

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
INSTITUTO DE FÍSICA

Tese de Doutorado

**Dinâmica de corrosão: Expoentes críticos,
invariância de Galileu e dimensão superior**

EVANDRO ALVES RODRIGUES

ORIENTADOR:

Fernando Albuquerque Oliveira

CO-ORIENTADOR:

Bernardo A. Mello

Brasília, 04 de Outubro de 2013

Dinâmica de corrosão: Expoentes críticos, invariância de Galileu e dimensão superior

Por

Evandro Alves Rodrigues

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade de Brasília como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Doutor em Física.

Aprovada por:

Fernando A. Oliveira

IF-UnB

Ademir Santana

IF-UnB

Ismael Costa

UnB-Planaltina

Alaor Chaves

UFMG

Wagner Figueiredo

UFSC

Brasília,

Demétrio Antônio da Silva Filho

Coordenador de Pós-Graduação

Instituto de Física

Universidade de Brasília

“Fractal, de olho na fresta da imensidão
Sinal, do mistério na cauda do pavão
Igual, ao mistério na juba do leão
Igual, ao mistério na presa do narval ”

Gilberto Gil

Sumário

1	Introdução	2
2	Crescimento	4
2.1	Rugosidade	5
2.1.1	Fractal	5
2.2	Dinâmica da rugosidade	6
2.2.1	Expoentes Dinâmicos	6
2.2.2	Relação de Family-Vicsek	9
2.3	Equações de Crescimento	10
2.3.1	Deposição Aleatória	10
2.3.2	Edward-Wilkinson	12
2.3.3	Kardar, Parisi e Zhang	15
2.3.4	Classes de Universalidade	17
2.4	Modelos de Crescimento	18
2.4.1	Modelo de Eden	19
2.4.2	Deposição Aleatória	20
2.4.3	Deposição Balística	20
3	Problemas em aberto: Dimensão Crítica Superior e Invariância Galileana	22
3.1	Dimensão Crítica Superior	23
3.1.1	Obtenção de Equações para o Comportamento de Expoentes	24

3.1.2	Resultados Modernos	25
3.2	Invariância Galileana	26
4	Modelo de Corrosão	28
4.1	A construção do modelo	28
4.1.1	O modelo de corrosão em dimensões fractais	31
4.1.2	Modelo de Corrosão com adição de impurezas	33
4.1.3	Distribuição de altura e rugosidade	34
5	Modelo de corrosão em Múltiplas dimensões	36
5.1	Extensão do Modelo	37
5.2	Obtenção dos dados	37
5.3	Análise dos dados	38
5.3.1	Expoente de rugosidade	39
5.3.2	Expoente de crescimento	40
5.3.3	Expoente Dinâmico	42
5.3.4	Colapso dos dados e comparação com outros resultados	43
6	Uma equação analítica para a dinâmica de rugosidade	48
6.1	Variação da rugosidade	48
6.2	Probabilidade	50
6.3	Aplicação ao modelo de corrosão	54
7	Uma Escala Universal para Rugosidade	57
7.1	Métodos de Ajuste	57
7.2	Colapso de dados	58
7.3	Uma forma forte da relação de Family-Vicsek	61
7.3.1	A função EUR	61
7.4	Comparação entre a EUR e a LP	65
7.4.1	Expoente de Rugosidade	65
7.4.2	Expoente de Crescimento	66

7.4.3	Expoente Dinâmico	67
7.5	Dimensão crítica superior e invariância de Galileu no modelo de Corrosão	68
7.5.1	Dimensão crítica superior	68
7.5.2	Invariância de Galileu	69
8	Conclusões	70
A	Exemplo de Grupo de Renormalização	72
A.1	A cadeia de osciladores lineares	72
B	Métodos Computacionais	76
B.1	Simulação	76
B.2	Análise de Resultados	78
B.2.1	Pre-Processador	79
B.2.2	Armazenamento dos dados	81
B.2.3	Ajuste	83
B.2.4	Geração de gráficos	85

Lista de Tabelas

4.1	Expoentes do modelo de corrosão em superfícies de dimensão fractal, conforme obtidos por Xun et al[49]	33
5.1	Expoentes dinâmicos obtidos a partir dos ajustes das figuras 5.2, 5.3 e 5.4. Evidências quanto a precisão destes expoentes são providas pelo valor de $\Delta z \equiv 2 z - \alpha/\beta /(z + \alpha/\beta)$, que deve idealmente ser zero, e de $\alpha + z$, que deve ser igual a 2.	45
5.2	Expoente α conforme os trabalhos de diversos autores.	46
5.3	Expoente β conforme os trabalhos de diversos autores.	46
7.1	Valores de α para cada dimensão obtidos a partir da aplicação da equação (5.1) aos valores de rugosidade de saturação w_s encontrados por meio de ajuste de lei de potência (LP) e da Escala Universal de Rugosidade (EUR).	66
7.2	Valores de β para cada dimensão obtidos a partir da aplicação da equação (5.3) aos valores de rugosidade de saturação w_s encontrados por meio de ajuste de lei de potência (LP) e Escala Universal de Rugosidade (EUR).	67
7.3	Valores de z para cada dimensão obtidos a partir da aplicação da equação (5.5) aos valores de tempo de saturação t_x encontrados pela lei de potência (LP), utilizando a equação (7.12) com os parâmetros do ajuste de α e β e da função universal de rugosidade (EUR).	68

7.4	Valores de $\alpha + z$ para cada dimensão obtidos da escala universal de rugosidade (EUR).	69
B.1	Número de instruções do processador gastas por cada função na execução da simulação para produzir média de 85 substratos com $D = 1$, $L = 1024$	77

Lista de Figuras

2.1	Exemplo de substrato discreto, com uma linha demarcando o valor de \bar{h}	5
2.2	Dinâmica da variação da rugosidade ao longo do tempo no modelo de corrosão, em escala log-log (a), e escala linear (b) para média de 10000 substratos.	7
2.3	Valor aproximado do tempo de saturação em um substrato discreto em $1 + 1$ dimensões com comprimento $L = 64$. O tempo de saturação é encontrado como o ponto de encontro da curva da equação (2.4) com a curva da equação (2.3).	8
2.4	Curvas da dinâmica de saturação da rugosidade no algoritmo de corrosão para substratos com L entre 2 e 1024.	10
4.1	Dinâmica de saturação no modelo de corrosão para uma superfície de $L = 2048$ em $1 + 1$ dimensões.	30
4.2	Ilustração das redes ponta de lança (esquerda) e caranguejo (direita) utilizadas por Xun et al[49], apresentando a estrutura gerada pela regra de iteração do fractal para diferentes valores de n . Note que os círculos vazios indicam o tamanho linear do fractal. Fonte: [49].	32
5.1	Rugosidade $w(L, t)$ no algoritmo de corrosão como função do tempo, para superfícies em $1 + 1$ (a), $2 + 1$ (b), $3 + 1$ (c), $4 + 1$ (d), $5 + 1$ (e) e $6 + 1$ (f) dimensões.	39

5.2	Rugosidade de saturação $w_s(L)$ versus o comprimento do substrato para superfícies entre $1 + 1$ e $6 + 1$ dimensões.	40
5.3	Expoente dinâmico $\beta_L(L)$ versus comprimento do substrato. É notável que quando $L \rightarrow \infty$ β_L parece convergir para o valor β esperado. . .	41
5.4	Tempo de saturação $t_x(L)$ versus comprimento do substrato. Os valores de cada dimensão são multiplicados por 10^d para melhorar a visualização.	43
5.5	Colapso dos dados de todos os valores de L para cada uma das dimensões, indicadas no canto superior esquerdo de cada gráfico. O colapso foi feito aplicando as escalas indicadas nas legendas dos eixos. Apenas pontos com $t > 10$ foram incluídos na figura acima para excluir os transientes em $t/t_x \lesssim 1$	44
6.1	Exemplo das probabilidades de ação do algoritmo de crescimento, onde consideramos 4 diferentes conformações e o sítio escolhido é sempre o sítio 2, e os sítios na cor cinza claro representam os afetados pelo processo.	54
7.1	Colapso de dados para todos os valores de d e L simulados. O colapso foi feito aplicando as transformações de escala indicadas nos eixos dos gráficos. As áreas retangulares são uma ampliação das inserções. Apenas pontos com $t > 10$ foram incluídos no gráfico acima para excluir o tempo transiente em $t/t_x \lesssim 1$. Como os valores de $\beta < 1$, o ruído é amplificado na figura (a).	60
7.2	Substrato com $L = 2048$ e $d = 1$ ajustado por exponencial (EUR), equação (7.7), e por lei de potência, equação (7.6)	62
7.3	Substrato com $L = 2048$ e $d = 1$ ajustado por exponencial (EUR), equação (7.7), e uma lei de potência, equação (7.8).	63
7.4	Substrato com $L = 2048$ e $d = 1$ ajustado por exponencial (EUR), equação (7.7), e uma outra função exponencial, equação (7.9).	64

7.5	Rugosidade de saturação $w_s(L)$ versus o comprimento do substrato para superfícies entre 1+1 e 6+1 dimensões calculadas para o modelo de corrosão por meio de leis de potência (esquerda) e da equação universal de escala (direita).	66
7.6	Expoente dinâmico $\beta_L(L)$ versus comprimento do substrato, ajustado com lei de potência (esquerda) e a equação universal de escala (direita).	67
7.7	Tempo de saturação $t_x(L)$ versus comprimento do substrato obtidos por lei de potência e por meio da EUR. Os valores de cada dimensão são multiplicados por 10^d para melhorar a visualização.	67
A.1	Exemplo de cadeia linear de osciladores.	72

Resumo

O Crescimento de superfícies fractais é uma área da Física Estatística que adquire grande momento com a popularização de ferramentas computacionais acessíveis, que tornam possível estudar este tipo de sistema por meio de modelos numéricos computacionais.

Neste trabalho estudamos as propriedades do modelo de corrosão, com o objetivo de esclarecer algumas das questões em aberto desta grande área de pesquisa, como a existência de dimensão crítica na equação KPZ, descrevemos uma estratégia de obtenção de uma equação que modele a dinâmica da rugosidade e propomos uma forma restrita da relação de Family-Vicsek.

Abstract

Fractal surface growth is one area of Statistical Physics that gains a lot of momentum with the recent popularization of cheap computational tools, that make it possible to study this kind of system through computational models.

On this work we study properties of the etching model, to further investigate some of the open questions of this large research area, such as the existence of an upper critical dimension on the KPZ equation. We do describe an strategy to obtain an equation to model the dynamics of the surface rugosity an propose a restricted form of the Family-Vicsek relation.

Capítulo 1

Introdução

O objetivo deste trabalho é investigar propriedades do modelo de corrosão. Nosso interesse parte do fato deste modelo apresentar, no caso unidimensional, expoentes dinâmicos equivalentes aos da equação KPZ, cuja solução geral para múltiplas dimensões permanece um problema sem solução. Esta ausência de uma solução geral leva a criação de diversos métodos para estudar o comportamento desta equação.

No capítulo 2 fazemos uma rápida introdução da literatura no que tange a conceitos básicos relacionados a superfícies fractais, classes de universalidade e alguns modelos de crescimento.

No capítulo 3 apresentamos alguns dos problemas em aberto relacionados a equação KPZ, especificamente a determinação dos expoentes dinâmicos, a questão da existência de uma dimensão crítica superior e a validade ou não da invariância de Galileu.

No capítulo 4 apresentamos o modelo de corrosão de Mello et al [1], ponto central desta tese, e apresentamos alguns dos trabalhos baseados no mesmo.

No capítulo 5 generalizamos o modelo original de corrosão, da dimensão $1 + 1$ para uma dimensão geral $d + 1$. Desenvolvemos os métodos numéricos para obtenção da evolução da rugosidade em função do tempo para vários substratos e dimensões $1 \leq d \leq 6$. Obtemos os expoentes dinâmicos e comparamos com resultados encontrados na literatura para outros modelos[2].

No capítulo 6 descrevemos o trabalho teórico de Costa et al[3], o qual mostra

uma expressão analítica para a evolução da rugosidade em função do tempo. A relação não é exata, mas é bastante precisa, permitindo uma determinação adequada dos expoentes dinâmicos.

No capítulo 7 apresentamos, com base em nossos resultados de simulação que a equação obtida por Costa mostra uma forma universal da relação de escala, que pode ser considerada mais restritiva que a relação de Family-Vicsek[4], e finalmente, concluimos no Capítulo 8.

No apêndice A exemplificamos a técnica de renormalização usada para obter expoentes das equações de crescimento de superfície (EW e KPZ) por meio de um exemplo simples.

No apêndice B mostramos alguns detalhes da construção da simulação e parte das técnicas utilizadas para simplificar a análise dos dados gerados.

Capítulo 2

Crescimento

Podemos definir uma superfície, em termos gerais, como a interface entre dois sistemas. Assim, um conjunto de dunas, o asfalto de uma rua ou a borda de um lago podem ser consideradas superfícies. Quando falamos em crescimento de uma superfície, estamos falando da dinâmica de uma grande classe de superfícies, cuja evolução no tempo é equivalente a propagação de tal superfície.

Para poder analisar uma superfície, é necessário definir quais de suas propriedades podem ser úteis. Uma dessas propriedades é chamada rugosidade. O significado de rugosidade é uma propriedade quase intuitiva, sendo percebida em superfícies com as quais entramos em contato no dia a dia. Por exemplo, é fácil notar que um espelho possui uma superfície menos rugosa do que uma lixa, sendo a diferença entre as duas a variação da altura h entre os pontos que formam essa superfície.

Neste capítulo, mostramos como a rugosidade é uma das mais importantes características de uma superfície, mostramos ferramentas para analisar a dinâmica temporal da rugosidade e sua importância no estudo do crescimento de superfícies fractais. Nesta exposição seguiremos de perto o livro de Barabasi e Stanley[5].

2.1 Rugosidade

Tornamos a medida da rugosidade em um valor quantitativo considerando a rugosidade como sendo o desvio padrão da média da altura da superfície, sendo esta altura medida do referencial da base. Desta forma, para uma superfície discreta a rugosidade $w(L, t)$ será escrita como

$$w(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h(i, t) - \bar{h}(t)]^2} \quad (2.1)$$

Definimos a rugosidade considerando uma medida sobre o referencial de *altura média*, $\bar{h}(t)$. Esta pode ser escrita, novamente considerando uma superfície discreta, como:

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h(i, t). \quad (2.2)$$

Na figura 2.1 mostramos um exemplo de superfície discreta, onde o valor de \bar{h} é representado por uma linha horizontal.

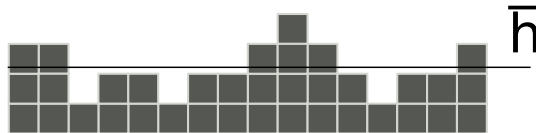


FIGURA 2.1: Exemplo de substrato discreto, com uma linha demarcando o valor de \bar{h} .

2.1.1 Fractal

Para nossos fins, um tipo específico de superfície é foco de interesse, as *superfícies fractais*. Fractais são, em sua definição clássica, estruturas que apresentam dimensão fractal[6].

Isso significa que tais estruturas apresentam um padrão "fraturado", ou seja, sua geometria é melhor definida em dimensões não-inteiras. Uma das características mais marcantes de conjuntos fractais é sua *auto-similaridade*.

A auto-similaridade implica que conjuntos fractais podem sofrer transformações de escala e manter suas propriedades, ou em alguns conjuntos de fractais, ser indistinto de sua escala anterior.

Uma forma de manifestação de fractalidade é na borda de superfícies. Tais superfícies fractais se diferenciam dos fractais típicos pelo fato de que apenas as propriedades estatísticas são mantidas após transformações de escala.

2.2 Dinâmica da rugosidade

Apenas descrever propriedades estáticas de superfícies fractais é pouco útil. Desta forma, torna-se interessante estudar como essas propriedades variam ao longo do tempo.

A variação da rugosidade ao longo do tempo é uma das medidas tipicamente feitas quando estuda-se superfícies fractais. Infelizmente, a complexidade das equações que descrevem o comportamento da rugosidade (conforme mostrado na seção 2.3) torna difícil obter tais valores diretamente.

Uma ferramenta comumente utilizada no estudo de superfícies para superar a dificuldade na solução direta destas equações é o uso de modelos computacionais simplificados. Tais modelos nos permitem analisar a dinâmica da superfície, compara-la com sistemas conhecidos na natureza. Normalmente, tais modelos computacionais produzem dados com grande quantidade de ruído, o que torna necessária a utilização de algumas técnicas estatísticas simples para tratamento dos dados, como por exemplo o uso de médias de ensemble sobre uma série de superfícies.

2.2.1 Expoentes Dinâmicos

Na figura 2.2 mostramos o comportamento da rugosidade de uma superfície onde há o surgimento de correlação, para um sistema discreto com $L = 512$ em $1 + 1$ dimensões. Nota-se no início do processo, conforme indicado em 2.2a, aqui mostrado em escala log-log, que a dinâmica da rugosidade apresenta um comportamento de lei

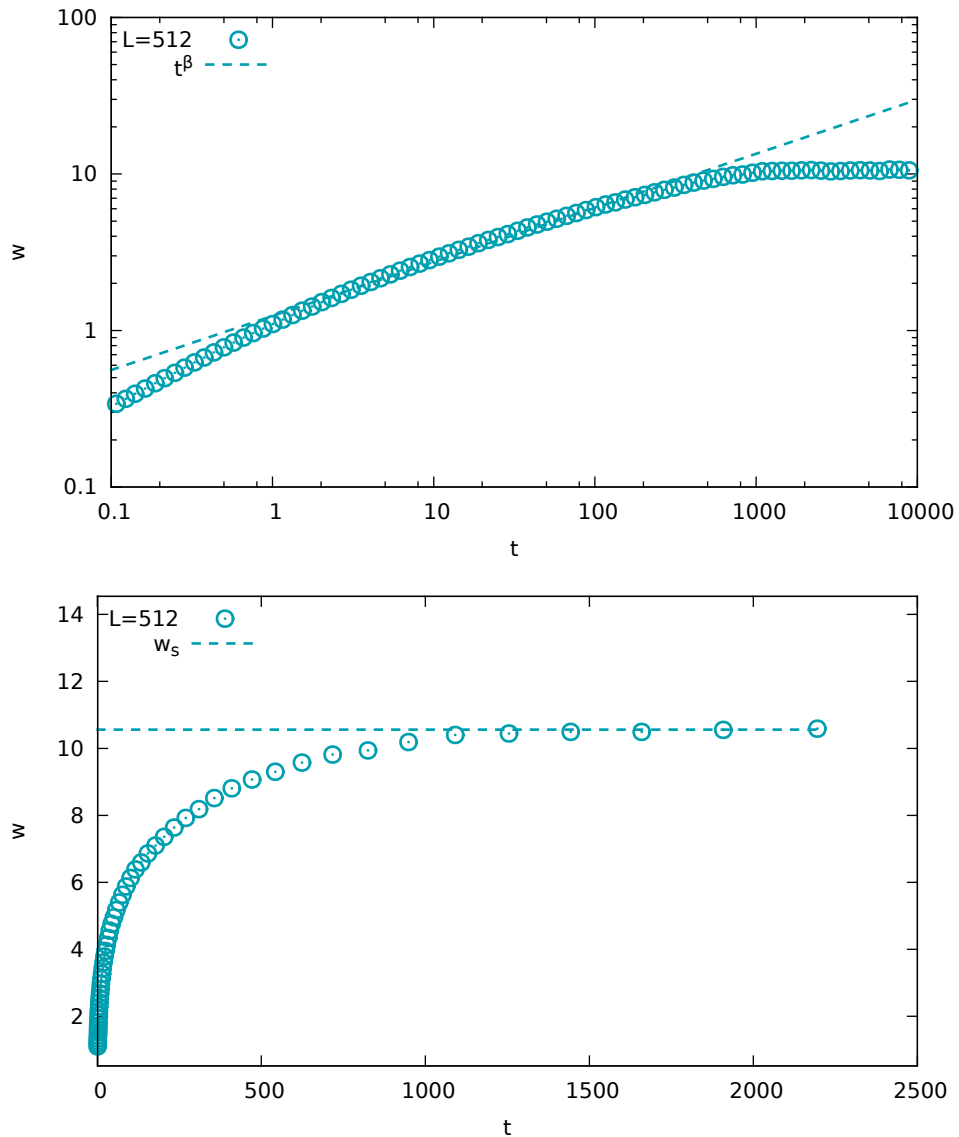


FIGURA 2.2: Dinâmica da variação da rugosidade ao longo do tempo no modelo de corrosão, em escala log-log (a), e escala linear (b) para média de 10000 substratos.

de potência, conforme verificado pela reta ajustada aos pontos. Esse comportamento nos permite modelar tal etapa do crescimento com uma equação simples,

$$w(L, t) = C_\beta t^\beta. \quad (2.3)$$

A inclinação desta reta nos fornece o chamado *expoente de crescimento*, representado pelo expoente β .

Na figura 2.2a, e com um pouco mais de clareza na figura 2.2b, percebemos

que após um determinado tempo há uma mudança no comportamento da rugosidade da superfície, de forma que a rugosidade para de crescer, sendo então este valor da rugosidade chamado de *rugosidade de saturação*, representado por w_s na figura 2.2b. Mesmo em tempos muito longos, este valor se torna essencialmente uma constante. Analisando um grande número de substratos, é possível observar que existe uma relação entre o comprimento dos substratos e o valor dessa constante, com a forma da lei de potência seguinte,

$$w_s = C_{w_s} L^\alpha. \quad (2.4)$$

O expoente que relaciona o comprimento do substrato com sua rugosidade de saturação é chamado de *expoente de rugosidade*, e é comumente representado por α .

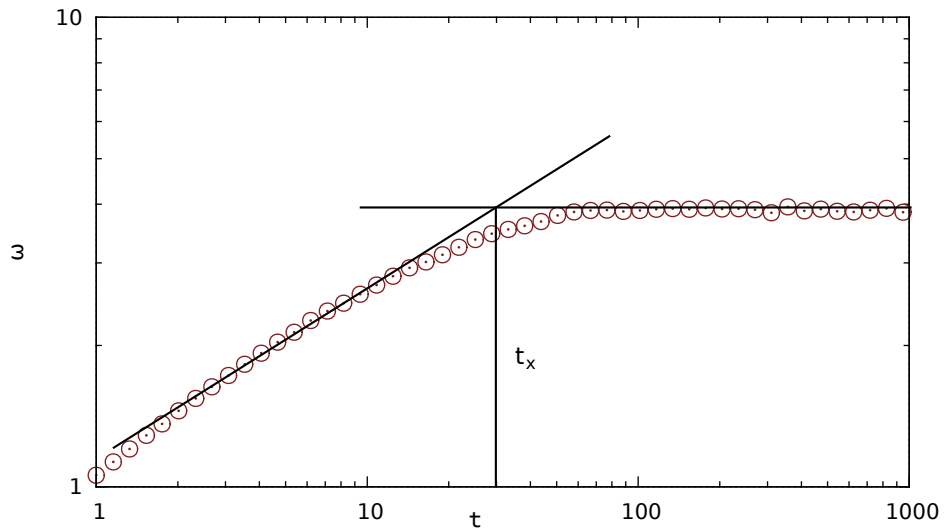


FIGURA 2.3: Valor aproximado do tempo de saturação em um substrato discreto em $1 + 1$ dimensões com comprimento $L = 64$. O tempo de saturação é encontrado como o ponto de encontro da curva da equação (2.4) com a curva da equação (2.3).

Na figura 2.3 mostramos a rugosidade $w(t)$ em função do tempo. Podemos ver claramente o regime inicial de crescimento como uma lei de potência, e o regime de saturação $w = w_s$. O tempo transiente t_x é chamado tempo de saturação e depende do comprimento do substrato. Esta relação pode ser descrita, novamente,

como uma lei de potência da forma

$$t_{\times} = C_{\times} L^z. \quad (2.5)$$

O expoente que relaciona o comprimento do substrato com o tempo de saturação é conhecido como *expoente dinâmico*, normalmente representado como z . Uma particularidade deste expoente é a dificuldade em realizar a medida direta do valor do tempo de saturação t_{\times} , de forma que normalmente este é aferido de forma indireta, sendo considerado o tempo t tal que as curvas de rugosidade saturada w_s (2.4) e da lei de potência $w(t, L)$ (2.3) se encontrem,

$$t_{\times} = \left(\frac{C_{w_s} L^{\alpha}}{C_{\beta}} \right)^{1/\beta}. \quad (2.6)$$

Esta forma de encontrar o t_{\times} é representada graficamente na figura 2.3, onde mostramos t_{\times} como o tempo onde as curvas das equações (2.4) e (2.3) coincidem. Este método produz valores de z com alguma imprecisão, e mostramos neste trabalho uma forma de obter estes valores de forma mais simples, com apenas um ajuste, com erros menores.

2.2.2 Relação de Family-Vicsek

A partir de modelos de crescimento de superfícies à época já bastante conhecidos, o modelo de deposição balística e o processo de Eden na rede infinita de percolação incipiente, Family e Vicsek [7], analisando as propriedades de agregação de clusters dos mesmos, observaram nos dados obtidos por meio de simulações que o comportamento da rugosidade em superfícies fractais onde ocorre o surgimento de correlação pode ser modelado de forma universal por uma expressão,

$$w(L, t) \sim L^{\alpha} f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (2.7)$$

com a função $f(x)$ exibindo a propriedade de que

$$f(x) = \begin{cases} x^{\beta} & \text{se } x \ll 1 \\ 1 & \text{se } x \gg 1 \end{cases} \quad (2.8)$$

A universalidade da relação Family-Vicsek a torna extremamente útil por nos permitir descrever o comportamento de múltiplas superfícies com uma única expressão. Ilustramos um uso da relação de Family-Vicsek na figura 2.4, onde utilizamos a relação (2.7) para colapsar o gráfico da dinâmica de diversos substratos diferentes, cuja rugosidade foi obtida pelo algoritmo de corrosão, em apenas uma curva.

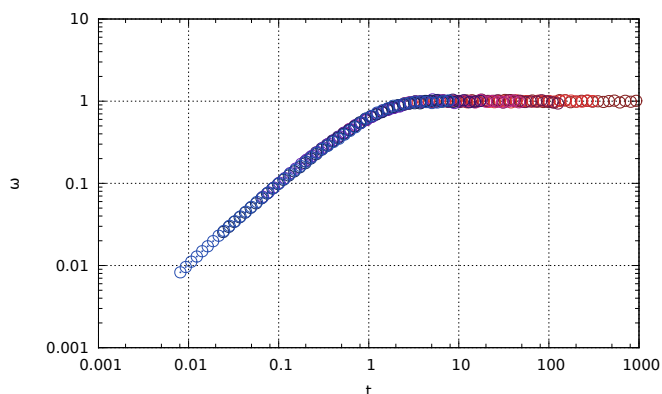


FIGURA 2.4: Curvas da dinâmica de saturação da rugosidade no algoritmo de corrosão para substratos com L entre 2 e 1024.

2.3 Equações de Crescimento

Apenas verificar as relações dos expoentes dinâmicos a partir de sistemas encontrados na natureza seria um forte limitante no estudo de suas propriedades. Assim, nesta seção estudamos algumas das equações que nos permitem modelar o comportamento destes sistemas através do tempo, e em alguns casos, obter seus expoentes dinâmicos através de equações.

2.3.1 Deposição Aleatória

O modelo de deposição aleatória nos produz a classe de universalidade mais simples dentre os processos de crescimento. Nesse modelo, um substrato discreto recebe aleatoriamente deposições de partículas que apenas se empilham sobre os outros

sítios no substrato. Desta forma, o crescimento apresentado é não-correlacionado, com cada uma das colunas crescendo independentemente e indefinidamente, sendo esse um modelo caracterizado por apenas um expoente dinâmico, o β .

Essas características tornam a análise desta classe de universalidade bastante simples, com a obtenção de seus expoentes sendo bastante direta. Para tal, consideramos uma superfície discreta com comprimento L . Após a deposição de N partículas, a probabilidade de encontrar uma coluna com altura h é descrita por

$$P(h, N) = \binom{N}{h} p^h (1-p)^{N-h}, \quad (2.9)$$

onde p é a probabilidade de crescimento de cada coluna e vale $1/L$.

Considerando que cada L deposições correspondem a uma unidade de tempo, a altura média será descrita como

$$\langle h \rangle = \sum_{h=1}^N h P(h, N) = Np = \frac{N}{L}, \quad (2.10)$$

e de forma semelhante a média do quadrado da altura será dado por

$$\langle h^2 \rangle = \sum_{h=1}^N h^2 P(h, N) = Np(1-p) + N^2 p^2. \quad (2.11)$$

A partir da definição da rugosidade apresentada em (2.1) podemos escrever então

$$w = \sqrt{Np(1-p) + N^2 p^2 - \left(\frac{N}{L}\right)^2}, \quad (2.12)$$

que escrita apenas em termos de N e L nos resultam em

$$w = \sqrt{\frac{N}{L} \left(1 - \frac{1}{L}\right)} = \sqrt{t \left(1 - \frac{1}{L}\right)} \quad (2.13)$$

ou seja, $w(t) \sim t^{1/2}$ [5].

O mesmo expoente $\beta = 1/2$ é encontrado na classe de deposição aleatória para sistemas em todas as dimensões.

2.3.2 Edward-Wilkinson

Partindo do problema da modelagem das flutuações de uma superfície de um material granular, Edwards e Wilkinson[8] constroem um modelo de uma superfície formada por sítios discretos onde ocorre a deposição *suave e uniforme* de material, em um fluxo fraco e não correlacionado.

Devido a complexidade do trabalho original, é usual obter a equação e os expoentes da classe de universalidade de Edwards-Wilkinson (EW) por meio de argumentos de simetria[5]. Neste caso, considera-se que um crescimento de superfície deve envolver uma variação de altura h e um fluxo de partículas.

A equação deve relacionar a variação de altura ao longo da superfície com um fluxo de partículas, fazendo que sua forma básica seja algo como

$$\partial_t h(\mathbf{x}, t) = F(h, \mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (2.14)$$

ou seja, uma parte $F(h, \mathbf{x}, t)$ determinística, com dependência apenas da interface, e a parte $\eta(\mathbf{x}, t)$ que deve ter a forma de um ruído.

Esperamos que tal sistema possua um conjunto específico de simetrias que devem ser aplicáveis ao termo $F(h, \mathbf{x}, t)$ sob investigação. As simetrias são[9]:

Translação horizontal:

A translação horizontal $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ remove a possibilidade de uma dependência explícita na posição \mathbf{x} ;

Translação temporal:

A translação temporal $t \rightarrow t + \Delta t$, assim como a translação horizontal, força que o termo F não possua dependência explícita no tempo;

Translação vertical:

A translação na altura $h \rightarrow h + \Delta h$ é o que nos permite trabalhar no referencial de altura média, ou em qualquer outro referencial de escolha, e novamente, remove a possibilidade de uma dependência explícita na altura h ;

Inversão horizontal:

A simetria de inversão horizontal nos dita que $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$. Isto implica que apenas potências pares ($2n$) ou derivadas pares (∇^{2n}) de \mathbf{x} pode se compor o termo $F(h, \mathbf{x}, t)$.

Inversão vertical:

A simetria de inversão vertical implica que podemos realizar a transformação $h \rightarrow -h$. Assim, de forma semelhante ao que temos para a inversão horizontal, apenas podemos utilizar potências pares de h ou derivadas pares de h .

Uma equação que possua tais características pode ser descrita de forma genérica como

$$\partial_t h(\mathbf{x}, t) = \eta(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=0, j=0}^{\infty} C_{ij} (\nabla^{2i} h) (\nabla h)^{2j}, \quad (2.15)$$

onde C_{ij} é um coeficiente a ser determinado.

Uma forma convidativa de simplificação desta equação é considerar apenas os primeiros termos, visto que podemos aproximar o comportamento do sistema apenas para tempos longos, tendendo a infinito, e para substratos grandes, considerando que a variação da rugosidade é pequena, ou seja, $\nabla h \ll 1$

Assim, podemos considerar apenas o termo de menor ordem, $\nabla^2 h(\mathbf{x}, t)$. A partir do comportamento esperado para tal sistema, consideramos que o coeficiente C_{10} presente neste único termo restante deve apresentar a característica de tornar a superfície suave, sendo considerada uma forma de *tensão superficial* e simbolizada por ν . Assim, escrevemos a equação de Edwards-Wilkinson (EW) como

$$\partial_t h(\mathbf{x}, t) = \eta(\mathbf{x}, t) + \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t), \quad (2.16)$$

com $\eta(\mathbf{x}, t)$ representando o ruído.

Expoentes da equação EW

A linearidade da EW permite a obtenção de soluções de forma relativamente simples. Adicionalmente, é possível obter os expoentes dinâmicos sem resolver

a equação, apenas usando argumentos de escala[5]. Nesta técnica, consideramos 3 transformações de escala simples,

$$\mathbf{x} \rightarrow b\mathbf{x}, \quad (2.17)$$

$$h \rightarrow b^\alpha h, \quad (2.18)$$

$$t \rightarrow b^z t, \quad (2.19)$$

que deve produzir uma interface com propriedades equivalentes a superfície original.

O termo que contém o laplaciano é reescalado de forma simples, produzindo $b^{\alpha-2}\nu\nabla^2 h(\mathbf{x}, t)$. Para obter a versão do ruído sob transformação de escala, partimos da propriedade de que o segundo momento do ruído deve ter a forma

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t)\eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D\delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t'), \quad (2.20)$$

que nos permite escrever a forma reescalada do segundo momento como

$$\langle \eta(b\mathbf{x}, b^z t)\eta(b\mathbf{x}', b^z t') \rangle = 2D\delta^d(b\mathbf{x} - b\mathbf{x}')\delta(b^z t - b^z t'). \quad (2.21)$$

Usando a propriedade das funções delta de que $\delta^d(a\mathbf{x}) = \frac{1}{a^d}\delta^d(\mathbf{x})$, podemos reescrever a eq. (2.21) como

$$\langle \eta(b\mathbf{x}, b^z t)\eta(b\mathbf{x}', b^z t') \rangle = 2Db^{-d-z}\delta(b\mathbf{x} - b\mathbf{x}')\delta(b^z t - b^z t'), \quad (2.22)$$

de forma que chegamos ao valor do ruído reescalado como $b^{-(d+z)/2}\eta(\mathbf{x}, t)$.

Assim, uma substituição destas transformações na equação original nos provê

$$b^{\alpha-z}\partial_t h(\mathbf{x}, t) = b^{-(d+z)/2}\eta(\mathbf{x}, t) + b^{\alpha-2}\nu\nabla^2 h(\mathbf{x}, t). \quad (2.23)$$

Reescrevendo de forma a isolarmos a variação da altura, temos

$$\partial_t h(\mathbf{x}, t) = b^{-(d+z)/2-\alpha}\eta(\mathbf{x}, t) + b^{z-2}\nu\nabla^2 h(\mathbf{x}, t). \quad (2.24)$$

Esperamos que esta equação seja independente do valor de b , forçando que cada uma das expressões dos expoentes de b seja nula, ou seja

$$z = 2, \quad (2.25)$$

$$\alpha = \frac{2-d}{2}, \quad (2.26)$$

e a partir da relação entre os 3 expoentes,

$$\beta = \frac{\alpha}{z} = \frac{2-d}{4}. \quad (2.27)$$

Os valores obtidos pela solução da equação diferencial descrita em (2.16) resulta em expoentes iguais aos obtidos por esta técnica. Tais expoentes se anulam para $d = 2$, o que não corresponde a realidade. Apresentamos na próxima subseção uma equação deduzida de princípios semelhantes a EW, que não possui esta limitação.

2.3.3 Kardar, Parisi e Zhang

Diferentemente da equação EW, Kardar, Parisi e Zhang [10] não partem da modelagem de um sistema, e sim de uma modificação da equação EW. Esta modificação consiste em considerar propriedades de simetria semelhantes as descritas em nossa dedução da EW, entretanto, ignoramos a **inversão vertical**, de forma que não mais podemos executar a transformação $h \rightarrow -h$. Isto implica em forçar uma direção no crescimento da superfície. Adicionalmente, a remoção desta simetria permite que tenhamos termos com a forma $(\nabla h)^{2k}$, tornando a equação KPZ algo do tipo

$$\partial_t h(\mathbf{x}, t) = \eta(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=0, j=0, k=0}^{\infty} [C_{ij}(\nabla^{2i} h)(\nabla h)^{2j} + D_k(\nabla h)^{2k}], \quad (2.28)$$

onde, assim como em EW, C_{ij} e D_k são constantes.

Novamente, descartamos os termos de ordem superior, mantendo apenas os de menor expoente, que resultam na equação

$$\partial_t h(\mathbf{x}, t) = \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2, \quad (2.29)$$

onde os dois primeiros termos do lado direito da equação possuem os mesmos significados que na eq. (2.16). Aqui identificamos a constante D_k com $\lambda/2$.

A remoção da possibilidade de inversão vertical implica na existência de crescimento lateral no modelo. Esta adição de crescimento lateral tem um preço.

Tal mudança torna a equação KPZ uma equação não-linear, o que torna sua solução analítica muito mais complexa. Pode-se ilustrar essa mudança considerando que apesar de sua moderada complexidade, a equação EW já era resolvida no trabalho que a propunha enquanto a equação KPZ somente obteve uma proposta de solução geral semi-analítica em 2010 para $d = 1$ [11], quase 25 anos após sua proposição.

Expoentes da equação KPZ

Devido a dificuldade de obter os expoentes da equação diretamente, há algumas técnicas para sua obtenção. Observe que a utilização das transformações de escala (2.17) a (2.19) feitas para a EW nos leva a uma aparente incoerência, já que os expoentes não se cancelam como no caso anterior. Somos então forçados a concluir que as constantes D , σ e λ não são fixas, mas mudam com a escala (ver apêndice A). Neste trabalho mostraremos a obtenção destes expoentes por meio da técnica mais simples, por meio de análise de simetrias.

Assim como é feito na equação EW, podemos definir a partir das simetrias esperadas na equação um conjunto de propriedades que restringem os valores possíveis de seus expoentes. Como dissemos na seção anterior, a equação KPZ possui as mesmas simetrias da equação EW, com exceção da inversão de altura, $h \rightarrow -h$. Além desse conjunto de simetrias, a KPZ possui também a propriedade de *parametrização infinitesimal*, de forma que podemos executar a transformação $h \rightarrow h + \epsilon \cdot \mathbf{x}$ e a transformação $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \lambda \epsilon t$, que são equivalentes a inclinar a superfície infinitesimalmente.

Mesmo com a informação sobre essas simetrias, obter os expoentes através delas ainda se mostra uma tarefa infrutífera. A técnica usada na ref [5], que utilizamos ao longo deste capítulo, parte da semelhança entre a equação KPZ e a equação de Burgers.

A equação de Burgers é uma das equações fundamentais da mecânica de

fluidos, descrevendo o fluxo viscoso na ausência de vórtices, que tem a forma

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \lambda(\mathbf{v} \cdot \nabla)v = \nu \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \eta(\mathbf{x}, t). \quad (2.30)$$

A versão da equação de Burgers com ruído pode ser transformada na equação KPZ por meio de uma mudança de variáveis, fazendo se $\mathbf{v} = -\nabla h$.

Esta substituição nos permite observar que a equação KPZ apresenta a chamada *Invariância Galileiana*, de forma que para substratos de qualquer dimensão, temos as duas relações válidas (ver apêndice A),

$$\alpha + z = 2 \quad (2.31)$$

$$z = \alpha/\beta \quad (2.32)$$

A partir dessas duas relações e da relação (A.17), podemos chegar aos valores conhecidos para os expoentes da equação KPZ em uma dimensão, $\alpha = 1/2$, $\beta = 1/3$, e $z = 3/2$.

2.3.4 Classes de Universalidade

Na seção 2.2.2, observamos que um conjunto de curvas com os mesmos expoentes podem ser colapsadas em uma mesma curva. Essa propriedade não se restringe a sistemas de mesma natureza, podendo por exemplo descrever o desenvolvimento de uma colônia de bactérias em uma placa petri [12] ou um filme orgânico [13].

Para tanto, agregamos sistemas que possuem o mesmo conjunto de expoentes dentro do que chamamos de *classe de universalidade*. De forma bastante simples, podemos dizer que a universalidade significa que podemos desconsiderar detalhes do sistema na procura de uma solução[14]. Assim, torna-se possível a agregação de uma série de diferentes fenômenos com soluções idênticas.

O conceito de universalidade está intimamente ligado ao conceito de escala, sendo quase inseparáveis, visto que as relações de escala são utilizadas para obter os expoentes que nos permitem essa classificação.

Dentro do estudo de superfícies fractais uma série de classes de universalidade aplicáveis são conhecidas, com algumas características em comum. Por exemplo, é conhecido que o valor do expoente α está relacionado à presença de correlação na deposição. Por exemplo, um expoente $\alpha = 1/2$ indica deposição não-correlacionada, enquanto que um expoente $\alpha > 1/2$ indica uma correlação persistente [15].

Uma característica que surge desta classificação em classes de universalidade de acordo com o valor dos expoentes é que como esta é definida pelo valor dos expoentes, isto significa que cada uma das equações que mostramos nesta seção acaba por definir sua própria classe de universalidade.

Além das três classes de universalidade mostradas nas subseções 2.3.1 2.3.2 e 2.3.3, diversas outras classes de universalidade existem no contexto de dinâmica de superfícies. Dentre estes modelos, podemos citar a variante temperada da classe de Edwards-Wilkinson [16], onde é utilizado um ruído temperado e uma força externa, a variante temperada da classe de Kardar-Parisi-Zhang [17], que similarmente a EW temperada é produzida pela adição de força externa e ruído temperado. Estas classes e suas respectivas equações surgem da aplicação na interface de meios não-lineares aleatórios.

2.4 Modelos de Crescimento

Dentre os múltiplos modelos computacionais utilizados no estudo de superfícies fractais, alguns merecem especial destaque devido a fatores como sua utilidade ou mesmo sua importância histórica.

Um método comum para construção destes modelos é fazer uso de ferramentas computacionais, como por exemplo o uso de autômatos celulares. Um autômato celular é uma estrutura de unidades discretas que interagem por meio de um conjunto de regras simples.

A idéia de autômatos celulares data da década de 1940, tendo como pioneiros

Stanislaw Ulam, que trabalhava na modelagem de cristais e John Von Neumann, com seu conhecido trabalho de sistemas auto-replicantes[18]. Trabalhos do começo da década de 1960, como o modelo de Eden e o modelo de Deposição Balística já faziam uso de computação aliada a experimentos para estudar a dinâmica de superfícies fractais.

Tais trabalhos são de extrema importância para a onda de trabalhos que surgiram na década de mil novecentos e oitenta, quando a popularização do uso de simulações computacionais como ferramenta se tornou possível, em parte graças a redução no custo e no aumento do poder de processamento. Modelos mais complexos e a possibilidade de executar em tempos razoáveis grandes números de experimentos permitem a análise de características de superfícies fractais que antes não eram acessíveis.

Tratamos nesta seção de alguns destes modelos, com especial atenção ao modelo de Corrosão, que é a base deste trabalho.

2.4.1 Modelo de Eden

O modelo de Eden [19] trata inicialmente do crescimento de uma estrutura formada por células. Uma de suas características definidoras é a simplicidade, visto que o algoritmo consiste em uma sucessão de deposições sobre a superfície, onde supõe-se a equiprobabilidade de deposição para cada sítio. Cada uma das partículas "gruda" na primeira partícula que encontra ao ser depositada na superfície.

A diferença do modelo de Eden em relação a outros modelos, como o modelo de corrosão, é que no modelo de corrosão partículas são depositadas sobre outras partículas, enquanto no modelo de Eden há também a deposição lateral.

Podemos atribuir parte da importância deste modelo ao fato de ser um dos precursores no estudo de crescimento de superfícies, que inspirou muitas das idéias nesta área.

Na década de mil novecentos e oitenta foi feita a análise do modelo utilizando-se ferramentas computacionais, de forma que seus expoentes dinâmicos para $d =$

1, 2 e 3 dimensões eram conhecidos [20], coincidindo, na versão mais simples do algoritmo, com os valores que seriam mais tarde conhecidos como a classe de universalidade KPZ.

2.4.2 Deposição Aleatória

O modelo de deposição aleatória pode ser considerado a forma mais simples de construir uma superfície fractal. Nele, considerando uma superfície com comprimento L , escolhe-se aleatoriamente uma coluna i , e sobre ela é feita a deposição de uma partícula, aumentando em uma unidade a altura da coluna.

Além da simplicidade, o fator que define o modelo de deposição aleatória é o fato deste não produzir correlação ao longo da superfície[5]. Isto o torna uma exceção entre os modelos comumente usados, que normalmente estabelecem correlação ao longo da superfície após um determinado número de deposições.

Esta ausência de correlação produz um comportamento onde, diferentemente de modelos como o de Eden ou a Deposição Balística que após um tempo t_x apresentam saturação da rugosidade, há o aumento por tempo indefinido da rugosidade. Isto faz com que a deposição aleatória possua propriedades diferentes dos outros modelos, sendo classificada em sua própria classe de universalidade, descrita mais a frente.

2.4.3 Deposição Balística

Utilizada inicialmente como uma ferramenta na modelagem no processo de agregação de colóides, a *Deposição Balística*[21] produz uma estrutura com interessantes propriedades, incluindo a sua porosidade.

De forma semelhante ao modelo de Eden, consideramos na versão mais simples da deposição balística uma superfície em $1 + 1$ dimensões formada por sítios discretos. O processo consiste em escolher aleatoriamente um sítio, e a partícula depositada irá grudar em um dos sítios da superfície. Há diversas regras de deposição,

como por exemplo a regra de deposição de vizinho mais próximo (em inglês, *nearest neighbour*), que pode ser descrita como o seguinte algoritmo:

1. Um sítio i é selecionado aleatoriamente;
2. $h_i(t + 1) = \max[h(i - 1, t), h(i, t) + 1, h(i + 1, t)]$

Em parte devido a variedade de regras aplicáveis, e em parte a diferentes métodos de obtenção, há considerável discordância quanto aos expoentes dinâmicos associados ao modelo de deposição balística, com razoáveis evidências que apontam na direção da deposição balística pertencendo a classe de universalidade KPZ[22].

Capítulo 3

Problemas em aberto: Dimensão Crítica Superior e Invariância Galileana

No capítulo anterior, verificamos que as principais grandezas que aparecem no fenômeno de crescimento, i.e. $w(t)$ para pequenos valores de t , w_s em função de L , e o tempo de saturação t_x , são descritos por lei de potência, veja Equações (2.3)-(2.5), definindo respectivamente os expoentes β , α e z . Esses expoentes dependem da dimensão espacial d . Embora existam outros expoentes na dinâmica de crescimento, os três expoentes acima são os mais importantes, e neste trabalho, nos concentraremos apenas neles. Por outro lado, uma área muito importante da física é o estudo das transições de fase, onde o comportamento dinâmico próximo a transição também é descrito por leis de potência, e uma parte substancial das teorias de transição de fase é dedicada ao estudo e obtenção dos expoentes críticos.

Devido a semelhança entre crescimento e transição de fase, nas duas seções seguintes, estudaremos dois pontos extremamente importantes: Primeiro a existência ou não de uma dimensão crítica superior (DCS), i.e. a dimensão a partir da qual os expoentes tornam-se independentes da dimensão, como acontece em transição de fase para alguns sistemas físicos. Segundo, discutir a Invariância de Galileu (IG) que é extremamente importante nos processos de crescimento.

Recentemente, uma proposta de solução analítica para a equação KPZ em uma dimensão foi proposta por Sasamoto e Spohn[11]. Esta solução, concebida a

partir da informação referente a função de distribuição de probabilidade universal, que os mesmos aplicam para a altura $h(x)$ na equação KPZ.

Posteriormente, Imamura e Sasamoto[23] continuaram tal trabalho, aplicando tal estratégia na obtenção da distribuição de alturas para a equação KPZ no regime estacionário. Entretanto, nenhum destes dois trabalhos podem ser considerados como soluções gerais, em especial quando consideramos sistemas em mais do que $1 + 1$ dimensões.

Além da ausência de soluções analíticas gerais, duas outras questões permanecem em aberto no estudo da equação KPZ e modelos semelhantes: a validade da Invariância Galileana e a existência de uma dimensão crítica superior. Neste capítulo, apresentamos estes dois problemas e o panorama atual em seu estudo.

3.1 Dimensão Crítica Superior

O modelo de Ising é provavelmente o modelo padrão para o estudo de transições de fase, devido a sua simplicidade. O modelo foi resolvido exatamente para duas dimensões a campo nulo, por Onsager[24], sendo referência básica para todo estudo posterior de transição de fase. Diversos métodos numéricos e resultados analíticos aproximados foram desenvolvidos para três e quatro dimensões. Finalmente, demonstrou-se que existe uma dimensão crítica $d_c = 4$. Isto é, para $d \geq 4$ os expoentes são os mesmos, mas os valores obtidos são idênticos aos valores obtidos por meio de uma simples teoria de campo médio tipo Ginzburg-Landau[25].

Esta analogia com o modelo de Ising levou alguns autores a postular a existência de uma DCS $d_c = 4$ para KPZ. Entretanto essa analogia é ingênua, já que mesmo em transição de fase outros modelos podem apresentar ou não DCS. Por exemplo o modelo de Hubbard tem DCS $d_c = \infty$.

A inexistência de uma solução geral para equação KPZ, somada a impossibilidade de obter seus expoentes em dimensões superiores a $1 + 1$ por meio de grupos de renormalização conduz a situação onde, a despeito de suas propriedades

dinâmicas serem bem conhecidas para tal dimensão, não há um consenso quanto as propriedades dinâmicas de tal sistema em dimensões superiores.

Tal ausência de consenso nos leva a uma das questões em aberto relativas a equação KPZ, a da existência de uma DCS. No contexto de crescimento de superfícies, uma DCS significa uma dimensão a partir da qual não importando o valor da não-linearidade, a superfície se mantém plana. Enquanto a obtenção da dimensão crítica para a equação de Edward-Wilkinson é direta, outras estratégias são adotadas para a verificação da existência de uma DCS na equação KPZ.

Em seu trabalho original, Kardar, Parisi e Zhang [10] especulavam a possibilidade de os expoentes de sua equação serem independentes da dimensão dos substratos. Trabalhos posteriores focando nos valores dos expoentes em dimensões superiores obtiveram resultados mistos.

Em uma continuação de seu trabalho original, Kardar e Zhang [26] utilizam um modelo de polímero direcionado para obter expoentes para sistemas com até $d = 4$. Os resultados novamente indicavam que os expoentes seriam superuniversais.

Durante as próximas duas décadas, uma plethora de trabalhos com o objetivo de responder a questão da existência de DCS sucederam.

3.1.1 Obtenção de Equações para o Comportamento de Expoentes

Dentre as diversas estratégias de obtenção de relações gerais entre dimensões de superfícies e seus respectivos expoentes dinâmicos é importante citar dois trabalhos que a despeito de posteriormente serem mostrados incorretos, foram considerados durante muito tempo como guias no estudo de DCS.

No primeiro destes trabalhos, Kim e Kosterlitz[27] fazem uso de simulações de crescimento no modelo RSOS [28] para superfícies em até 4 dimensões, e utilizam estes resultados para realizar uma ajuste de dados em uma função *ansatz*, que fornece uma relação entre expoentes dinâmicos e dimensão de superfície com a forma

$$\alpha = \frac{2}{d+3}, \quad \beta = \frac{1}{d+2}, \quad z = 2\frac{d+2}{d+3}. \quad (3.1)$$

No mesmo ano de 1991 outro artigo por Kerstész e Wolf [29] baseia-se no modelo de Eden[19] para obter soluções numéricas da KPZ para até $d = 3$. Da mesma forma que Kim e Kosterlitz, é utilizado um *ansatz* para ajustar os resultados numéricos, que produz o conjunto de equações seguinte

$$\alpha = \frac{1}{d+1}, \quad \beta = \frac{1}{2d+1}, \quad z = \frac{2d+1}{d+1}. \quad (3.2)$$

Posteriormente, Lässig[30] utiliza métodos de campos para propor uma série de propriedades para sistemas regidos pela KPZ, e deriva a partir delas uma quantização para o expoente α ,

$$\alpha = \frac{2}{k_0 + 2}, \quad (3.3)$$

onde k_0 é um inteiro ímpar para $d \geq 2$. Um trabalho anterior do mesmo Lässig[31] propõe, a partir do estudo do regime de acoplamento forte da KPZ, que a mesma deve ter uma DCS menor ou igual a 4.

Resultados posteriores discutidos na próxima subseção, tanto utilizando técnicas analíticas quanto numéricas se mostram significativamente divergentes dos resultados destes três trabalhos, esvaziando as tentativas de obter relações diretas entre d e os expoentes dinâmicos.

3.1.2 Resultados Modernos

Em 1998, Ala-Nissila[32] critica os resultados apresentados em [31], baseando-se em dados obtidos para o modelo RSOS apresentado por Kim[28], desta vez implementado com maior precisão. Posteriormente a este trabalho podemos observar um considerável aumento de trabalhos tratando da DCS.

Parte da controvérsia surge pelo fato de que diferentes aplicações da mesma estratégia muitas vezes obtém valores distintos para a DCS, como, por exemplo, a aplicação de teorias de modo acoplado obtendo ora valores baixos ($d_c \leq 4$),[33], ora a inexistência de tal dimensão[34]. A partir da correspondência de fenômenos críticos a grupos de renormalização perturbativos de modo acoplado, realizando a

expansão de potência em torno de $\alpha = 0$, Bhattacharjee[35] obtém uma expressão da forma

$$\alpha = \frac{4 - d}{6}, \quad (3.4)$$

compatível com uma dimensão crítica $d_c = 4$.

Tentativas utilizando grupos de renormalização somado a simulações computacionais como o de Castellano et al[36] não observam tal comportamento, obtendo valores de α não nulos para sistemas com até $d = 9$.

Marinari et al [37] obtém valores para os expoentes críticos da equação KPZ para $d = 2, 3$ e 4 dimensões via simulações numéricas, não encontrando evidências da existência de d_c .

Posteriormente, de Colaioni e Moore[38] utilizam novamente teorias de modo de acoplamento, por meio de um tratamento analítico aproximado para obter um valor de $d_c = 4$. Outro trabalho de Moore[39] sugere um limite superior idêntico.

Em um dos trabalhos mais recentes na área, Schwartz et al[40] analisam o polímero direcionado em temperatura zero, em quatro dimensões, obtendo o resultado de que tal sistema está abaixo de uma possível dimensão crítica superior, sugerindo que se uma DCS existe, deve ser tal que $d_c > 7$, especulando baseado em outros trabalhos que não exista uma DCS para a equação KPZ.

3.2 Invariância Galileana

Na obtenção teórica dos expoentes dinâmicos da equação KPZ, utiliza-se como ponto de partida os métodos de grupos de renormalização, obtidos inicialmente para transição de fase de segunda ordem, veja os artigos históricos [41, 42] e os introdutórios [43, 44, 45]. Estes trabalhos foram uma generalização da transformação de blocos de Kadanoff. Os resultados mais importantes foram a obtenção das relações existentes entre os expoentes críticos como por exemplo a relação de Escala de Widom e de Rushbrooke[46].

Aplicada a KPZ, desta estratégia emerge uma importante relação entre os

expoentes dinâmicos de crescimento, que é

$$\alpha + z = 2, \tag{3.5}$$

conhecida como, invariância Galileana (IG), ver apêndice A. Nos últimos anos entretanto, resultados teóricos [47] e numéricos [48, 49], os últimos associados a dimensões fractais do modelo de corrosão de Mello et al[1] nos leva a possibilidade de violação da IG.

Esta propriedade da equação normalmente é expressa como a relação $\alpha + z = 2$. Entretanto, muitas das soluções obtidas para os expoentes dinâmicos da equação KPZ são obtidos mediante diferentes técnicas de discretização da equação.

O trabalho de Wio et al[50] demonstra que o fato da equação KPZ ser obtida a partir de uma transformação de Hopf-Cole aplicada a uma equação de difusão restringe as escolhas de esquemas de discretização espacial disponíveis. Esta questão é de extrema importância quando consideramos que uma das estratégias populares para estudo da equação KPZ inclui a sua discretização para permitir o uso de estratégias computacionais em suas tentativas de solução.

A IG é muito importante em física, em particular para a equação KPZ e o modelo de corrosão, que é o objetivo central dessa tese. Deste modo dedicaremos parte do nosso trabalho, ver capítulo 5, para discutir a IG.

Capítulo 4

Modelo de Corrosão

Neste capítulo introduzimos o modelo de corrosão [1]. Esse modelo proposto por Mello, Oliveira e Chaves, é de importância fundamental neste trabalho, de forma que neste capítulo descrevemos a origem do modelo, assim como algumas de suas características e propriedades, além de apresentarmos alguns dos resultados obtidos por outros pesquisadores ao utilizá-lo.

4.1 A construção do modelo

O algoritmo de corrosão é um autômato celular com um conjunto de regras simples que reproduz com grande precisão os expoentes dinâmicos encontrados na equação KPZ em superfícies em uma dimensão, podendo então ser classificado como um dos modelos da classe de universalidade KPZ.

O modelo considera uma superfície discreta, composta por sítios de tamanhos idênticos. Em sua concepção original, o mesmo é aplicado para sistemas em $1 + 1$ dimensões. A primeira dimensão se refere a dimensão de "comprimento" da superfície, representada por L , e essa segunda dimensão é onde ocorre o crescimento, sendo denominada a altura h da superfície.

A execução do algoritmo de autômato celular consiste em considerar que cada um dos sítios, aqui denominados por um índice i , pode aleatoriamente ser sorteado. Na ocasião do sorteio de um sítio i , cuja altura é descrita por h_i , a

seguinte sequência de eventos é considerada:

1. em um instante T um sítio i é selecionado aleatoriamente;
2. $h_i(T + 1) = h_i(T) - 1$
3. se $h_{i-\delta}(T) > h_i(T)$, fazer $h_{i-\delta}(T + 1) = h_i(T)$;

A unidade de tempo considerada é o tempo necessário para execução de L iterações dos passos acima.

É interessante citar que os passos (2) e (3) introduzem no modelo a aleatoriedade no tempo e no espaço, sendo equivalentes ao η da equação KPZ. A terceira condição combina o termo Laplaciano, que tende a suavizar a superfície reduzindo sua curvatura ao termo não-linear, que adiciona crescimento lateral. Este modelo não pretende modelar diretamente a equação KPZ, mas a despeito disto observamos propriedades dinâmicas equivalentes à da KPZ para sistemas em uma dimensão.

Esta equivalência é observada através da análise dos expoentes dinâmicos, conforme observados no trabalho original e em diversos outros autores investigando o modelo. Esta propriedade leva a considerar o modelo de corrosão dentro da classe de universalidade KPZ.

A equivalência do ponto de vista da dinâmica significa, em termos práticos, que a rugosidade de superfícies modeladas com o algoritmo de corrosão deve ser semelhante àquela proposta por Family-Vicsek[7], com dois regimes distintos, cada um dos quais definidos por um diferente expoente dinâmico.

Este comportamento é visível na figura 4.1, onde a rugosidade de uma superfície em $1 + 1$ dimensões, com comprimento $L = 2048$ é apresentada em escala log-log. Observa-se a presença em tempos iniciais $t \lesssim 1$ de um comportamento diferente do esperado, onde a curva de rugosidade apresenta uma inclinação equivalente a $\beta = 1/2$ ao invés de $\beta = 1/3$ do modelo KPZ.

A existência deste comportamento transiente é creditada ao processo de desenvolvimento da correlação de curta distância, de forma que neste intervalo de

tempo o modelo é ainda equivalente a deposição aleatória, e deve ser levado em conta quando da avaliação do expoente β .

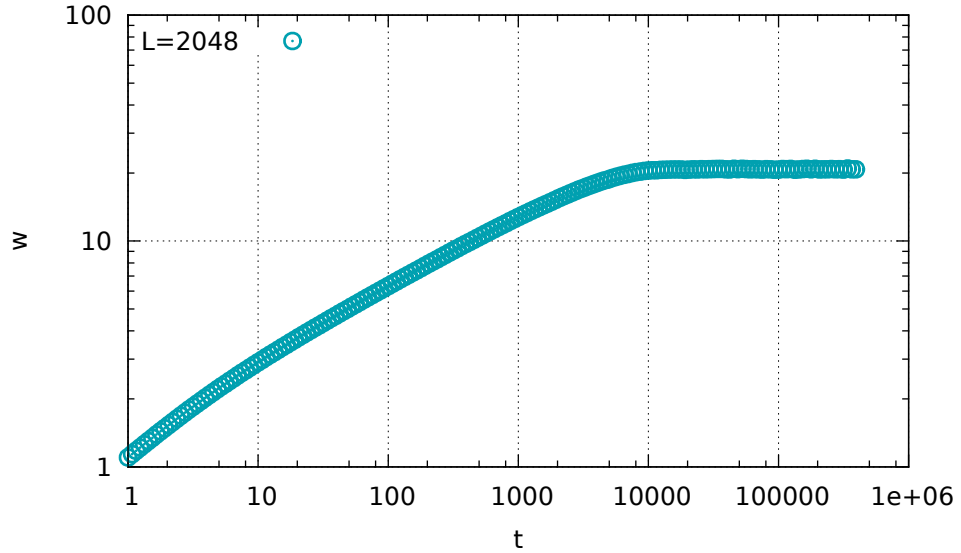


FIGURA 4.1: Dinâmica de saturação no modelo de corrosão para uma superfície de $L = 2048$ em $1 + 1$ dimensões.

No trabalho original, o algoritmo foi executado em sistemas de bordas periódica e não periódica, com comprimentos $L = 2^n$ com tempos de até $t = 20t_\times$. Para fins de obtenção de valores de expoentes, entretanto, apenas os substratos com $L > 1000$ foram utilizados, obtendo-se valores de expoentes notavelmente próximos dos resultados obtidos teoricamente para KPZ, com $\alpha = 0.4961 \pm 0.0003$ e $\beta = 0.330 \pm 0.001$, visto que o valor de β foi obtido utilizando apenas o maior substrato disponível, com $L = 131072$.

Estes valores de α e β situam este modelo, considerando a margem de erro, dentro da classe de universalidade KPZ. O interesse em modelos com expoentes dinâmicos semelhantes a equação KPZ surge em parte pelo fato da solução da mesma ser extremamente complexa.

4.1.1 O modelo de corrosão em dimensões fractais

Uma das áreas de interesse no estudo de superfícies fractais é aquele onde não apenas a superfície tem propriedades fractais, como também encontra-se em um espaço de dimensão fractal. O estudo consiste na investigação de propriedades de modelos discretos em superfícies em dimensões fractais. Trabalhos desta natureza já foram feitos para a versão em equilíbrio do RSOS, que produz expoentes da equação de Edwards-Wilkinson[47] e pode ser descrito por uma equação de Langevin fracional. Tais sistemas em equilíbrio produzem uma relação entre os expoentes e a dimensão fractal d_f que lembra a relação produzida pela invariância Galileiana, de forma que:

$$2\alpha + d_f = z. \quad (4.1)$$

Uma das aplicações do modelo de corrosão é analisar o seu comportamento em superfícies de dimensão fractal, observando suas propriedades dinâmicas. O trabalho de Tang et al[48] vale-se do fato de haver evidências apontando que o modelo de corrosão e o modelo de Family[51] pertencem à classe de universalidade para executar simulações dos mesmos no tapete do fractal de Sierpinski, onde $d_f \simeq 1.465$.

Por meio da relação de Family-Vicsek, são obtidos para tal superfície os expoentes $\beta = 0.290(1)$ e $\alpha = 0.485(3)$. A partir da relação $z = \alpha/\beta$, obtém-se $z \approx 1.67$.

Um trabalho posterior do mesmo grupo[49] retorna a aplicação do modelo de corrosão, desta vez considerando outras superfícies com dimensões fractais. Diferentemente do modelo de corrosão original, onde todo o crescimento ocorre em uma rede quadrada, tais superfícies são construídas considerando-se inicialmente uma rede hexagonal/triangular na qual são embutidos os fractais.

Na figura 4.2 mostramos duas destas estruturas, a ponta de seta de Sierpinski e o caranguejo. Ambas são construídas por meio de um algoritmo, sendo o número total de sítios disponíveis para crescimento determinado pelo índice da iteração, de forma que na k -ésima iteração teremos um total de $N_k = 3^k + 1$ sítios.

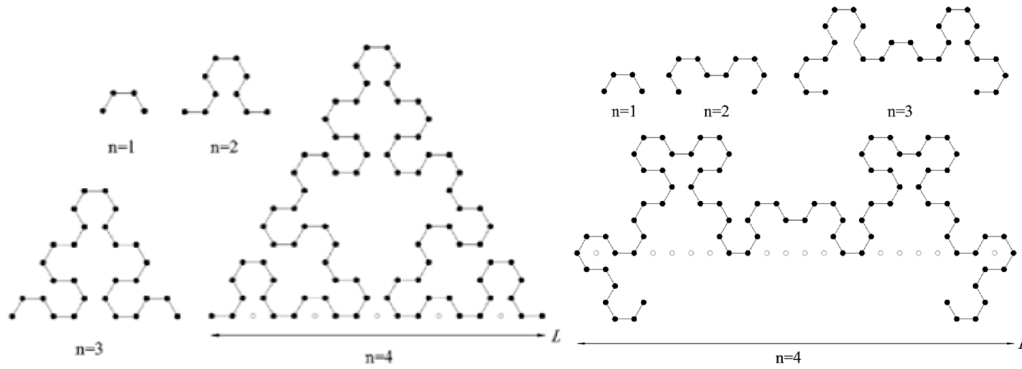


FIGURA 4.2: Ilustração das redes ponta de lança (esquerda) e caranguejo (direita) utilizadas por Xun et al[49], apresentando a estrutura gerada pela regra de iteração do fractal para diferentes valores de n . Note que os círculos vazios indicam o tamanho linear do fractal. Fonte: [49].

O comprimento linear da rede também é determinado pelo número da iteração, sendo $L_k = 2^k + 1$ para a ponta de seta de Sierpinski e $L_k = 3 \times 2^{k-1}$ para o caranguejo.

Esta regra de formação faz com que o número de vizinhos possíveis para cada sítio seja determinado por esta geometria e também pela estrutura de conexões locais, tornando o número de vizinhos disponíveis um valor entre dois e três. A ponta de seta de Sierpinski e o caranguejo possuem a mesma dimensão fractal $d_f \approx 1.585$, mas diferentes dimensões espectrais, respectivamente $d_s \approx 1.365$ e $d_s \approx 1.230$, de forma que as regras de deposição de ambos devem ser diferentes.

Além destas estruturas, o trabalho de Xun et al[49] também analisa o modelo de corrosão em outro fractal, o Triângulo duplo de Sierpinski, que é construído em uma rede triangular e apresenta a propriedade de possuir dimensões fractais e espectrais idênticas à Ponta de Seta de Sierpinski, o que torna possível verificar se os expoentes dinâmicos estão relacionados a dimensão espectral ou a dimensão fractal.

Na tabela 4.1 resumizamos os resultados desse trabalho [49]. Os autores conjecturam que o comportamento de escala do modelo de corrosão é afetado pelas características da dimensão fractal da superfície, sendo o valor de $\alpha = 0.64(2)$ no caranguejo uma evidência importante, visto que se trata de um valor de rugosidade maior do que o encontrado em qualquer dimensão Euclideana.

TABELA 4.1: Expoentes do modelo de corrosão em superfícies de dimensão fractal, conforme obtidos por Xun et al[49]

Superfície	d_f	α	β	z	$\alpha + z$
Ponta de Seta	1.585	0.48(1)	0.268(3)	1.79	2.27
Carangejo	1.585	0.64(2)	0.328(2)	1.96	2.60
Triângulo duplo	1.585	0.48(1)	0.267(1)	1.80	2.28

Nota-se também que tais expoentes não são consistentes com a Invariância Galileiana, que os autores consideram como evidência de que além da difusão anômala, o modelo de corrosão apresenta também anomalias no crescimento lateral, visto que a equação KPZ fractal, utilizada em sistemas onde há difusão anômala, também possui a invariância Galileiana[52], e que diferentemente do que é encontrado para o modelo de Family[51] nas mesmas estruturas fractais, a equação (4.1) não é válida para o modelo de corrosão.

Uma hipótese para o motivo desta ocorrência poderia ser o fato de que a IG é obtida considerando sistemas contínuos, sendo inválida para dimensões fractais, e portanto, discretas. Outra possibilidade estaria relacionada à discretização de tais sistemas e uma possível violação da IG[50] devida, novamente, a discretização.

4.1.2 Modelo de Corrosão com adição de impurezas

Uma variação do modelo proposto por Reis[53] prevê a deposição de um fluxo perpendicular de partículas de espécie diferente durante o processo de corrosão. Tal modelo apresenta a interessante propriedade de apresentar uma transição entre um regime de corrosão e um regime com superfície bloqueada.

Uma das diferenças em relação ao modelo de corrosão é que enquanto no primeiro há apenas um tipo de partícula, neste consideram-se dois tipos, o A, que é o da corrosão normal, e o tipo B, que é a impureza. Quando uma partícula no topo de uma coluna é do tipo A, ela é considerada exposta e, portanto, sujeita a corrosão, enquanto uma coluna com uma partícula B no topo não sofre corrosão

direta, apenas a corrosão lateral. Tais partículas são distribuídas sobre a superfície com uma probabilidade p .

No limite onde a probabilidade p é alta, após um longo intervalo de tempo a superfície tende a se tornar completamente bloqueada por partículas B , parando o processo de corrosão. É assim observada uma transição entre as duas fases, de corrosão e de bloqueio.

É observado que tal transição pertence à classe de universalidade de percolação direta, apesar de apresentar diferenças importantes em relação aos modelos normalmente classificados em tal classe de universalidade.

4.1.3 Distribuição de altura e rugosidade

Investigando as propriedades de distribuição de rugosidade e altura de filmes crescidos por modelos do tipo KPZ discretos, Paiva e Reis[54] utilizam o modelo de corrosão, em sua versão de crescimento, dois modelos RSOS[28] e o modelo de deposição balística.

Nesse trabalho, a caracterização destas distribuições é feita utilizando a curtose e a assimetria, definidas por:

$$Q = \frac{\langle (\Delta h)^4 \rangle}{\langle (\Delta h)^2 \rangle^2}, \quad (4.2)$$

$$S = \frac{\langle (\Delta h)^3 \rangle}{\langle (\Delta h)^2 \rangle^{3/2}}, \quad (4.3)$$

e conclui-se que a distribuição de rugosidade é a melhor opção para testar as propriedades de escala da KPZ no regime de crescimento.

Em um trabalho posterior, Reis[55] usa o modelo de corrosão em $2 + 1$ dimensões para testar um novo método que estima o expoente de rugosidade a partir da distribuição de rugosidade, utilizando o desvio padrão da rugosidade quadrada,

$$\sigma = \sqrt{\langle w_2^2 \rangle - \langle w_2 \rangle^2}, \quad (4.4)$$

considerando a relação de que

$$\sigma \sim L^{2\alpha}. \quad (4.5)$$

Essa estratégia se mostra eficaz em reduzir os efeitos de substrato finito, reduzindo a necessidade de correções no expoente de rugosidade α .

Capítulo 5

Modelo de corrosão em Múltiplas dimensões

Apesar de avanços recentes em tentativas de obtenção de soluções analíticas para a equação KPZ em uma dimensão [11, 23] e do fato de seus expoentes dinâmicos serem conhecidos há mais de vinte anos[56, 57], tanto a obtenção de uma solução geral quanto a obtenção de expoentes dinâmicos inequívocos para sistemas em dimensões superiores, $d > 1+1$ tem frustrado pesquisadores da área durante as últimas décadas.

Diversas estratégias em estabelecer tais valores foram tentadas ao longo das últimas décadas, algumas vezes com resultados contestáveis, como as tentativas de Kim e Kosterlitz[27] em obter por meio de simulações do modelo RSOS e as de Kerstész e Wolf [29] por meio de uma alteração do modelo de Eden, em obter uma regra geral para os expoentes dinâmicos.

As técnicas numéricas fazem uso de métodos computacionais, executando simulações de sistemas que podem ser equivalentes à KPZ, como, por exemplo, modelos baseados no modelo Eden[19] e no RSOS[58] ou diversas discretizações[59, 60] da equação KPZ.

Neste capítulo, apresentamos nossa contribuição à discussão por meio de uma extensão do modelo de corrosão proposto inicialmente por Mello et al[1]. A versão original do modelo é estendida para superfícies em $d + 1$ dimensões espaciais,

e comparado com resultados obtidos em outros trabalhos.

5.1 Extensão do Modelo

Nossa versão estendida do modelo de corrosão mantém parte das características originais do modelo, como por exemplo o fato de tratarmos de um sólido formado por unidades discretas e de considerarmos que a probabilidade de remoção de um sítio é proporcional a área exposta. O aumento de dimensões é tratado no algoritmo como uma extensão no número de vizinhos de cada sítio, ou seja, enquanto no modelo unidimensional cada sítio possui dois vizinhos, no modelo multidimensional cada sítio possui 2^d vizinhos[2].

Desta forma, reescrevemos o algoritmo apresentado no capítulo 4 como:

1. em um momento T um sítio i é selecionado aleatoriamente;
2. $h_i(T + 1) = h_i(T) - 1$
3. se $h_{i-\delta}(T) > h_i(T)$, fazer $h_{i-\delta}(T + 1) = h_i(T)$;

onde $\delta \pm 1$ são os primeiros vizinhos.

O caso geral compreende tanto i quanto δ como vetores indexando cada um dos 2^d vizinhos. Assim, considerando substratos de comprimento L temos uma superfície com um total de L^d sítios. Desta forma, consideramos também que a unidade de tempo de execução passa a ser o tempo necessário para L^d execuções.

5.2 Obtenção dos dados

Para obtermos os dados o modelo foi escrito como uma simulação computacional. A evolução de apenas uma superfície do método produz grande quantidade de ruído, sendo portanto necessária a execução de diversas amostras do mesmo para a redução do ruído, com os valores obtidos em cada uma delas considerados dentro de uma média.

Como nosso objetivo inclui analisar o comportamento dos expoentes para dimensões superiores, foram executadas simulações com diversos comprimentos de substrato L , que devido à peculiaridades de nossa implementação do algoritmo, consistem em valores de 2^n , onde n é um inteiro.

As dimensões analisadas foram restritas entre $d = 1 + 1$ e $d = 6 + 1$. O comprimento máximo dos substratos para cada dimensão acaba sendo limitado pela disponibilidade de tempo de processamento e pela quantidade de memória disponível, de forma que para $d = 1 + 1$ pudemos utilizar um comprimento máximo de $L = 16384$, enquanto em nossa maior dimensão, $d = 6 + 1$ nossa maior superfície possui $L = 32$.

Maiores informações relacionadas às restrições de recursos computacionais encontram se no apêndice B.

5.3 Análise dos dados

A análise dos dados da simulação foi feita utilizando a forma mais simples de ajuste, considerando a relação de Family-Vicsek (FV), descrita na subseção 2.2.2. Apesar da existência de estratégias mais recentes para este tipo de análise[61, 62], utilizamos esta estratégia pois posteriormente, no capítulo 7 propomos uma técnica nova para ajuste, cujos resultados são comparados aos obtidos pela FV e aos resultados de outros trabalhos.

Na figura 5.1 plotamos parte dos dados obtidos da simulação. Apenas 1 em cada 4 pontos são mostrados para simplificar a visualização, assim como o tempo máximo exibido é de $15t_\times$. É nítida a relação entre o tempo de saturação t_\times com o comprimento do substrato, e mesmo sem realizar o colapso dos dados é possível notar, em especial em 5.1a que conforme aumentamos o comprimento do substrato, a declividade da curva para $t < t_\times$ parece se estabilizar. Esta informação será utilizada posteriormente para estabelecer o valor de β .

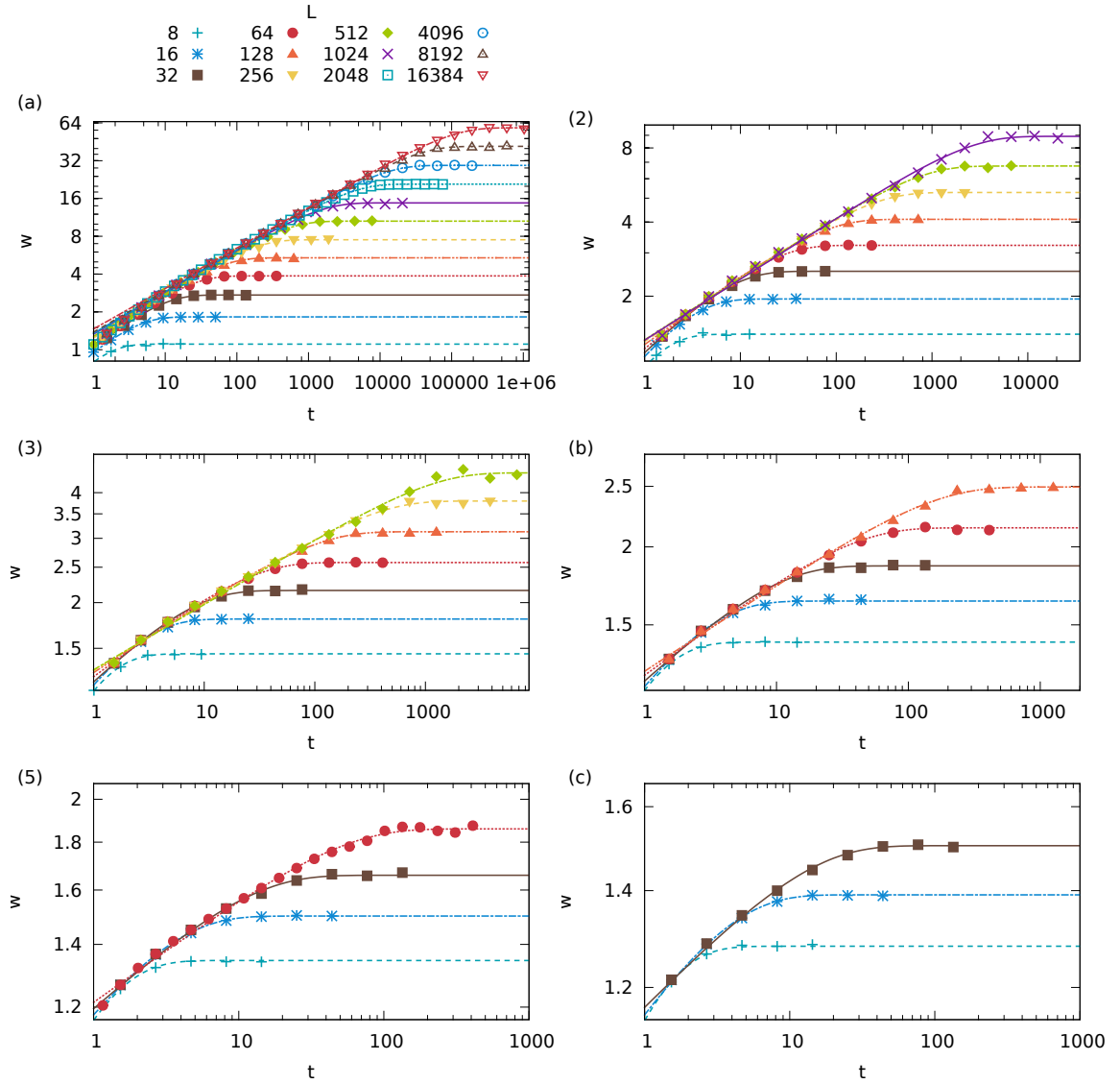


FIGURA 5.1: Rugosidade $w(L, t)$ no algoritmo de corrosão como função do tempo, para superfícies em 1 + 1 (a), 2 + 1 (b), 3 + 1 (c), 4 + 1 (d), 5 + 1 (e) e 6 + 1 (f) dimensões.

5.3.1 Expoente de rugosidade

As propriedades dinâmicas de escala de superfícies nos permitem observar que a rugosidade de saturação w_s tende a seguir uma lei de potência com a forma

$$w_s = C_{w_s} L^\alpha, \quad (5.1)$$

onde c_w é uma constante e α é um dos expoentes dinâmicos, conhecido como *expoente de rugosidade*. Verificamos que em nossas simulações com substratos de diversos comprimentos L e com dimensões d entre $1 + 1$ e $6 + 1$ os dados apresentam forte concordância com essa relação, estando a rugosidade de saturação mostrada na figura 5.2.

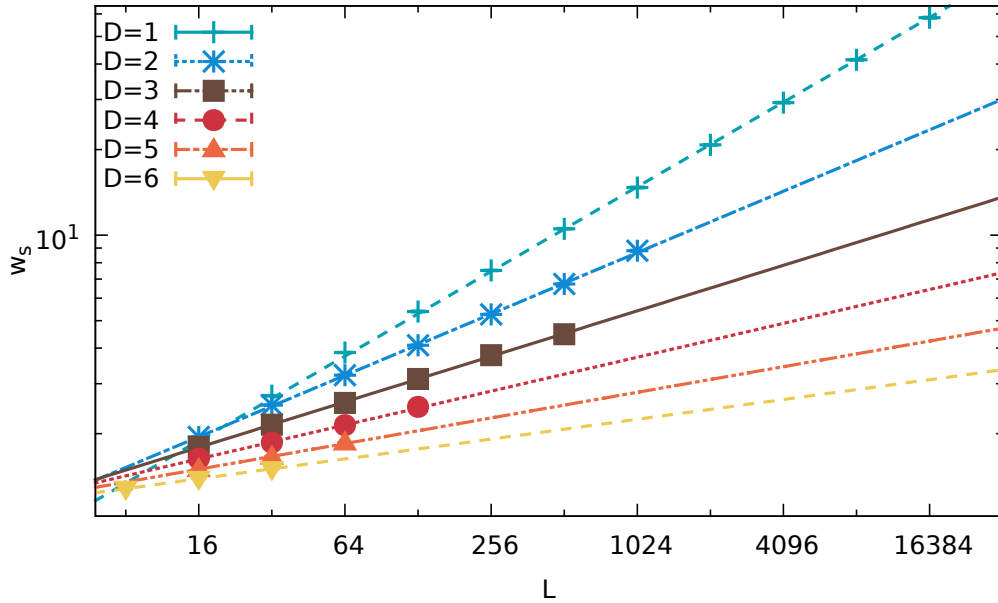


FIGURA 5.2: Rugosidade de saturação $w_s(L)$ versus o comprimento do substrato para superfícies entre $1 + 1$ e $6 + 1$ dimensões.

5.3.2 Expoente de crescimento

De forma semelhante ao que foi feito para os valores de α , obtemos os valores de β ajustando nossos dados a relação de Family-Vicsek, para valores de $t \ll t_x$, de forma que

$$w(t, L) = w_\beta t^\beta. \quad (5.2)$$

Na figura 5.3 apresentamos as curvas com os valores de β obtidos do modelo de corrosão para cada uma das dimensões simuladas, cujos valores de β foram obtidos por meio da lei de potência (5.2). Observa-se que conforme aumentamos

o comprimento dos substratos, há o que pode ser considerada uma correspondente convergência dos valores para uma constante. Esta propriedade faz com que consideremos os valores de β obtidos por ajustes como sendo dependente de L , e portanto representado por β_L .

Esta dependência do β_L em relação ao comprimento nos faz acreditar na existência de efeitos de comprimento finito neste expoente. Desta forma, este tipo de efeito deve ser reduzido conforme utilizamos substratos maiores.

Um outro efeito que afeta os valores deste expoente é a existência de anomalias de tempos curtos, onde o modelo ainda não apresentou total desenvolvimento da correlação na superfície, que afeta em especial os valores de β para $t \lesssim 1$.

Devido a este comportamento dos valores de β obtemos para cada dimensão uma função β_L ,

$$\beta_L = \beta \left(1 + \frac{L_0}{L} \right), \quad (5.3)$$

ou seja, consideramos que para $L \rightarrow \infty$, o valor de beta converge, $\beta_L \rightarrow \beta$.

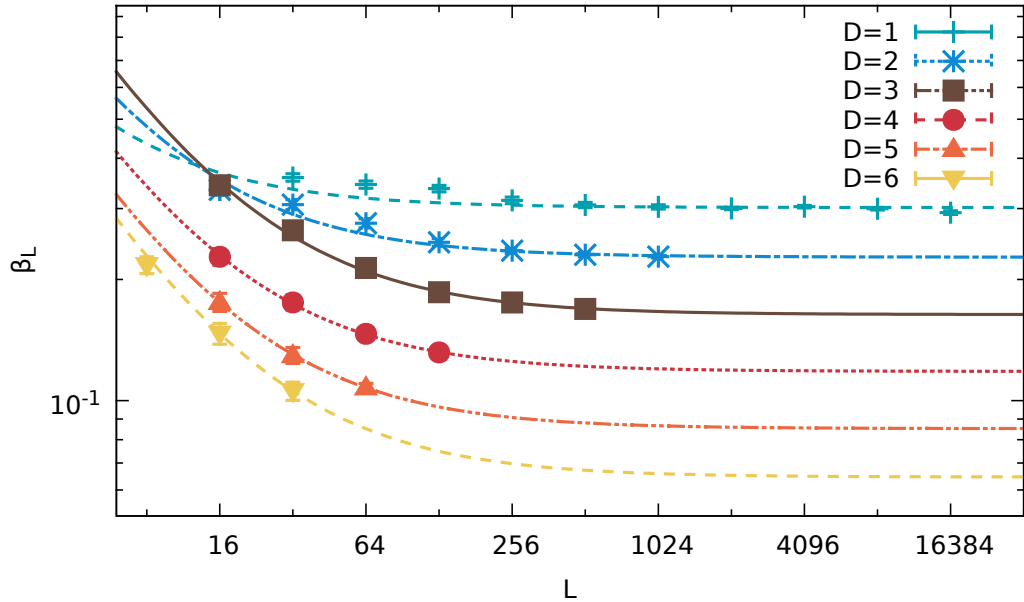


FIGURA 5.3: Expoente dinâmico $\beta_L(L)$ versus comprimento do substrato. É notável que quando $L \rightarrow \infty$ β_L parece convergir para o valor β esperado.

5.3.3 Expoente Dinâmico

Devido a natureza da rugosidade na classe de universalidade KPZ, com dois regimes distintos, é bastante difícil determinar utilizando ajustes com leis de potência o valor do tempo de saturação t_\times , o que faz com a maioria dos trabalhos realizando análise do expoente dinâmico z se baseiem na razão α/β .

Em nosso trabalho realizamos a obtenção dos valores de z considerando que o tempo de saturação t_\times se encontra na intersecção entre a curva ajustada de β e a curva da rugosidade de saturação. Assim, ainda temos o valor do tempo de saturação sendo obtido como uma relação entre α e β , da seguinte forma:

$$t_\times(L) = \left(\frac{C_{w_s} L^\alpha}{C_\beta} \right)^{1/\beta}. \quad (5.4)$$

onde C_β e C_{w_s} são as constantes de ajuste das equações (5.1) e (5.2) respectivamente. Desta forma, o erro em t_\times não é obtido diretamente do método de ajuste, e sim por meio de um cálculo de propagação de erros de ajuste da equação (5.4). Este erro é usado no ajuste que calcula o valor de z .

Utilizamos então a lei de potência que relaciona o tempo de saturação e o expoente z ,

$$t_\times = C_\times L^z, \quad (5.5)$$

obtemos uma reta para cada dimensão, conforme mostrado na figura 5.4.

Originalmente notamos que as curvas sobrepõe-se, de forma que para simplificar a visualização na figura 5.4 multiplicamos cada uma das curvas por 10^d .

Os pontos originados pelos valores de tempo de saturação para substratos pequenos, com $L < 8$ apresentam uma distância considerável da curva ajustada. Esse comportamento é esperado, visto que no algoritmo de corrosão há um período no início do processo onde o crescimento apresenta comportamento semelhante ao da deposição balística, e para substratos muito pequenos o tempo onde o comportamento é semelhante ao da classe de universalidade KPZ é muito pequeno, tornando difícil a detecção com precisão do tempo de saturação.

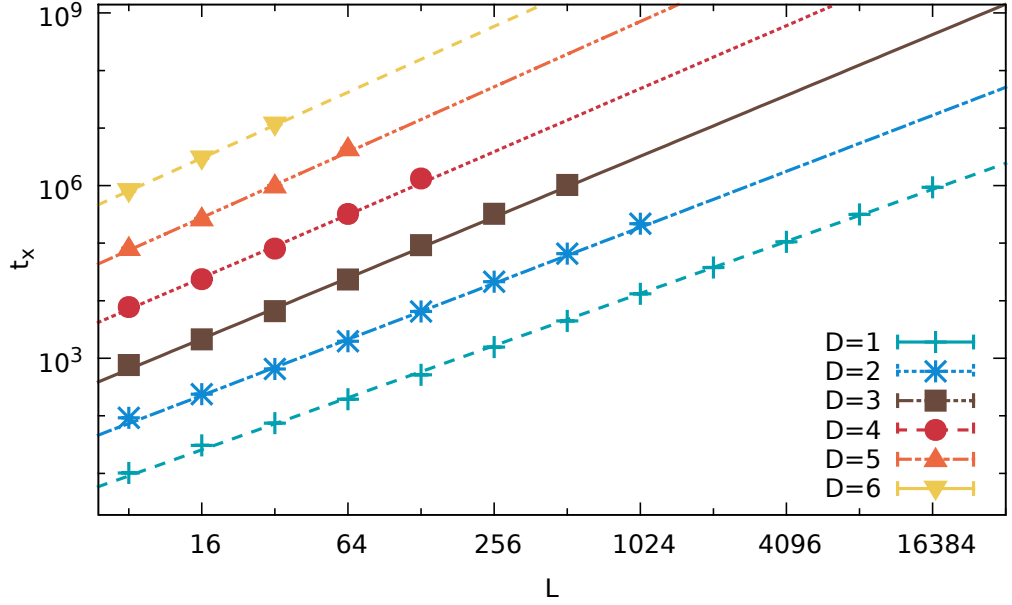


FIGURA 5.4: Tempo de saturação $t_x(L)$ versus comprimento do substrato. Os valores de cada dimensão são multiplicados por 10^d para melhorar a visualização.

5.3.4 Colapso dos dados e comparação com outros resultados

Uma forma de verificarmos a qualidade de nossos ajustes é verificar como os dados se comportam quando executado um colapso dos dados. No caso ideal, as curvas uma vez colapsadas devem se sobrepor identicamente.

Para realizar o colapso, foram feitos gráficos para cada dimensão, onde duas alterações de escala são aplicadas ao longo dos eixos dos gráficos para cada uma de suas curvas. Estas mudanças de escala são:

$$w \rightarrow \frac{w}{w_s}, \quad (5.6)$$

$$t \rightarrow \frac{t}{t_x}. \quad (5.7)$$

Assim, conseguimos colapsar todos os dados de cada dimensão em apenas uma curva, onde claramente observamos a sobreposição dos pontos[2]. Na figura 5.5 mostramos o colapso de dados para cada uma das dimensões, conforme indicado no canto superior esquerdo. Pode-se notar que ocorrem ainda algumas flutuações,

causadas pelo fato de que necessitaríamos de um número maior de execuções das simulações em alguns dos comprimentos de substratos do que o que foi possível realizar em nossa estrutura computacional.

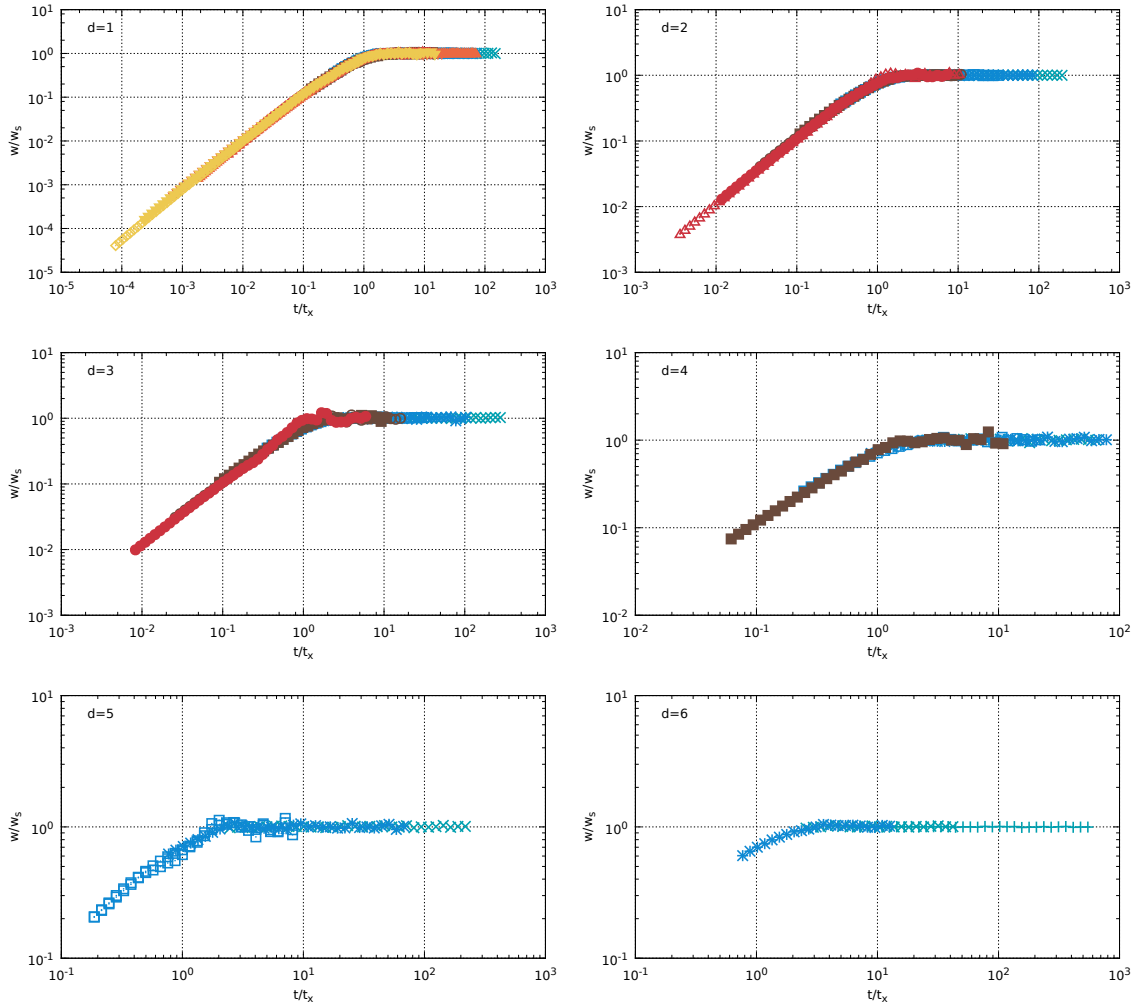


FIGURA 5.5: Colapso dos dados de todos os valores de L para cada uma das dimensões, indicadas no canto superior esquerdo de cada gráfico. O colapso foi feito aplicando as escalas indicadas nas legendas dos eixos. Apenas pontos com $t > 10$ foram incluídos na figura acima para excluir os transientes em $t/t_x \lesssim 1$.

O comportamento encontrado nas curvas colapsadas indica boa qualidade dos valores dos expoentes. Na tabela 5.1 descrevemos nossos resultados obtidos por meio de lei de potência. Na quinta coluna apresentamos o valor de Δz , que

TABELA 5.1: Expoentes dinâmicos obtidos a partir dos ajustes das figuras 5.2, 5.3 e 5.4. Evidências quanto a precisão destes expoentes são providas pelo valor de $\Delta z \equiv 2|z - \alpha/\beta|/(z + \alpha/\beta)$, que deve idealmente ser zero, e de $\alpha + z$, que deve ser igual a

2.

d	α	β	z	Δz	$\alpha + z$
1	0.494(3)	0.301(3)	1.565(9)	4.65%	2.06(1)
2	0.358(2)	0.227(2)	1.66(2)	5.51%	2.02(1)
3	0.266(3)	0.163(1)	1.70(3)	4.90%	1.97(1)
4	0.198(4)	0.118(1)	1.94(5)	14.65%	2.13(1)
5	0.149(6)	0.085(1)	1.96(9)	11.25%	2.11(2)
6	0.115(1)	0.064(1)	1.57(1)	12.76%	1.69(1)

consideramos uma boa medida da diferença relativa entre z e α/β ,

$$\Delta z \equiv 2|z - \alpha/\beta|/(z + \alpha/\beta), \quad (5.8)$$

que deveria ser 0, caso α , β e z fossem exatos. A sexta coluna contém $\alpha + z$, cujo valor deve ser 2 em sistema dentro da classe de universalidade KPZ, devido a Invariância Galileiana (IG) [50]. A comparação da Invariância Galileiana com os resultados de outros autores é de difícil execução, pelo fato de que muitos resultados são obtidos considerando a IG a priori, fazendo-se uso da relação $z = \alpha/\beta$ juntamente a IG de forma a determinar os expoentes.

Apresentamos, a título de comparação, os resultados obtidos para os expoentes α e β de diversos autores nas tabelas 5.2 e 5.3. Dentre os autores citados, Ala-Nissila[32] realizou simulações do modelo RSOS para dimensões $d \geq 4$. Marinari et al [37] usam uma discretização do RSOS de uma superfície, encontrando expoentes para até $4 + 1$ dimensões. Katzav e Scharz[22] obtêm tais expoentes para o modelo de deposição balística. Ódor et al[63] mapeiam modelos de crescimento em gases de rede direcionados em d -mers. Canet et al [64] desenvolveram uma aproximação simples do grupo de normalização não-perturbativo para a equação KPZ. Tang et al [65] propõem um modelo de empilhamento hipercúbico.

TABELA 5.2: Expoente α conforme os trabalhos de diversos autores.

d	Ala[32]	Ma[37]	Ka[22]	Od[63]	Ca[64]
1	—	—	0.45	—	0.50
2	—	0.393(3)	0.26	0.395(5)	0.33
3	—	0.3135(15)	0.12	0.29(1)	0.17
4	0.141(1)	0.255(3)	—	0.245(5)	0.075
5	—	—	—	0.22(1)	—
6	—	—	—	—	—

TABELA 5.3: Expoente β conforme os trabalhos de diversos autores.

d	Ta[65]	Ala[32]	Od[63]
1	0.333(1)	—	0.333(5)
2	0.240(1)	—	0.240(1)
3	0.180(5)	—	0.184(5)
4	—	0.16(1)	0.15(1)
5	—	0.11(1)	0.115(5)
6	—	0.09(1)	—

Por meio destes valores nas tabelas, observamos que nossos resultados se aproximam consideravelmente dos resultados de outros autores trabalhando diretamente com a equação KPZ ou em modelos considerados equivalentes.

Não temos uma prova da equivalência do modelo de corrosão a equação KPZ, como o apresentado por Bertini e Giacomin [66] para o modelo RSOS. A partir destes dados, é possível considerar que dentro da margem de erro observada, o modelo de corrosão apresenta expoentes próximos aos esperados para a equação KPZ em dimensões superiores, sendo os resultados obtidos pela Invariância Galileiana fortes indicadores de que o mesmo se situa na classe de universalidade KPZ.

É notável que a técnica de ajuste utilizada neste capítulo possui diversas deficiências, sendo o maior potencial de impacto nos resultados a dificuldade em identificar precisamente o tempo de saturação. Para superar tais deficiências,

apresentamos no capítulo 6 a seguir uma equação semi-analítica baseada em propriedades da equação KPZ e do modelo de corrosão que será posteriormente utilizado no capítulo 7 para ajustar tais dados de uma forma mais precisa e para determinar uma possível escala universal para a rugosidade, impondo restrições adicionais a já conhecida relação de Family-Vicsek.

Capítulo 6

Uma equação analítica para a dinâmica de rugosidade

Além da inexistência de uma solução geral para a equação KPZ, outro fator dificulta a modelagem da dinâmica de superfícies fractais: a inexistência de uma equação que modele a variação da rugosidade ao longo do tempo, que seria de extrema valia em especial para modelos computacionais, permitindo, por exemplo, o ajuste de dados e posterior análise de expoentes.

Neste capítulo mostramos como, partindo inicialmente de características gerais de modelos de corrosão discretos, e posteriormente usando propriedades inerentes ao modelo de corrosão podemos obter, analiticamente, uma equação que permita esta modelagem.

6.1 Variação da rugosidade

Como primeiro passo para obter uma equação que descreva a dinâmica da rugosidade de superfícies é necessário analisar como a rugosidade se comporta. Para isso, começamos analisando como a mudança mais simples em uma superfície – a remoção de uma partícula – altera essa propriedade. Considerando um substrato discreto de comprimento L com partículas de largura idêntica e unitária, que a medida de altura do sitio i é feita no referencial de altura média \bar{h} e que $h_i^f(t)$ é a

altura do mesmo sítio em um referencial fixo, temos que a o quadrado de $h_i(t)$ no referencial de altura média será inicialmente

$$h_i^2(t) = \left[h_i^f(t) - \bar{h}(t) \right]^2. \quad (6.1)$$

Após a deposição de uma partícula de altura Δh , temos que a altura quadrática deve ter a forma

$$h_i^2(t + \Delta t) = \left[h_i^f(t + \Delta t) - \bar{h}(t + \Delta t) \right]^2 \quad (6.2)$$

$$= \left[h_i^f(t) + \Delta h_i(t) - \bar{h}(t) - \Delta \bar{h}(t) \right]^2, \quad (6.3)$$

onde $\Delta \bar{h}$ representa a variação de altura média causada pela deposição e $\Delta h_i(t)$ representa a variação de altura apenas no sitio i .

Definimos então o termo ϱ_i como sendo a variação da altura do sitio i após o tempo Δt valendo

$$\varrho_i = 2h_i(t)\Delta h_i(t) - 2h_i(t)\Delta \bar{h}(t) - 2\Delta h_i(t)\Delta \bar{h}(t) + \Delta h_i^2(t) + \Delta \bar{h}^2(t), \quad (6.4)$$

de forma que a equação (6.2) se torna

$$h_i^2(t + \Delta t) = h_i^2(t) + \varrho_i. \quad (6.5)$$

Usando este valor da altura ao quadrado de um sítio, podemos escrever a variação da rugosidade em termos dessas variáveis. Assim, antes da deposição em um sítio temos

$$w(t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_i^L h_i^2(t)} \quad (6.6)$$

e após a deposição,

$$w(t + \Delta t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_i^L [h_i^2(t + \Delta t) + \varrho_i]}. \quad (6.7)$$

Como nosso objetivo é analisar a variação da rugosidade ao longo do tempo, vamos analisar a variação da rugosidade ao quadrado, que chamaremos de w_q . Definindo como unidade temporal o tempo necessário para que ocorram L deposições,

e considerando que $2\Delta\bar{h}(t)\sum_i^L h_i(t) = 0$ e que $\Delta\bar{h}(t)\sum_i^L \Delta h_i(t) = 2L\Delta\bar{h}^2$, podemos escrever a variação da rugosidade quadrática como

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = \frac{w^2(t + \Delta t) - w^2(t)}{\Delta t} = \sum_i^L \varrho_i \quad (6.8)$$

$$= -L\Delta\bar{h}^2 + \frac{1}{L} \sum_i [2h_i(t)\Delta h_i(t) + \Delta h_i^2]. \quad (6.9)$$

Como não fizemos uso de nenhuma particularidade do algoritmo de corrosão, a equação (6.8) é uma forma generalizada para o cálculo de variação quadrática da rugosidade, podendo ser potencialmente utilizada em qualquer modelo de corrosão que faça uso de estruturas discretas e algoritmos celulares.

O valor obtido para a variação por deposição individual é importante, pois a partir desse valor combinado com a probabilidade obtemos a variação temporal da rugosidade média quadrada, que descrevemos como:

$$\left\langle \frac{\Delta w_q}{\Delta t} \right\rangle = \int_{-\sqrt{Lw^2}}^{\sqrt{Lw^2}} \int_{-\sqrt{Lw^2 - h_{i+1}^2}}^{\sqrt{Lw^2 - h_{i+1}^2}} \int_{-\sqrt{Lw^2 - h_{i+1}^2 - h_i^2}}^{\sqrt{Lw^2 - h_{i+1}^2 - h_i^2}} \frac{\Delta w_q(w, h_{i-1}, h_i, h_{i+1})}{\Delta t} p(w, h_{i-1}, h_i, h_{i+1}) dh_{i-1} dh_i dh_{i+1}. \quad (6.10)$$

Para obtermos o valor da probabilidade, fazemos na próxima seção uma análise da geometria que surge da consideração do espaço de probabilidade como uma hipersfera. Nossa definição dos limites está ligada a essa definição e será explicada na mesma.

6.2 Probabilidade

Uma superfície com determinada rugosidade w deve possuir uma combinação finita de alturas de sítios. A partir dessa constatação, utilizamos a definição da rugosidade para escrever que

$$\sum_i^L h_i^2 = Lw^2. \quad (6.11)$$

Como estamos executando a medição da altura no referencial de altura média, podemos escrever uma segunda relação das alturas,

$$\sum_i^L h_i = 0. \quad (6.12)$$

As equações (6.11) e (6.12) definem uma hipersfera de raio $w\sqrt{L}$ e um hiperplano em L dimensões. O espaço de possíveis configurações da rugosidade é a superfície resultante da intersecção entre essas duas estruturas, o que resulta em uma hipersfera de dimensões $L - 2$. Como nosso algoritmo trabalha com os vizinhos imediatos ao sítio onde ocorre a deposição, vamos considerar um sítio h_i , com vizinhos de altura h_{i-1} e h_{i+1} . Para cada conjunto de sítios h_{i-1} , h_i e h_{i+1} , removemos três graus de liberdade de nosso sistema, de forma que o conjunto de todos os outros sítios da superfície formam um espaço de probabilidade que pode ser representado como uma hipersfera de dimensão $L - 5$.

A área das hipersferas que contem todas as possíveis combinações de alturas será dada por

$$A_t = S_{L-2} R_t^{L-2} \quad (6.13)$$

enquanto a área da hipersfera que contém apenas as probabilidades onde fixamos h_i e seus vizinhos será dada por

$$A_p = S_{L-5} R_p^{L-5}, \quad (6.14)$$

onde S_d é uma constante que depende da dimensão da hipersfera d e R_t e R_p são os raios das hipersferas.

Desconsiderando a existência de configurações proibidas, temos que a relação entre as áreas das hipersferas nos dá a probabilidade da ocorrência da configuração dos vizinhos de h_i ,

$$p(w_e, h_{i-1}, h_i, h_{i+1}) = \frac{A_p}{A_t}, \quad (6.15)$$

onde w_e é a rugosidade equipotencial, i.e, sem a exclusão das configurações proibidas, que escrita em termos dos raios e dimensões das hipersferas nos dá

$$p(w_e, h_{i-1}, h_i, h_{i+1}) = \frac{S_{L-5} R_p^{L-5}}{S_{L-2} R_t^{L-2}}. \quad (6.16)$$

O valor de R_t é trivialmente obtido das equações (6.11) e (6.12), visto que a intersecção entre este plano e a hiperesfera deve possuir o mesmo raio que a hiperesfera, de forma que $R_t = w_e \sqrt{L}$. Já para obtermos o raio R_p devemos considerar a restrição quanto ao valor dos sítios vizinhos a h_i . Por simplificação da notação, vamos chamar h_i de h_2 , tornando seus vizinhos h_1 e h_3 . Reescrevendo as equações (6.11) e (6.12), temos

$$h_4^2 + h_5^2 + \dots + h_L^2 = Lw_e^2 - h_1^2 - h_2^2 - h_3^2 \quad (6.17)$$

$$h_4 + h_5 + \dots + h_L = -(h_1 + h_2 + h_3). \quad (6.18)$$

Combinando as 2 equações, temos a seguinte expressão:

$$-2 \sum_{\substack{i,j=4 \\ i \neq j}}^L h_i h_j = Lw_e^2 - h_1^2 - h_2^2 - h_3^2 - (h_1 + h_2 + h_3)^2. \quad (6.19)$$

Nosso foco é em tentar expressar o raio da hiperesfera em função de valores conhecidos, no caso as alturas de h_i e seus vizinhos, além do tamanho do substrato. Para tal, a transformamos na forma matricial

$$\begin{vmatrix} & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ h_4 & h_5 & \dots & h_L & & \\ & & & & & \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 0 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ -1 & \dots & -1 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} h_4 \\ h_5 \\ \vdots \\ h_L \end{vmatrix} = Lw_e^2 - h_1^2 - h_2^2 - h_3^2 - (h_1 + h_2 + h_3)^2.$$

Os autovalores desta matriz nos permite obter uma transformação da equação, de forma a reescreve-la como

$$-(L-4)h_4'^2 + h_5'^2 + \dots + h_L'^2 = Lw_e^2 - h_1^2 - h_2^2 - h_3^2 - (h_1 + h_2 + h_3)^2 \quad (6.20)$$

Deste modo, a variável h_4' é reescrita como

$$h_4' = -\frac{1}{\sqrt{L-3}}(h_1 + h_2 + h_3). \quad (6.21)$$

Assim determinamos que o raio da hiperesfera é dado por

$$R_p = \left[Lw_e^2 - h_1^2 - h_2^2 - h_3^2 - \frac{(h_1 + h_2 + h_3)^2}{L-3} \right]^2. \quad (6.22)$$

Substituímos então na equação (6.16), obtendo

$$p(w_e, h_1, h_2, h_3) = \eta L \frac{\left[Lw_e^2 - h_1^2 - h_2^2 - h_3^2 - \frac{(h_1+h_2+h_3)^2}{(L-3)} \right]^{\frac{L-5}{2}}}{(Lw_e^2)^{\frac{L-2}{2}}} dh_1 dh_2 dh_3, \quad (6.23)$$

onde $\eta(L) = S_{L-5}/S_{L-2}$.

Considerando que cada uma das alturas é um ponto na superfície da hipersfera de raio A_t , podemos fazer a seguinte transformação de coordenadas,

$$h_{i-1} = \sqrt{L} w_e \sin \rho \cos \theta \quad (6.24)$$

$$h_i = \sqrt{L} w_e \sin \rho \sin \theta \cos \phi \quad (6.25)$$

$$h_{i+1} = \sqrt{L} w_e \sin \rho \sin \theta \sin \phi, \quad (6.26)$$

com os valores das coordenadas tais que

$$0 \leq \rho \leq \frac{\pi}{2}, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi. \quad (6.27)$$

Esta transformação de coordenadas nos permite simplificar a expressão usada para a probabilidade, que escrevemos agora como

$$p(w_e, \rho, \theta, \phi) = \eta(L) (Lw_e^2)^{-\frac{3}{2}} \cos^{L-5} \rho. \quad (6.28)$$

Com esta transformação, finalmente podemos escrever a variação da rugosidade média quadrada descrita em (6.10) como

$$\left\langle \frac{\Delta w_q}{\Delta t} \right\rangle = \eta(L) \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{\pi/2} \frac{\Delta w_q(w, \rho, \theta, \phi)}{\Delta t} \sin^2 \rho \cos^{L-4} \rho \sin \theta d\rho d\theta d\phi, \quad (6.29)$$

onde foi usado o seguinte jacobiano para a transformação:

$$dh_{i-1} dh_i dh_{i+1} = (Lw_e^2)^{\frac{3}{2}} \sin^2 \rho \cos \rho \sin \theta d\rho d\theta d\phi. \quad (6.30)$$

A integral (6.29) remove a dependência no valor da probabilidade, de forma que simplificamos consideravelmente a obtenção da variação temporal da rugosidade. Assim, dependemos apenas da taxa de variação da rugosidade local, que é facilmente obtida para cada caso.

6.3 Aplicação ao modelo de corrosão

A aplicação de nossa equação de variação de corrosão no tempo ao modelo de crescimento descrito em 4 depende da obtenção do valor da variação de altura por passo do algoritmo.

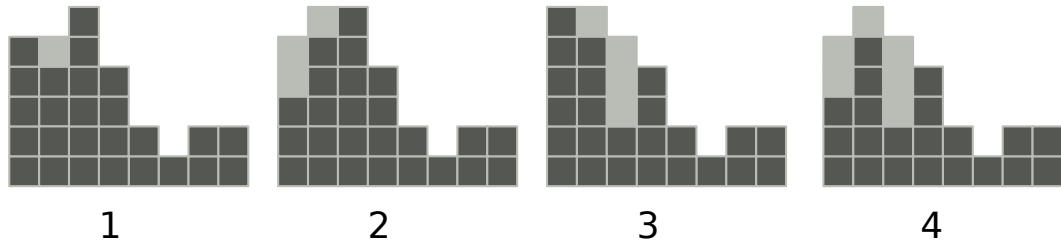


FIGURA 6.1: Exemplo das probabilidades de ação do algoritmo de crescimento, onde consideramos 4 diferentes conformações e o sítio escolhido é sempre o sítio 2, e os sítios na cor cinza claro representam os afetados pelo processo.

Observamos que o algoritmo de crescimento contempla 4 possíveis probabilidades, mostradas na figura 6.1. No caso (1), o sítio escolhido encontra-se em uma altura menor do que seus vizinhos, resultando na redução de altura apenas deste, ou seja, $\Delta\bar{h} = \frac{\Delta y}{L}$. No caso (2), apenas o sítio a esquerda apresenta altura menor, de forma que $\Delta\bar{h} = \frac{\Delta y}{L} + \frac{(h_2-h_1)}{L}$. O caso (3) é similar, com alteração de que os sítios que sofrem a corrosão são os vizinhos a direita, com $\Delta\bar{h} = \frac{\Delta y}{L} + \frac{(h_2-h_3)}{L}$. No caso (4), o sítio escolhido está entre outros dois onde deve ser considerada a corrosão, tornando a variação de altura média $\Delta\bar{h} = \frac{\Delta y}{L} + \frac{(h_2-h_1)}{L} + \frac{(h_2-h_3)}{L}$.

Para obtermos então o valor da variação da rugosidade ao longo do tempo, devemos considerar o valor da probabilidade de cada uma das configurações que descrevemos, assim como a variação de rugosidade para cada um dos casos.

As variações de rugosidades para cada caso, que chamaremos de $\frac{\Delta w_q}{\Delta t}_i$, com i representando cada uma das configurações, com $\delta_+ = h_i - h_{i+1}$ e $\delta_- = h_i - h_{i-1}$ nos

apresenta:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t}_1 = - \left(\frac{\Delta x}{L} \right)^2 + 2 \frac{\Delta x}{L} h_i + \frac{\Delta x^2}{L} \quad (6.31)$$

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t}_2 = - \left(\frac{\Delta x}{L} \right)^2 - \frac{(\delta_-)^2}{L^2} - 2 \frac{\Delta x}{L^2} (\delta_-) + 2 \frac{\Delta x}{L} h_i + \frac{\Delta x^2}{L} + 2 \frac{h_{i-1}}{L} (\delta_-) + \frac{(\delta_-)^2}{L} \quad (6.32)$$

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t}_3 = - \left(\frac{\Delta x}{L} \right)^2 - \frac{(\delta_+)^2}{L^2} - 2 \frac{\Delta x}{L^2} (\delta_+) + 2 \frac{\Delta x}{L} h_i + \frac{\Delta x^2}{L} + 2 \frac{h_{i-1}}{L} (\delta_+) + \frac{(\delta_+)^2}{L} \quad (6.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta w_q}{\Delta t}_4 = & - \left(\frac{\Delta x}{L} \right)^2 - \frac{(\delta_-)^2}{L^2} - \frac{(\delta_+)^2}{L^2} - 2 \frac{\Delta x}{L^2} (\delta_-) - 2 \frac{\Delta x}{L^2} (\delta_+) - \frac{2}{L^2} (\delta_-) (\delta_+) \\ & + 2 \frac{\Delta x}{L} h_i + \frac{\Delta x^2}{L} + 2 \frac{h_{i-1}}{L} (\delta_-) + 2 \frac{h_{i-1}}{L} (\delta_+) + \frac{(\delta_-)^2}{L} + \frac{(\delta_+)^2}{L} \end{aligned} \quad (6.34)$$

A partir de nossa relação de transformação de coordenadas mostrada em (6.24), vemos que há uma relação entre a rugosidade e a altura de forma que $h_i \sim w_e$, fazendo que cada uma das equações de (6.31) a (6.34) seja uma equação quadrática de w . Assim, a variação média da rugosidade pode ser escrita como

$$\left\langle \frac{\Delta w_q}{\Delta t} \right\rangle = -c_a w^2 - c_b w - c_c. \quad (6.35)$$

No limite para tempos pequenos, com $\Delta t \rightarrow 0$, podemos fazer,

$$\left\langle \frac{\Delta w_q}{\Delta t} \right\rangle \rightarrow \frac{dw_q}{dt} = 2w \frac{dw}{dt} \rightarrow 0, \quad (6.36)$$

logo, $c_c = 0$. Conseqüentemente,

$$-c_a dt = \frac{2 dw}{(w - w_1)}, \quad (6.37)$$

onde $w_1 = -c_b/c_a$, cuja solução é

$$\frac{w_e - w_1}{w_0 - w_1} = e^{-t/t_x}, \quad (6.38)$$

onde $t_x = 2/c_a$ e $w_0 = 0$ é o valor inicial da rugosidade.

Analizando os limites da equação (6.38) observamos que quando vamos para o regime de tempos longos, a rugosidade deve se estabilizar em w_{es} , de forma que podemos considerar que o valor de $w_1 = w_{es}$. Assim, podemos escrever

$$w_e = w_{es}(1 - e^{-t/t_x}), \quad (6.39)$$

o que nos leva ao valor absurdo de $\beta = 1$.

Esta contradição surge do fato de considerarmos que a princípio, todas as configurações do modelo possuam a mesma probabilidade de ocorrência, o que não é verdade para o modelo de corrosão, visto que há uma série de conformações da superfície que não são geradas pelo modelo de corrosão.

Desta forma, deve-se levar em consideração a existência de configurações proibidas no modelo ao analisarmos os valores da rugosidade. Contornamos a questão da equiprobabilidade postulando que a rugosidade *real* do modelo de corrosão, w deve ser uma função da rugosidade w_e , obtida considerando a equiprobabilidade,

$$\frac{w}{w_s} = \left(\frac{w_e}{w_{es}} \right)^\nu, \quad (6.40)$$

onde o subscrito s se refere as rugosidades de saturação. Consideramos esta forma plausível por uma serie de motivos. Primeiramente, w deve crescer monotonamente com w_e . Segundo, em uma hipersfera de dimensão Euclideana $d + 1$ e raio $\approx R$, a área de superfície cresce como R^d , enquanto superfícies como as geradas pelo modelo de corrosão devem crescer com $S_f \propto R^{d_f}$, onde d_f é a dimensão fractal. Assim, a única forma que atende tais requisitos deve ser a da Eq. (6.40).

Substituindo a Eq. (6.40) na Eq. (6.39), escrevemos

$$w = w_s(1 - e^{-t/t_x})^\nu. \quad (6.41)$$

Realizando uma expansão e mantendo apenas o termo de segunda ordem, temos uma expressão com a forma $w = (t/t_x)^\nu$. O crescimento inicial, $t \ll t_x$ é controlado pelo expoente β , de forma que podemos considerar $\nu = \beta$. Nomeamos esta função, devido a suas propriedades, de Função de Escala Universal de Rugosidade, ou como abreviaremos a partir de agora neste texto, EUR.

No próximo capítulo, mostramos que esta equação satisfaz a relação de Family-Vicsek, e utilizamos dados experimentais para ilustrar seu comportamento como função de ajuste.

Capítulo 7

Uma Escala Universal para Rugosidade

No capítulo 5, apresentamos o modelo de corrosão em sua versão para múltiplas dimensões, assim como uma análise de seus expoentes baseada em ajustes obtidos por meio da relação de Family-Vicsek. Posteriormente, apresentamos no capítulo 6 a equação EUR, baseada em características do modelo de corrosão, sendo portanto capaz de modelar a dinâmica temporal da rugosidade no mesmo. Neste capítulo, mostramos como utilizar tal equação para o ajuste dos dados referentes a evolução temporal da rugosidade no modelo de corrosão, obtendo seus expoentes dinâmicos, e adicionalmente mostramos que tal equação é uma forma mais restrita da relação de Family-Vicsek[7].

7.1 Métodos de Ajuste

A relação de Family-Vicsek descreve o comportamento da maioria dos modelos estocásticos de superfícies dinâmicas onde há relaxação na superfície. De forma simples, podemos dizer que esta relação pode ser descrita como

$$w(t, L) = w_s f(t/t_x, \beta) = \begin{cases} w_y t^\beta & \text{se } t \ll t_x \\ w_s & \text{se } t \gg t_x \end{cases} \quad (7.1)$$

Esta forma de representar a dinâmica de superfícies define um comportamento, mas não estabelece uma forma para esta função $f(x)$. Normalmente, para fins de ajuste com o objetivo de se obter os valores dos expoentes dinâmicos, são

utilizadas 2 funções diferentes para obter-se os valores de β e w_s , com o tempo de saturação t_x sendo considerado o valor onde estas duas funções se encontram. Neste trabalho denominamos esta forma como o método de lei de potência (LP). Este método tradicional foi usado no capítulo 5 para obter os expoentes dinâmicos. A partir dos valores destes expoentes, é possível realizar um colapso de dados, que dará a forma da função $f(x)$.

Entretanto, ao utilizarmos a técnica de lei de potência para executar um ajuste, cada um dos regimes será ajustado por meio de uma equação diferente, tornando a determinação do tempo de saturação em processo um tanto quanto impreciso.

Devido a esta dificuldade, neste trabalho utilizamos a técnica de ajuste proposta por Costa et al[3] e demonstrada no capítulo 6, que se baseia na probabilidade de deposição no modelo de corrosão, culminando na equação (6.41).

Utilizamos esta equação para ajustar os dados obtidos da simulação, conforme mostrado em 5, obtendo w_s , β e t_x . Para fins de comparação, a partir do mesmo conjunto de dados foi feita a obtenção dos mesmos parâmetros utilizando o método de lei de potência.

7.2 Colapso de dados

Uma vez que se possua os valores de w_s , β e t_x para todas as dimensões, torna-se simples a tarefa de obter-se uma curva de dados colapsados. Esta curva define a função $f(x)$, conforme descrito na equação (7.1).

A partir dos dados obtidos para diversas dimensões e comprimentos L , prosseguimos em obter uma única curva com todo este conjunto de dados por meio de uma transformação de escala que seja adequada à nossa proposta da forma da função $f(x)$.

Podemos citar a existência de duas transformações simples compatíveis com a relação de Family-Vicsek para um conjunto de dados onde cada curva possui

diferentes valores de β . Assim, consideramos a forma com os eixos reescalados como

$$\frac{w}{w_s} \times \left(\frac{t}{t_x} \right)^\beta \quad (7.2)$$

ou como

$$\left(\frac{w}{w_s} \right)^{1/\beta} \times \frac{t}{t_x}. \quad (7.3)$$

Os parâmetros β e t_x provocam o colapso para dados no intervalo onde $t \ll t_x$, enquanto o parametro w_s é proeminente no colapso para valores de $t \gg t_x$. Desta forma, podemos considerar que estes três parâmetros são o conjunto mínimo de expoentes necessários para ajustar toda a curva que descreve a dinâmica da rugosidade de superfície para cada dimensão e comprimento de substrato proposto[4].

Na figura 7.1 mostramos o resultado do colapso usando as formas de reescala dos eixos, sendo a figura 7.1a construída utilizando o colapso descrito por 7.3 e a figura 7.1b construída usando o colapso descrito por 7.2. Como era de se esperar, colapso se mostra adequado para os valores extremos em ambas as figuras, uma vez que a relação de Family-Vicsek é obedecida.

Apesar da concordância para valores extremos, ao analisarmos a região onde ocorre a mudança de regime, notamos que as transformações de escala se comportam de forma bastante diversa. Na figura 7.1a os pontos estão próximos, excetuando-se flutuações estatísticas amplificadas pela escala, visto que $1/\beta > 3$, formando visivelmente uma linha. Já na figura 7.1b, observamos que os dados estão espalhados de forma consistente, não sendo possível verificar um colapso nesta região. Devido a utilização de valores da rugosidade nos extremos para obtenção dos parâmetros, não há capacidade para acomodar esta discrepância no espaço de parâmetros.

É possível estender a capacidade do espaço de parâmetros fazendo uso de escalas mais gerais, como por exemplo por meio de

$$\left(\frac{w}{w_s} \right)^{1/\beta^c} \times \left(\frac{t}{t_x} \right)^{\beta^{1-c}}, \quad (7.4)$$

que tornam as duas escalas que utilizamos casos especiais. Entretanto, esta generalização introduz um novo parâmetro c , o que apenas se justifica caso esta alteração

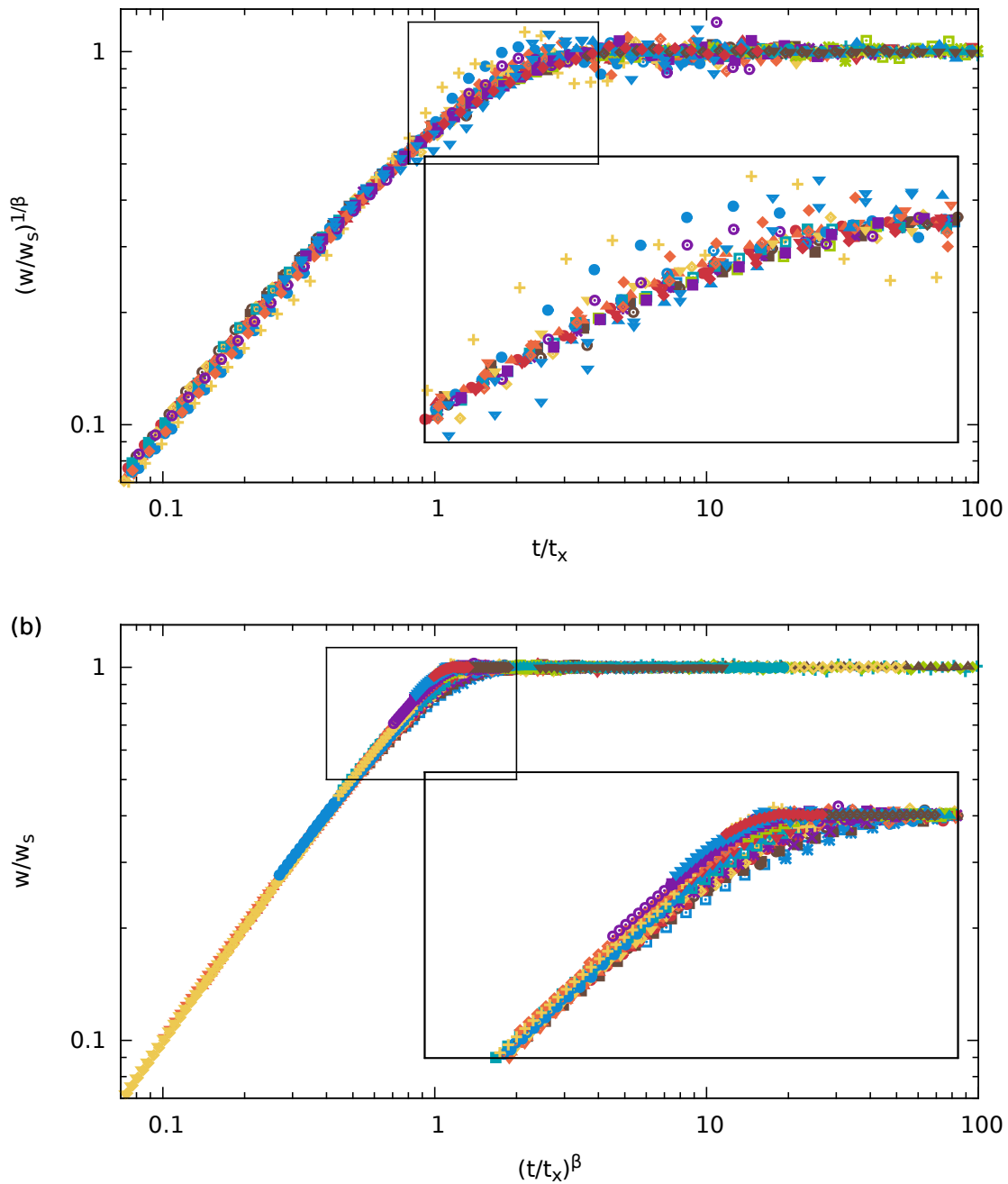


FIGURA 7.1: Colapso de dados para todos os valores de d e L simulados. O colapso foi feito aplicando as transformações de escala indicadas nos eixos dos gráficos. As áreas retangulares são uma ampliação das inserções. Apenas pontos com $t > 10$ foram incluídos no gráfico acima para excluir o tempo transiente em $t/t_x \lesssim 1$. Como os valores de $\beta < 1$, o ruído é amplificado na figura (a).

melhorasse significativamente o ajuste dos dados na região do tempo de saturação, o que não é necessário para a escala apresentada em (7.3), visto que está já apresenta excelente ajuste a curva. Além disto, outra característica notável dos dados da figura 7.1 é a coincidência dos raios de todas as curvas na região de transição.

Este conjunto de características da transformação de escala 7.3 nos leva a definir tal escala como a escala universal de rugosidade (EUR)[4]. Desta forma, concluímos que quando escalada corretamente, a função que descreve a evolução temporal da rugosidade é compartilhada para superfícies de todos os comprimentos L para todas as dimensões.

7.3 Uma forma forte da relação de Family-Vicsek

Além de demonstrar a existência de uma curva universal, a EUR provê restrições adicionais a função utilizada na relação de Family-Vicsek, tais que

$$w(t) = w_s [g(t/t_\times)]^\beta, \quad (7.5a)$$

$$g(x) = \begin{cases} x & \text{if } x \ll 1 \\ 1 & \text{if } x \gg 1 \end{cases}. \quad (7.5b)$$

Esta relação define explicitamente a relação entre a rugosidade ao longo do tempo $w(t)$ e o expoente β , enquanto que na relação de Family-Vicsek apenas o comportamento nos início do processo é estabelecido. A ausência de β na definição de $g(x)$ a torna mais restritiva do que FV quanto as possíveis formas funcionais permitidas.

7.3.1 A função EUR

Uma forma de procurar a função $g(x)$ da eq.(7.5b) é procurar a função mais simples que satisfaça a EUR. Uma possível candidata é uma lei de potência como

$$w(t) = w_s \frac{1}{(1 + t_\times/t)^\beta}. \quad (7.6)$$

A função mais simples possível que se ajusta aos dados é a equação proposta no trabalho de Costa et al [3] e cuja obtenção foi mostrada no capítulo 6, i.e

$$w(t) = w_s(1 - e^{-t/t_x})^\beta. \quad (7.7)$$

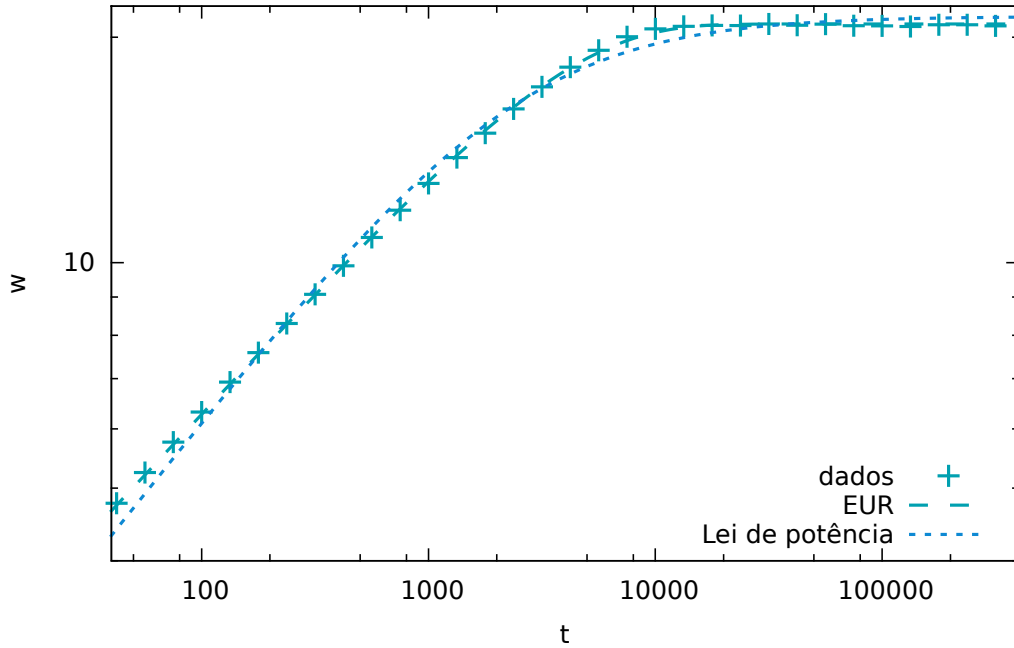


FIGURA 7.2: Substrato com $L = 2048$ e $d = 1$ ajustado por exponencial (EUR), equação (7.7), e por lei de potência, equação (7.6)

Na figura 7.2, comparamos estas duas funções, e nota-se que enquanto a equação (7.7) se ajusta perfeitamente aos dados, a equação (7.6) não apresenta um resultado satisfatório. Na escala utilizada na figura 7.2 é difícil observar discrepâncias entre os pontos representando os dados da simulação da curva.

Para fins de comparação, funções utilizando a escala (7.2) também foram utilizadas, como por exemplo,

$$w(t) = w_s \frac{1}{1 + (t_x/t)^\beta}, \quad (7.8)$$

$$w(t) = w_s \left[1 - e^{-(t/t_x)^\beta} \right]. \quad (7.9)$$

Na figura 7.3 mostramos o resultado do ajuste usando a equação (7.8), e

vemos que tal forma de função apresenta resultados ruins em ajustar os dados na maioria do tempo, com resultados especialmente discordantes para tempos iniciais.

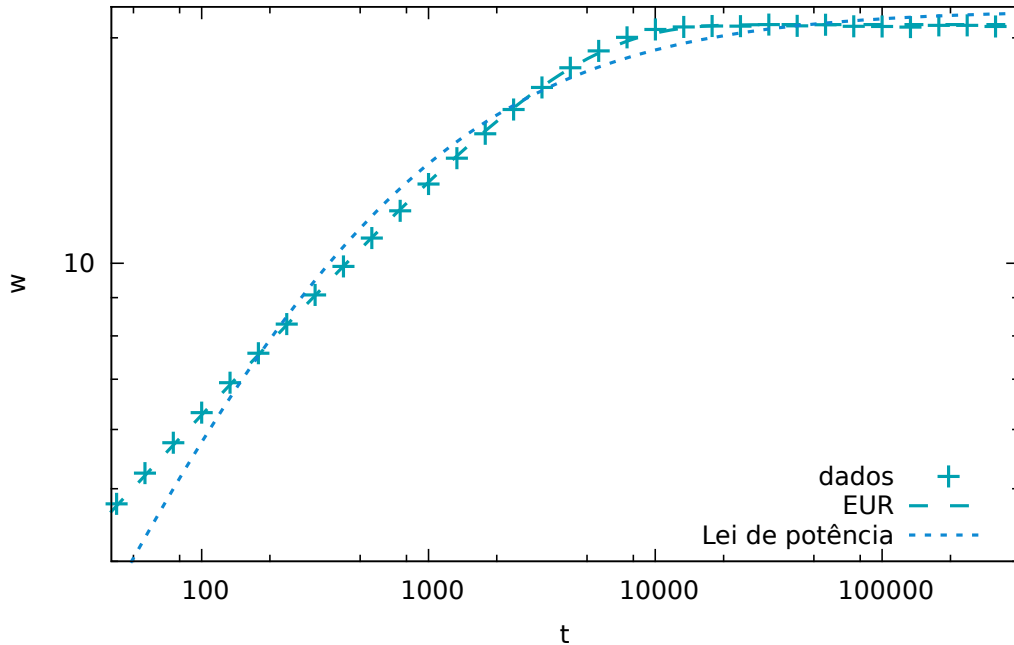


FIGURA 7.3: Substrato com $L = 2048$ e $d = 1$ ajustado por exponencial (EUR), equação (7.7), e uma lei de potência, equação (7.8).

Já na figura 7.4 mostramos o ajuste com a equação (7.9), usando uma função exponencial para o ajuste. Neste caso, temos resultados um pouco melhores, mas ainda assim discordantes nos tempos iniciais e próximos ao tempo de saturação t_x .

Os resultados de ajuste destas funções são tão ruins quanto os da equação (7.6), confirmando nossas expectativas quanto a precisão desta forma de escala. A utilização da forma generalizada da escala mostrada na equação (7.4) poderia melhorar o ajuste em torno do tempo de transição tornando os raios de curvatura dos pontos coincidentes, entretanto, a introdução do parâmetro c aumenta a complexidade da função.

Podemos considerar então que as forma mais simples de funções que satisfazem a equação (7.5) são as equações (7.6) e (7.7). Entretanto, vemos na figura 7.2 que a equação (7.6) não produz um bom resultado quando utilizada para analisar

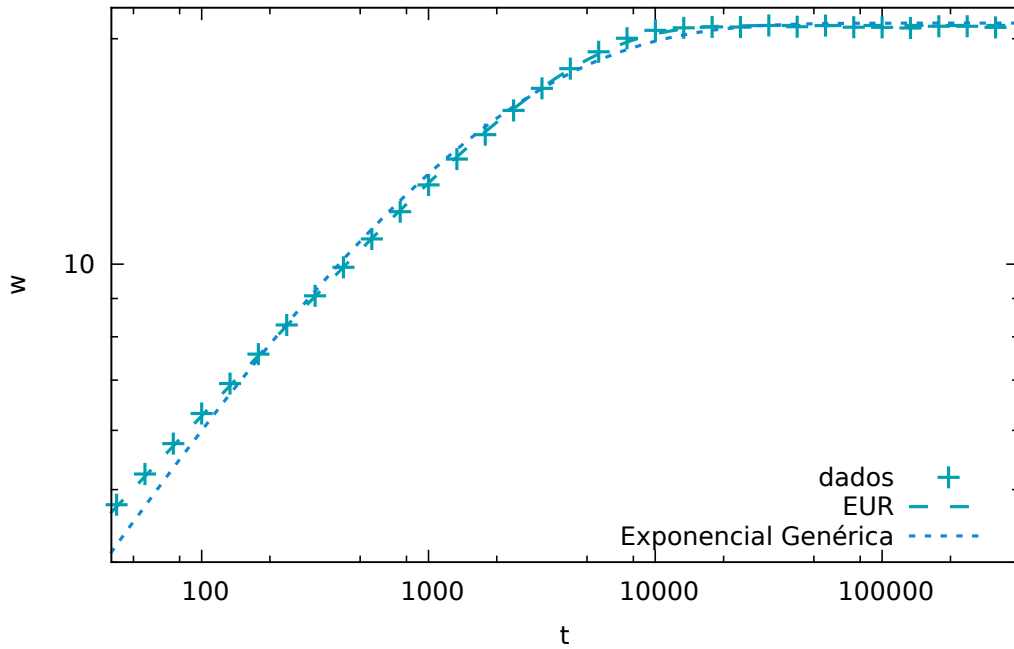


FIGURA 7.4: Substrato com $L = 2048$ e $d = 1$ ajustado por exponencial (EUR), equação (7.7), e uma outra função exponencial, equação (7.9).

dados reais, enquanto a equação (7.7) se mostra bastante eficiente para a descrição desta curva. É importante notar que apesar de incluirmos os dados para um comprimento de substrato em uma dimensão específica ($L = 2048$ e $d = 1$), tal análise foi realizada para diversas superfícies diferentes, sempre sendo verificada uma melhor concordância de nossos dados com a função EUR.

Consideramos então que esta equação e sua relação de escala apresentam resultados excelentes para descrever a variação temporal da rugosidade no modelo de corrosão. Apesar de tais funções serem derivadas de propriedades do mesmo, suspeitamos que tais características devem se estender a outros modelos considerados como pertencentes a classe de universalidade KPZ, suspeitas que não foram ainda dirimidas devido a falta de tempo.

7.4 Comparação entre a EUR e a LP

No capítulo 5 mostramos a obtenção dos expoentes dinâmicos do modelo de corrosão multidimensional, usando a relação de Family-Vicsek por meio de leis de potência (LP). Utilizamos esses valores como referência, além de compararmos com resultados da literatura. Desta forma, utilizamos o mesmo conjunto de dados da simulação mostrados na figura 5.1.

Enquanto utilizando leis de potência (LP) havia a necessidade de realizar dois diferentes ajustes para obtenção de w_s e β e estimar o valor de t_x a partir dos dois, a EUR nos permite obter os três parâmetros através de um único ajuste.

Esta simplicidade do ajuste se torna especialmente útil pelo fato de conseguirmos obter diretamente valores de t_x , sem partirmos da suposição da validade de invariância galileiana, ou dos valores de α e β , de forma que equações obtidas da forma descrita no capítulo 6 podem ser usadas para outros modelos discretos que não se encaixem na classe de universalidade KPZ.

Desta forma, para cada substrato L foi feito o ajuste da EUR,

$$w(t) = w_s(1 - e^{-t/t_x})^\beta, \quad (7.10)$$

resultando em três parâmetros.

7.4.1 Expoente de Rugosidade

Assim como foi feito no capítulo 5, consideramos a relação entre α e o comprimento do substrato,

$$w_s = C_{w_s} L^\alpha, \quad (7.11)$$

para obter o valor do mesmo para cada uma dos substratos.

Na figura 7.5 comparamos lado a lado os gráficos obtidos para α usando LP e EUR. Como seria esperado para os valores da rugosidade de saturação, há pouca diferença visível entre os valores, especialmente quando levamos em consideração

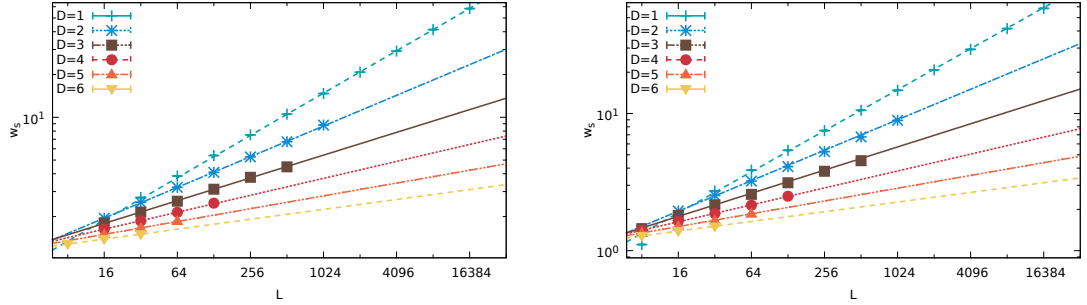


FIGURA 7.5: Rugosidade de saturação $w_s(L)$ versus o comprimento do substrato para superfícies entre $1 + 1$ e $6 + 1$ dimensões calculadas para o modelo de corrosão por meio de leis de potência (esquerda) e da equação universal de escala (direita).

TABELA 7.1: Valores de α para cada dimensão obtidos a partir da aplicação da equação (5.1) aos valores de rugosidade de saturação w_s encontrados por meio de ajuste de lei de potência (LP) e da Escala Universal de Rugosidade (EUR).

d	1	2	3	4	5	6
α_{LP}	0.494(3)	0.358(2)	0.266(3)	0.198(4)	0.149(6)	0.115(1)
α_{EUR}	0.497(5)	0.369(8)	0.281(7)	0.205(3)	0.154(2)	0.117(1)

que as simulações foram feitas com tempos longos, com $T_{final} \geq 15 \times t_x$, de forma que correções não fossem necessárias no ajuste de lei de potência.

Mostramos os valores obtidos por meio deste gráfico na tabela 7.1, onde nota-se que considerado o erro, podemos dizer que os resultados são iguais.

7.4.2 Expoente de Crescimento

Diferentemente do ajuste de α , os valores de β são obtidos diretamente do ajuste da equação EUR, reduzindo um passo na sua obtenção e também reduzindo a propagação de erros.

Na figura 7.6 apresentamos lado a lado os valores de β obtidos pelos dois ajustes, onde é notável que o EUR se ajuste melhor para substratos de comprimento L menor. Esta propriedade da EUR reduz a necessidade de procurar o início dos transientes quando obtemos β , tornando possível o uso de substratos menores que

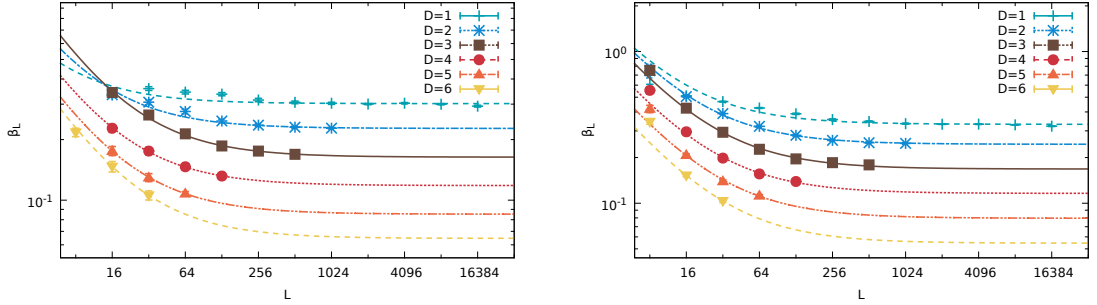


FIGURA 7.6: Expoente dinâmico $\beta_L(L)$ versus comprimento do substrato, ajustado com lei de potência (esquerda) e a equação universal de escala (direita).

TABELA 7.2: Valores de β para cada dimensão obtidos a partir da aplicação da equação (5.3) aos valores de rugosidade de saturação w_s encontrados por meio de ajuste de lei de potência (LP) e Escala Universal de Rugosidade (EUR).

d	1	2	3	4	5	6
β_{LP}	0.301(3)	0.227(2)	0.163(1)	0.118(1)	0.085(1)	0.064(1)
β_{EUR}	0.331(3)	0.244(2)	0.167(1)	0.116(3)	0.079(3)	0.054(1)

seriam descartados.

7.4.3 Expoente Dinâmico

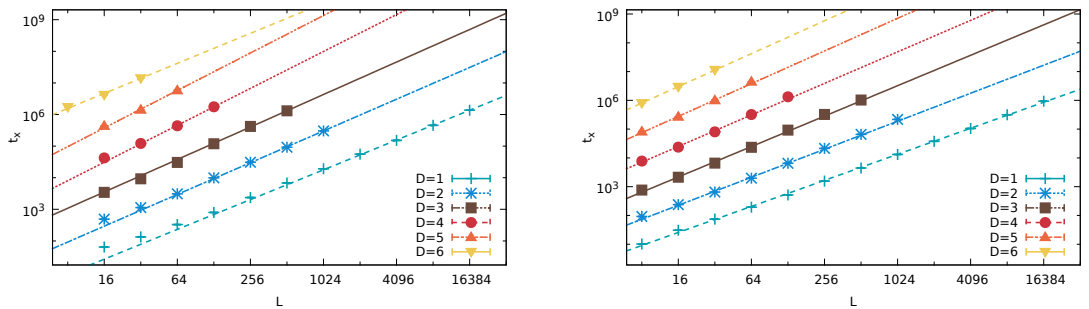


FIGURA 7.7: Tempo de saturação $t_x(L)$ versus comprimento do substrato obtidos por lei de potência e por meio da EUR. Os valores de cada dimensão são multiplicados por 10^d para melhorar a visualização.

Na figura 7.7 apresentamos os gráficos de t_x versus L para as diversas dimensões ajustadas. É importante lembrar que os dados são essencialmente diferentes

entre a LP e a EUR, devido a obtenção direta dos mesmos por meio da EUR.

Na tabela 7.3 mostramos os valores de z obtidos por meio de EUR e os valores obtidos por LP. É necessário observar que no caso da obtenção por LP estamos nos baseando nos dados do ajuste para α e para β , e tais dados são obtidos através da relação:

$$t_{\times LP}(L) = \left(\frac{\alpha}{c_\beta} \right)^{1/\beta}, \quad (7.12)$$

onde c_β é a constante do ajuste de β feito utilizando a expressão, $w(t) = c_\beta t^\beta$. Desta forma, o erro descrito para z_{LP} na tabela 7.3 é referente a propagação de erro desta equação, enquanto o erro mostrado para z_{EUR} se refere ao erro de ajuste.

TABELA 7.3: Valores de z para cada dimensão obtidos a partir da aplicação da equação (5.5) aos valores de tempo de saturação t_\times encontrados pela lei de potência (LP), utilizando a equação (7.12) com os parâmetros do ajuste de α e β e da função universal de rugosidade (EUR).

d	1	2	3	4	5	6
z_{LP}	1.565(9)	1.66(2)	1.70(3)	1.94(5)	1.96(9)	1.57(1)
z_{EUR}	1.50(1)	1.61(2)	1.74(4)	1.81(6)	1.88(8)	1.90(2)

7.5 Dimensão crítica superior e invariância de Galileu no modelo de Corrosão

De posse dos dados obtidos para cada um dos expoentes em cada uma das dimensões, podemos analisar como a questão da DCS e IG se apresentam no modelo de corrosão em múltiplas dimensões.

7.5.1 Dimensão crítica superior

Conforme mostrado no capítulo 3, uma das questões em aberto relacionadas a equação KPZ, e por consequência a sistemas que estejam na classe de universali-

dade KPZ é a da existência ou não de uma DCS. Portanto, é interessante verificar como o modelo de corrosão se comporta sob esta óptica.

Analisando os valores dos expoentes, em especial os valores de α , podemos concluir que até a maior dimensão observada, $d = 6$, não foi possível verificar, considerando a precisão de nossos dados, a existência de uma dimensão crítica superior. Esta observação é importante, tendo em vista trabalhos recentes como o de Schwartz et al[40], onde deduz-se que sistemas dentro da classe de universalidade KPZ, caso possuam uma DCS, deve ser tal que $d_c > 7$, tornando o modelo de corrosão em múltiplas dimensões compatível com a classe de universalidade KPZ.

7.5.2 Invariância de Galileu

Quando lidando com sistemas em dimensões $d > 1$, uma das formas de analisar se um modelo faz parte da classe de universalidade KPZ é por meio da invariância de Galileu, visto que esta é considerada constante para todas as dimensões. Na tabela 7.4 mostramos os valores de $\alpha + z$ que obtivemos em nosso trabalho, usando especificamente os dados ajustados pela EUR, que consideramos apresentar melhores resultados.

É notável que dentro da margem de erro de nossos dados, podemos considerar que o modelo de corrosão em múltiplas dimensões obedece fielmente a invariância de Galileu, como é esperado de um sistema dentro da classe de universalidade KPZ, nos levando a crer que o mesmo é parte dela.

TABELA 7.4: Valores de $\alpha + z$ para cada dimensão obtidos da escala universal de rugosidade (EUR).

d	1	2	3	4	5	6
$\alpha + z$	2.00(1)	1.98(2)	2.03(2)	2.02(2)	2.04(2)	2.01(1)

Capítulo 8

Conclusões

Neste trabalho apresentamos brevemente alguns conceitos essenciais no estudo de superfícies fractais, definindo propriedades das mesmas e as equações que são normalmente usadas em seu estudo, assim como alguns dos modelos mais comuns e as classes de universalidade nas quais são organizados, focando no estudo da equação KPZ, que a despeito de seus quase 30 anos, ainda não possui uma solução geral.

Apresentamos também alguns dos problemas em aberto em relação à equação KPZ, como por exemplo, a questão da existência ou não de uma dimensão crítica superior, a questão de como a discretização escolhida ao modelar um problema pode afetar a Invariância Galileiana e a estratégia que vem sendo usada por alguns grupos para tentar obter uma solução geral da KPZ.

Ainda dentro de nossa revisão da literatura, apresentamos o modelo de corrosão, que é central nesta tese, e algumas das características deste modelo estudadas por diversos pesquisadores.

Na segunda metade, finalmente apresentamos nossos resultados. Inicialmente, mostramos nossa extensão ao modelo de corrosão, inicialmente proposto para apenas uma dimensão, em múltiplas dimensões[2]. Esta extensão mostra expoentes compatíveis com outros trabalhos que exploram propriedades de outros modelos tipicamente classificados como sendo parte da Classe de Universalidade KPZ. Em nossa análise tentamos cobrir o máximo possível de dimensões e comprimento de substratos, a despeito de nossas limitações computacionais, de forma a tentar ve-

rificar se o modelo de corrosão apresenta ou não uma dimensão crítica superior, o que para sistemas em até $d = 6 + 1$ não foi, consideradas nossas margens de erro, encontrado.

Posteriormente, apresentamos o método usado para, a partir da probabilidade de deposição de partículas no modelo de corrosão, encontrar uma equação capaz de descrever o comportamento da rugosidade ao longo do tempo para este modelo[3]. Apesar de sua obtenção ser explicitamente definida para o modelo de corrosão, este método é suficientemente geral de forma que pode ser prontamente utilizado para outros modelos de corrosão discretos.

Utilizamos nossos dados de corrosão para aferir esta equação, usando-a como uma função para o ajuste dos dados do capítulo 5, observando que o mesmo possui excelente ajuste aos mesmos, apresentando a propriedade, de nosso conhecimento única, de obter diretamente o valor de z sem a necessidade de inferências quanto a α e β . Por meio das propriedades desta equação, sugerimos uma escala universal para a rugosidade, impondo algumas restrições sobre a relação de Family-Vicsek, e demonstramos tal escala por meio do colapso dos dados de ajuste[4].

Apêndice A

Exemplo de Grupo de Renormalização

Neste apêndice, analisamos um caso de renormalização em um sistema físico cuja simplicidade permite a solução exata por meio de renormalização, de forma a ilustrar a técnica usada para obtenção de expoentes em equações de crescimento.

Não é nosso objetivo refazer aqui a técnica de grupo de renormalização (GR), podendo maiores informações, incluindo a sua aplicação para a equação KPZ ser encontrada em diversas referências.

A.1 A cadeia de osciladores lineares

Mostramos na figura A.1 uma cadeia linear de osciladores, com deslocamento U_l da posição de equilíbrio. A equação de movimento para tal sistema é

$$M\ddot{U}_l = -k(U_l - U_{l-1}) + k(U_{l+1} - U_l). \quad (\text{A.1})$$

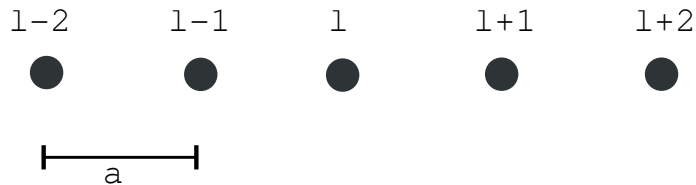


FIGURA A.1: Exemplo de cadeia linear de osciladores.

Podemos propor uma solução do tipo

$$U_l(t) = U_0(0)e^{i(kla - \omega t)}, \quad (\text{A.2})$$

onde $x = la$ é a posição de equilíbrio dos átomos. Introduzindo (A.2) em (A.1), obtemos:

$$\omega^2 = -\omega_0^2(e^{ika} + e^{-ika} - 2) = 4\omega_0^2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right), \quad (\text{A.3})$$

que é a bem conhecida relação de dispersão de fónons.

Uma outra maneira de olhar para este problema é considerar

$$U_l(t) = U_l e^{i\omega t}, \quad (\text{A.4})$$

de modo que (A.1) torne-se

$$(2 - \Omega)U_l = U_{l+1} + U_{l-1}, \quad (\text{A.5})$$

onde $\Omega = \omega^2/(4\omega_0^2)$. Note que $0 \leq \Omega \leq 1$.

Se aplicarmos novamente o operador $2 - \Omega$ na equação (A.5), obtemos

$$(2 - \Omega')U_l = U_{l+2} + U_{l-2}, \quad (\text{A.6})$$

onde

$$\Omega' = 4\Omega(1 - \Omega) \quad (\text{A.7})$$

é o famoso mapa logístico. Observe que a Eq. (A.5) é a mesma que a equação (A.6) com as constantes modificadas.

Neste processo fizemos uma transformação de escala

$$x' = bx, \quad \text{com } b = 2, \quad (\text{A.8})$$

semelhante a proposta por Edwards-Wilkinson.

Não sabemos muito sobre a relação de dependência $\Omega = \Omega(a)$. Portanto, vamos propor uma solução da forma

$$\Omega = \sin^2(\alpha a), \quad (\text{A.9})$$

que leva a

$$\Omega' = 4 \sin^2(\alpha a) \cos^2(\alpha a) = \sin^2(2\alpha a). \quad (\text{A.10})$$

Comparando com a equação (A.3) vemos que $\alpha = k/2$.

Fica claro neste processo de renormalização que preservamos a equação do movimento, mas as constantes mudam com a transformação de escala. Basicamente,

$$\Omega'(a) = \Omega(2a). \quad (\text{A.11})$$

Quando aplicadas às equações de crescimento, as transformações de escala nos levam a dois cenários:

- Na equação EW a transformação de escala é suficiente;
- Na equação KPZ a transformação de escala mostra que as constantes têm que mudar i.e, são funções de escala, como na equação (A.11). Neste caso, necessitamos do uso do grupo de renormalização.

O grupo de renormalização para KPZ produz um conjunto de equações de fluxo, conforme descrito em [5]:

$$\frac{d\nu}{dl} = \nu \left[z - 2 + K_d g^2 \frac{2-d}{4d} \right], \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{dD}{dl} = D \left[z - d - 2\alpha + K_d \frac{g^2}{4} \right], \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{d\lambda}{dl} = \lambda [\alpha + z - 2], \quad (\text{A.14})$$

onde $g^2 = \frac{\lambda^2 D}{\nu^3}$ e $K_d = S_d / (2\pi)^d$, e S_d é a área da esfera d -dimensional unitária. Os expoentes devem ser obtidos nos pontos fixos das equações de fluxo, considerando

$$\frac{d\nu}{dl} = \frac{dD}{dl} = \frac{d\lambda}{dl} = 0. \quad (\text{A.15})$$

Como $\frac{d\lambda}{dl}$, decorrente da invariância Galileiana é independente da dimensão da superfície, podemos considerar que esta relação é válida para todas as superfícies.

Portanto, escrevemos a IG como

$$\alpha + z = 2. \quad (\text{A.16})$$

Combinando as equações (A.12) e (A.13), obtemos

$$(d - 1)z + 2\alpha = d. \tag{A.17}$$

Para $d = 1$, obtemos $\alpha = 1/2$, $\beta = 1/3$ e $z = \alpha/\beta$, os conhecidos expoentes da KPZ unidimensional. Entretanto, quando calculamos para o caso de duas dimensões, temos $z = 2$ e $\alpha = 0$, que contradiz $z = \alpha/\beta = 2$. Deste modo, a conversão para equações de fluxo somente é utilizável para a forma unidimensional.

Apêndice B

Métodos Computacionais

No estudo de sistemas complexos, é inegável o valor agregado pelo uso de ferramentas computacionais tanto na construção de modelos e simulações quanto na análise dos dados gerados.

Em determinados sistemas, especialmente na extração e modelagem de dados de redes, o uso de modelos de análise de grandes quantidades de dados é conhecido como "big data", e tem aplicações científicas, comerciais e estratégicas para governos e empresas.

Neste capítulo, apresento os métodos, técnicas e ferramentas computacionais utilizadas para, a partir do modelo matemático-computacional apresentado no capítulo 5, obter dados.

B.1 Simulação

O modelo utilizado no trabalho é um autômato celular relativamente simples, porém computacionalmente intenso, visto que para obtermos resultados significativos é necessário executar a simulação para tempos longos, com pelo menos $15t_x$ e com um número grande de experimentos para cada substrato.

Devido a especificidade do modelo e a necessidade de performance, optamos por escrever a simulação em C++, utilizando o compilador g++, que apresenta boa performance para este tipo de utilização.

Instruções	Percentual	Funcao
358,859,842,734	63.26%	Ran::int64()
225,826,296,128	35.67%	evolui_substrato()
5,916,932,622	0.93%	abaixaSubstrato()
781,161,513	0.14%	Outras operações
632,991,171,259	100.00%	Total

TABELA B.1: Número de instruções do processador gastas por cada função na execução da simulação para produzir média de 85 substratos com $D = 1$, $L = 1024$.

Uma das ferramentas utilizadas na aferição de possíveis erros, como por exemplo estouros de memória é o Valgrind.

Uma das funções desta ferramenta é produzir um perfil do uso de processador para cada uma das funções do programa. Utilizando esta funcionalidade da ferramenta produzimos a a tabela B.1 ilustrando o tempo gasto por cada função do programa.

Uma parte considerável do uso de processamento na simulação é usado gerando números aleatórios, essenciais para a execução do algoritmo, com a proporção do tempo gasto em cada uma das funções descrito na tabela B.1, e em seguida descrevemos cada uma delas.

Esta utilização frequente de números aleatórios nos obriga a aplicar um algoritmo de geração de números aleatórios de razoável qualidade e velocidade. Em nossa simulação, fazemos uso da implementação de gerador de número aleatório apresentada no Numerical Recipes[67], em parte por se tratar de um gerador de desvio uniforme, e por apresentar razoável velocidade, além de produzir inteiros de 64 bits com segurança. Na tabela B.1 a função de geração de números aleatórios é referida pelo nome Ran::int64.

A necessidade de utilizar uma função capaz de gerar números de 64 bits advem de utilizarmos substratos sucessivamente maiores, onde o endereçamento de cada sítio na superfície precisa suportar um número maior do que um inteiro de 32

bits.

Normalmente, executamos o modelo analisando a rugosidade no referencial de altura média. Um dos motivos, do ponto de vista computacional para isto é o fato de que ao longo da simulação é necessário armazenar a altura de cada um dos sítios. Na versão usual do algoritmo, utilizamos para armazenamento de cada uma das "colunas" uma variável do tipo char, ou seja, um byte. Esta mudança do referencial executada pelo método `abaixaSubstrato` nos permite otimizar o uso de memória para a maioria dos substratos, havendo a necessidade de utilizar uma variável de maior capacidade, como um short int apenas para substratos maiores.

A otimização do uso de memória é essencial para obtenção de dados. Quando trabalhando em uma dimensão é pouco notável, visto que um sistema com $d = 1$ e $L = 131072$, que foi o maior substrato utilizado no trabalho original utiliza cerca de 12Mb para armazenar código executável e a estrutura a ser simulada. Porém, quanto extendemos o sistema para dimensões superiores, vemos que rapidamente o uso de memória cresce, já que uma superfície é formada por L^d sítios. Assim, devido ao hardware disponível para execução as maiores superfícies disponíveis tem uso de memória situado em torno dos 4Gb, como por exemplo para $d = 5$ e $L = 64$.

Esta característica do uso de memória limita os tamanhos máximos de substratos simuláveis, nos forçando a trabalhar com uma precisão cada vez maior conforme trabalhamos com dimensões superiores.

Classificamos como *Outras operações* funções não centrais da simulação, como a manipulação de arquivos e calculo de dados estatísticos sobre os dados (média da rugosidade, curtose e etc), assim como os *loops* que executam as funções principais.

B.2 Análise de Resultados

A simulação acima citada produz, como é de costume em simulações em Física, um arquivo de dados para cada substrato analisado, com um cabeçalho con-

tendo informações do substrato, dados relevantes para o reinício da execução em caso de falha e os dados referentes a evolução da rugosidade. Abaixo, mostramos como exemplo o cabeçalho de um arquivo de dados de um substrato com comprimento $L = 2048$ em duas dimensões:

```
#1      t      h      h2      rug      rug2      ass
      ass2      curt      curt2      nsub
#Time Tue Nov 20 08:33:24 2012
#l: 2048
#n_dim: 2
#tFinal: 100000
#savedt: 1.15
#nSubs: 278
```

Um arquivo de dados foi gerado para cada um dos distintos 50 substratos simulados. A partir destes dados um primeiro conjunto de ajustes é executado, e sobre este um novo conjunto de ajustes, que novamente são usados para nossa obtenção da relação entre dimensão do substratos e valor de seus expoentes dinâmicos. Isto significa que a adição de um novo substrato ou a mudança em algum parâmetro implica na reexecução de todo o processo de análise.

Para tornar o processo mais simples e replicável, foi escrito um programa em bash que realiza todo o processo de análise, incluindo os fittings e geração de gráficos. Descrevemos nas seções a frente as características deste programa e as técnicas utilizadas para os ajustes.

B.2.1 Pre-Processador

O tratamento de dados é uma parte essencial da pesquisa científica, tanto em áreas que utilizam experimentos quanto as que executam simulações. Em alguns casos, como no estudo de Física de partículas em grandes colisores, como o LHC, a geração, armazenagem e processamento de dados exige pesquisa e desenvolvimento de ferramentas próprias, tamanha a complexidade dos experimentos e a grande magnitude da geração de dados que serão posteriormente analisados.

Mesmo em situações onde a taxa de produção de dados é menor, a automação da análise é desejável, visto que permite testar diversas hipóteses e modelos com maior agilidade, além de tornar a obtenção dos resultados um processo de fácil reprodução, tornando possível que um grupo de pesquisa avalie integralmente os métodos utilizados, um passo importante na reprodução de resultados as vezes polêmicos.

Em nosso trabalho optamos pela automação do máximo de tarefas de análise de dados e utilizamos como ferramenta central na análise de dados e geração de gráficos o gnuplot. O gnuplot é uma ferramenta open source de linha de comando comumente utilizada para geração de gráficos científicos de alta qualidade.

A despeito de sua qualidade em ajuste de dados e geração de gráficos, na versão utilizada inicialmente em nosso trabalho o gnuplot, a 4.2.1, este apresenta uma série de limitações, como a ausência de suporte a loops do tipo *for*, suporte a condicionais *if* e suporte a *arrays*. Assim, o processo de automação das tarefas de análise ainda necessitaria de intervenção humana na criação de scripts.

Para contornar esta limitação do gnuplot, decidimos utilizar uma linguagem de script mais completa como um *preprocessador*. Por questão de ubiquidade, foi escolhida a linguagem de shell script do interpretador *bash*.

Desta forma, podemos utilizar os recursos de loops, condições e templates do bash para produzir scripts para o gnuplot, alimentando este diretamente via *pipe*. Assim, um script de ajuste do gnuplot que precisaria ser alterado manualmente sempre que uma nova superfície é adicionada ao nosso *dataset* passa a ser gerado automaticamente de acordo com as condições pre-definidas. Outra vantagem desta estratégia de análise é que torna-se quase trivial alterar passos intermediários do processo de forma independente, possibilitando, por exemplo, a alteração da função de ajuste da rugosidade ao longo do tempo sem haver a necessidade de alterar os métodos posteriores de ajuste de β .

B.2.2 Armazenamento dos dados

Para facilitar a manipulação dos dados, cada um dos arquivos de resultados da simulação é carregado para uma base de dados do tipo `sqlite3`. O `sqlite3` é um SGBD popular em aplicações de sistemas embarcados, em parte devido a seu reduzido uso de memória, base de código bastante compacta e licença livre (Domínio público). A forma mais comum de utiliza-lo é por meio do uso da biblioteca `libsqlite3` dentro de um programa, sendo também disponibilizada uma ferramenta de linha de comando.

A principal vantagem do uso de um SGBD em relação a arquivos é o fato de o mesmo fornecer a possibilidade de selecionar conjuntos de dados específicos, ou mesmo de realizar transformações e análises estatísticas simples. Devido a simplicidade do `sqlite3` pudemos utilizar plugins de extensão matemática que intermediam também acesso a outras funções matemáticas disponíveis na biblioteca padrão de matemática do C.

A carga dos resultados na base de dados é feita por meio de uma função em script `bash`, em uma tabela criada com o seguinte comando SQL:

```
create table origdata (  
    D integer, tFinal float, l integer, t float, h  
        float,  
    h2 float, rug float, rug2 float, ass float, ass2  
        float,  
    curt float, curt2 float, nsub integer);
```

Desta forma, um mapeamento um a um foi feito de cada coluna do arquivo de dados, de forma que uma simples busca nos retorne os dados necessários para análise.

A principal vantagem do uso de um banco de dados para o armazenamento para o programa de análise está no fato de podermos também gravar de forma programática e ordenada os dados gerados pelos ajustes, de forma a usa-los posteriormente.

Assim, adicionalmente a tabela de dados importados da simulação, criamos uma série de tabelas para armazenar dados gerados pelos ajustes, especificamente:

ajuste

Parâmetros do ajuste feito diretamente sobre os dados da simulação, como w_s , β e t_x para cada um dos substratos usando a função SURF

ajuste_tradicional

Parâmetros do ajuste feito diretamente sobre os dados da simulação, como w_s , β e t_x para cada um dos substratos usando leis de potência

exp

Parâmetros dos ajustes feitos sobre os dados do primeiro ajuste, descritos nas subseções 5.3.1, 5.3.2 e 7.4.3.

expfinal

Parâmetros dos ajustes de dos expoentes em relação a dimensão dos substratos, conforme descrito nas seções 5.3 e 7.4.

Para realizar a leitura dos dados armazenados no banco usamos a funcionalidade do gnuplot entrada a partir de processos. Definimos então uma função que irá executar o comando relevante, retornando ao gnuplot um conjunto de colunas com a informação desejada.

Exemplificamos a construção de uma função simples com este objetivo, linha de código gnuplot,

```
dsource(d,L)=sprintf("<_sqlite3_>-column_<_&#123;dbfile}<_>'select_<_<br>distinct_<_t,rug_<_from_<_origdata_<_where_<_D=%d_<_and_<_L=%d_<_order_<_<br>by_<_t;' ",d,L).
```

Neste exemplo, executamos um comando SQL em nossa base definida na variável *dbfile*, seleccionando os valores de tempo e de rugosidade para substratos de comprimento L e dimensão d . É um caso simples, onde não há diferenças notáveis em relação ao método tradicional, com arquivos.

Tal estratégia permite uma grande flexibilidade na análise de dados e geração de gráficos, possibilitando formas de análise que não são disponíveis na ferramenta, como mostramos na função a seguir:

```
dsourcer(d,L,d,L)=sprintf("<_sqlite3_column_{dbfile}_
    'select_distinct_t,rug,rug2,nsub_from_origdata_where_
    D=%d_and_L=%d_and_t<_(select_tx*20_from_ajuste_where_
    D=%d_and_L=%d)_order_by_t;'",d,L,d,L).
```

Esta função nos permite gerar um gráfico com diversas curvas diferentes, cada uma com um valor máximo de tempo diferente, determinado pelo tempo de saturação da curva t_x . Utilizando apenas a leitura direta de arquivos, estaríamos limitados a um tempo máximo único para todas as curvas, especificado por meio do comando *set xrange*.

B.2.3 Ajuste

Uma característica menos conhecida do gnuplot é o seu módulo de ajuste de dados. Este módulo, também chamado gnuftit implementa o ajuste de curvas por meio do método de mínimos quadrados.

O método de mínimos quadrados, historicamente atribuído a Carl Friedrich Gauss, consiste em, considerando um conjunto de n pontos (x_i, y_i) , propor uma forma de função $f(x, \mathbf{v})$ que possua m parâmetros ajustáveis, que consideramos compor um vetor de dados \mathbf{v} . O espaço de m parâmetros é varrido de forma a minimizar os resíduos quadráticos, representados pela equação

$$S = \sum_{i=1}^n r_i^2 \quad (\text{B.1})$$

onde os resíduos r_i são escritos como

$$r_i = x_i - f(x_i + \mathbf{v}) \quad (\text{B.2})$$

O algoritmo utilizado no gnuplot é uma variante moderna deste método, especificamente o algoritmo Levenberg-Marquardt [68]. Este se diferencia de outros

métodos de mínimos quadrados pelo fato de ser mais robusto e funcionar relativamente bem com funções não-lineares. Trata-se de um método iterativo, de forma que é necessário que os parâmetros iniciais do ajuste sejam fornecidos. A partir destes valores iniciais, a cada passo são estimados novos valores para os parâmetros.

O gnuplot permite utilizar este algoritmo por meio de uma interface simples, onde é definida uma função com parâmetros a serem ajustados. Em muitos casos, a implementação do gnuplot funciona sem haver a necessidade do fornecimento de parâmetros iniciais, sendo necessário verificar caso a caso se estes precisam ser fornecidos.

Dividimos nossos ajustes em 2 níveis, com os resultados do primeiro nível sendo usados para gerar os dados do nível subsequente.

1. Ajustes dos dados de rugosidade gerados pela simulação. Para cada substrato de comprimento L em uma dimensão d produz w_s , β e t_x . O gráfico 5.1 descreve a os dados da simulação e as curvas de ajuste. Cada um destes três parâmetros tem um erro associado, sendo este considerado o erro de ajuste, que é medido levando em consideração a diferença entre os dados da simulação e os valores gerados no ajuste.
2. Ajustes dos dados gerados pelo ajuste anterior. Para cada um dos três parâmetros obtidos previamente é produzido um conjunto de curvas, de forma que temos curvas de w_s por L , ilustradas na figura 5.2 que nos fornece o valor de α para cada dimensão. As curvas de β por L , ilustradas na figura 5.3 nos fornecem o valor de β_L , já que temos evidência de haver um fenômeno de comprimento finito relacionado a este. Finalmente, a a figura 5.4 mostra nossas curvas de t_x por L , que nos fornecem z . Assim, neste passo produzimos dados relacionando α , β_L e z para cada dimensão d .

Nesta etapa, utilizamos como peso dos pontos os erros produzidos na etapa anterior. Isto nos permite considerar a qualidade de cada ponto, e fornece ao algoritmo de ajuste uma informação adicional quanto a possibilidade de

variação possível dos valores, assim como a relevância de cada um dos pontos, que é maior substratos de comprimento L maior.

B.2.4 Geração de gráficos

Todos os gráficos utilizados para análise neste trabalho foram feitos por meio da ferramenta gnuplot, a mesma utilizada para o ajuste de dados. Estes foram feitos utilizando diretamente os dados armazenados no SGBD juntamente aos valores de expoentes e parâmetros obtidos de cada ajuste.

Foi criada uma função para cada categoria de gráfico, de forma que as multiplas figuras de dinâmica da rugosidade, por exemplo, foram criadas a partir da mesma função, que recebeu os parâmetros de qual gráfico plotar.

Assim, para a geração cada um dos gráficos o script de ajuste produz, de acordo com os parâmetros desejados – tipo de saída, paleta de cores e proporções do gráfico – um script que é executado pelo gnuplot, produzindo uma saída com as características desejadas.

Esta estratégia simplifica enormemente a produção de gráficos, tornando possível testar multiplas funções de ajuste sem haver a necessidade de reescrever todo o código de geração de gráficos. Apesar de sua grande flexibilidade, o gnuplot não possui mecanismos internos eficientes para a produção de múltiplos gráficos com parâmetros obtidos de fontes externas, tornando necessário o uso do shell script como um pre-processador.

Referências Bibliográficas

- [1] Bernardo A. Mello, Alaor Chaves, and Fernando A. Oliveira. Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid. *Physical Review E*, 63(4):041113, March 2001.
- [2] Evandro A. Rodrigues, Bernardo A. Mello, and Fernando A. Oliveira. Growth exponents of the etching model in high dimensions. submetido a Physical Review X.
- [3] Ismael V. L. Costa, Henrique A. Fernandes, Evandro A. Rodrigues, Bernardo A. Mello, and Fernando A. Oliveira. An analytical formulation for roughness based on celular automata. A ser submetido.
- [4] Evandro A. Rodrigues, Bernardo A. Mello, and Fernando A. Oliveira. Universal scaling for the roughness of a celular automata surface growth model. A ser submetido.
- [5] H. E. Stanley A. L. Barabasi. *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge University Press, 1995.
- [6] B. Mandelbrot. *Fractals and Chaos: the Mandelbrot set and beyond*, volume 3. Springer, 2004.
- [7] T. Family, F. Vicsek. Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 18:L75, 1985.

- [8] S. F. Edwards and D. R. Wilkinson. The Surface Statistics of a Granular Aggregate. *Proceedings of the Royal Society A*, 381(1780):17–31, May 1982.
- [9] Géza Ódor. Universality classes in nonequilibrium lattice systems. *Reviews of modern physics*, 76(July), 2004.
- [10] M. Kardar, Giorgio Parisi, and Y.C. Zhang. Dynamic scaling of growing interfaces. *Physical Review Letters*, 56(9):889–892, 1986.
- [11] Tomohiro Sasamoto and Herbert Spohn. One-Dimensional Kardar-Parisi-Zhang Equation: An Exact Solution and its Universality. *Physical Review Letters*, 104(23):230602, June 2010.
- [12] Juan a. Bonachela, Carey D. Nadell, João B. Xavier, and Simon a. Levin. Universality in Bacterial Colonies. *Journal of Statistical Physics*, 144(2):303–315, March 2011.
- [13] a. Dürr, F. Schreiber, K. Ritley, V. Kruppa, J. Krug, H. Dosch, and B. Struth. Rapid Roughening in Thin Film Growth of an Organic Semiconductor (Diindenoperylene). *Physical Review Letters*, 90(1):1–4, January 2003.
- [14] LP Kadanoff. Scaling and universality in statistical physics. *Physica A*, 163:1–14, 1990.
- [15] JA de Sales and ML Martins. One-dimensional cellular automata characterization by the roughness exponent. *Physica A: Statistical Mechanics*, 245:461–471, 1997.
- [16] T. Nattermann, S. Stepanow, L.H. Tang, and H. Leschhorn. Dynamics of interface depinning in a disordered medium. *Journal de Physique II*, 2(8):1483–1488, 1992.

- [17] Sergey V. Buldyrev, Shlomo Havlin, and H.Eugene Stanley. Anisotropic percolation and the d-dimensional surface roughening problem. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 200(1â @ S4):200 – 211, 1993.
- [18] J.L. Schiff. *Cellular automata: a discrete view of the world*, volume 45. Wiley-Interscience, 2011.
- [19] Murray Eden. A two-dimensional growth process. *Dynamics of fractal surfaces*, 4:223–239, 1961.
- [20] R Jullien and R Botet. Scaling properties of the surface of the Eden model in $d= 2, 3, 4$. *Journal of Physics A: Mathematical and . . .*, 18:2279, 1985.
- [21] MJ Vold. Computer simulation of floc formation in a colloidal suspension. *Journal of Colloid Science*, 18(7):684–695, September 1963.
- [22] Eytan Katzav and Moshe Schwartz. What is the connection between ballistic deposition and the Kardar-Parisi-Zhang equation? *Physical Review E*, 70(6):1–8, December 2004.
- [23] Takashi Imamura and Tomohiro Sasamoto. Exact solution for the stationary Kardar-Parisi-Zhang equation. *Physical Review Letters*, 108(19):190603, May 2012.
- [24] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3-4):117, 1944.
- [25] Jean Zinn-Justin et al. *Quantum field theory and critical phenomena*, volume 142. Clarendon Press Oxford, 2002.
- [26] M Kardar and YC Zhang. Scaling of directed polymers in random media. *Physical review letters*, 58(20):2087–2090, 1987.

- [27] JM Kim, JM Kosterlitz, and T. Ala-Nissila. Surface growth and crossover behaviour in a restricted solid-on-solid model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24:5569, 1991.
- [28] J.M. Kim and JM Kosterlitz. Growth in a restricted solid-on-solid model. *Physical Review Letters*, 62(19):2289–2292, 1989.
- [29] K. Moser, J. Kertész, and D.E. Wolf. Numerical solution of the Kardar-Parisi-Zhang equation in one, two and three dimensions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 178(2):215–226, 1991.
- [30] Michael Lässig. Quantized scaling of growing surfaces. *Physical review letters*, 80(11):2366–2369, March 1998.
- [31] M Lässig and H Kinzelbach. Upper critical dimension of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Physical review letters*, 85(5 Pt 1):050103, May 1997.
- [32] T Ala-Nissila. Comment on Upper critical dimension of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Physical review letters*, 80(4):9007, 1998.
- [33] JP Doherty, MA Moore, JM Kim, and AJ Bray. Generalizations of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Physical review letters*, 72(13):2041–2044, 1994.
- [34] Yuhai Tu. Absence of finite upper critical dimension in the spherical Kardar-Parisi-Zhang model. *Physical review letters*, 73(23):3109–3112, 1994.
- [35] J. K. Bhattacharjee. Upper critical dimension of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31:L93–L96, 1998.
- [36] C Castellano, M Marsili, M a Muñoz, and L Pietronero. Scale invariant dynamics of surface growth. *Physical review. E*, 59(6):6460–75, June 1999.
- [37] E. Marinari, A. Pagnani, and G. Parisi. Critical exponents of the KPZ equation via multi-surface coding numerical simulations. *Journal of Physics A*, 33(2):8181, 2000.

- [38] Francesca Colaiori and M. Moore. Upper Critical Dimension, Dynamic Exponent, and Scaling Functions in the Mode-Coupling Theory for the Kardar-Parisi-Zhang Equation. *Physical Review Letters*, 86(18):3946–3949, April 2001.
- [39] L. Canet and M. Moore. Universality Classes of the Kardar-Parisi-Zhang Equation. *Physical Review Letters*, 98(20):1–4, May 2007.
- [40] Moshe Schwartz and Ehud Perlsman. Upper critical dimension of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Physical Review E*, 85(5):050103, May 2012.
- [41] Leo P Kadanoff. Scaling laws for ising models near t_c . *Physics*, 2(6):263–272, 1966.
- [42] Kenneth G Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, 47(4):773, 1975.
- [43] Bertrand Delamotte. A hint of renormalization. *American Journal of Physics*, 72:170, 2004.
- [44] Humphrey J Maris and Leo P Kadanoff. Teaching the renormalization group. *American Journal of Physics*, 46:652–657, 1978.
- [45] Eleftherios Kirkinis. The renormalization group: A perturbation method for the graduate curriculum. *SIAM Review*, 54(2):374–388, 2012.
- [46] Kerson Huang. *Introduction to statistical physics*. CRC Press, 2001.
- [47] Sang Lee and Jin Kim. Equilibrium-restricted solid-on-solid growth model on fractal substrates. *Physical Review E*, 80(2):021101, August 2009.
- [48] Gang Tang, Zhipeng Xun, Rongji Wen, Kui Han, Hui Xia, Dapeng Hao, Wei Zhou, Xiquan Yang, and Yuling Chen. Discrete growth models on deterministic fractal substrate. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389(21):4552–4557, November 2010.

- [49] Zhipeng Xun, Yongwei Zhang, Yan Li, Hui Xia, Dapeng Hao, and Gang Tang. Dynamic scaling behaviors of the discrete growth models on fractal substrates. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2012(10):P10014, October 2012.
- [50] H. Wio, J. Revelli, R. Deza, C. Escudero, and M. de La Lama. Discretization-related issues in the Kardar-Parisi-Zhang equation: Consistency, Galilean-invariance violation, and fluctuation-dissipation relation. *Physical Review E*, 81(6):066706, June 2010.
- [51] F Family. Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion. *Journal of Physics A*, 441, 1986.
- [52] Eytan Katzav. Growing surfaces with anomalous diffusion: Results for the fractal Kardar-Parisi-Zhang equation. *Physical Review E*, 68(3):031607, September 2003.
- [53] F. Aarão Reis. Dynamic transition in etching with poisoning. *Physical Review E*, 68(4):041602, October 2003.
- [54] T Paiva and F. D. a. Aarão Reis. Height and roughness distributions in thin films with Kardar-Parisi-Zhang scaling. *Surface Science*, 601(2):419–424, January 2007.
- [55] F. D. A. Aarão Reis. Roughness fluctuations, roughness exponents and the universality class of ballistic deposition. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 364:190–196, May 2006.
- [56] Terence Hwa and Erwin Frey. Exact scaling function of interface growth dynamics. *Physical Review A*, 44(12):7873–7876, 1991.
- [57] E Frey, Uc Täuber, and T Hwa. Mode-coupling and renormalization group results for the noisy Burgers equation. *Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics*, 53(5):4424–4438, May 1996.

- [58] S. Hosseinabadi, A.a. Masoudi, and M. Sadegh Movahed. Solid-on-solid model for surface growth in 2+1 dimensions. *Physica B: Condensed Matter*, 405(8):2072–2077, April 2010.
- [59] Jeffrey Kelling and Géza Ódor. Extremely large-scale simulation of a Kardar-Parisi-Zhang model using graphics cards. *Physical Review E*, 84(6):061150, December 2011.
- [60] Vladimir G. Miranda and Fábio D. a. Aarão Reis. Numerical study of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Physical Review E*, 77(3):031134, March 2008.
- [61] F.D.A.A. Reis. Universality in two-dimensional Kardar-Parisi-Zhang growth. *Physical Review E*, 69(2):021610, 2004.
- [62] T Ala-Nissila, T Hjelt, J.M. Kosterlitz, and O. VenkâÄl AÄinen. Scaling exponents for kinetic roughening in higher dimensions. *Journal of Statistical Physics*, 72(1-2):207–225, 1993.
- [63] Géza Ódor, Bartosz Liedke, and KH Heinig. Directed d-mer diffusion describing the Kardar-Parisi-Zhang-type surface growth. *Physical Review E*, 81(3):031112, March 2010.
- [64] Léonie Canet, Hugues Chaté, Bertrand Delamotte, and Nicolás Wschebor. Non-perturbative Renormalization Group for the Kardar-Parisi-Zhang Equation. *Physical Review Letters*, 104(15):150601, April 2010.
- [65] LH Tang, BM Forrest, and DE Wolf. Kinetic surface roughening. II. Hypercube-stacking models. *Physical Review A*, 45(10):7162–7179, 1992.
- [66] Lorenzo Bertini. Stochastic Burgers and KPZ equations from particle systems. *Communications in mathematical physics*, 183(3):571–607, 1997.

- [67] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge University Press, 2007.
- [68] D.W. Marquardt. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *Journal of the Society for Industrial & Applied Mathematics*, 11(2):431–441, 1963.