é ainda muito baixo para a maioria das aplicações e existe uma maneira de aumentar significativamente o limite de confiabilidade desse gerador. A solução para contornar essa limitação consiste em trocar periodicamente a semente, fazendo com que a seqüência reinicie em outro ponto. Assim, aproximadamente a cada 10^7 passos na geração dos números aleatórios, substituímos X_n por X'_n , que é obtido a partir da expressão

$$X'_{n+1} = CX'_n, \quad (2)$$

sendo $C = 65539$ outro *número mágico*. A seqüência X'_n se repete a cada 2^{30} passos, ou seja, possui um quarto do limite de confiabilidade da seqüência gerada pela expressão (1). Porém, a rotina mista aumenta substancialmente o limite de confiabilidade do gerador, possuindo um período maior que 10^{13} , como pode ser visto na figura 2. Esse limite atendeu às necessidades de todas as simulações realizadas para esta dissertação.

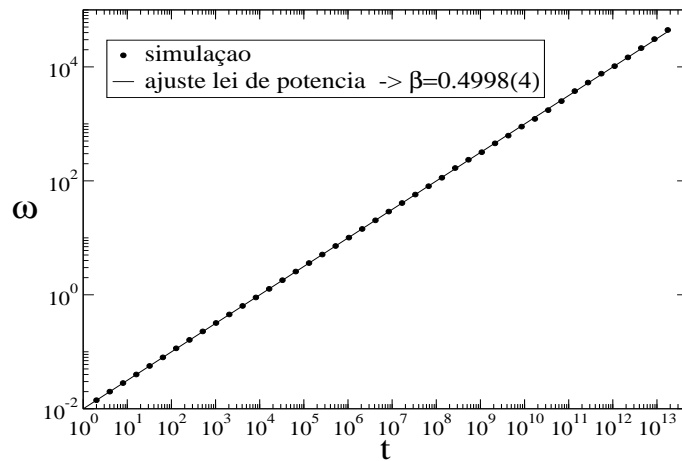


Figura 2: Rugosidade ω em função do tempo t , utilizando o gerador congruencial definido com uma rotina mista. Novamente temos $L = 1000$ e definimos a deposição de uma partícula como sendo uma unidade de tempo. Como podemos ver, o período de repetição deste gerador é maior que 10^{13} .

Referências Bibliográficas

- [1] F. Family e T. Vicsek, “Dynamics of Fractal Surfaces”, World Scientific, Singapore (1991)
- [2] A.-L. Barabási e H.E. Stanley, “Fractal Concepts in Surface Growth”, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1995)
- [3] P. Meakin, “Fractals, scaling and growth far from equilibrium”, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1998)
- [4] S. Wolfram, “Theory and Applications of Cellular Automata”, World Scientific, Singapore (1986) ; “Statistical Mechanics of Cellular Automata”, *Rev.Mod.Phys.* **vol.55**, No.3, 601-644 (1983) ; “Universality and Complexity in Cellular Automata”, *Physica* **10D**:1 (1984)
- [5] Benoit B. Mandelbrot, “The Fractal Geometry of Nature”, W. H. Freeman, New York (1983)
- [6] “MathWorld”, acessado em outubro de 2005:
<<http://mathworld.wolfram.com/>>
- “NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods”, acessado em outubro de 2005:
<<http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/>>
- “Financial Risk Management - riskglossary.com”, acessado em outubro de 2005:
<<http://www.riskglossary.com/link/kurtosis.htm>>
<<http://www.riskglossary.com/link/skewness.htm>>
- [7] F. Family, “Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion”, *J.Phys. A* **19**, L441-L446 (1986)

- [8] J.M. Kim e J.M. Kosterlitz, “Growth in a restricted solid-on-solid model”, *Phys.Rev.Lett.* **62**, 2289 (1989)
- [9] P. Meakin, P. Ramanlal, L.M. Sander e R.C. Ball, “Ballistic deposition on surfaces”, *Phys.Rev. A* **34**, 5091 (1986)
- [10] D.E. Wolf e J. Villain, “Growth with surface diffusion”, *Europhys. Lett.*, **13** (5), 389-394 (1990)
- [11] S. Das Sarma e P. Tamborenea, “A new universality class for kinetic growth: one-dimensional molecular beam epitaxy”, *Phys.Rev.Lett.* **66**, 325-328 (1991)
- [12] F. Family e T. Vicsek, “Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model”, *J.Phys. A* **18**, L75-L81 (1985)
- [13] S.F. Edwards e D.R. Wilkinson, “The surface statistics of a granular aggregate”, *Proc.R.Soc.Lond. A* **381**, 17-31 (1982)
- [14] T. Tomé e M.J. de Oliveira, “Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade”, EdUsp, São Paulo (2001)
- [15] M. Kardar, G. Parisi e Y.C. Zhang, “Dynamic scaling of growing interfaces”, *Phys.Rev.Lett.* **56**, 889 (1986)
- [16] P. Devillard e H. Spohn, *J. Stat. Phys.* **66**, 1089 (1992)
- [17] Herbert B. Callen, “Thermodynamics and an introduction to thermostatistics”, 2nd edition, New York (1985)
- [18] J. von Neumann, *Theory of Self-Reproducing Automata*, edited by A.W. Burks (University of Illinois, Urbana - 1966) ; “The general and logical theory of automata”, in J. von Neumann *Collected Works*, edited by A.H. Taub, **5**, 288 (1963)
- [19] S. Ulam, “Some ideas and prospects in biomathematics”, *Ann.Rev.Bio.*, **255** (1974)
- [20] J.A. de Sales, M.L. Martins e J.G. Moreira, “Roughness Exponent in the Domany-Kinzel Cellular Automaton”, *J.Phys. A* **32**, 885 (1999)
- [21] T.G. Mattos e J.G. Moreira, “Universality Classes in Chaotic Cellular Automata”, *Brazilian Journal of Physics*, **vol.34**, no.2, 448-451 (2004)

- [22] A.P.F. Atman, R. Dickman e J.G. Moreira, “Scaling exponents of rough surfaces generated by the Domany-Kinzel cellular automaton”, *Phys.Rev.E* **66**, 016113 (2002)
- [23] Allbens Atman Picardi Faria, “Aspectos Fractais em Sistemas Complexos”, Tese de Doutorado, UFMG (2002)
- [24] E. Domany e W. Kinzel, “Equivalence of cellular automata to Ising-models and directed percolation”, *Phys.Rev.Lett.* **53**, 311 (1984)
- [25] M.L. Martins, H.F. Verona de Resende, C. Tsallis e A.C.N. de Magalhães, “Evidence for a new phase in the Domany-Kinzel cellular automaton”, *Phys.Rev.Lett.* **66**, 2045 (1991)
- [26] A.P.F. Atman e J.G. Moreira, “Growth exponent method in the Domany-Kinzel cellular automaton”, *Eur.Phys.J. B* **16** (3), 501 (2000)
- [27] Romuel Figueiredo Machado, “Deposição Gaussiana em modelos de crescimento com difusão”, Dissertação de Mestrado, UFMG (1993)
- [28] M.E.J. Newman e G.T. Barkema, “Montecarlo Methods in Statistical Physics”, Oxford University Press (1999)
- [29] D. Stauffer, “Monte Carlo methods in Statistical Physics”, em “Computer Simulation and Computer Algebra”, D. Stauffer, F.H. Hehl, N. Ito, V. Winkelman e J.G.Zabolitzky eds. (Springer-Verlag, Berlin, 1993)