

Metodologia Analítica para o Modelo de Corrosão: Crescimento e Rugosidade

Por

WASHINGTON SOARES ALVES

Orientador:

PROF. DR. ISMAEL VICTOR DE LUCENA COSTA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós - Graduação em Ciências de Materiais da Universidade de Brasília - FUP, como parte dos requisitos para obtenção do título de "Mestre" em Ciência de Materiais.

UnB - FUP - Planaltina - DF

Agradecimentos

Agradeço a DEUS, pela força e coragem que me tem dado no decorrer dessa longa caminhada.

Aos meus Pais, *Sebastião* e *Luzia*, que mesmo distante, sempre me apóiam e me incentivam. Mãe, seu cuidado e dedicação foi que deram em muitos momentos, a esperança para seguir em frente na minha caminhada. Pai, sua presença significa, não só segurança, mais também um porto seguro, donde com certeza sei que não estou sozinho nessa caminhada.

A esposa, Socorro, e filhos, Marcos Wesley (Cursando Engenharia de Materiais, não sei se por incentivo meu) e Wanderson (que adora carros, quem sabe Engenharia Mecânica ou Mecatrônica), mas que muitas vezes deixei de dar atenção necessária, sempre ocasionada por alguma situação alheio a minha vontade.

Destaco aqui, meus agradecimentos ao amigo Diogo, a quem muitas vezes abusei da sua paciência e boa vontade, a colega Camila, por quem lutou pela nossa sala de estudos, e a todos os demais colegas do Programa CIMA, bem como a todos os professores do Programa de Pós - Graduação em Ciências de Materiais, e a Coordenadora da Pós-Graduação, Prof^aRenata Aquino, a quem muito me auxilio, no decorrer do curso.

Agradeço também a Professora Iêda, pelo empenho na correção desse trabalho.

Agradecimento Especial ao Professor e Orientador Ismael Costa, pela sua paciência, perseverança e incentivo, e que com sua sabedoria e determinação, sempre me incentivou no decorrer dessa jornada.

Resumo

Na presente dissertação, desenvolvemos uma metodologia analítica para obter a função matemática da rugosidade e os expoentes críticos (rugosidade - α , crescimento - β e dinâmico - z) de modelos de crescimento superficial baseado em autômatos celulares. A metodologia é geral e pode ser utilizada em qualquer modelo que envolva interação entre primeiros vizinhos e que seja unidimensional.

O desenvolvimento dessa metodologia se baseia nas probabilidades de ocorrência das configurações superficiais e como elas influenciam a variação da rugosidade. Para isto utilizamos diversas ferramentas matemáticas, como o estudo das superfícies das hiperesferas, função gama e fatorial.

Para verificarmos a validade de nossa metodologia, escolhemos analisar o modelo de corrosão (etching model) proposto por Mello, Chaves e Oliveira [1]. Este modelo descreve a evolução da corrosão em uma superfície sob a ação de um fluido corrosivo. Após empregarmos a nossa metodologia no modelo de corrosão, obtivemos uma equação matemática implícita da evolução da rugosidade e os expoentes críticos com boas aproximações dos valores obtidos por Mello et al em seu artigo original.

PALAVRAS-CHAVE: Autômatos celulares, modelo de corrosão, rugosidade, expoentes críticos.

Abstract

In this monograph, we develop an analytical methodology for obtaining the mathematical function of the roughness and the critical exponents (roughness - α , growth - β and dynamic - z) of surface growth models based on cellular automata. The method is general and can be used in any one-dimensional model involving interaction between nearest neighbors.

The development of this methodology is based on the probabilities of occurrence of surface configurations and how they influence the roughness. We use various mathematical tools, such as the study of the surfaces of hyperspheres, gamma and factorial functions.

To check the validity of our methodology, we chose to analyze the etching model proposed by Mello, Chaves and Oliveira [1]. This model describes the evolution of corrosion on surface under the action of a corrosive fluid. After we use our methodology in the etching model, we obtained an implicit mathematical equation of roughness and the critical exponents with good approximations of the values obtained by Mello et al in their original article.

PALAVRAS-CHAVE: Cellular automata, etching model, roughness, critical exponents.

Sumário

| | |
|---|-----------|
| Introdução | 2 |
| 1 Conceitos Básicos | 8 |
| 1.1 Altura Média e Rugosidade | 9 |
| 1.1.1 Altura Média | 9 |
| 1.1.2 Rugosidade da Superfície | 10 |
| 1.2 Modelos de Crescimento | 11 |
| 1.2.1 Deposição Aleatória - DA | 13 |
| 1.2.2 Deposição Balística - DB | 14 |
| 1.2.3 Deposição Aleatória com Relaxação Superficial - DARS | 16 |
| 1.3 Leis de Escalas e Expoentes Críticos | 18 |
| 1.4 Universalidade e Classes de Universalidade | 21 |
| 1.5 Equação de <i>KPZ</i> | 23 |
| 2 Modelo de Corrosão (Etching) | 25 |
| 2.1 Algoritmo do Modelo de Corrosão | 26 |
| 2.2 Expoentes no Modelo de Corrosão | 27 |
| 3 Metodologia para Obtenção da Equação da Rugosidade | 30 |
| 3.1 Desenvolvimento do Incremento da Rugosidade - Método | 30 |
| 3.2 Sistema de Corrosão e Variação da Rugosidade Quadrática | 32 |
| 3.3 Forma Simples para a Variação da Rugosidade Quadrática | 34 |
| 3.4 Obtenção da Probabilidade $p(w, h_1, h_2, h_3)$ | 36 |
| 3.4.1 Cálculo da Área Total (A_T) | 37 |
| 3.4.2 Cálculo da área parcial (A_p) | 38 |
| 3.4.3 Cálculo de R_p | 39 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3.5 | Densidade de Probabilidade | 42 |
| 4 | Mudança para Coordenadas Esféricas | 43 |
| 4.1 | Mudança na Probabilidade | 44 |
| 4.1.1 | Matriz Jacobiano | 44 |
| 4.1.2 | Cálculo de $dh_1dh_2dh_3$ | 45 |
| 4.2 | Estudo dos Termos da Equação $\frac{\Delta w_q}{\Delta t}$ | 47 |
| 5 | Resolução da Equação | 53 |
| 5.1 | Obtenção dos expoentes críticos | 55 |
| 5.1.1 | Obtenção do expoente de rugosidade α | 56 |
| 5.1.2 | Obtenção do expoente de crescimento β | 57 |
| 5.1.3 | Obtenção do expoente dinâmico z | 58 |
| 5.2 | Considerações da Metodologia | 61 |
| 5.2.1 | Existência de configurações proibidas e probabilidade | 61 |
| 6 | Resolução da Equação - Nova Perspectiva | 64 |
| 6.1 | Análise dos Coeficientes | 64 |
| 6.2 | Fórmula de Stirling | 65 |
| 6.3 | Outra Resolução da Equação | 65 |
| | Conclusão | 69 |
| | Apêndice - A | 72 |
| | Apêndice - B | 82 |
| | Bibliografia | 89 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|--|----|
| 1 | Esquema de deposição aleatória. | 4 |
| 2 | Representação de difusão [3]. | 4 |
| 3 | Representação de desorção [3]. | 5 |
| 1.1 | Esquema representativo de deposição de partículas. | 9 |
| 1.2 | Representação da altura média numa interface unidimensional. | 10 |
| 1.3 | As três primeiras figuras representam o crescimento observado numa folha de papel durante a queima (Figuras à direita). A figura da esquerda representa o crescimento de uma colônia de bactérias. | 12 |
| 1.4 | Os resultados de uma simulação de uma interface que consiste em 100 sítios, onde 50.000 átomos são depositados. A cor foi alterada após a deposição de cada 5.000 átomos [7]. | 13 |
| 1.5 | Deposição Aleatória. As partículas simplesmente adere à superfície, sem nenhum tipo de relação com os sítios vizinhos. | 14 |
| 1.6 | Deposição Balística. A partícula A, adere à superfície (condição - 01), enquanto que a partícula B, adere ao sítio de maior altura (condição - 02). | 15 |
| 1.7 | Resultados de uma simulação de uma interface com $L = 100$ sítios, onde são depositados 12.800 átomos. A cor foi alterada após a deposição de cada 800 átomos. | 16 |
| 1.8 | Deposição Aleatória com Relaxamento Superficial. As partículas recém-depositadas não aderem sobre o local que caem, mas procuram via mecanismos a posição de menor altura. | 17 |
| 1.9 | Simulação de DARS, onde são depositadas 35.000 partículas sobre um substrato de tamanho $L = 100$. As cores reflete a hora de chegada das partículas: após a deposição de cada conjunto de 3500 partículas, ocorrem as mudanças de cores [3]. | 17 |

| | | |
|------|---|----|
| 1.10 | Crescimento de um sistema obtido por simulação. Primeira Região: Linha inclinada, compreendida entre o eixo w e o t . Segunda Região: Linha horizontal partindo de t_{sat} , [8]. | 19 |
| 1.11 | Representação esquemática dos passos envolvidos na reescala da rugosidade com dependência temporal. FONTE: Adaptada de Barabási & Stanley. | 20 |
| 2.1 | Esquema de corrosão de um sítio escolhido aleatoriamente. | 26 |
| 2.2 | Esquema de corrosão do sítio $h_7(2) = 3$ escolhido, mais seus sítios vizinhos. | 27 |
| 2.3 | Curva de ajuste, determinação do expoente de rugosidade. | 28 |
| 3.1 | Tomando a queda de uma partícula no sítio $i = 2$, veja o processo de corrosão em cada situação. | 33 |
| 4.1 | Esquema representativo da mudança de coordenadas cartesianas para coordenadas esféricas. | 43 |
| 5.1 | Gráfico tipo log-log de $L \times w_{sat}$, com os dados tabelados, obtidos através da expressão $w_1 = w_{sat}$, simultaneamente com ajuste de curvas. | 56 |
| 5.2 | Representação gráfica dos dados obtidos, para o caso particular de $L = 16384$, usando a Eq. (5.5). | 58 |
| 5.3 | Representação gráfica, $w \times t$, para as curvas correspondentes a cada L | 59 |
| 5.4 | Gráfico log – log de $L \times t_{sat}$, com os valores extraídos da Tabela 5.2. | 60 |
| 5.5 | Esquema de duas configurações impossíveis no modelo MCO. | 62 |
| 6.1 | Perímetro de uma circunferência que, num primeiro momento, denotaremos como "volume". | 72 |
| 6.2 | Área de um círculo, que também chamaremos de "Volume". | 73 |
| 6.3 | Volume como é conhecido da geometria espacial. | 73 |
| 6.4 | Representação gráfica da Função $H(x)$ | 75 |
| 6.5 | Representação gráfica da Função $H(x - y)$ | 75 |

Introdução

Uma superfície é definida como sendo uma interface existente entre dois meios diferentes. Cada superfície possui uma morfologia e uma dinâmica temporal com características próprias. Tais informações são importantes para se entender um sistema, pois as superfícies que o envolvem consistem em locais onde ocorrem trocas de materiais e informações com o exterior. Outro aspecto bastante útil e estudado a respeito da natureza de uma superfície vem a ser o processo de formação dela.

Com relação ao crescimento de superfícies, os mais variados fenômenos são estudados. Por exemplo, crescimento de colônia de bactérias, formação do relevo submetida a condições externas como a ação das intempéries, criação das dunas pela ação dos ventos, erosão do solo causada pelas chuvas, maresia nos cascos dos navios, região submetida à queimada, ação de produtos químicos quando em contato com determinados tipos de materiais e etc [2].

Neste trabalho, o nosso interesse nas superfícies se resume em torno de alguns aspectos. O primeiro deles diz respeito a morfologia de uma interface, mais precisamente, os chamados expoentes de crescimento. Esses expoentes, como veremos mais adiante, inserem o tipo de crescimento dentro das chamadas *Classes de Universalidade*. Essas classes unem sistemas aparentemente desconexos em grupos com características comportamentais similares. Em particular, trabalharemos com uma

classe definida como *Classe de Universalidade de KPZ*². O segundo aspecto diz respeito a evolução temporal de uma característica morfológica das superfícies definida como rugosidade. Dentre os variados tipos de crescimento, concentrar-nos-emos, principalmente, nos tipos de crescimento causados por processos de deposições de sedimentos (ou partículas) ou por erosão (ou corrosão) [2].

O estudo da dinâmica de uma superfície pode ser realizado de diversas maneiras, dentre elas podemos citar os **métodos experimentais**, que consistem na observação e medição dos crescimento nos mais variados sistemas físicos e a **simulação numérica computacional**, quando são desenvolvidos algoritmos computacionais com o intuito de simular o crescimento. Existem ainda os **cálculos analíticos**, cujo objetivo é encontrar uma formulação matemática analítica dos mecanismos de crescimento, mas para isso é necessário utilizar as informações colhidas dos métodos experimentais ou das simulações computacionais.

No estudo dos processos associados ao crescimento de uma superfície, a sua formação estrutural deve depender de três fatores que competirão entre si [2, 3], são eles:

Deposição: nesse processo de crescimento, uma partícula atinge a superfície e se liga a ela, porém o processo associado à adesão dessas partículas ocorre por meio de uma energia de ligação, cuja intensidade depende não só da natureza das partículas depositadas, como também da geometria local da superfície.

²A equação-*KPZ* (em homenagem a seus criadores Mehran Kardar, Giorgio Parisi, e Yi-Cheng Zhang) é uma equação diferencial parcial estocástica não-linear. Ele descreve a mudança temporal da altura $h(x, t)$ no lugar de x e tempo t . É formalmente dada por

$$\frac{\partial h}{\partial t}(x, t) = v \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}(x, t) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}(x, t) \right)^2 + \eta(x, t).$$

onde $\eta(x, t)$ é ruído branco Gaussiano com média $\langle \eta(x, t) \rangle = 0$ e segundo momento $\langle \eta(x, t), \eta(x', t') \rangle = 2D\delta^d(x - x')\delta(t - t')$. v , λ e D são parâmetros do modelo e d é a dimensão. Muitos modelos no campo de sistemas de partículas interagindo, tais como o processo de exclusão simples totalmente assimétrica, também encontram-se na classe de universalidade *KPZ*. Esta classe é caracterizada por modelos que, em uma dimensão $(1 + 1)$ têm expoente de rugosidade $\alpha = \frac{1}{2}$, o expoente de crescimento $\beta = \frac{1}{3}$ e o expoente dinâmico $z = \frac{3}{2}$.

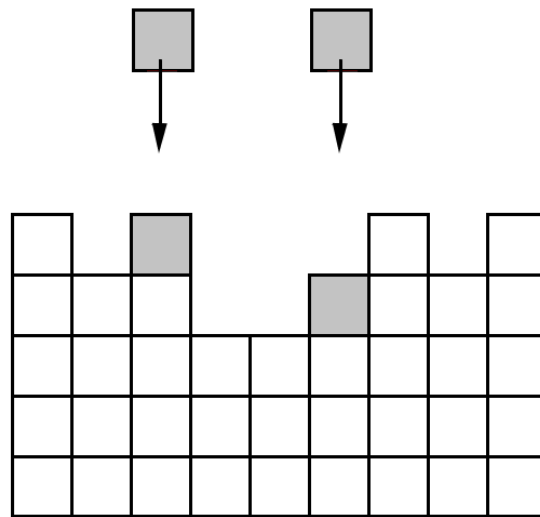


Figura 1: Esquema de deposição aleatória.

Difusão: uma partícula, no instante que atinge a superfície, possui a capacidade de só aderir quando encontra um sítio cujo nível energético seja o mais favorável possível.

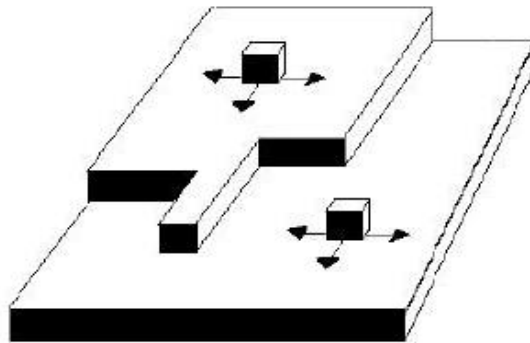


Figura 2: Representação de difusão [3].

Dessorção: esse processo ocorre de forma inversa aos anteriores, isto é, a partícula em vez de sofrer processo de adesão, é liberada da posição de equilíbrio. Essa liberação é influenciada por algum tipo de mecanismo, como aumento da temperatura, ionização por laser, etc.

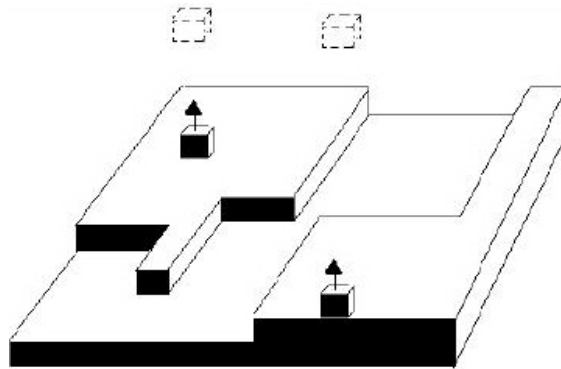


Figura 3: Representação de desorção [3].

Cito, como exemplo, o caso em que a desorção corresponde a uma técnica utilizada no tratamento de solos, lamas ou sedimentos contaminados com resíduos tóxicos. O princípio básico constitui em aquecer o solo de forma direta (tratamento físico-térmico), quando são separados os elementos contaminantes, como pesticidas, produtos derivados do petróleo, cianetos e metais pesados (como o mercúrio), com baixo ponto de ebulição (vaporização). O processo ocorre da seguinte forma: o solo contaminado é aquecido por um determinado período de tempo até atingir uma temperatura suficiente para volatilizar a água e os contaminantes e, posteriormente, é feito o tratamento dos gases obtidos [4].

Um exemplo mais simples no qual também pode ser observado o processo de desorção, constitui no chamado processo erosivo, causado pela ação das chuvas sob uma superfície desprovida de vegetação. Percebe-se claramente, que os efeitos das chuvas retiram boa parte do material arenoso, causando erosão do solo.

Dessa forma, torna-se evidente que a importância associada aos processos de crescimento da superfície, está por sua vez, depende de vários fatores, como: propriedades microscópicas da interface; magnitude das energias de ligação e de parâmetros externos que possam ser modificados experimentalmente.

Portanto, vale dizer que não é nosso objetivo estabelecer um estudo que esteja associado a essas características ou propriedades. Vamos nos deter somente ao estudo do crescimento da superfície através dos modelos de crescimento, os quais obedecerão a três princípios básicos. São eles [2]:

P1. Os modelos a serem estudados devem ter, no processo de sua formação, a existência de um fluxo constante de partículas a serem depositadas;

P2. A esse fluxo constante de partículas a serem depositadas, deve existir ainda o caráter de aleatoriedade, associado a essas mesmas partículas, no que se refere ao processo de deposição das mesmas;

P3. Existência de mecanismos que são encarregados tanto da difusão quanto da fixação das partículas sob a superfície, denotaremos esses mecanismos por *algoritmo*.

A principal característica, associada ao algoritmo, é a existência de regras pré-definidas, isto é, condições já estabelecidas no modelo adotado no que se refere à adesão e fixação das partículas no momento das deposições. Exemplo, um caso de deposição de partículas em que uma determinada partícula possui a capacidade de escolher em qual lado deve se fixar. Isso está associado à existência deste algoritmo.

Apesar de o crescimento de uma superfície ser um típico processo de não equilíbrio, este possui um comportamento de escalas nas flutuações da altura da interface com o tempo e com o tamanho do sistema. Partindo do comportamento das escalas de flutuações da altura em função do tempo e tamanho da interface, muitos desses estudos concentrar-se-ão nos processos de crescimento em relação às classes de universalidade. Dessa forma, diz-se que um modelo de crescimento pertence a uma determinada classe de universalidade de acordo com os valores obtidos para seus expoentes críticos, os quais são obtidos a partir da aplicação da relação de escala proposta por **Family e Vicsek** [3, 5], que será apresentada no Capítulo 1, em conjunto com os modelos de deposição aleatória, deposição aleatória com relaxação superficial, deposição balística, classes de universalidade e Equação de *KPZ*.

No Capítulo 2, apresentaremos um modelo de crescimento proposto por Mello, Chaves e Oliveira, de 2001. Esse modelo busca descrever a dissolução de um sólido cristalino por um líquido [1]. Para esse estudo é considerado que o referido substrato possui um comportamento do tipo unidimensional, ou seja, é um sistema $(1 + 1)$ (variável de posição + variável associada à altura). Nesse capítulo, vamos obter, por meio de simulação computacional, os expoentes de crescimento cujos resultados serão os mesmos obtidos pelos pesquisadores. Dessa forma concluiremos que o referido modelo pertence à classe de universalidade de *KPZ*.

Nos capítulos subsequentes, iremos propor uma formulação analítica para a evolução da rugosidade, tomando, como ponto inicial, o modelo de corrosão proposto no artigo de *Mello et al* [1], em conjunto com a relação existente entre as

configurações do modelo (algoritmo) e o estudo das superfícies das hiperesferas. Nessa nova metodologia, objetivamos encontrar os expoentes críticos associados a esse modelo de corrosão.

Acrescentaremos, ao final deste trabalho, Apêndices com objetivo de apresentar um embasamento teórico a respeito de alguns temas que serão apresentados nos capítulos anteriores, como é o caso do tratamento matemático feito para as hiperesferas e a inserção da chamada Função Gama.

Capítulo 1

Conceitos Básicos

Como o estudo associado ao crescimento das interfaces de uma superfície ocorre por meio dos modelos de crescimento e estes são propostos pelos mais variados métodos, tais como: métodos experimentais, simulação computacional e cálculos analíticos [6]. Iniciaremos este capítulo com uma apresentação dos elementos básicos associados a forma da interface, quanto a dinâmica do crescimento de superfícies, em seguida, daremos uma breve descrição de três modelos de crescimento:

Deposição Aleatória - DA;

Deposição Aleatória com Relaxação Superficial - DARS;

Deposição Balística - DB.

Esses modelos não são únicos, existem, na literatura, outros modelos de crescimento, como podem ser vistos em [1, 2, 3]. Os modelos escolhidos são importantes no sentido de que, num momento inicial, eles sejam convincentes e nos auxiliem a melhor visualizar e interpretar a evolução das interfaces.

Partindo do modelo de Deposição Balística - DB, apresentaremos os conceitos de Leis de Escala associados aos expoentes críticos, que são, de rugosidade - α , de crescimento - β e dinâmico - z , bem como a relação de dependência existente entre esses expoentes, também chamados de relação de **Family-Vicsek**. Os valores dos expoentes críticos de um modelo permitem inseri-lo dentro de uma determinada *Classe de Universalidade*, junto com outros modelos que possuam os mesmos valores de expoentes.

1.1 Altura Média e Rugosidade

A fim de termos uma melhor compreensão das relações matemáticas associadas à formação e morfologia de uma interface, apresentaremos definições importantes que utilizaremos no desenvolvimento de todo o trabalho.

Para isso faremos uso da figura esquematizada abaixo:

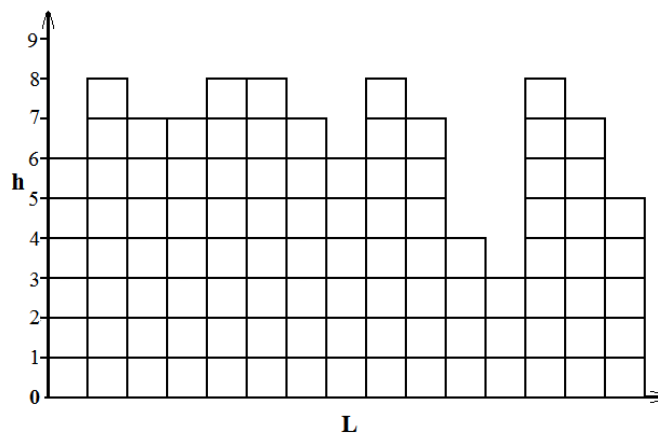


Figura 1.1: Esquema representativo de deposição de partículas.

Considerando L o tamanho do substrato, a figura descrita acima é representada por coordenadas cartesianas, em que o tamanho do substrato correspondente ao eixo das abscissas é dado sob a forma $0 \leq i \leq L$, onde i representa o "sítio posição" (local) onde as partículas devem ser depositadas, já o eixo das ordenadas representa a altura do substrato. Essa altura é representada por $h(i, t)$ ou $h_i(t)$, que corresponde ao valor da posição i num dado instante t com relação a um referencial fixo. No nosso trabalho optaremos por $h_i(t)$ para a representação da altura.

1.1.1 Altura Média

A altura média de uma superfície, denotada por $\bar{h}(t)$, para uma rede, é dada pela expressão matemática:

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h_i(t), \quad (1.1)$$

onde $h_i(t)$ corresponde à altura da coluna (i) no tempo t , e definimos ainda, $\Delta t = \frac{1}{L}$, onde L corresponde ao tamanho total do sistema, isto é, o valor do substrato em que estamos trabalhando. Na realização deste trabalho, faremos uso de modelos de crescimento discretos. Em um modelo discreto, a relação entre os vizinhos é descrita pelo uso de um *algoritmo* no intuito de tentar reproduzir, satisfatoriamente, vários aspectos de algum tipo de crescimento observado experimentalmente. Para isso ao se criar um modelo, procura-se escolher os fatores considerados essenciais para determinar a morfologia e dinâmica da interface [2].

Se a taxa de deposição das partículas num substrato for constante, a altura média cresce linearmente com o tempo.

Observando a figura abaixo e fazendo uso da equação (1.1), depois de $9 \times L$ deposições, a altura média vale:

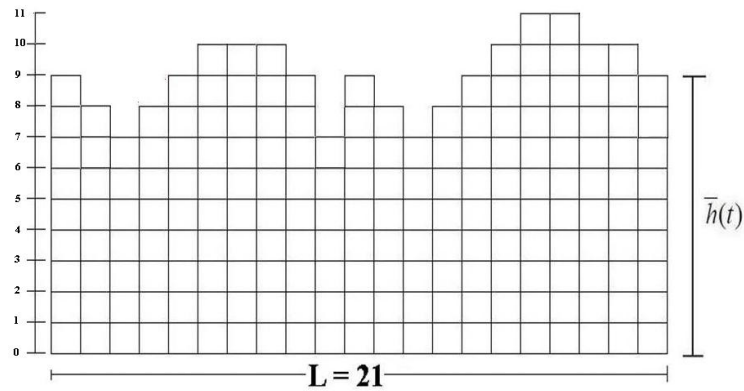


Figura 1.2: Representação da altura média numa interface unidimensional.

$$\bar{h}(9) = \frac{3(7) + 4(8) + 6(9) + 6(10) + 2(11)}{21} = 9.$$

1.1.2 Rugosidade da Superfície

A rugosidade, denotada por $w(L, t)$, possui como característica quantificar as flutuações na altura da interface. A expressão que a define é dada por:

$$w(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (h_i(t) - \bar{h}(t))^2}. \quad (1.2)$$

Do ponto de vista matemático, a rugosidade é apenas um desvio padrão, entretanto do ponto de vista físico, sua evolução ainda não é completamente compreendida, sendo ainda objeto de investigação.

Buscando compreender melhor a rugosidade de uma superfície, medimos inicialmente a largura da interface em função do tempo, quando por definição o crescimento começa a partir de uma linha horizontal, isto é, a interface no tempo $t = 0$, é dada por:

$$w(L, 0) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (h_i(0) - \bar{h}(0))^2} = 0.$$

Isso corresponde à interface representada por uma linha, onde $h_i(0) = 0$. A medida em que ocorrem deposições de partículas, a interface se altera, de forma gradual, e com novas características associadas devido às deposições aleatórias do processo. Diz-se, então, que a interface possui *rugosidade*.

1.2 Modelos de Crescimento

Estudos teóricos, nas diversas áreas do conhecimento, como em Ciências de Materiais, nas Engenharias, na Física, na Química e outras áreas, são realizadas através de ferramentas computacionais e modelos matemáticos, cujo objetivo é a descrição e representação de objetos, sistemas, situações ou fenômenos das mais variadas naturezas, e que se encontram, na maioria das vezes, em difícil acesso, seja por limitações tecnológicas ou por situações que não são fáceis de serem trabalhadas na sua forma efetiva. Portanto, os usos de algoritmos computacionais e de computação permitem a elaboração e aplicação de modelos de forma a explorar e prever propriedades fundamentais de sistemas. Assim, pesquisadores empregam a modelagem e podem viabilizar resultados que de outra maneira talvez não fossem obtidos.

A estrutura de um modelo é baseada numa forma simplificada, que serve de analogia para um determinado fenômeno ou sistema. Assim, o fenômeno fica mais compreensivo e o modelo possui a vantagem de ser adaptado e aprimorado dependendo da situação, de modo que suas propriedades passem a refletir as observações com maior exatidão e consiga gerar um maior grau de confiabilidade.

Buscando compreender os fenômenos físicos associados ao crescimento das interfaces, iremos nos valer de *modelos de crescimento*, os quais são estabelecidos no plano das representações ideais. Os referidos modelos já são bastante utilizados, e estes, buscam assemelhar-se ao plano real em suas principais características, porém de uma maneira mais simples, isto é, sendo apenas uma idealização e, portanto, propício ao estudo.

A fim de facilitar um estudo mais geral de crescimento de superfícies, vamos iniciar a partir de modelos unidimensionais, conhecidos como sistemas de dimensão $(1 + 1)$, em que o significado físico é o de uma superfície unidimensional (variável de posição), mais a variável associada a sua altura. Podemos citar, como exemplos de sistemas $(1 + 1)$, uma chama em uma folha de papel; percebe-se que a parte queimada forma uma estrutura que cresce no decorrer do tempo, ou ainda, o crescimento de uma colônia de bactérias; como podem ser vistas nas ilustrações abaixo.



Figura 1.3: As três primeiras figuras representam o crescimento observado numa folha de papel durante a queima (Figuras à direita). A figura da esquerda representa o crescimento de uma colônia de bactérias.

Vale ressaltar ainda que no estudo de crescimento, existem outras situações

as quais são descritas em dimensões maiores, como os sistemas $(2 + 1)$, quando a posição de uma determinada partícula fica bem definida com uso de duas variáveis, mais outra variável que visa identificar a sua altura. Existem ainda as estruturas $(3 + 1)$, e assim por diante [6].

1.2.1 Deposição Aleatória - DA

O modelo de **Deposição Aleatória - DA** - é considerado um dos mais simples. Isso devido ao fato do seu algoritmo ser bastante rudimentar. O algoritmo descreve a queda retilínea de uma partícula e a sua adesão sob a superfície.

$$\text{Algoritmo do DA: } h_i(t + 1) = h_i(t) + 1.$$

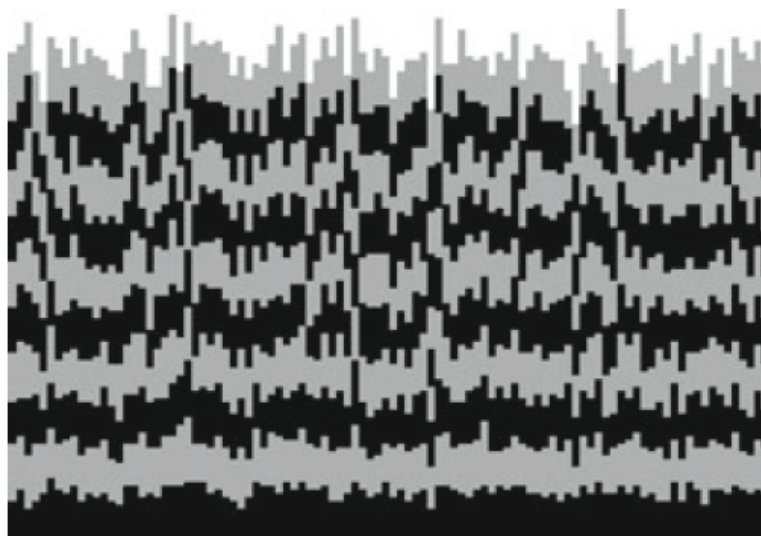


Figura 1.4: Os resultados de uma simulação de uma interface que consiste em 100 sítios, onde 50.000 átomos são depositados. A cor foi alterada após a deposição de cada 5.000 átomos [7].

A figura abaixo descreve o processo usado na deposição aleatória numa forma bastante simplificada, do que foi exposto acima:

O processo de deposição das partículas, neste modelo, ocorre da seguinte forma: inicialmente é escolhida, aleatoriamente, uma posição, de onde se deixa cair livremente uma partícula verticalmente em direção a sua superfície, Essa partícula é

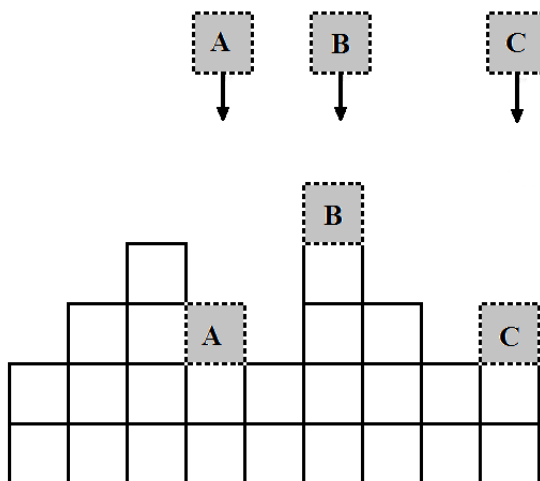


Figura 1.5: Deposição Aleatória. As partículas simplesmente adere à superfície, sem nenhum tipo de relação com os sítios vizinhos.

então depositada de forma permanente. As partículas que vêm, a seguir, são também depositadas umas sobre as outras. Como o modelo possui um mecanismo que simplesmente descreve a queda da partícula, sem causar associações com seus vizinhos, ocorre que as alturas crescem de forma independente, de modo que não há correlação espacial entre os sítios vizinhos, dessa forma no modelo de deposição aleatória, a rugosidade cresce indefinidamente.

Observando a Fig. 1.2, da seção 1.1.1, e considerando que a unidade de tempo é escolhida como sendo o tempo necessário para a deposição de L partículas, em que L corresponde ao tamanho do sistema. Dessa forma, para o sistema de tamanho L , no primeiro instante de tempo, $t = 1$, significa que serão depositados L partículas, num segundo tempo, ou seja, quando $t = 2$, teremos $2L$ partículas e assim sucessivamente, veja que no caso em questão, isto é, Figura. 1.2, quando $t = 9$, já houve 189 deposições (21×9).

1.2.2 Deposição Balística - DB

No modelo de **Deposição Balística - DB**, uma partícula é liberada de uma posição escolhida de forma aleatória sobre uma superfície que esteja localizada a uma distância maior que a altura máxima da interface [8]. A partícula, então, segue uma trajetória retilínea e vertical e, devido a sua interação com vizinhos, ela cumpre

uma das duas condições abaixo:

Condição - 01: a partícula adere à superfície desde que não tenha encontrado, anteriormente, sítios de primeiros vizinhos; ou

Condição - 02: a partícula adere ao primeiro sítio vizinho que encontrar, pois esse apresentará um nível energético mais favorável.

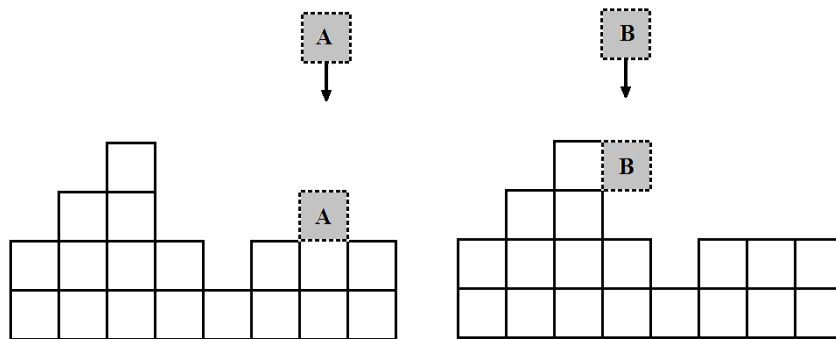


Figura 1.6: Deposição Balística. A partícula A, adere à superfície (condição - 01), enquanto que a partícula B, adere ao sítio de maior altura (condição - 02).

A representação dada pela figura acima, garante-nos uma melhor visualização desse modelo. Percebe-se que, na primeira figura, o sítio escolhido foi o 7º, como este não possui vizinhos, a partícula então obedece a primeira condição, aderindo então à superfície. Enquanto que, na segunda figura, o sítio escolhido foi o 4º. Nesse caso, a partícula obedece a segunda condição e adere ao vizinho que possui uma maior altura.

É inserida, abaixo, a regra associada ao modelo da **DB** e uma representação envolvendo simulação de partículas, como pode ser visto no livro *Scale Invariance - From Phase Transitions to Turbulence*, dos Físicos Annick Lesne e Michel Laguës [7]:

$$\text{Algoritmo - DB: } \left\{ h_i(t+1) = \max \begin{bmatrix} h_{i-1}(t), \\ h_i(t) + 1, \\ h_{i+1}(t). \end{bmatrix} \right.$$



Figura 1.7: Resultados de uma simulação de uma interface com $L = 100$ sítios, onde são depositados 12.800 átomos. A cor foi alterada após a deposição de cada 800 átomos.

1.2.3 Deposição Aleatória com Relaxação Superficial - DARS

Consideremos agora um substrato de tamanho L e com um certo grau de rugosidade. Isso significa que já houve uma série de deposições anteriores. Utilizando de analogia com os casos anteriores, para esse modelo, também, é escolhida de forma aleatória uma posição e , em seguida, deixa-se cair uma partícula verticalmente em direção a sua superfície, porém ao atingir o topo da coluna da posição escolhida, a partícula, antes de aderir ao substrato, "procura" entre os primeiros sítios vizinhos, isto é, o vizinho à esquerda e à direita, o que possui menor altura. Quando o encontra, a partícula relaxa e adere a ele. Caso o sítio, inicialmente, sorteado possua como vizinhos sítios de mesma altura, a partícula é depositada aleatoriamente em qualquer de seus vizinhos, conforme pode ser visto na representação abaixo:

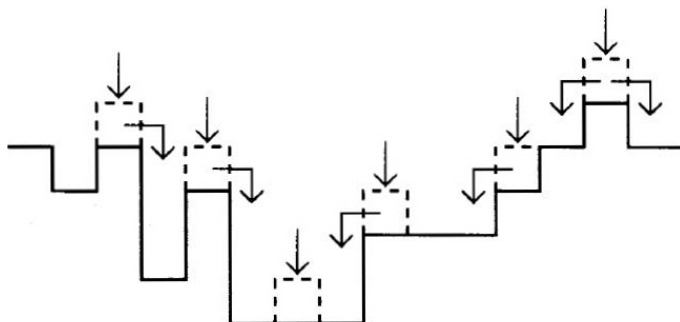


Figura 1.8: Deposição Aleatória com Relaxamento Superficial. As partículas recém-depositadas não aderem sobre o local que caem, mas procuram via mecanismos a posição de menor altura.

Como resultado desse processo de deposição, a interface obtida possui como característica uma superfície suave ao compararmos com o modelo de deposição aleatória, como podemos observar no crescimento obtido por simulação representado na figura abaixo:

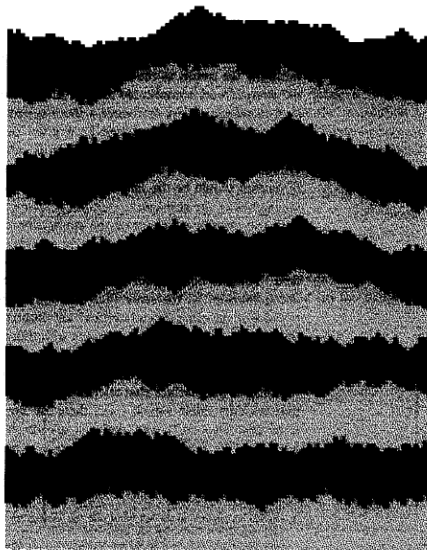


Figura 1.9: Simulação de DARS, onde são depositadas 35.000 partículas sobre um substrato de tamanho $L = 100$. As cores reflete a hora de chegada das partículas: após a deposição de cada conjunto de 3500 partículas, ocorrem as mudanças de cores [3].

1.3 Leis de Escalas e Expoentes Críticos

Métodos de escala tornaram-se uma ferramenta padrão para os físicos de hoje, esse termo, denotado ainda por hipótese de escala, foi trabalhado por B. Widom, entre as décadas de 60 e 70, dessa forma podemos encontrar, em artigos, como Escala de Widom. O termo escala evoca uma estrutura de natureza e relações particulares, mas, sobretudo como uma aproximação universal e certos tipos de análise. Dessa forma, pode-se dizer que os métodos de escala tratam não somente de observações, como também de ação, dessa forma pode-se dizer que essa é a ideia de que esta abordagem atua de forma a moldar o processo de observação [7].

Ao estudar a dinâmica de uma superfície, o uso dos conceitos de escala é de grande importância, pois estes possuem um grande poder de predição. Esses conceitos são de fácil manipulação e permitem relacionar quantidades e expoentes aparentemente independentes [2]. Uma das formas de utilizar as propriedades de escala para caracterizar os sistemas é através de expoentes, quando se considera que dois sistemas que apresentam o mesmo conjunto de expoentes devem, portanto, pertencer a mesma classe de universalidade, como veremos mais adiante [9].

Partindo dos modelos vistos anteriormente, em particular os modelos de deposição balística e o de deposição aleatória com relaxação superficial, vamos investigar o que acontece com a rugosidade da superfície durante o seu crescimento. É notoriamente visto que o conjunto de partículas depositadas na superfície define um perfil, formando então um agregado com uma geometria muito particular, o qual evolui com o tempo.

A figura abaixo corresponde a um gráfico típico da evolução temporal da rugosidade em função do tempo. Supondo que, no instante inicial, a superfície esteja lisa, tem-se que, num primeiro momento, à medida que o tempo prossegue, aumenta a rugosidade da superfície, até que ocorra a saturação da rugosidade, ou seja, a rugosidade fica constante num dado valor w_{sat} e a partir de um tempo t_{sat} .

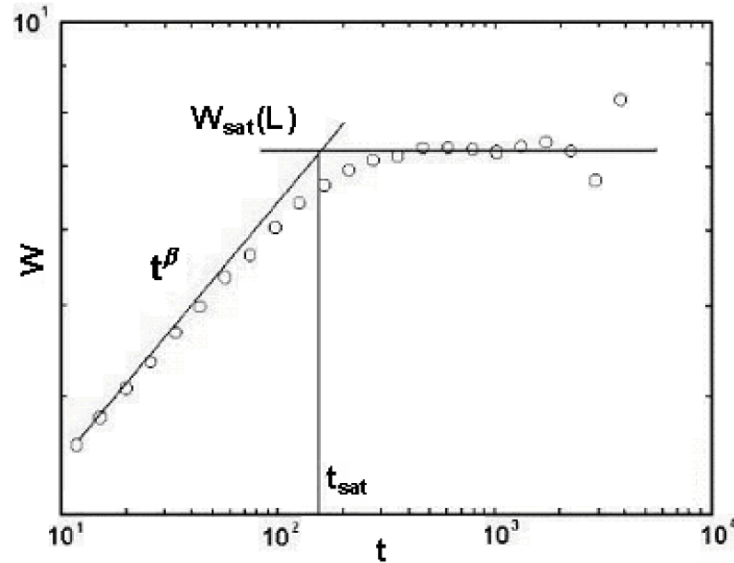


Figura 1.10: Crescimento de um sistema obtido por simulação. Primeira Região: Linha inclinada, compreendida entre o eixo w e o t . Segunda Região: Linha horizontal partindo de t_{sat} , [8].

A figura mostra o gráfico de evolução da rugosidade de um sistema em que pode-se observar a presença de duas regiões distintas no decorrer do processo de crescimento.

Na primeira região, o valor da rugosidade aumenta à medida que o tempo aumenta, e esta relação está associada a uma lei de potência com o tempo, ou seja,

$$w(L, t) \sim t^\beta, \text{ quando } t \ll t_{sat}, \quad (1.3)$$

o expoente β é chamado de **expoente de crescimento** e caracteriza informações a respeito da dinâmica do crescimento da rugosidade do sistema.

A rugosidade, isto é, o aumento da largura da flutuação pela lei de potência, não continua indefinidamente, esta cessa num determinado ponto, chamado de ponto de saturação, isto é, $w(t \gg t_{sat}) \sim w_{sat}$. Na figura, é representada na segunda região e denotada pela expressão:

$$w_{sat}(L) \sim L^\alpha, \text{ quando } t \gg t_{sat}, \quad (1.4)$$

o expoente α é chamado de **expoente de rugosidade** e caracteriza informações a respeito da rugosidade do sistema quando ele atinge o equilíbrio.

Observamos que tanto a rugosidade quanto o tempo em que o sistema satura, t_{sat} , depende do tamanho do sistema, isto é, quanto maior for o sistema maiores

serão os valores da rugosidade e o tempo de saturação, dessa forma tem-se ainda a seguinte relação:

$$t_{sat} \sim L^z \quad (1.5)$$

onde agora o expoente z é chamado de **expoente dinâmico** do sistema.

Os expoentes de escala α, β e z não são independentes e, para verificar que eles obedecem a uma lei de escala, vamos fazer uma análise do gráfico tipo log – log da largura da interface em função do tempo, representado pela figura abaixo, na qual cada uma das curvas corresponde a um tamanho distinto do sistema [10].

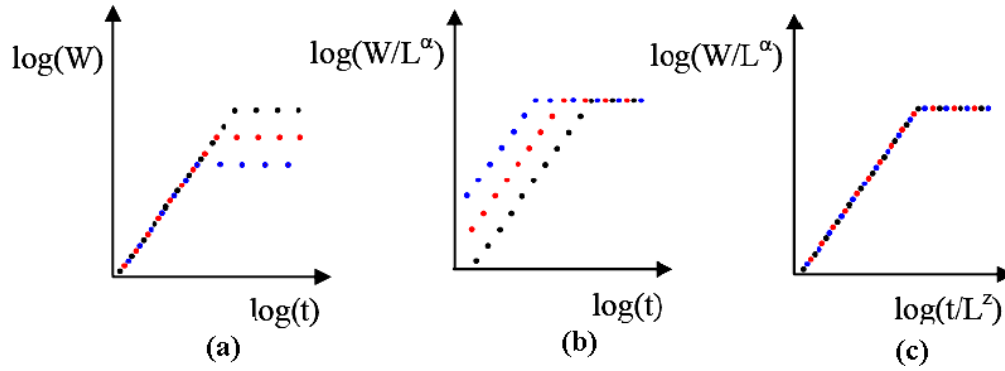


Figura 1.11: Representação esquemática dos passos envolvidos na reescala da rugosidade com dependência temporal. FONTE: Adaptada de Barabási & Stanley.

Observando a Fig. 1.9.(a), é evidente a variação para três tamanhos diferentes de L . Na passagem de (a) para (b), ao dividirmos a rugosidade por $w_{sat}(L)$, obtêm-se, como resultado, curvas que saturam no mesmo valor (Fig. 1.9.(b)), independente do tamanho de L . Agora, na passagem de (b) para (c), reescalamos o tempo dividindo este por t_{sat} , as curvas também saturam no mesmo valor da abcissa.

Partindo das observações apresentadas acima, tem-se que $\frac{w(L,t)}{w_{sat}(L)}$ corresponde a uma função de $\frac{t}{t_{sat}}$, se e somente se:

$$\frac{w(L,t)}{w_{sat}(L)} \sim f\left(\frac{t}{t_{sat}}\right) \quad (1.6)$$

onde a função $f(u)$ deve satisfazer as relações $f(u) = \begin{cases} u^\beta, & u \ll 1; \\ \text{const}, & u \gg 1; \end{cases}$, e é chamada *função escala*. Substituindo agora $w_{sat}(L)$ e t_{sat} na função acima pelas suas respectivas formas escala (1.4) e (1.5) encontramos a *Relação de Escala de*

Family-Vicsek [3]:

$$\frac{w(L, t)}{L^\alpha} \sim f\left(\frac{t}{L^z}\right) \implies w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (1.7)$$

Utilizando a Eq. (1.3) no ponto t_{sat} , tem-se que $w_{sat}(L) \sim t_{sat}^\beta$ e, usando a Eq. (1.4), vamos encontrar que

$$t_{sat}^\beta \sim L^\alpha,$$

e aplicando a Eq. (1.5), pode-se concluir que:

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (1.8)$$

A Eq. (1.8) é a equação de escala que relaciona os três expoentes críticos [3].

1.4 Universalidade e Classes de Universalidade

O conceito de universalidade é uma ideia importante para o estudo de transições de fase, tanto no equilíbrio quanto longe dele. No estudo da Física Estatística, diz-se que universalidade é a observação da existência de propriedades para um grande número de sistemas que não possuem dependência com os detalhes dinâmicos. Partindo do que foi dito, é esperado que o comportamento crítico observado nas transições de fase possa ser associado a um conjunto finito de possíveis classes, a essas classes, denotaremos como classes de universalidade. No início, a noção de universalidade havia sido proposta originalmente por físicos experimentais, onde estes tinham por objetivo descrever a observação de que vários sistemas aparentemente desconexos, isto é, sem nenhuma relação, apresentavam os mesmos tipos de comportamento numa dada transição de fase. Analisamos as classes de universalidade em termos de expoentes e funções de escala definidos próximos da criticalidade [11].

De forma quantitativa, o conjunto de valores dos expoentes críticos (rugosidade - α , crescimento - β e dinâmico - z), para um dado processo de crescimento, define uma classe de universalidade. Assim, sistemas possuindo os mesmos valores de expoentes críticos pertencem à mesma classe de universalidade.

Na literatura acerca do assunto, já são conhecidas várias classes de universalidades. Cito a classe de universalidade de *EW* (Edwards-Wilkinson) a de *KPZ*

(Kardar-Parisi-Zhang) e a classe de universalidade associada à deposição aleatória, DA .

Apresentamos, a seguir, uma tabela com os expoentes de crescimento e rugosidade para modelo de deposição aleatória, DA , deposição balística, DB , deposição aleatória com relaxamento superficial, $DARS$:

| Modelos \ Expoentes | rugosidade $-\alpha$ | crescimento $-\beta$ | dinâmico $-z$ |
|---------------------|----------------------|----------------------|---------------|
| DA | $\#$ | 0,50 | $\#$ |
| DB | 0,50 | 0,33 | 1,50 |
| $DARS$ | 0,50 | 0,25 | 2 |

Tabela 1.1: Valores correspondentes aos expoentes de crescimento de rugosidade e dinâmico para o caso unidimensional.

E agora, uma tabela com os expoentes das classes de universalidade que faremos uso nesse trabalho.

| Classes Universalidade \ Expoentes | rugosidade $-\alpha$ | crescimento $-\beta$ | dinâmico $-z$ |
|------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------|
| EW | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{4}$ | 2 |
| KPZ | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{3}$ | $\frac{3}{2}$ |

Tabela 1.2: Valores correspondentes aos expoentes de crescimento de rugosidade e dinâmico para o caso unidimensional, para as classes de universalidade.

Resumindo, os expoentes críticos correspondentes à deposição aleatória com relaxação superficial - $DARS$, estão em concordância com os mesmos valores obtidos analiticamente da equações de crescimento de EW . Logo se conclui que o modelo $DARS$ pertence à classe de universalidade de EW . De maneira análoga os expoentes do modelo de deposição balística - DB estão em concordância com os expoentes obtidos de forma analítica da equação de KPZ . Então o modelo de DB pertence a classe de universalidade de KPZ . E, para finalizar, a DA define uma outra classe de universalidade. De fato, vê-se que, para esse caso, os expoentes de rugosidade - α e dinâmico - z não estão definidos, pois não existe saturação nessa dinâmica.

1.5 Equação de *KPZ*

Existem numerosos livros sobre fenômenos de crescimento e escala de invariância. Citamos, como exemplo, os livros *Fractal concepts in surface growth*, de A. L. Barabási e H. E. Stanley; *Dynamics of fractal surfaces*, de F. Family e T. Vicsek; *Fractals, scaling and growth far from equilibrium*, de P. Meakin, entre outros. Juntamente a esses livros existem, também, uma enorme quantidade de dissertações, teses e artigos todos relacionados ao mesmo tema. Todos esses trabalhos enfatizam estudos associados à teoria do crescimento de superfícies, em especial, a características relacionadas ao estudo dos fractais e a tópicos associados às classes de universalidades. Dentre essas, em particular, uma que é desenvolvida neste trabalho, denotada como classe de universalidade *KPZ*.

No ano de 1986, Kardar, Parisi, e Zhang elaboraram e propuseram uma descrição contínua acerca do crescimento de superfície, a famosa equação de *KPZ*, em homenagem aos pesquisadores acima citados.

Neste trabalho, buscamos enfatizar o crescimento de superfície dominada por regras dinâmicas locais. Tanto na dinâmica de crescimento, quanto nos estudos pertinentes aos modelos de deposição com elementos discretos, estes são descritos através de equações diferenciais. A equação abaixo é conhecida como equação de **Kardar-Parisi-Zhang**, ou simplesmente, equação de *KPZ*

$$\frac{\partial h}{\partial t}(x, t) = v \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}(x, t) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x}(x, t) \right)^2 + \eta(x, t).$$

Essa é a equação de crescimento e descreve o processo de crescimento de uma interface, em que os termos da referida equação são descritos pelos seguintes elementos:

$$\left\{ \begin{array}{l} h(x, t) - \text{altura da interface numa posição } x \text{ num dado tempo } t; \\ \eta(x, t) - \text{termo do ruído;} \\ v - \text{parâmetro associado à tensão superficial;} \\ \lambda - \text{parâmetro associado ao crescimento lateral.} \end{array} \right.$$

A equação acima constitui uma extensão da Equação Linear de Edwards-Wilkinson (*EW*) (maiores detalhes são encontrados no Cap. 06 do livro do Barabasi [3]). A equação de *KPZ* inclui, na sua formulação, um termo não linear o qual não existe na equação de *EW*. Esse termo não linear é necessário, pois inclui um crescimento lateral da interface na equação de crescimento.

Quantitativamente, o conjunto dos expoentes críticos encontrados tanto nos modelos de deposição balística como no modelo de corrosão, que veremos a seguir, são, dentro da margem de erro, os mesmos. O que implica que ambos podem ser descritos pela mesma equação, em particular a equação KPZ , e dizemos que esses modelos estão na classe de universalidade de KPZ .

Capítulo 2

Modelo de Corrosão (Etching)

Corrosão é a degradação progressiva de um determinado sistema. Essa degradação ocorre, na maioria das vezes, pelo contato da superfície em questão com um meio ácido. Porém, podem existir outros mecanismos que também favorecem o processo corrosivo, a maresia, por exemplo, é um desses mecanismos. Esta consiste num tipo de névoa fina, úmida e salgada, presente nas cidades litorâneas, cuja principal ação corresponde à destruição de toda a sorte de metais a que estiver sendo exposta.

Nosso objetivo não é o de efetuar um estudo investigativo acerca dos mais variados processos de corrosão de materiais. Iremos nos deter num caso particular, no qual tentaremos estabelecer uma padronização a respeito do processo de crescimento de uma interface para um determinado modelo de crescimento, no caso o modelo de corrosão. Esse modelo foi proposto em 2001, por *Bernardo A. Mello; Alaor S. Chaves* e *Fernando A. Oliveira* [1], sendo conhecido por modelo de corrosão (Etching).

Nesse modelo, as simulações numéricas para o caso em que a dimensão $d = 1$ levam a crer que o modelo pertence à classe de universalidade KPZ e que possuem boas propriedades de escala [6].

Tentaremos agora chegar aos mesmos resultados, ou próximos dos resultados que foram obtidos neste modelo.

2.1 Algoritmo do Modelo de Corrosão

Na versão original do modelo de corrosão, como proposto por *Mello et al*, ao tomarmos uma partícula aleatória do sistema, isto é, ao retirarmos uma partícula, tem-se um crescimento negativo, em outros termos, ocorre um crescimento no sentido de baixo para cima, não só do sítio escolhido como também dos seus primeiros vizinhos, desde que estes possuam alturas (parte não corroída) maior do que a do sítio escolhido [1].

Neste trabalho, a versão do modelo de corrosão sofrerá apenas uma mudança no sentido do referencial, ou seja, adotaremos o crescimento ocorrendo no sentido de cima para baixo, $h \rightarrow -h$, apenas para facilitar o processo, o que em nada afetará nossos cálculos, desde que o nosso interesse é no desvio padrão, $w(t)$.

Portanto, para uma melhor compreensão do referido processo, iremos nos valer do algoritmo descrito abaixo, cuja idéia principal é considerar que um fluído corrosivo, ao atuar num determinado sítio, retira as partículas que estiverem expostas ao fluido, isto é, será considerado o sítio onde o fluído atuará, bem como os primeiros vizinhos. Assim, temos que:

$$\begin{cases} h_i(t+1) = h_i(t) + 1 \\ \text{se } h_{i-1}(t) < h_i(t) \implies h_{i-1}(t+1) = h_i(t) \\ \text{se } h_{i+1}(t) < h_i(t) \implies h_{i+1}(t+1) = h_i(t) \end{cases} \quad (2.1)$$

a expressão $h_i(t)$ corresponde a altura com relação ao referencial fixo no sítio i .

Exemplo: Suponhamos um substrato no qual algumas corrosões já tenham ocorrido, conforme figura abaixo,

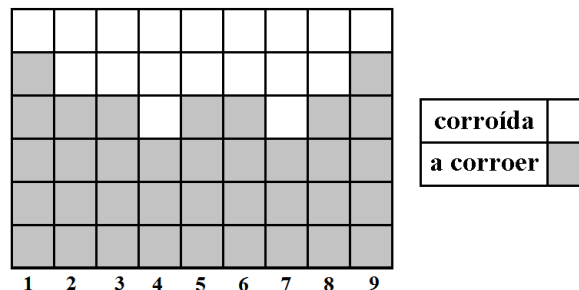


Figura 2.1: Esquema de corrosão de um sítio escolhido aleatoriamente.

onde $i = 1, 2, \dots, L, (L = 9)$, para $i = 7$ e $t = 2$, a altura será dada por $h_7(2) = 3$. Agora suponha que o solvente tenha sua ação sob esse sítio. Fazendo uso do algoritmo acima descrito, tem-se:

$$\{h_7(2+1) = h_7(2) + 1 = 3 + 1 = 4 \implies h_7(3) = 4.$$

Analisaremos, agora, a atuação do solvente nos primeiros vizinhos:

$$\begin{cases} h_6(2) = 2 \\ h_7(2) = 3 \end{cases} \implies h_6(2) < h_7(2) \implies h_6(3) = h_7(2) \implies h_6(3) = 3;$$

$$\begin{cases} h_8(2) = 2 \\ h_7(2) = 3 \end{cases} \implies h_8(2) < h_7(2) \implies h_8(3) = h_7(2) \implies h_8(3) = 3.$$

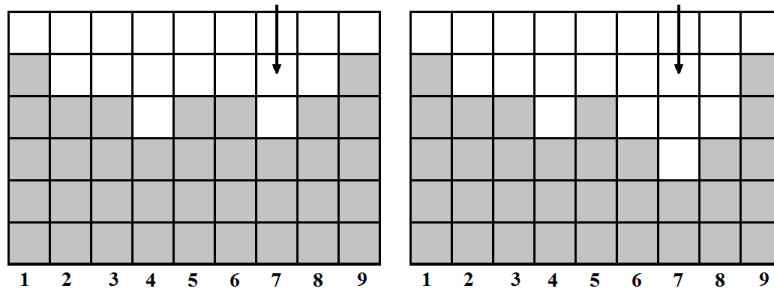


Figura 2.2: Esquema de corrosão do sítio $h_7(2) = 3$ escolhido, mais seus sítios vizinhos.

Observa-se que a parte pintada, corresponde à porção a ser corroída, enquanto que a parte em branco corresponde ao crescimento da corrosão, isto é, a parte que já foi corroída.

2.2 Expoentes no Modelo de Corrosão

Inicialmente, definiremos a dimensão geral como sendo $d + 1$, onde d representa a dimensão do substrato no qual se pretende trabalhar, dessa forma, quando $d = 1$, estamos trabalhando no espaço unidimensional, se $d = 2$, o espaço em questão é bidimensional, ou seja, corresponde a uma região plana; quando $d = 3$, estamos no espaço tridimensional, o que corresponde ao espaço onde estamos inserido; enquanto que para o numeral 1, corresponde a altura a qual o substrato ira obedecer após as respectivas deposições.

No artigo original de *Mello et al*, foi realizada uma simulação do modelo de corrosão para o caso em que $d = 1$ e foram encontrados os seguintes valores dos expoentes críticos: $\alpha = 0.491 \pm 0.002$, $\beta = 0.330 \pm 0.001$. Desse modo considera-se que o modelo está inserido na classe de universalidade de *KPZ*.

A partir do algoritmo de corrosão, também realizamos uma simulação para o modelo em $1 + 1$ dimensões. Utilizamos simulações em que $L = 2^n$, com $n = 5, 6, \dots, 14$, de onde encontramos os valores para a rugosidade como podem ser vistos na tabela abaixo e seu respectivo gráfico:

| L | w_{sat} |
|-------|-----------|
| 32 | 2.71410 |
| 64 | 3.87041 |
| 128 | 5.40696 |
| 256 | 7.53987 |
| 512 | 10.53470 |
| 1024 | 14.75900 |
| 2048 | 20.85730 |
| 4096 | 29.16790 |
| 8192 | 41.16560 |
| 16384 | 58.94120 |

Tabela 2.1: Valores simulados para L , com $L = 32$ à 16384 e seus correspondentes valores de saturação.

a partir desses valores, e com ajuste de curvas, como pode ser visto abaixo,

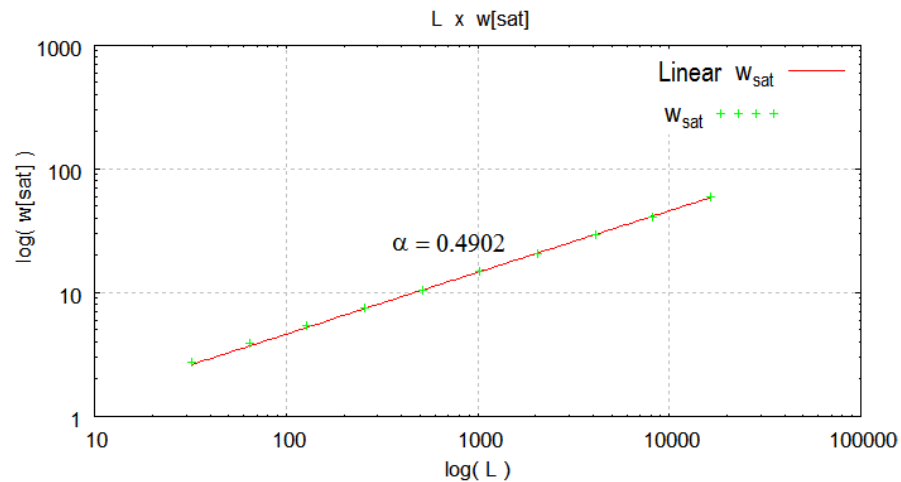


Figura 2.3: Curva de ajuste, determinação do expoente de rugosidade.

encontramos o valor do expoente de rugosidade, $\alpha = 0.498 \pm 0.003$, e ainda o valor do expoente de crescimento $\beta = 0.311 \pm 0.001$, muito próximo ao encontrado por Mello e colaboradores [6]. A partir desses valores, pode-se induzir que são compatíveis com os valores da Tabela 1.1 e, portanto pertencentes à Classe de Universalidade de *KPZ*.

Capítulo 3

Metodologia para Obtenção da Equação da Rugosidade

Neste capítulo, o objetivo é tentar encontrar uma metodologia que possibilite obter uma equação que descreva a evolução da rugosidade do modelo de corrosão proposto por *Mello; Chaves e Oliveira* [1]. Para isso, faremos uso de conceitos iniciais, como altura média e rugosidade, usaremos ainda o algoritmo proposto para o modelo de corrosão, sendo este algoritmo dado pela expressão 2.1, usaremos ainda o cálculo das probabilidades das hiperesferas, onde encontrar-se-á no Apêndice - A, um estudo detalhado a respeito do cálculo da área das hiperesferas. Dessa forma acreditamos que, desenvolvida a metodologia para este modelo, no futuro possa ser permitida uma generalização do método para abarcar modelos mais gerais.

3.1 Desenvolvimento do Incremento da Rugosidade - Método

Suponha que uma partícula caia em um substrato de rugosidade w . Nosso principal objetivo é tentar prever qual será o incremento da rugosidade nesse substrato. Consideremos o substrato discreto, em que cada sítio possua uma unidade de comprimento (u), o qual denotaremos por $u = 1$, e altura $h = \Delta x$. Considerando o sistema **antes** de uma deposição e **depois** de uma deposição, a altura referente à posição i de cada partícula, no referencial da altura média, será dada por

$$\text{Antes} : \quad \left\{ h_i(t) = h_i^f(t) - \bar{h}(t) \right.$$

$$\text{Depois} : \quad \left\{ h_i(t + \Delta t) = h_i^f(t + \Delta t) - \bar{h}(t + \Delta t), \right.$$

onde $h_i^f(t)$ representa seu valor na posição i e no instante t com relação a um referencial fixo. Definiremos ainda:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta h_i \implies \text{o acréscimo da altura na posição } i; \\ \Delta \bar{h} \implies \text{o acréscimo da altura média} \end{array} \right. ,$$

substituindo na segunda igualdade da última equação, isto é:

$$\begin{aligned} h_i^f(t + \Delta t) - \bar{h}(t + \Delta t) &= \left(h_i^f(t) + \Delta h_i(t) \right) - \left(\bar{h}(t) + \Delta \bar{h}(t) \right) \\ &= \left(h_i(t) + \bar{h}(t) + \Delta h_i(t) \right) - \left(\bar{h}(t) + \Delta \bar{h}(t) \right), \end{aligned}$$

e simplificando-a em conjunto com a primeira equação, o sistema, depois de uma deposição, toma a forma:

$$h_i(t + \Delta t) = h_i(t) + \Delta h_i(t) - \Delta \bar{h}(t). \quad (3.1)$$

Como já é sabido a equação que descreve as flutuações na altura da interface, isto é, a expressão referente à rugosidade é dada através da expressão:

$$w(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left(h_i^f(t) - \bar{h}(t) \right)^2}.$$

Usando a equação da rugosidade, antes e depois de uma deposição, tem-se que:

$$\text{Antes} : \quad \left\{ w^2(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left(h_i(t) \right)^2 \right.$$

$$\text{Depois} : \quad \left\{ w^2(t + \Delta t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left(h_i(t + \Delta t) \right)^2. \right.$$

Substituindo (3.1) na expressão da rugosidade depois de uma deposição tem-se:

$$w^2(t + \Delta t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left(h_i(t) + \Delta h_i(t) - \Delta \bar{h}(t) \right)^2.$$

Agora

$$w^2(t + \Delta t) - w^2(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left(\Delta h_i^2 + \Delta \bar{h}^2 + 2h_i \Delta h_i - 2h_i \Delta \bar{h} - 2\Delta h_i \Delta \bar{h} \right). \quad (3.2)$$

Veja que

$$\Delta \bar{h} = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \Delta h_i \implies \sum_{i=1}^L \Delta h_i = L \Delta \bar{h}.$$

Como não utilizaremos a altura $h_i^f(t)$ baseada em um referencial fixo, mas utilizaremos a altura com relação ao referencial da altura média, denotado por $h_i(t) = h_i^f(t) - \bar{h}(t)$, assim, utilizando a definição da altura média, $h_i(t)$ representa uma variável aleatória de valor médio nulo, isto é:

$$\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h_i(t) = 0 \implies \sum_{i=1}^L h_i(t) = 0,$$

e como a unidade de tempo é correspondente a L deposições, de onde se sabe que $\Delta t = \frac{1}{L}$, reescrevendo e reorganizando a Eq. (3.2), a variação da rugosidade quadrática é dada por

$$\frac{w^2(t + \Delta t) - w^2(t)}{\Delta t} = -L \Delta \bar{h}^2 + \sum_{i=1}^L (\Delta h_i^2 + 2h_i \Delta h_i).$$

Definindo $\Delta w_q = w^2(t + \Delta t) - w^2(t)$, a expressão toma a forma:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = -L \Delta \bar{h}^2 + \sum_{i=1}^L (2h_i \Delta h_i + \Delta h_i^2). \quad (3.3)$$

A equação acima representa a fórmula geral para o incremento da rugosidade quadrática, independente da iteratividade do algoritmo. Para que obtenhamos a rugosidade é necessário que se conheçam os valores de Δh_i e $\Delta \bar{h}$.

3.2 Sistema de Corrosão e Variação da Rugosidade Quadrática

Deter-nos-emos agora no cálculo do aumento da rugosidade quadrática em cada deposição, obedecendo à equação (3.3), devemos encontrar, inicialmente, o valor de $\Delta \bar{h}$.

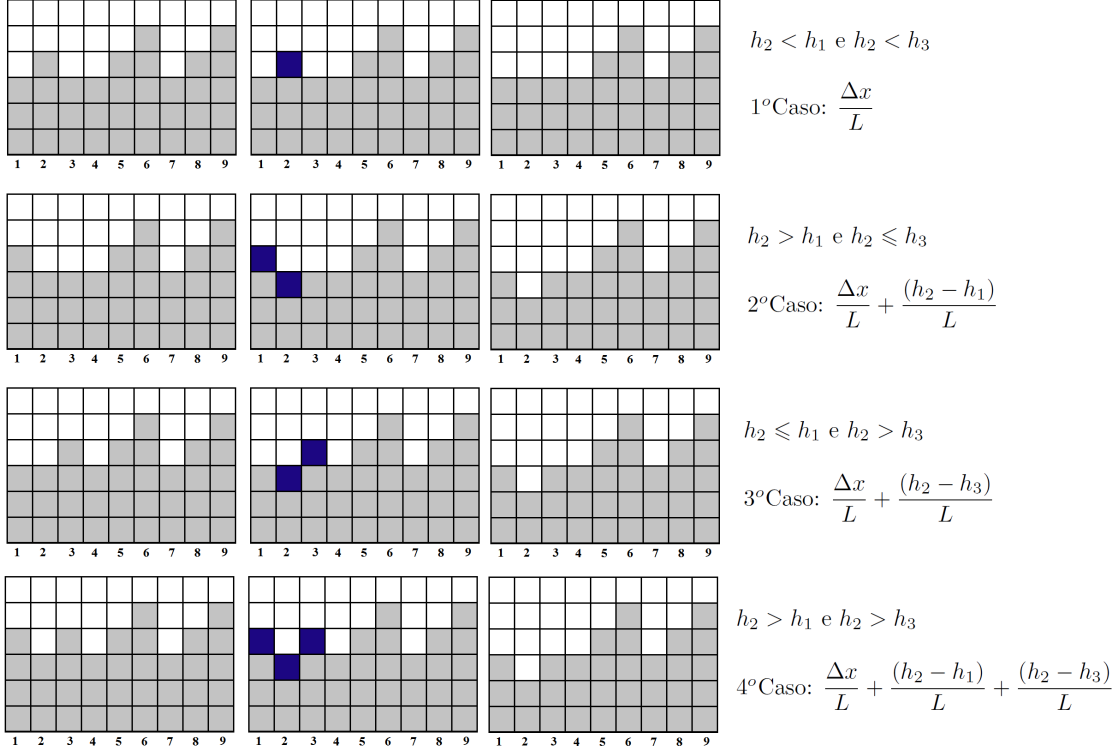


Figura 3.1: Tomando a queda de uma partícula no sítio $i = 2$, veja o processo de corrosão em cada situação.

Observando a figura acima, que corresponde ao processo de corrosão de um substrato, podemos concluir a partir da existência do algoritmo que este é munido de quatro possibilidades para a determinação de $\Delta \bar{h}$. Essas quatro possibilidades dependem da posição de queda da partícula no substrato.

Portanto, temos o valor do acréscimo da altura média $\Delta \bar{h}$, em cada uma das possibilidades, em particular a queda da partícula no sítio $i = 2$, e onde tomamos Δx como sendo o tamanho da altura da partícula depositada.

$$\Delta \bar{h} = \begin{cases} 1^\circ \text{Caso: } \Delta \bar{h} = \frac{\Delta x}{L} \\ 2^\circ \text{Caso: } \Delta \bar{h} = \frac{\Delta x}{L} + \frac{(h_2 - h_1)}{L} \\ 3^\circ \text{Caso: } \Delta \bar{h} = \frac{\Delta x}{L} + \frac{(h_2 - h_3)}{L} \\ 4^\circ \text{Caso: } \Delta \bar{h} = \frac{\Delta x}{L} + \frac{(h_2 - h_1)}{L} + \frac{(h_2 - h_3)}{L} \end{cases} . \quad (3.4)$$

Usando a Eq. (3.3) em conjunto com (3.4), podemos escrever a variação da rugosidade quadrática para cada caso, da seguinte forma:

$$\frac{\Delta w_{q(1)}(h_2)}{\Delta t} = 2\Delta x h_2 + \left(1 - \frac{1}{L}\right) \Delta x^2$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta w_{q(2)}(h_2)}{\Delta t} &= \left(1 - \frac{1}{L}\right) \Delta x^2 + \left(1 - \frac{1}{L}\right) (h_2 - h_1)^2 - 2\frac{\Delta x}{L} (h_2 - h_1) \\ &\quad + 2h_1 (h_2 - h_1) + 2\Delta x h_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta w_{q(3)}(h_2)}{\Delta t} &= \left(1 - \frac{1}{L}\right) \Delta x^2 + \left(1 - \frac{1}{L}\right) (h_2 - h_3)^2 - 2\frac{\Delta x}{L} (h_2 - h_3) \\ &\quad + 2h_3 (h_2 - h_3) + 2\Delta x h_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta w_{q(4)}(h_2)}{\Delta t} &= \left(1 - \frac{1}{L}\right) \Delta x^2 + \left(1 - \frac{1}{L}\right) (h_2 - h_1)^2 + \left(1 - \frac{1}{L}\right) (h_2 - h_3)^2 \\ &\quad - 2\frac{\Delta x}{L} (h_2 - h_1) - 2\frac{\Delta x}{L} (h_2 - h_3) - \frac{2}{L} (h_2 - h_1) (h_2 - h_3) \\ &\quad + 2h_1 (h_2 - h_1) + 2h_3 (h_2 - h_3) + 2\Delta x h_2 \end{aligned}$$

3.3 Forma Simples para a Variação da Rugosidade Quadrática

Para representarmos a forma simplificada para a variação da rugosidade quadrática, como descrito acima, precisaremos antes de uma troca de coeficientes, e estes serão definidos sob a forma:

$$\begin{aligned} A_{11} &= 2\Delta x & A_{12} &= \left(1 - \frac{1}{L}\right) \Delta x^2 & A_{21} &= \left(1 - \frac{1}{L}\right) \\ A_{22} &= 2 & A_{23} &= 2\frac{\Delta x}{L} & A_{31} &= \frac{2}{L} \end{aligned}$$

perceba, que os dois primeiros coeficientes, A_{11} e A_{12} representam os coeficientes da primeira equação, estes se repetem nas demais equações; os coeficientes A_{21} , A_{22} e A_{23} representam os coeficientes da segunda e terceira equação, que por questão de simetria, não se faz necessária a presença de outros coeficientes, estes também aparecem concomitantemente com os primeiros coeficientes da quarta equação, já o coeficiente A_{31} representa o coeficiente da quarta equação. Com a utilização desses coeficientes, as expressões para a variação da rugosidade quadrática, passam a ser dadas sob a forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta w_{q(1)}(h_2)}{\Delta t} = A_{11}h_2 + A_{12} \\ \frac{\Delta w_{q(2)}(h_2)}{\Delta t} = A_{11}h_2 + A_{12} + A_{21}(h_2 - h_1)^2 + \\ \quad + A_{22}h_1(h_2 - h_1) - A_{23}(h_2 - h_1) \\ \frac{\Delta w_{q(3)}(h_2)}{\Delta t} = A_{11}h_2 + A_{12} + A_{21}(h_2 - h_3)^2 + \\ \quad + A_{22}h_3(h_2 - h_3) - A_{23}(h_2 - h_3) \\ \frac{\Delta w_{q(4)}(h_2)}{\Delta t} = A_{11}h_2 + A_{12} + A_{21}(h_2 - h_1)^2 + A_{21}(h_2 - h_3)^2 + \\ \quad + A_{22}h_1(h_2 - h_1) + A_{22}h_3(h_2 - h_3) - A_{23}(h_2 - h_1) - \\ \quad - A_{23}(h_2 - h_3) - A_{31}(h_2 - h_1)(h_2 - h_3) \end{array} \right. \quad (3.5)$$

Cada configuração ocorre com uma probabilidade $p(w, h_1, h_2, h_3)$ que depende da rugosidade da interface, como também dos valores de h_1 , h_2 e h_3 , sendo assim, o valor total da rugosidade quadrática $\left(\frac{\Delta w_q}{\Delta t}\right)$ é dada por:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} \left(\begin{array}{l} \frac{\Delta w_{q1}}{\Delta t} \Theta(h_1 - h_2) \Theta(h_3 - h_2) + \\ + \frac{\Delta w_{q2}}{\Delta t} \Theta(h_2 - h_1) \Theta(h_3 - h_2) + \\ + \frac{\Delta w_{q3}}{\Delta t} \Theta(h_1 - h_2) \Theta(h_2 - h_3) + \\ + \frac{\Delta w_{q4}}{\Delta t} \Theta(h_2 - h_1) \Theta(h_2 - h_3) \end{array} \right) p(w, h_1, h_2, h_3) dh_1 dh_3 dh_2 \quad (3.6)$$

onde os elementos a_1 , a_2 , b_1 , b_2 , c_1 e c_2 são os limites que abrangem todos os valores das variáveis h_1 , h_2 e h_3 [6].

Agora, utilizando as Eq. (3.5) e (3.6) e retirando as Funções de Heaviside¹, temos:

¹**Função de Heaviside Step** (ou **Função Degrau**): é a função definida como se segue

$$H(x - y) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < y; \\ 1, & \text{se } x > y; \end{cases}$$

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = \left[\begin{array}{l} \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} (A_{11}h_2 + A_{12}) + \\ + \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} \left(\begin{array}{l} A_{21}(h_2 - h_1)^2 + \\ + A_{22}h_1(h_2 - h_1) - \\ - A_{23}(h_2 - h_1) \end{array} \right) + \\ + \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} \left(\begin{array}{l} A_{21}(h_2 - h_3)^2 + \\ + A_{22}h_3(h_2 - h_3) - \\ - A_{23}(h_2 - h_3) \end{array} \right) + \\ + \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} -A_{31}(h_2 - h_1)(h_2 - h_3) \end{array} \right] p(w, h_1, h_2, h_3) dh_1 dh_2 dh_3$$

perceba que, aqui, por questão de simetria entre os sítios h_1, h_2 e h_3 , o que acontece de um lado acontece do outro, nas integrais tripla $\int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2}$ e $\int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2}$. Então podemos escrever a expressão acima, agora sob a forma:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = \left[\begin{array}{l} \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} (A_{11}h_2 + A_{12}) + \\ + 2 \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} \left(\begin{array}{l} A_{21}(h_2 - h_1)^2 + \\ + A_{22}h_1(h_2 - h_1) - \\ - A_{23}(h_2 - h_1) \end{array} \right) + \\ + \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} (-A_{31}(h_2 - h_1)(h_2 - h_3)) \end{array} \right] p(w, h_1, h_2, h_3) dh_1 dh_2 dh_3. \quad (3.7)$$

O próximo passo é a busca da densidade de probabilidade. Após a determinação desta, iremos calcular os limites a_1, a_2, b_1, b_2, c_1 e c_2 .

3.4 Obtenção da Probabilidade $p(w, h_1, h_2, h_3)$

Para uma dada rugosidade, há um número finito de configurações, determinadas pelas equações:

$$\begin{cases} h_1^2 + h_2^2 + \dots + h_L^2 = Lw^2 \\ h_1 + h_2 + \dots + h_L = 0 \end{cases}, \quad (3.8)$$

logo os valores de h_i , com $i = 1, 2, 3, \dots, L$ devem satisfazer às equações do sistema acima.

Percebe-se que a primeira das equações refere-se à definição da **rugosidade**, enquanto que a segunda está associada à **altura com referencial na altura média**.

Por analogia, as equações acima formam a chamada:

$$\begin{aligned} & \text{hiperesfera de dimensão } n = L - 1 \text{ e} \\ & \text{raio } R = (Lw^2)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Denotaremos essa hiperesfera de (H_T) , pois todas as configurações para uma dada rugosidade w estão inseridas na superfície dessa hiperesfera, que corresponde a nossa *hiperárea superficial* ou *hipersuperfície*, denotada por (A_T) , e cuja dimensão é dada por $n = L - 2$.

Para um dado h_1, h_2 e h_3 formamos uma outra hiperesfera, cuja superfície possui dimensão $n = L - 5$. Esta hiperesfera é a figura obtida pela interseção da Eq. (3.8) com os planos de h_1, h_2 e h_3 . Sua área (A_p) é proporcional ao número de configurações que possui h_1, h_2 e h_3 , isso significa que a área (A_p) está conectada aos h_1, h_2 e h_3 . Logo para cada h_1, h_2, h_3 e w , a área (A_p) será diferente, significando um número diferente de configurações. Assim, a *densidade de probabilidade* (p) de ocorrer uma dada configuração h_1, h_2 e h_3 será descrita por:

$$p(w, h_1, h_2, h_3) = \frac{A_p}{A_T} dh_1 dh_2 dh_3. \quad (3.9)$$

Calculemos agora os valores da área total (A_T) e da área parcial (A_p) .

3.4.1 Cálculo da Área Total (A_T)

Vejamos, antes, duas importantes fórmulas utilizadas para o cálculo do volume de uma hiperesfera de dimensão n e de sua área²:

$$V_n(R) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} R^n = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{(\frac{n}{2})!} R^n \quad (3.10)$$

$$A_n(R) = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2})} R^{n-1} = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{(\frac{n}{2} - 1)!} R^{n-1}. \quad (3.11)$$

²Uma demonstração mais detalhada a respeito do referido tema, encontra-se no Apêndice - A.

O valor de n representa a dimensão da hiperesfera.

De acordo com a equação (3.8), a hiperesfera (H_T) possui dimensão $n = L - 1$ e raio $R_T = (Lw^2)^{\frac{1}{2}}$, logo a Área A_T , será denotada por:

$$A_n(R) = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\left(\frac{n}{2} - 1\right)!} R^{n-1} = \frac{2\pi^{\frac{L-1}{2}}}{\left(\frac{L-1}{2} - 1\right)!} \left((Lw^2)^{\frac{1}{2}}\right)^{(L-1)-1}$$

daí, temos:

$$A_T = \frac{2\pi^{\frac{L-1}{2}}}{\left(\frac{L-3}{2}\right)!} (Lw^2)^{\frac{L-2}{2}}. \quad (3.12)$$

3.4.2 Cálculo da área parcial (A_p)

Como se sabe a área (A_p) é proporcional ao número de configurações que possuem h_1, h_2 e h_3 e, por conseguinte essa área (A_p) é obtida de uma hiperesfera (H_p) que, por sua vez, foi formada pela interseção da hiperesfera (H_T) com os planos de h_1, h_2 e h_3 . Daí, podemos representar (H_p) pelo sistema de equações:

$$\begin{cases} w^2 = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h_i^2 \\ \sum_{i=1}^L h_i = 0 \\ h_1, h_2, h_3 \rightarrow \text{cte} \end{cases},$$

com algumas manipulações, temos:

$$\begin{cases} h_4^2 + h_5^2 + \dots + h_L^2 = Lw^2 - (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2) \\ h_4 + h_5 + \dots + h_L = -(h_1 + h_2 + h_3) \end{cases}. \quad (3.13)$$

Essa é então nossa hiperesfera (H_p), cuja dimensão $n = L - 4$. Agora, podemos calcular (A_p), usando (3.11):

$$A_n(R) = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\left(\frac{n}{2} - 1\right)!} R^{n-1} = \frac{2\pi^{\frac{L-4}{2}}}{\left(\frac{L-4}{2} - 1\right)!} R_p^{(L-4)-1}$$

daí, a área parcial da hiperesfera é dada por:

$$A_p = \frac{2\pi^{\frac{L-4}{2}}}{\left(\frac{L}{2} - 3\right)!} R_p^{L-5}. \quad (3.14)$$

3.4.3 Cálculo de R_p

Inicialmente, veja que o primeiro termo da primeira equação do sistema (3.13) ficará bem definido sob a forma:

$$\begin{aligned}
 h_4^2 + h_5^2 + \cdots + h_L^2 &= (h_4 + h_5 + \cdots + h_L)^2 - 2h_4h_5 - 2h_4h_6 - \cdots - 2h_4h_L \\
 &\quad - 2h_5h_6 - 2h_5h_7 - \cdots - 2h_5h_L - \cdots - 2h_{L-1}h_L \\
 h_4^2 + h_5^2 + \cdots + h_L^2 &= (h_4 + h_5 + \cdots + h_L)^2 - 2 \sum_{\substack{i,j \neq 1,2,3 \\ i \neq j}}^L h_i h_j \quad (3.15)
 \end{aligned}$$

Substituindo (3.15) em (3.13), o sistema passa a ter a forma,

$$\begin{cases} (h_4 + h_5 + \cdots + h_L)^2 - 2 \sum_{\substack{i,j \neq 1,2,3 \\ i \neq j}}^L h_i h_j = Lw^2 - (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2) \\ h_4 + h_5 + \cdots + h_L = -(h_1 + h_2 + h_3) \end{cases} .$$

Usando substituição de equação, isto é, substituindo a 2ª equação na 1ª equação do sistema acima, temos que:

$$-2 \sum_{\substack{i,j \neq 1,2,3 \\ i \neq j}}^L h_i h_j = Lw^2 - (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2) - (h_1 + h_2 + h_3)^2. \quad (3.16)$$

Objetivando extrair os termos cruzados da nossa equação, vamos fazer uso de tópicos, bastante conhecidos em álgebra linear, em particular, polinômios característicos, autovetores e autovalores. Maiores informações podem ser encontrados no livros Álgebra Linear, da coleção Schaum, de Seymour Lipschutz e Álgebra Linear, da Coleção Matemática Universitária, de Elon Lages Lima [12, 13].

Escrevendo a equação acima sob a forma matricial, obtemos:

$$[h_4 \ h_5 \ \cdots \ h_L] \begin{bmatrix} 0 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & 0 & \cdots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_4 \\ h_5 \\ \vdots \\ h_L \end{bmatrix} = Lw^2 - \left(\sum_{i=1}^3 h_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^3 h_i \right)^2. \quad (3.17)$$

Denotando a matriz $L \times L$, como matriz \mathbf{M} , vamos calcular os seus autovalores:

$$\mathbf{M}_{L \times L} = \begin{bmatrix} 0 - \lambda & -1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & 0 - \lambda & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & -1 & 0 - \lambda & \cdots & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \cdots & 0 - \lambda \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico é dado por

$$(\lambda + (L - 1)) \cdot (\lambda - 1)^{L-1} = 0 \implies \begin{cases} \lambda_1 = -(L - 1) \\ \lambda_2 = \lambda_3 = \cdots = \lambda_L = 1 \end{cases}.$$

Como a matriz \mathbf{M} está associada aos $h_{i's}$ com $i = 4, 5, \dots, L$, os autovalores são

$$\begin{cases} \lambda_4 = -(L - 4) \\ \lambda_5 = 1 \\ \lambda_6 = 1 \\ \vdots \\ \lambda_L = 1 \end{cases}$$

e os autovetores associados aos autovalores são:

$$\begin{cases} \lambda_4 = -(L - 4); \\ v_4 = (1, 1, 1, \dots, 1) \\ \lambda_5 = 1 = \lambda_6 = 1 = \cdots = \lambda_L = 1 \\ v_5 = (-1, 1, 0, 0, \dots, 0) + (-1, 0, 1, 0, \dots, 0) + \cdots + (-1, 0, 0, 0, \dots, 1) \end{cases}.$$

Para definir o autovetor unitário, associado a $\lambda_4 = -(L - 4)$, devemos inicialmente calcular a norma de $|v_4|$:

$$|v_4| = \sqrt{\underbrace{1^2 + 1^2 + \cdots + 1^2}_{(L-3) \text{ vezes}}} = \sqrt{L-3}$$

e o vetor unitário será dado por:

$$u_4 = \frac{v_4}{|v_4|} = \left(\frac{1}{\sqrt{L-3}}, \frac{1}{\sqrt{L-3}}, \frac{1}{\sqrt{L-3}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{L-3}} \right).$$

Com os autovalores acima descritos, é possível criar uma matriz de conversão para outros eixos h' , por meio de uma rotação nos eixos, com objetivo de eliminar

os termos cruzados da Eq. (3.16). Daí, reescreve-se a expressão (3.17) sob a forma:

$$\begin{aligned} [h'_4 \ h'_5 \ \cdots \ h'_L] \begin{bmatrix} -(L-4) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h'_4 \\ h'_5 \\ \vdots \\ h'_L \end{bmatrix} &= Lw^2 - \left(\sum_{i=1}^3 h_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^3 h_i \right)^2 \\ -(L-4)h_4'^2 + h_5'^2 + \cdots + h_L'^2 &= Lw^2 - \left(\sum_{i=1}^3 h_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^3 h_i \right)^2. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Agora, veja que

$$\begin{aligned} h'_4 &= (u_4) \begin{bmatrix} h_4 \\ h_5 \\ \vdots \\ h_L \end{bmatrix} = \left[\frac{1}{\sqrt{L-3}} \quad \frac{1}{\sqrt{L-3}} \quad \cdots \quad \frac{1}{\sqrt{L-3}} \right] \begin{bmatrix} h_4 \\ h_5 \\ \vdots \\ h_L \end{bmatrix}, \\ h'_4 &= \frac{1}{\sqrt{L-3}} (h_4 + h_5 + \cdots + h_L). \end{aligned}$$

Substituindo $(h_4 + h_5 + \cdots + h_L)$ por $-(h_1 + h_2 + h_3)$

$$\begin{aligned} h'_4 &= -\frac{1}{\sqrt{L-3}} (h_1 + h_2 + h_3), \\ h'_4 &= -\frac{1}{\sqrt{L-3}} \left(\sum_{i=1}^3 h_i \right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Agora, com uma nova substituição de (3.19) em (3.18), temos:

$$\begin{aligned} -(L-4) \left(\frac{1}{L-3} \left(\sum_{i=1}^3 h_i \right)^2 \right) + \left(\sum_{j=5}^L h_j'^2 \right) &= Lw^2 - \left(\sum_{i=1}^3 h_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^3 h_i \right)^2 \\ h_5'^2 + \cdots + h_L'^2 &= Lw^2 - \left(\sum_{i=1}^3 h_i^2 \right) - \frac{1}{L-3} \left(\sum_{i=1}^3 h_i \right)^2. \end{aligned}$$

Dado o substrato de tamanho L , quando $L \rightarrow \infty \implies \frac{1}{L-3} \rightarrow 0$, podemos concluir que o raio da hipersfera parcial (R_p) será dado por:

$$R_p = (Lw^2 - (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2))^{\frac{1}{2}}. \quad (3.20)$$

3.5 Densidade de Probabilidade

Agora, que já se sabe quem é R_p e, utilizando a equação da Área Parcial, A_p , tem-se que:

$$A_p = \frac{2\pi^{\frac{L-4}{2}}}{\left(\frac{L}{2} - 3\right)!} R_p^{L-5},$$

$$A_P = \frac{2\pi^{\frac{L-4}{2}}}{\left(\frac{L}{2} - 3\right)!} \left[(Lw^2 - (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2))^{\frac{1}{2}} \right]^{L-5}.$$

Por conseguinte, a probabilidade de ocorrência de uma configuração quando for dada h_1, h_2 e h_3 é:

$$p(w, h_1, h_2, h_3) = \frac{A_p}{A_T}.$$

Assim

$$p(w, h_1, h_2, h_3) = \frac{\frac{2\pi^{\frac{L-4}{2}}}{\left(\frac{L}{2}-3\right)!} \left[(Lw^2 - (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2))^{\frac{1}{2}} \right]^{L-5}}{\frac{2\pi^{\frac{L-1}{2}}}{\left(\frac{L-3}{2}\right)!} (Lw^2)^{\frac{L-2}{2}}}.$$

Com mais algumas manipulações algébricas na expressão acima, podemos concluir que a densidade de probabilidade (p) de ocorrência, para uma dada configuração h_1, h_2 e h_3 , será denotada por:

$$p(w, h_1, h_2, h_3) = \eta(L) \frac{(Lw^2 - (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2))^{\frac{L-5}{2}}}{(Lw^2)^{\frac{L-2}{2}}}, \quad (3.21)$$

onde $\eta(L) = \pi^{\frac{-3}{2}} \frac{\left(\frac{L-3}{2}\right)!}{\left(\frac{L-3}{2}\right)!}$.

No próximo capítulo, faremos uso das mudanças de coordenadas, objetivando não só uma simplificação para a metodologia adotada, como também para garantir a sua funcionalidade, para isso iremos começar fazendo uso da mudança de coordenadas para a equação acima descrita, Eq. (3.21).

Capítulo 4

Mudança para Coordenadas Esféricas

Uma mudança conveniente para a expressão do cálculo da probabilidade, bem como para a variação da rugosidade quadrática, é dada usando as coordenadas esféricas, nas quais a terna (h_1, h_2, h_3) passa a ser descrita em termos de coordenada radial mais os ângulos (ρ, α, β) , dessa forma, temos as seguintes equações de transformação:

$$\begin{cases} h_1 = R \sin \rho \sin \alpha \cos \beta \\ h_2 = R \sin \rho \sin \alpha \sin \beta \\ h_3 = R \sin \rho \cos \alpha \end{cases} \text{ onde } R = w\sqrt{L}. \quad (4.1)$$

Conforme podemos observar na figura abaixo:

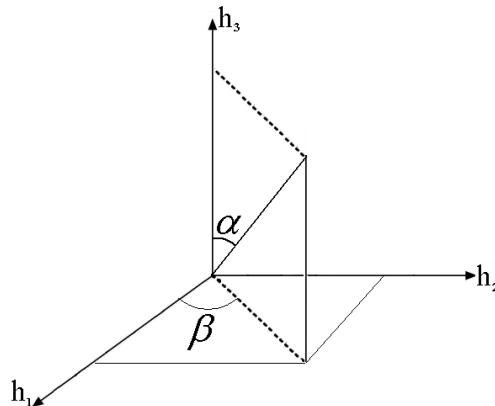


Figura 4.1: Esquema representativo da mudança de coordenadas cartesianas para coordenadas esféricas.

Os ângulos são definidos nos seguintes intervalos:

$$0 \leq \beta \leq 2\pi$$

$$0 \leq \alpha \leq \pi.$$

Veja ainda que, ao multiplicarmos o raio $R = w\sqrt{L}$ por $\sin \rho$, com ρ definido no intervalo $0 \leq \rho \leq \frac{\pi}{2}$, este nos assegura que, dada uma configuração, o raio nunca vai ultrapassar o valor máximo permitido para qualquer configuração dada, estando então limitado pelos primeiros vizinhos, isto é, h_1 e h_3 .

4.1 Mudança na Probabilidade

Usando a cálculo da probabilidade, Eq. (3.21), vista no capítulo anterior, e com uso da mudança de coordenadas, a expressão toma nova forma:

$$\begin{aligned} p(w, \rho, \alpha, \beta) &= \eta(L) \frac{(Lw^2 - Lw^2 \sin^2 \rho)^{\frac{L-5}{2}}}{(Lw^2)^{\frac{L-2}{2}}} \\ &= \eta(L) \frac{(Lw^2)^{\frac{L-5}{2}} (1 - \sin^2 \rho)^{\frac{L-5}{2}}}{(Lw^2)^{\frac{L-2}{2}}} \\ &= \eta(L) \frac{(Lw^2)^{\frac{L-5}{2}} (\cos^2 \rho)^{\frac{L-5}{2}}}{(Lw^2)^{\frac{L-2}{2}}} \\ p(w, \rho, \alpha, \beta) &= \eta(L) (Lw^2)^{-\frac{3}{2}} (\cos \rho)^{L-5} \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde $\eta(L) = \pi^{\frac{-3}{2}} \frac{(\frac{L}{2} - \frac{3}{2})!}{(\frac{L}{2} - 3)!}$.

4.1.1 Matriz Jacobiano

No estudo envolvendo mudança de coordenadas, trocamos as variáveis h_1, h_2 e h_3 (coordenadas cartesianas) pela coordenada radial, $\sin \rho$, mais os ângulos (ρ, α, β) , também deveremos fazer uso do determinante jacobiano, como veremos a seguir. Por esse motivo, fizemos o estudo a respeito do tema, Jacobiano, e por se tratar de um texto curto, optamos por anexar neste mesmo capítulo. Vale dizer, que o uso do jacobiano é útil no sentido de mostrar como a mudança de coordenadas se comporta geometricamente [14, 15].

Definição formal

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, ou seja, uma função que denominaremos " f ", com domínio e imagem no espaço euclidiano n e m dimensional, respectivamente. Tal função é definida por um vetor de m componentes, sendo cada componente uma função $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. As derivadas parciais dessas funções podem ser organizadas numa matriz $m \times n$, denominada **Matriz Jacobiana**. Assim, a Jacobiana é definida como:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix},$$

uma matriz de m linhas e n colunas. A primeira linha representa as derivadas parciais da função f_1 em relação a todos os x (de x_1 a x_n). A segunda linha representa as derivadas parciais de f_2 (também em relação a todos os x), e assim por diante, até a linha de número m , que representa as derivadas parciais de em relação a todos os x_i 's.

O **Jacobiano** é definido como sendo o determinante da Matriz Jacobiana. Esse determinante é de grande importância na mudança de variáveis em integrais múltiplas, bem como em outros campos da matemática.

4.1.2 Cálculo de $dh_1dh_2dh_3$

Ao usarmos as equações de transformações, Eq. (4.1), é fácil observar que as derivadas parciais de cada função h_1, h_2, h_3 existem, denotando a função $f(\rho, \alpha, \beta)$ da seguinte maneira:

$$f(\rho, \alpha, \beta) = (h_1(\rho, \alpha, \beta), h_2(\rho, \alpha, \beta), h_3(\rho, \alpha, \beta)).$$

Então, a matriz das derivadas parciais pode ser escrita sob a forma:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial \rho} & \frac{\partial h_1}{\partial \alpha} & \frac{\partial h_1}{\partial \beta} \\ \frac{\partial h_2}{\partial \rho} & \frac{\partial h_2}{\partial \alpha} & \frac{\partial h_2}{\partial \beta} \\ \frac{\partial h_3}{\partial \rho} & \frac{\partial h_3}{\partial \alpha} & \frac{\partial h_3}{\partial \beta} \end{bmatrix},$$

onde cada uma das derivadas serão descritas conforme representação abaixo:

$$\begin{cases} \frac{\partial h_1}{\partial \rho} = R \cos \rho \sin \alpha \cos \beta \\ \frac{\partial h_1}{\partial \alpha} = R \sin \rho \cos \alpha \cos \beta \\ \frac{\partial h_1}{\partial \beta} = -R \sin \rho \sin \alpha \sin \beta \end{cases}, \begin{cases} \frac{\partial h_2}{\partial \rho} = R \cos \rho \sin \alpha \sin \beta \\ \frac{\partial h_2}{\partial \alpha} = R \sin \rho \cos \alpha \sin \beta \\ \frac{\partial h_2}{\partial \beta} = R \sin \rho \sin \alpha \cos \beta \end{cases}, \begin{cases} \frac{\partial h_3}{\partial \rho} = R \cos \rho \cos \alpha \\ \frac{\partial h_3}{\partial \alpha} = -R \sin \rho \sin \alpha \\ \frac{\partial h_3}{\partial \beta} = 0 \end{cases}$$

efetuando as substituições na matriz, podemos agora calcular o seu determinante.

O jacobiano é então dado pelo determinante da matriz, como se segue:

$$\begin{aligned} J_{\rho\alpha\beta} &= \det \begin{bmatrix} R \cos \rho \sin \alpha \cos \beta & R \sin \rho \cos \alpha \cos \beta & -R \sin \rho \sin \alpha \sin \beta \\ R \cos \rho \sin \alpha \sin \beta & R \sin \rho \cos \alpha \sin \beta & R \sin \rho \sin \alpha \cos \beta \\ R \cos \rho \cos \alpha & -R \sin \rho \sin \alpha & 0 \end{bmatrix} \\ &= R^3 (\cos \rho \sin^2 \rho \sin \alpha) (\cos^2 \beta + \sin^2 \beta) (\sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha) \\ &= R^3 (\cos \rho \sin^2 \rho \sin \alpha). \end{aligned}$$

É sabido que $R = w\sqrt{L}$, então $R^3 = (Lw^2)^{\frac{3}{2}}$, daí tem-se:

$$dh_1 dh_2 dh_3 = (Lw^2)^{\frac{3}{2}} (\cos \rho \sin^2 \rho \sin \alpha) d\beta d\alpha d\rho. \quad (4.3)$$

Como a probabilidade, propriamente dita, é o produto da *densidade de probabilidade* com $(dh_1 dh_2 dh_3)$, usando as mudanças de coordenadas e as expressões (4.2) e (4.3) tem-se:

$$p(w, h_1, h_2, h_3) dh_1 dh_2 dh_3 = p(w, \rho, \alpha, \beta) d\beta d\alpha d\rho$$

$$p(w, h_1, h_2, h_3) dh_1 dh_2 dh_3 = \eta(L) (Lw^2)^{-\frac{3}{2}} (\cos \rho)^{L-5} (Lw^2)^{\frac{3}{2}} \sin^2 \rho \cos \rho \sin \alpha d\beta d\alpha d\rho$$

$$p(w, \rho, \alpha, \beta) d\beta d\alpha d\rho = \eta(L) (\cos \rho)^{L-4} \sin^2 \rho \sin \alpha d\beta d\alpha d\rho. \quad (4.4)$$

Usando (3.7), em conjunto com a expressão (4.4), temos:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = \left[\begin{array}{l} \int \int \int_{c_1 b_1 a_1}^{c_2 b_2 a_2} (A_{11}h_2 + A_{12}) + \\ + 2 \int \int \int_{c_1 b_1 a_1}^{c_2 b_2 h_2} \left(\begin{array}{l} A_{21} (h_2 - h_1)^2 + \\ + A_{22} h_1 (h_2 - h_1) - \\ - A_{23} (h_2 - h_1) \end{array} \right) + \\ + \int \int \int_{c_1 b_1 a_1}^{c_2 h_2 h_2} (-A_{31} (h_2 - h_1) (h_2 - h_3)) \end{array} \right] (\eta(L) (\cos \rho)^{L-4} \cdot \sin^2 \rho \cdot \sin \alpha \cdot d\beta d\alpha d\rho. \quad (4.5)$$

4.2 Estudo dos Termos da Equação $\frac{\Delta w_q}{\Delta t}$

Iniciaremos agora um estudo detalhado de cada um dos termos da equação que corresponde a variação total da rugosidade quadrática. Nesse estudo, além de procurarmos saber quais intervalos deveremos tomar os respectivos valores para cada termo, iremos fazer uso do programa Maple 8.0 [16], tendo em vista que para efetuarmos os cálculos aqui expostos levaríamos bastante tempo, e ainda correndo o risco de encontrar resultados errados, devido a grande complexidade de cada termo, vale salientar ainda, que nos cálculos por ele efetuado, o programa Maple 8.0, aparece à chamada Função Gama, porém por questão de simplicidade, transformei todas essas funções para fatorial, obedecendo às regras desenvolvidas no Apêndice - B deste trabalho, tendo em vista, que é muito mais simples e fácil de ser entendido, do que a própria Função Gama, embora, em certas partes, o próprio fatorial, também precise de ajustes para tornar-se legível.

1º Termo da Equação

Usaremos para denotar o primeiro termo da Eq. (4.5), $w_{q(1)}$, logo o primeiro termo da Eq. (4.5) em conjunto com seus coeficientes e as equações de transformação para h_1, h_2 e h_3 como descrita anteriormente, passa a ser descrita sob a forma:

$$w_{q(1)} = \eta(L) \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} ((\cos \rho)^{L-4} (\sin \alpha) (\sin^2 \rho) [2\Delta x w \sqrt{L} \sin \rho \sin \alpha \sin \beta + \left(1 - \frac{1}{L}\right) (\Delta x)^2]) d\beta d\alpha d\rho.$$

$$\text{Lembre-se: } \eta(L) = \pi^{\frac{-3}{2}} \frac{(\frac{L}{2} - \frac{3}{2})!}{(\frac{L}{2} - 3)!}$$

No primeiro termo da equação, a integral ocorre para todos os valores de h_1, h_2 e h_3 , de modo que a integral, nas novas coordenadas, será calculada dentro dos respectivos intervalos:

$$0 \leq \beta \leq 2\pi; 0 \leq \alpha \leq \pi; 0 \leq \rho \leq \frac{\pi}{2},$$

logo a equação acima, a ser integrada, deverá obedecer aos intervalos, daí temos:

$$w_{q(1)} = \eta(L) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left((\cos \rho)^{L-4} (\sin \alpha) (\sin^2 \rho) \left[\begin{array}{l} 2\Delta x w \sqrt{L} \sin \rho \sin \alpha \sin \beta + \\ + \left(1 - \frac{1}{L}\right) (\Delta x)^2 \end{array} \right] \right) d\beta d\alpha d\rho,$$

efetuando os cálculos acima, obtém-se para o primeiro termo da equação da variação total da rugosidade quadrática, o resultado:

$$w_{q(1)} = \frac{32\Delta x^2 (L-4)}{(L-3)(L-2)(L-1)L(L+1)^2} \left(\frac{(\frac{L+1}{2})!}{(\frac{L}{2}-2)!} \right)^2. \quad (4.6)$$

2º Termo da Equação

O segundo termo da equação será denotada por $w_{q(2)}$, usando o segundo termo da Eq. (4.5) com as mesmas condições com que foi tratado o primeiro termo e simplificando os seus termos, obtém-se:

$$\begin{aligned} w_{q(2)} = & 2\eta(L) \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{b_2} \int_{a_1}^{a_2} \left(\left(1 - \frac{1}{L}\right) w^2 L \sin^2 \rho \sin^2 \alpha (\sin \beta - \cos \beta)^2 + \right. \\ & \left. + 2w^2 L \sin^2 \rho \sin^2 \alpha \cos \beta (\sin \beta - \cos \beta) - \right. \\ & \left. - 2\frac{\Delta x}{L} \sqrt{L} w (\sin \rho) (\sin \alpha) (\sin \beta - \cos \beta) \right) ((\cos \rho)^{L-4} (\sin^2 \rho) (\sin \alpha)) d\beta d\alpha d\rho. \end{aligned}$$

No segundo termo, h_1 não passa de h_2 , isto é, $h_1 \leq h_2$. Logo a densidade de probabilidade, para as novas coordenadas, deve possuir valores correspondentes a todos os pontos em que $h_2 \geq h_1$, daí:

$$\begin{aligned} h_2 &\geq h_1 \\ R \sin \rho \sin \alpha \sin \beta &\geq R \sin \rho \sin \alpha \cos \beta \\ \sin \beta &\geq \cos \beta. \end{aligned}$$

Dessa forma, percebe-se que os novos valores para β estão no intervalo:

$$\frac{\pi}{4} \leq \beta \leq \frac{5\pi}{4}.$$

Portanto, os intervalos para o segundo termo serão dados por:

$$\frac{\pi}{4} \leq \beta \leq \frac{5\pi}{4}; 0 \leq \alpha \leq \pi; 0 \leq \rho \leq \frac{\pi}{2}$$

e agora a equação deverá ser integrada dentro dos seguintes intervalos:

$$\begin{aligned} w_{q(2)} = & 2\eta(L) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\pi} \int_{\frac{\pi}{4}}^{\frac{5\pi}{4}} \left[\left(1 - \frac{1}{L}\right) w^2 L \sin^2 \rho \sin^2 \alpha (\sin \beta - \cos \beta)^2 + \right. \\ & \left. + 2w^2 L \sin^2 \rho \sin^2 \alpha \cos \beta (\sin \beta - \cos \beta) - \right. \\ & \left. - 2\frac{\Delta x}{L} \sqrt{L} w (\sin \rho) (\sin \alpha) (\sin \beta - \cos \beta) \right] (\cos \rho)^{L-4} (\sin^2 \rho) (\sin \alpha) d\beta d\alpha d\rho. \end{aligned}$$

No que resulta:

$$w_{q(2)} = \frac{\begin{pmatrix} \Delta x \sqrt{2} L^3 \left(\frac{L}{2} - 2\right)! - 3\Delta x \sqrt{2} L^2 \left(\frac{L}{2} - 2\right)! + \\ -8w(L-4) \left(\frac{L-1}{2}\right)! \left[+2\Delta x \sqrt{2} L \left(\frac{L}{2} - 2\right)! + 2wL\sqrt{L}\sqrt{\pi} \left(\frac{L-1}{2}\right)! - \right. \\ \left. - 2w\sqrt{L}\sqrt{\pi} \left(\frac{L-1}{2}\right)! \right] \end{pmatrix}}{(L-3)(L-2)\sqrt{\pi}L\sqrt{L}(L-1)^3 \left[\left(\frac{L}{2} - 2\right)!\right]^2}.$$

Simplificando a expressão acima, encontramos:

$$w_{q(2)} = \frac{-w(L-4)(L-2)\sqrt{L} \left[\Delta x \sqrt{2} \left(\frac{L}{2}\right)! + w \left(\frac{L-1}{2}\right)! \sqrt{L}\sqrt{\pi} \right]}{\sqrt{\pi}(L-1)^2(L-3)} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left[\left(\frac{L}{2}\right)!\right]^2} \right). \quad (4.7)$$

3º Termo da Equação

Para terceiro termo da equação, seguindo o mesmo pensamento, denotaremos por $w_{q(3)}$, e usando o terceiro termo da Eq. (4.5) com condições análogas ao primeiro e segundo termo e simplificando os seus termos, obtém-se:

$$w_{q(3)} = -2w^2\eta(L) \int_{c_1}^{c_2} \int_{b_1}^{h_2} \int_{a_1}^{h_2} [\sin^2 \rho \sin \alpha (\cos \alpha - \sin \alpha \sin \beta) (\cos \beta - \sin \beta) (\cos \rho)^{L-4} \sin^2 \rho \sin \alpha] d\beta d\alpha d\rho.$$

As novas coordenadas do terceiro termo devem possuir valores correspondentes a todos os pontos em que $h_2 \geq h_1$ e $h_2 \geq h_3$. De $h_2 \geq h_1$, sabe-se que valores para β estão no intervalo:

$$\frac{\pi}{4} \leq \beta \leq \frac{5\pi}{4}.$$

Agora, para $h_2 \geq h_3$, tem-se que:

$$\begin{aligned} h_2 &\geq h_3 \\ \sin \alpha \sin \beta &\geq \cos \alpha \\ \sin \beta &\geq \frac{\cos \alpha}{\sin \alpha} = \cot \alpha, \end{aligned}$$

o intervalo que cumpre esta condição é, então, descrito por:

$$0 \geq \alpha \geq \cot^{-1}(\sin \beta).$$

Logo os intervalos, para o terceiro termo, serão dados por:

$$\frac{\pi}{4} \leq \beta \leq \frac{5\pi}{4}; 0 \geq \alpha \geq \text{arccot} \sin \beta; 0 \leq \rho \leq \frac{\pi}{2}.$$

E também de forma análoga aos casos anteriores, as integrais possuirão valores dentro desses respectivos intervalos:

$$w_{q(3)} = -2w^2\eta(L) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_{\frac{\pi}{4}}^{\frac{5\pi}{4}} \int_0^{\text{arccot} \sin \beta} [\sin^2 \rho \sin \alpha (\cos \alpha - \sin \alpha \sin \beta) (\cos \beta - \sin \beta) (\cos \rho)^{L-4} \sin^2 \rho \sin \alpha] d\beta d\alpha d\rho.$$

Calculando essa integral tripla, encontramos:

$$w_{q(3)} = -\frac{1}{12} \frac{w^2 L (L+2) (L-2) (L-4) (\pi - 3\sqrt{3}) \left(\frac{L+1}{2}\right)! \left(\frac{L-3}{2}\right)!}{\pi (L-1) (L+1) (L-3) \left(\frac{L}{2}\right)! \left(\frac{L+2}{2}\right)!}$$

que simplificada nos fornece:

$$w_{q(3)} = -\frac{w^2}{6} \left(\frac{L (L-2) (L-4) (3\sqrt{3} - \pi)}{\pi (L-1)^2 (L-3)} \right) \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2. \quad (4.8)$$

Forma Simplificada de w_q e w

Dessa forma, podemos efetuar os cálculos do *valor total da rugosidade quadrática* $\left(\frac{\Delta w_q}{\Delta t}\right)$, este é obtido através da adição dos valores de $w_{q(1)}$, $w_{q(2)}$ e $w_{q(3)}$.

Escrevendo o resultado da adição em função de w^2 e w , a expressão obtida e simplificada é denotada por:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = \begin{cases} -\frac{1}{6} \frac{(7\pi - 3\sqrt{3})(L-4)(L-2)L}{\pi(L-3)(L-1)^2} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2 w^2 + \\ -\frac{2\sqrt{2}\Delta x(L-4)(L-2)\sqrt{L}}{\sqrt{\pi}(L-3)(L-1)^2} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right) w + \\ + \frac{\Delta x^2(L-4)(L-2)L}{2(L-3)(L-1)} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2 \end{cases}.$$

Para facilitar, vamos fazer uma troca de coeficientes, conforme é visto abaixo:

$$c_1 = \frac{1}{6} \frac{(7\pi - 3\sqrt{3})(L-4)(L-2)L}{\pi(L-3)(L-1)^2} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2$$

$$c_2 = \frac{2\sqrt{2}\Delta x(L-4)(L-2)\sqrt{L}}{\sqrt{\pi}(L-3)(L-1)^2} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)$$

$$c_3 = \frac{\Delta x^2(L-4)(L-2)L}{2(L-3)(L-1)} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2,$$

daí, temos:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = -c_1 w^2 - c_2 w + c_3, \quad (4.9)$$

onde cada um dos coeficientes, como pode ser observado são positivos.

No capítulo seguinte, iniciaremos o estudo da equação diferencial acima descrita, quando tentaremos, a partir dessa encontrar os principais elementos do nosso estudo, que são: a rugosidade de saturação - w_{sat} , bem como os expoentes críticos (rugosidade - α , crescimento - β e dinâmico - z). Em seguida, vamos comparar com os resultados obtidos por simulação numérica computacional.

Capítulo 5

Resolução da Equação

Como visto no capítulo anterior, o *valor total da rugosidade quadrática*, é dado pela Eq. (4.9) e seus respectivos coeficientes, que são:

$$\begin{aligned}c_1 &= \frac{1}{6} \frac{(7\pi - 3\sqrt{3})(L-4)(L-2)L}{\pi(L-3)(L-1)^2} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2 \\c_2 &= \frac{2\sqrt{2}\Delta x(L-4)(L-2)\sqrt{L}}{\sqrt{\pi}(L-3)(L-1)^2} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right) \\c_3 &= \frac{\Delta x^2(L-4)(L-2)L}{2(L-3)(L-1)} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2\end{aligned} \quad (5.1)$$

Com essas novas informações, inicia-se agora um estudo da equação acima descrita. Para isso, é importante lembrar que a variação da rugosidade quadrática $\frac{\Delta w_q}{\Delta t}$ é dada no intervalo de uma deposição, considerando esse intervalo como sendo uma diferencial, temos:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = \frac{dw_q}{dt} = 2w \frac{dw}{dt}. \quad (5.2)$$

Substituindo a Eq. (4.9) na Eq. (5.2), encontramos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}-c_1 w^2 - c_2 w + c_3 &= 2w \frac{dw}{dt} \\-(c_1 w^2 + c_2 w - c_3) &= 2w \frac{dw}{dt} \\ \frac{2w dw}{w^2 + \frac{c_2}{c_1} w - \frac{c_3}{c_1}} &= -c_1 dt.\end{aligned} \quad (5.3)$$

Como a expressão $w^2 + \frac{c_2}{c_1}w - \frac{c_3}{c_1}$ trata-se de uma equação quadrática, esta pode ser fatorada e, portanto, reescrita sob a forma:

$$w^2 + \frac{c_2}{c_1}w - \frac{c_3}{c_1} = (w - w_1)(w - w_2),$$

onde w_1, w_2 corresponde as raízes da equação, e mais como $\begin{cases} w_1 + w_2 = -\frac{c_2}{c_1} \\ w_1 w_2 = -\frac{c_3}{c_1} \end{cases}$, isso implica que as raízes possuem sinais contrários, digamos $w_1 > 0$ e $w_2 < 0$.

Usando a Eq. (5.3), agora com a forma fatorada para a correspondente equação quadrática, tem-se:

$$\frac{2w dw}{(w - w_1)(w - w_2)} = -c_1 dt.$$

Utilizando o método das frações parciais, podemos escrever o primeiro termo da equação acima sob a forma:

$$\left(\frac{A}{w - w_1} + \frac{B}{w - w_2} \right) dw = -c_1 dt, \quad (5.4)$$

de onde encontramos os seguintes valores:

$$A = \frac{-2w_1}{w_2 - w_1}; B = \frac{2w_2}{w_2 - w_1}.$$

Substituindo os valores de A e B na Eq. (5.4), tem-se:

$$\left(\frac{\frac{-2w_1}{w_2 - w_1}}{w - w_1} + \frac{\frac{2w_2}{w_2 - w_1}}{w - w_2} \right) dw = -c_1 dt$$

que se trata de uma equação diferencial de variáveis separáveis. Integrando os dois termos da equação acima, quando a primeira integração acontecerá no intervalo $[0, w]$, e a segunda no intervalo $[0, t]$, obtemos a seguinte expressão, que é a equação da rugosidade:

$$\int_0^w \left(\frac{\frac{-2w_1}{w_2 - w_1}}{w - w_1} + \frac{\frac{2w_2}{w_2 - w_1}}{w - w_2} \right) dw = -c_1 \int_0^t dt$$

$$\ln \left(1 - \frac{w}{w_2} \right)^{\frac{2w_2}{w_2 - w_1}} + \ln \left(1 - \frac{w}{w_1} \right)^{\frac{2w_1}{w_1 - w_2}} = -c_1 t$$

$$t = -\frac{1}{c_1} \ln \left[\left(1 - \frac{w}{w_2}\right)^{\left(\frac{2w_2}{w_2-w_1}\right)} \left(1 - \frac{w}{w_1}\right)^{\left(\frac{2w_1}{w_1-w_2}\right)} \right] \quad (5.5)$$

A expressão acima é a equação da rugosidade a qual procurávamos. Toda a metodologia culminou nessa equação e, como podemos observar, ela possui o inconveniente de ser uma equação implícita, pois o tempo t , variável independente, está em função da rugosidade w , variável dependente. A equação acima nos garante que na rugosidade inicial, ou seja, $w = 0$, temos o tempo inicial $t = 0$.

5.1 Obtenção dos expoentes críticos

Podemos observar na Eq. (5.5) a presença dos elementos w_1, w_2 que, como já apresentados, são raízes da equação ($w^2 + \frac{c_2}{c_1}w - \frac{c_3}{c_1} = (w - w_1)(w - w_2)$) e, desse modo, essas raízes podem ser obtidas a partir dos coeficientes: c_1, c_2 e c_3 . De posse dessas informações, temos que:

$$w_1 = \frac{-c_2 + \sqrt{(c_2)^2 + 4(c_1)(c_3)}}{2(c_1)}, w_2 = \frac{-c_2 - \sqrt{(c_2)^2 + 4(c_1)(c_3)}}{2(c_1)}. \quad (5.6)$$

Os coeficientes c_1, c_2 e c_3 dependem de L e Δx (onde Δx corresponde a altura do sítio e a partir de agora tomaremos $\Delta x = 1$) de acordo com a Eq. (6.1). Dessa forma, w_1 e w_2 estão associados a L .

Com ajuda computacional, apresentaremos, a seguir, os valores de w_1 e w_2 , o procedimento para calcularmos os valores correspondentes a esses elementos, serão obtidos, usando o programa Maple 8.0 [16]. Para isso, usaremos o seguinte script:

```
L:=2^i: dx:=1:
array([seq([evalf(w1)],i=5..14)]);
```

No script do programa, tomamos $L = 2^i$, para a obtenção de $L = 32, 64, \dots, 16384$, dessa forma consta no script os valores de $i = 5, \dots, 14$; para os cálculos de w_1 e w_2 , sendo os coeficientes c_1, c_2 e c_3 , já conhecidos; dessa forma inicialmente, calculamos os valores de w_1 e depois com o mesmo script, trocando w_1 por w_2 , calculamos os seus respectivos valores. Os resultados obtido, é então Tabelado, conforme pode ser visto abaixo:

| L | w_1 | w_2 |
|-------|---------|----------|
| 32 | 3.5812 | -4.8575 |
| 64 | 5.3440 | -6.6154 |
| 128 | 7.8314 | -9.1002 |
| 256 | 11.3452 | -12.6129 |
| 512 | 16.3121 | -17.5792 |
| 1024 | 23.3348 | -24.6015 |
| 2048 | 33.2652 | -34.5317 |
| 4096 | 47.3081 | -48.5746 |
| 8192 | 67.1672 | -68.4337 |
| 16384 | 95.2520 | -96.5184 |

Tabela 5.1: Valores obtidos para várias variáveis com $L = 32$ à 16384.

5.1.1 Obtenção do expoente de rugosidade α

Pela Eq. (5.5) e, tendo em vista que, anteriormente, denotamos $w_1 > 0$ e $w_2 < 0$, temos que, a medida que w se aproxima de w_1 , o tempo tende a infinito, pois $\ln 0 = -\infty$. Isso implica que w_1 é a rugosidade de saturação, $w_1 = w_{sat}$. A partir dessa informação é possível obter o expoente de rugosidade α .

De posse dos dados, ver Tabela 5.1, é possível obter o expoente de rugosidade α , como se segue. Sabendo que $w_{sat} = kL^\alpha$, podemos apresentar os dados tabelados em um gráfico do tipo $\log - \log$, de modo que $\log(w_{sat}) \sim \alpha \log(L) + \log(k)$, e o expoente de rugosidade α será o coeficiente angular da curva que, nesse caso, possuirá valor igual a $\alpha = 0.509 \pm 0.002$.

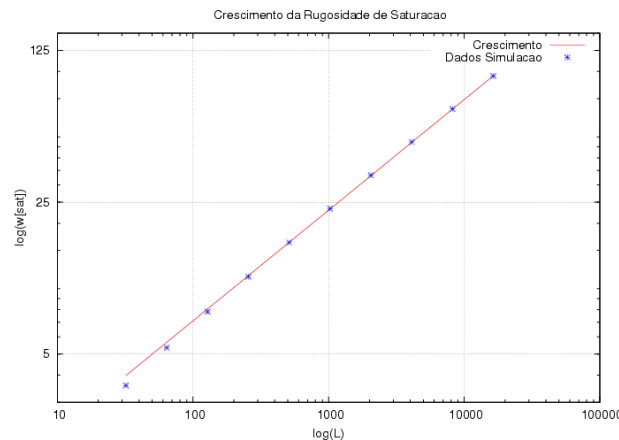


Figura 5.1: Gráfico tipo $\log - \log$ de $L \times w_{sat}$, com os dados tabelados, obtidos através da expressão $w_1 = w_{sat}$, simultaneamente com ajuste de curvas.

Ainda sobre o expoente de rugosidade α , temos que:

1) *Mello et al*, em seu artigo original, obteve $\alpha = 0.491 \pm 0.002$,

2) no Capítulo 2, foram feitas simulações do algoritmo de corrosão, onde expusemos a Tabela 2.1 com seus respectivos valores de saturação, daí com esses valores, encontramos o expoente $\alpha = 0.498 \pm 0.003$, e

3) a equação obtida por nossa metodologia, Eq. (5.5) forneceu $\alpha = 0.509 \pm 0.002$.

Apesar do valor obtido em nossa metodologia não se encontrar dentro da margem de erro apresentada pelas simulações, podemos considerar que os valores possuem boas aproximações e, ainda pode ser proposta a inclusão dentro da classe de universalidade de *KPZ*, pois essa classe possui $\alpha = \frac{1}{2}$.

5.1.2 Obtenção do expoente de crescimento β

Nesta subseção obteremos o expoente β . Já demonstramos que a rugosidade está associada a uma lei de potência com o tempo, isto é, $w \sim t^\beta$, quando $t \ll t_{sat}$. Assim, o expoente β é obtido com maior precisão quanto maior for o tamanho do substrato, no caso $L = 16384$, pois nesse caso mais dados de tempo $t \ll t_{sat}$ participarão do ajuste.

Para criarmos a tabela de rugosidade pelo tempo, de modo numérico, geraremos para cada valor de w , começando de $w = 0$, o seu respectivo valor de tempo t , e isso para os valores de L , variando de $L = 2^5 = 32$ até $L = 2^{13} = 8192$. Assim, para o caso correspondente a $L = 16384$, encontramos os seguintes valores para $w_1 = 95.2520$ e $w_2 = -95.5184$. Em seguida, variamos os valores correspondentes à rugosidade w de 0.10 até 95.26 (este último valor corresponde a um valor maior do que o valor de $w_1 = w_{sat}$) e, usando a Eq. (5.5), obtemos para cada rugosidade o valor correspondente ao tempo. Seguindo esse passo a passo, obtivemos o gráfico do crescimento da rugosidade versus tempo para $L = 16384$.

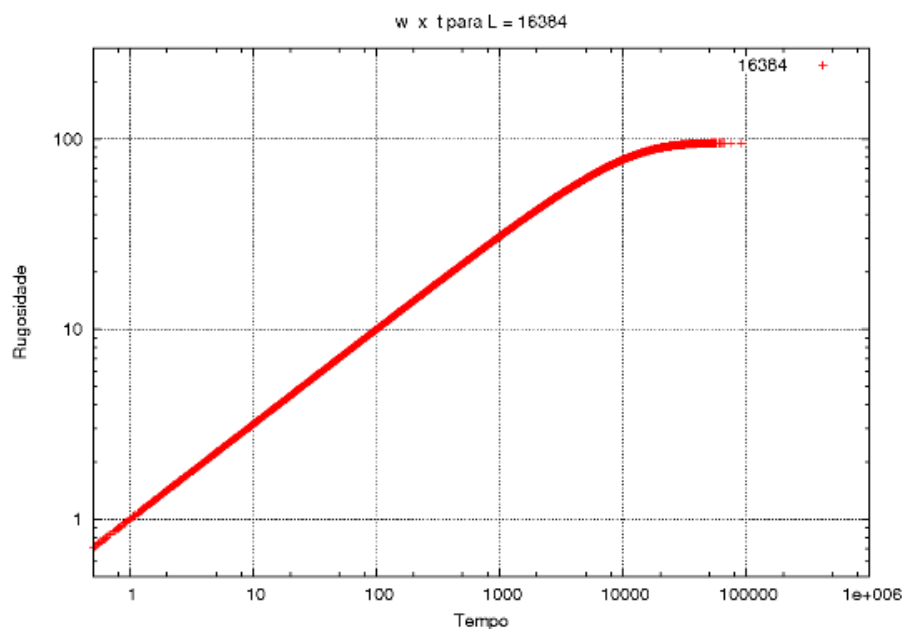


Figura 5.2: Representação gráfica dos dados obtidos, para o caso particular de $L = 16384$, usando a Eq. (5.5).

Utilizando os dados e o gráfico acima, pode-se obter o expoente β . Assim, para o caso $L = 16384$ realizamos o ajuste e obtivemos o expoente de crescimento $\beta = 0.337 \pm 0.001$. O valor encontrado por *Mello et al*, em 2001, em seu artigo original, foi de $\beta = 0.330 \pm 0.001$. Assim, para β percebe-se que os dados possuem boa aproximação até segunda casa decimal.

5.1.3 Obtenção do expoente dinâmico z

Utilizando o mesmo procedimento numérico, apresentado na subseção acima, para $L = 16384$, foi possível a construção da curva de crescimento para cada valor L , como podemos observar no gráfico abaixo.

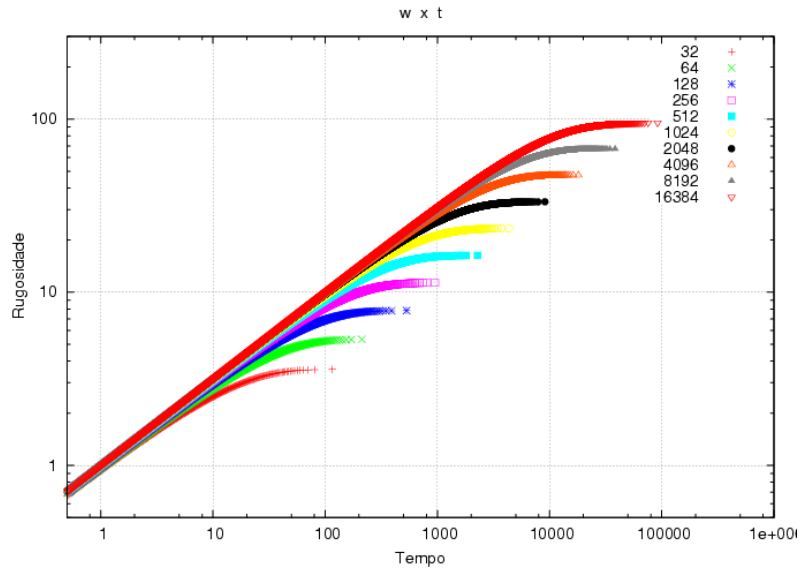


Figura 5.3: Representação gráfica, $w \times t$, para as curvas correspondentes a cada L .

Tal como apresentado no capítulo 1, Figura 1.8, se realizarmos, no gráfico tipo log – log, o ajuste de curva para $t \ll t_{sat}$, que será uma reta, e para $t \gg t_{sat}$, que será uma curva constante, tem-se que o encontro entre essas duas retas indica o tempo t_{sat} . Realizando os ajustes para os diversos substratos, obtemos os seguintes valores de t_{sat} para cada L :

| L | t_{sat} |
|-------|-------------|
| 32 | 1.31090 |
| 64 | 4.29788 |
| 128 | 13.35321 |
| 256 | 40.09693 |
| 512 | 117.73636 |
| 1024 | 340.54084 |
| 2048 | 974.89790 |
| 4096 | 2771.17207 |
| 8192 | 7838.29797 |
| 16384 | 22094.28411 |

Tabela 5.2: Valores obtidos para t_{sat} para as variáveis com $L = 32$ a 16384.

Como já apresentado $t_{sat} \sim L^z$, logo se plotarmos a tabela acima em um gráfico tipo log – log e realizarmos a linearização, como mostrado abaixo:

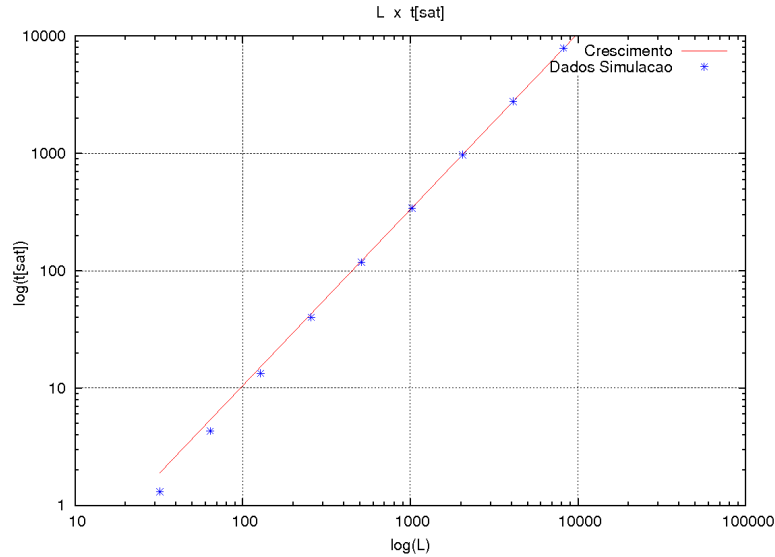


Figura 5.4: Gráfico log – log de $L \times t_{sat}$, com os valores extraídos da Tabela 5.2.

obtém-se, então, o valor de z que, com esta nova situação, tem-se $z = 1.502 \pm 0.002$. Porém, como não temos o expoente dinâmico z , no artigo original de *Mello et al*, de 2001, o valor correspondente a esse expoente dinâmico z , aqui exposto, foi obtido usando a equação de escala que relaciona os três expoentes, Eq. (1.8), que em nossos cálculos, foi de $z = 1.488 \pm 0.011$.

Apresentamos abaixo uma tabela com os valores obtidos nas seções anteriores; os valores obtidos por simulação¹ e os valores encontrados no trabalho dos pesquisadores Mello, Chaves e Oliveira [1]:

| Método \ Expoentes | rugosidade – α | saturação – β | dinâmico – z |
|--------------------|-----------------------|---------------------|-------------------|
| <i>Mello et al</i> | 0.491 ± 0.002 | 0.330 ± 0.001 | 1.488 ± 0.011 |
| <i>Simulação</i> | 0.498 ± 0.003 | 0.311 ± 0.001 | 1.601 ± 0.012 |
| <i>Analítica</i> | 0.509 ± 0.002 | 0.337 ± 0.001 | 1.502 ± 0.002 |

Tabela 5.3: Expoentes de rugosidade, crescimento e dinâmico.

A partir dos dados obtidos por nossa formulação analítica, isto é, baseada na Eq. (5.5), podemos concluir que o modelo de corrosão pertence à classe de universalidade de *KPZ*.

¹O expoente dinâmico z , aqui exposto, foi calculado pela Eq. (1.8).

5.2 Considerações da Metodologia

Podemos observar na Tabela 5.3, que a nossa formulação analítica forneceu os expoentes críticos com boa precisão ao ser comparado com os mesmos expoentes obtidos tanto pelas simulações, quanto pelo apresentado no trabalho de *Mello et al* [1]. E como exposto anteriormente, é através desses valores (expoentes de crescimento, rugosidade e dinâmico), que nos leva a considerar que o modelo de corrosão proposto pertença à classe de universalidade de *KPZ*.

5.2.1 Existência de configurações proibidas e probabilidade

Tomando como base a metodologia que criamos, pode ser visto no capítulo 3, que o cálculo das probabilidades é descrita considerando a razão entre a área da hipersfera parcial (A_p)² e a área da hipersfera total (A_T)³. Isto nos fornece a probabilidade para todas as ternas (h_1 , h_2 e h_3) de configuração. Porém, esta formulação possui algumas inconsistências, pois ela não inclui algumas características intrínsecas ao algoritmo como é o caso de alguns tipos de configurações, que aqui chamaremos de configurações proibidas. Veremos a seguir maiores detalhes a seu respeito.

Como sabemos este modelo de corrosão, é baseado em autômatos celulares, isto é, regido por regras (algoritmos) que proíbe a presença de determinados tipos de configurações. Observando a figura abaixo, temos um esquema representativo de dois tipos de configurações do modelo de corrosão que são impossíveis de acontecer, e as denominamos de configurações proibidas.

As duas configurações, representadas pela Fig. 5.5, não existem para o modelo de corrosão, pois ao se depositar uma partícula no sítio do centro, devido ao algoritmo de corrosão Eq. (2.1), os dois sítios também seriam corroídos de modo a crescerem até a altura anterior ao sítio do meio. Isto formaria uma configuração diferente do que é visualizada na Fig. 5.5. Não existe nenhuma sequência de deposições que conseguiriam formar aquelas trincas de alturas usando o modelo de corrosão. Daí

²Essa é proporcional ao número de configurações que possuem h_1, h_2 e h_3 , significando então que a área (A_p) está associada a cada um dos $h_{i's}$, $i = 1, 2, 3$ e w . Daí a área (A_p) será diferente, significando um número diferente de configurações.

³Essa é calculada, levando em consideração apenas a rugosidade w .

podemos afirmar que configurações como as apresentadas na Fig. (5.5), constituem uma limitação à nossa metodologia, pois as probabilidades calculadas não excluem essas configurações.

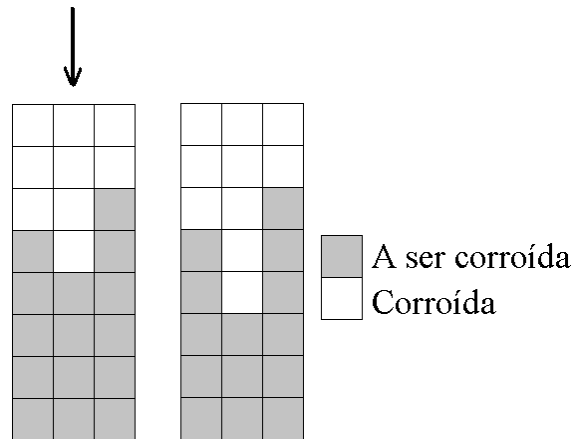


Figura 5.5: Esquema de duas configurações impossíveis no modelo MCO.

Os valores da rugosidade de saturação obtidas pelas simulações e pela fórmula analítica geram valores diferentes, acredito que uma das motivações, seja exatamente pela presença, no cálculo das probabilidades, das configurações proibidas. Porém, pelos resultados obtidos, os expoentes críticos não são alterados, o que a princípio nos leva a supor que as configurações proibidas não alteram os valores dos expoentes críticos. Uma hipótese é que o padrão do crescimento como um todo se mantenha, incluindo ou retirando as configurações proibidas. Porém, a metodologia deve ser empregada para outros modelos a fim de se verificar esta suposição.

Se conseguíssemos obter a probabilidade exata e na qual incluía estas características ao modelo, conseguiríamos obter não só os expoentes críticos, mas a rugosidade de saturação com um melhor grau de precisão.

Aqui estamos considerando a noção de **Equiprobabilidade**, ou seja, acontecimentos *igualmente possíveis*, isto é, quando as características associadas ao experimento sugerem N resultados possíveis, todos eles com a mesma chance de ocorrência. Partindo daí, a probabilidade de um dado evento que contenha n resultados será dado por [17]:

$$P = \frac{n}{N}$$

onde, essa probabilidade, deve ser um valor compreendido entre 0 e 1, observando

que, quando a probabilidade assumir valor nulo, significa que temos um evento impossível de acontecer, enquanto que no caso da probabilidade ser igual a 1, o evento em questão sempre acontecerá. Dessa forma, o cálculo das probabilidades das hiperesferas, como visto no capítulo 3, e no parágrafo anterior, sugere que estamos trabalhando com todo os tipos de configurações, isto é, as configurações proibidas e as não proibidas.

No entanto, nesse trabalho, como buscamos a partir de uma metodologia, uma formulação analítica, que descrevesse de forma prática, os expoentes críticos (rugosidade, α , crescimento, β e dinâmico, z), e quanto a isso, consideramos que os resultados foram atingidos com êxito, a metodologia aqui utilizada satisfaz a contento os nossos objetivos principais.

Outro ponto, que devemos considerar, é a aplicabilidade da metodologia no estudo de outros modelos de crescimento, isto é, podemos, a partir da metodologia aqui utilizada, procurar desenvolver novas formulações analíticas para outros modelos de crescimento, que tenham por finalidade, descrever os expoentes de crescimento, de rugosidade e dinâmico, como os que encontramos, para o caso do modelo de corrosão.

Capítulo 6

Resolução da Equação - Nova Perspectiva

Partindo do que já foi visto, o que iremos fazer agora é uma nova tentativa de resolução baseando-se nas características observadas nos coeficientes obtidos da Eq. (4.9), para isso, iremos usar como nova ferramenta de investigação, a fórmula de Stirling e a invariância galileana.

6.1 Análise dos Coeficientes

Como visto no Capítulo 4, o *valor total da rugosidade quadrática* é dado pela Eq. (4.9) e seus respectivos coeficientes, são:

$$\begin{aligned}c_1 &= \frac{1}{6} \frac{(7\pi - 3\sqrt{3})(L-4)(L-2)L}{\pi(L-3)(L-1)^2} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2 \\c_2 &= \frac{2\sqrt{2}\Delta x(L-4)(L-2)\sqrt{L}}{\sqrt{\pi}(L-3)(L-1)^2} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right) \\c_3 &= \frac{\Delta x^2(L-4)(L-2)L}{2(L-3)(L-1)} \left(\frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \right)^2\end{aligned} \quad (6.1)$$

Com essas novas informações, inicia-se agora um estudo da equação acima descrita, fazendo uso dos novos conceitos acima descrito para isso iniciamos com o conceito de fórmula de Stirling.

6.2 Fórmula de Stirling

No estudo dos fatoriais é percebido que quando n for muito grande, o esforço utilizado para calcular o seu valor torna-se bastante exaustivo, dessa forma é importante produzir aproximações de $n!$ que sejam mais simples de serem obtidas. Para isso usa-se a fórmula de Stirling definida como se segue [18]:

$$n! \sim \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}. \quad (6.2)$$

Na expressão 6.2, o símbolo (\sim) indica que as duas sequências tendem para infinito com a mesma rapidez, isto é:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}}{n!} = 1.$$

A fórmula de Stirling não diz que para n grande, $n!$ e $\sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$ são próximos, o que pode ser observado é que à medida que n aumenta a diferença entre esses números também aumenta, contudo o erro relativo cometido ao substituímos $n!$ por $\sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$ diminui a medida que n cresce. No quadro abaixo ilustramos alguns valores para $n!$, para $\sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$ e a porcentagem de erro [19].

| n | $n!$ | $\sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$ | Porcentagem de erro % |
|-----|------------------------|----------------------------|--------------------------|
| 1 | 1 | 0,922 | 7,8 |
| 2 | 2 | 1,91 | 4 |
| 5 | 120 | 118,01 | 1,7 |
| 10 | 3628800 | 3598695,619 | 0,8 |
| 50 | $3,04 \times 10^{64}$ | $3,03 \times 10^{64}$ | 0,2 |
| 100 | $9,33 \times 10^{157}$ | $9,32 \times 10^{157}$ | 0,1 |

6.3 Outra Resolução da Equação

Com relação aos coeficientes c_1 , c_2 e c_3 , percebe-se que todos eles são possuidores do termo $\frac{(\frac{L-1}{2})!}{(\frac{L}{2})!} = \lambda_L$, onde L é inteiro. Devido a isto, fazendo uso da fórmula de Stirling, obtém-se:

$$\begin{aligned}
\lambda_L &= \frac{\left(\frac{L-1}{2}\right)!}{\left(\frac{L}{2}\right)!} \sim \frac{\sqrt{2\pi \left(\frac{L-1}{2}\right)} \left(\frac{L-1}{2}\right)^{\left(\frac{L-1}{2}\right)} e^{-\left(\frac{L-1}{2}\right)}}{\sqrt{2\pi \left(\frac{L}{2}\right)} \left(\frac{L}{2}\right)^{\left(\frac{L}{2}\right)} e^{-\left(\frac{L}{2}\right)}} \\
&= \frac{\sqrt{2\pi \left(\frac{L-1}{2}\right)} \left(\frac{L-1}{2}\right)^{\left(\frac{L-1}{2}\right)} e^{-\left(\frac{L-1}{2}\right)}}{\sqrt{2\pi \left(\frac{L}{2}\right)} \left(\frac{L}{2}\right)^{\left(\frac{L}{2}\right)} e^{-\left(\frac{L}{2}\right)}} \\
&= 2^{\frac{1}{2}} L^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{L-1}{L}\right)^{\frac{L}{2}} e^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

veja que

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left(\frac{L-1}{L}\right)^{\frac{L}{2}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{L}\right)^{\frac{L}{2}} = e^{-\frac{1}{2}},$$

substituindo na última expressão o comportamento assintótico de λ_L passa a ser dado sob a forma:

$$\lambda_L \sim 2^{\frac{1}{2}} L^{-\frac{1}{2}} \text{ quando } L \rightarrow \infty, \quad (6.3)$$

em seguida substituindo a expressão 6.3 em cada um dos coeficientes c_1 , c_2 e c_3 , e fazendo um estudo assintótico para $L \rightarrow \infty$, em cada um desses coeficientes como segue, encontramos:

$$c_1 \sim \frac{1}{6} \frac{(7\pi - 3\sqrt{3})(L-4)(L-2)L}{\pi(L-3)(L-1)^2} \left(2^{\frac{1}{2}} L^{-\frac{1}{2}}\right)^2$$

veja que ao fazer o estudo assintótico dos termos dependentes de L , quando $L \rightarrow \infty$, tem-se:

$$\frac{(L-4)(L-2)L}{(L-3)(L-1)^2 L} \sim L^{-1}$$

logo para o coeficiente c_1 obtemos:

$$c_1 \sim \frac{(7\pi - 3\sqrt{3})}{3\pi} L^{-1}, \text{ quando } L \rightarrow \infty.$$

Fazendo uso dos argumentos utilizados para o cálculo de c_1 , calculemos agora c_2 , veja:

$$c_2 \sim \frac{2\sqrt{2}\Delta x (L-4)(L-2)\sqrt{L}}{\sqrt{\pi}(L-3)(L-1)^2} \left(2^{\frac{1}{2}} L^{-\frac{1}{2}}\right),$$

tomando $\Delta x = 1$, chegamos ao seguinte resultado:

$$c_2 \sim \frac{4}{\sqrt{\pi}} L^{-1}, \text{ quando } L \rightarrow \infty.$$

Pelo mesmo argumento, calculamos c_3 , de onde obtemos:

$$c_3 \sim \frac{\Delta x^2 (L-4)(L-2)L}{2(L-3)(L-1)} \left(2^{\frac{1}{2}} L^{-\frac{1}{2}}\right)^2$$

$$c_3 \sim 1, \text{ quando } L \rightarrow \infty.$$

Partindo então desses cálculos, e ainda fazendo o estudo assintótico para $L \rightarrow \infty$, chegamos aos seguintes resultados:

$$c_1 \sim \frac{(7\pi - 3\sqrt{3})}{3\pi} L^{-1} \sim L^{-1};$$

$$c_2 \sim \frac{4}{\sqrt{\pi}} L^{-1} \sim L^{-1};$$

$$c_3 \sim 1.$$

Para efeitos de cálculos, no Capítulo 4, temos:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = -c_1 w^2 - c_2 w + c_3,$$

agora substituindo o valor de cada coeficiente obtido através do estudo assintótico para $L \rightarrow \infty$, na equação da rugosidade, chegamos a seguinte expressão:

$$\frac{\Delta w_q}{\Delta t} \sim -L^{-1} w^2 - L^{-1} w + 1.$$

como a rugosidade satura quando $\frac{\Delta w_q}{\Delta t} = 0$, o valor de w_{sat} será dado através da equação:

$$L^{-1} w_{sat}^2 + L^{-1} w_{sat} - 1 \sim 0.$$

onde o discriminante será:

$$\Delta = (L^{-1})^2 - 4 \cdot (L^{-1}) \cdot 1 \sim L^{-2} + 4L^{-1} \sim 4L^{-1},$$

substituindo na resolução da equação quadrática, tem-se:

$$\begin{aligned} w &= \frac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2a} \sim \frac{-(L^{-1}) \pm \sqrt{4L^{-1}}}{2L^{-1}} \sim \frac{-L^{-1} \pm 2\sqrt{L^{-1}}}{2L^{-1}} \\ &\sim \frac{\pm 1}{\sqrt{L^{-1}}} \end{aligned}$$

$$w_1 \sim \frac{1}{\sqrt{L^{-1}}} \text{ e } w_2 \sim \frac{-1}{\sqrt{L^{-1}}}$$

como a rugosidade de saturação, $w_{sat} > 0$, chegamos ao seguinte resultado:

$$w_{sat} \sim \frac{1}{\sqrt{L^{-1}}} \sim L^{\frac{1}{2}}.$$

dessa forma, $w_1 \rightarrow w_{sat} \sim L^{\frac{1}{2}}$, e com isso é conseguido o primeiro expoente, que é denotado como expoente de rugosidade, $\alpha = \frac{1}{2}$.

Partiremos agora, para o cálculo dos demais expoentes, para isso utilizaremos um novo conceito, denominado de invariância galileana, esta propriedade foi verificada primeiramente para a equação de Burgers [20], onde a equação foi usada para descrever o comportamento de fluidos com agitação aleatória. Partindo desta equação, em conjunto com a equação de KPZ e ainda fazendo uso do formalismo dos grupos de renormalização dinâmico, desenvolvido por Foster, Nelson e Stephen [21], aonde após uma série de resoluções e transformações, chegou-se na seguinte expressão [22]:

$$z + \alpha = 2.$$

Agora, partindo do valor correspondente ao expoente de rugosidade, $\alpha = \frac{1}{2}$, e substituindo na expressão acima, encontramos o expoente dinâmico, z :

$$z + \frac{1}{2} = 2 \implies z = \frac{3}{2},$$

agora, com auxílio da relação de Family-Vicsek, onde expusemos que $z = \frac{\alpha}{\beta}$, é encontrado o expoente de crescimento, β :

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

$$\beta = \frac{1}{3}.$$

Dessa forma, isto é, com o uso da fórmula de Stirling e da invariância galileana, chegamos aos expoentes que queríamos: $\alpha = \frac{1}{2}$, $\beta = \frac{1}{3}$ e $z = \frac{3}{2}$, que mostra que os respectivos expoentes do modelo de corrosão, faz com que estes pertençam a classe de universalidade de KPZ.

Conclusão

Neste trabalho abordamos, inicialmente, conceitos básicos que estão associados à dinâmica de crescimento, como altura média e rugosidade. Descrevemos, também, de maneira simplificada alguns modelos de crescimento, como os de deposição aleatória (*DA*), deposição balística (*DB*) e deposição aleatória com relaxação superficial (*DARS*). Abordamos, de forma resumida, assuntos como leis de escala e expoentes críticos, sendo este último de grande relevância no sentido de que, a partir deles, classificam-se os modelos de crescimento dentro de determinadas classes de universalidade. Em seguida, introduzimos a equação de *KPZ* e o modelo de corrosão proposto por *Mello, Chaves e Oliveira*, o qual busca simular o processo corrosivo de uma superfície unidimensional de um cristal causado pela ação de um solvente.

O ponto principal esteve associado à formulação de uma metodologia para obtenção da função de rugosidade. Para a formulação dessa metodologia, escolhemos testá-la no modelo de corrosão proposto por *Mello et al*, em 2001. A metodologia apresenta várias etapas de desenvolvimento, como a alteração da rugosidade, após uma única deposição, ou ainda a obtenção da probabilidade de uma configuração, baseada na razão entre áreas de hiperesferas. A equação encontrada consegue expressar, de forma satisfatória, os expoentes de rugosidade, α , de crescimento, β , e dinâmico, z .

O método das hiperesferas, como visto, possui grande potencial, pois a sua formulação permite a inserção dentro de contextos, nos quais abordam-se outros algoritmos associados a modelos de crescimento. A forma como o método das hiperesferas foi abordado, isto é, levando em consideração a probabilidade entre as suas áreas, vimos que inclui uma série de configurações proibidas. Uma proposta de prosseguimento de estudos para o futuro seria reestruturar a probabilidade das configurações para que, ao invés de usarmos essas áreas em sua totalidade, considerarmos essas

áreas como fractais, pois assim talvez seria possível eliminar os elementos limitadores, no caso as configurações proibidas.

Outro aspecto para trabalhos futuros seria testar a metodologia em outros modelos de crescimento, a fim de verificarmos a sua validade. Um trabalho importante como perspectiva futura é ampliar a metodologia para descrever modelos com mais dimensões, como bidimensionais ou tridimensionais e ainda ampliá-la para descrever modelos com interações além dos primeiros vizinhos.

APÊNDICE - A

APÊNDICE - A

Volume das Hiperesferas $n - dimensional$

Nossa intenção é o cálculo do volume das hiperesferas, mas para isso usaremos algumas definições que serão apresentadas no decorrer do processo.

Uma **hiperesfera de dimensão $n = 1$** tem o seu "volume" representado por uma circunferência e, matematicamente, calculamos esse "volume" simplesmente calculando o comprimento de sua circunferência:

$$V_1 = 2\pi r.$$

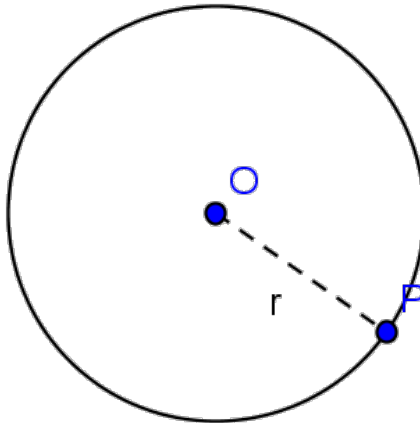


Figura 6.1: Perímetro de uma circunferência que, num primeiro momento, denotaremos como "volume".

O cálculo do "volume" da hiperesfera $1 - dimensional$, corresponde ao perímetro da circunferência.

Uma **hiperesfera de dimensão $n = 2$** , é conhecida como um círculo, e o cálculo

do seu "volume" é dado por:

$$V_2 = \pi r^2.$$

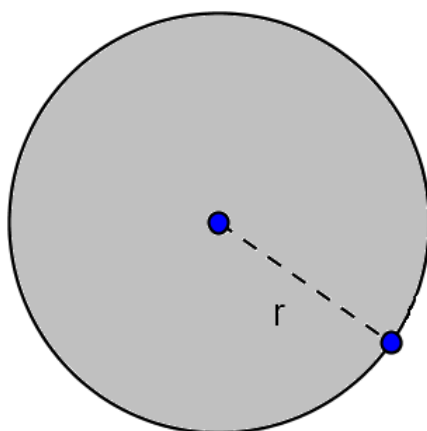


Figura 6.2: Área de um círculo, que também chamaremos de "Volume".

O cálculo do "volume" da hiperesfera 2 – *dimensional*, corresponde ao cálculo da área superficial do círculo.

Uma hiperesfera de dimensão $n = 3$, é conhecida como uma esfera, e tem seu volume no real significado da palavra dada por:

$$V_3 = \frac{4}{3}\pi r^3.$$

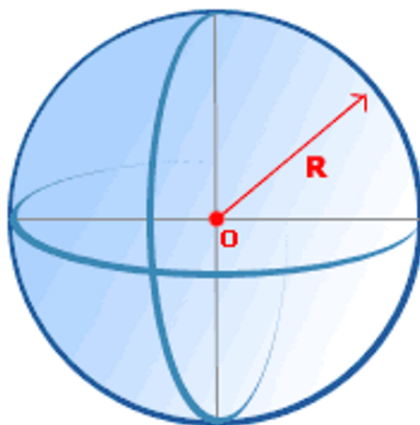


Figura 6.3: Volume como é conhecido da geometria espacial.

Percebe-se, claramente, nos exemplos acima citados, que o raio possui sempre o expoente associado à dimensão correspondente à que estamos trabalhando. Dessa forma para os casos, em que a dimensão dada for maior que 3, o apelo geométrico, deixa de existir, e é observada a presença de um termo (K_i) associado a π e ao raio com seu expoente. Então, pode-se ter uma visualização do processo, isto é:

$$\begin{aligned} \dim = 1 &\implies V_1 = 2\pi r^1; \\ \dim = 2 &\implies V_2 = \pi r^2; \\ \dim = 3 &\implies V_3 = \frac{4}{3}\pi r^3; \\ \dim = 4 &\implies V_4 \propto K_1\pi R^4; \\ \dim = 5 &\implies V_5 \propto K_2\pi R^5; \\ &\vdots \\ \dim = n &\implies V_n \propto K_n\pi R^n. \end{aligned}$$

A presença do elemento π possui uma importante característica; esse elemento é o responsável pelo curvamento do corpo em qualquer dimensão que se faz presente.

Definições Importantes

Inicialmente, faremos uso de algumas notações já conhecidas. A primeira delas se refere a somatório:

$$\sum_{i=1}^n x_i = x_1 + x_2 + \cdots + x_n,$$

e a segunda a produtório, definido por:

$$\prod_{i=1}^n x_i = x_1 \times x_2 \times \cdots \times x_n.$$

Definiremos agora, a função Degrau Unitário de Heaviside.

Função de Heaviside (ou **degrau unitário de Heaviside**): é a função $H(x)$ definida sob a forma:

$$H(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0; \\ 1, & \text{se } x > 0; \end{cases} .$$

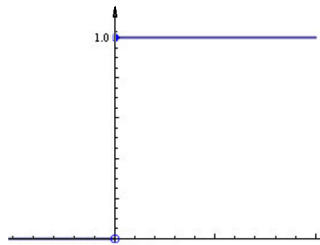


Figura 6.4: Representação gráfica da Função $H(x)$.

Generalização da **Função de Heaviside**: é a função $H(x - y) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < y; \\ 1, & \text{se } x > y; \end{cases}$.

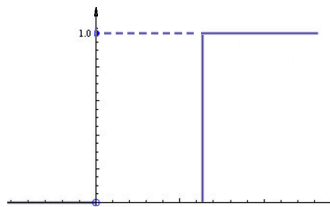


Figura 6.5: Representação gráfica da Função $H(x - y)$.

Ao calcularmos a derivada da função de Heaviside, encontraremos uma nova função, denominada **Função Delta de Dirac**:

$$\frac{d}{dx}H(x) = \delta(x) = \begin{cases} 0, & \forall x \in \mathbb{R}^*; \\ \infty, & \text{quando } x = 0; \end{cases}$$

Cálculo do volume da hiperesfera

Começaremos, agora, com o cálculo do volume da hiperesfera n -dimensional, porém, partindo de estudos iniciais, sabe-se que, no caso de 2 -dimensões, a equação do círculo é dada por

$$x^2 + y^2 = R^2.$$

Enquanto que, para uma esfera propriamente dita, isto é, no caso de 3 -dimensões, tem-se:

$$x^2 + y^2 + z^2 = R^2.$$

Dessa forma podemos generalizar para n -dimensão, denotando a equação sob a forma:

$$x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2 = R^2.$$

Fazendo uso das integrais, tem-se que, no caso de 2 -*dimensões*, o volume pode ser calculado por uma integral dupla, quando tivermos 3 -*dimensões*, o volume será definido por uma integral tripla e, generalizando para o caso n -*dimensional*, teremos uma n -*upla* de integrais, conforme pode ser visto abaixo. E mais, acrescentamos um vínculo para que o objetivo principal seja realmente o cálculo do volume de uma hipersfera. Esse vínculo é dado exatamente pela função de **Heaviside**, porém tomando como argumento:

$$R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2$$

daí,

$$V_n(R) = \int_{-\infty}^{\infty} \times \int_{-\infty}^{\infty} \times \cdots \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^n H \left(R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2 \right) dx_i. \quad \text{A.1}$$

Veja que a função dada, é a função de Heaviside $H(x)$, que no caso:

$$H \left(R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2 \right) = 1 \implies R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2 > 0 \implies \sum_{j=1}^n x_j^2 < R^2,$$

pois se fosse

$$H \left(R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2 \right) = 0 \implies R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2 = 0 \implies \sum_{j=1}^n x_j^2 = R^2,$$

e isso excluiria todos os pontos da integral.

Veja, agora, que reescrevemos a Eq. (A.1), com as seguintes alterações; o volume será calculado para uma hipersfera de $R = 1$, multiplicado por R^n , pois o volume será o nosso termo proporcional sem a dependência do raio. Como se percebe, nos exemplos acima citados, estaríamos agindo como se houvesse uma separação entre o termo proporcional e o raio que possui expoente associado à dimensão.

$$V_n(R) = \int_{-\infty}^{\infty} \times \int_{-\infty}^{\infty} \times \cdots \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^n dx_i H \left(R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2 \right) = V_{n(1)} R^n. \quad \text{A.2}$$

Como calcular as integrais

Inicialmente, devemos derivar a Eq. (A.2)

$$\frac{d}{dR} V_n(R) = \int_{-\infty}^{\infty} \times \cdots \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^n dx_i 2R \delta \left(R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2 \right) = V_{n(1)} n R^{n-1}$$

agora, multiplicamos por e^{-R^2} e $\int_0^{\infty} dR$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \times \cdots \times \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \prod_{i=1}^n dx_i 2dR e^{-R^2} R \delta \left(R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2 \right) = n V_{n(1)} \int_0^{\infty} R^{n-1} e^{-R^2} dR \quad \text{A.3}$$

usando mudança de variáveis, como definido abaixo:

$$R^2 = t \implies R = t^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2} t^{-\frac{1}{2}} \implies 2dR = t^{-\frac{1}{2}} dt,$$

substituindo os valores referentes à mudança de variáveis na última parte da Eq. (A.3), tem-se:

$$\begin{aligned} n V_{n(1)} \int_0^{\infty} R^{n-1} e^{-R^2} dR &= n V_{n(1)} \int_0^{\infty} \left(t^{\frac{1}{2}} \right)^{n-1} e^{-t} \frac{1}{2} t^{-\frac{1}{2}} dt \\ &= n V_{n(1)} \frac{1}{2} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{\frac{n-1}{2}} t^{-\frac{1}{2}} dt \\ &= n V_{n(1)} \frac{1}{2} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{\frac{n-2}{2}} dt \\ &= n V_{n(1)} \frac{1}{2} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{\frac{n}{2}-1} dt \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dR} V_n(R) = n V_{n(1)} \frac{1}{2} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{\frac{n}{2}-1} dt. \quad \text{A.4}$$

Função Gama - Γ

Utilizaremos, agora, uma outra função, conhecida como função gama¹, representada por Γ , onde:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt.$$

Para todo $n \in \mathbb{N}$, temos as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned}\Gamma(1) &= 1; \\ \Gamma(n+1) &= n!; \\ \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) &= \frac{(2n)!}{4^n n!} \sqrt{\pi}.\end{aligned}$$

Daí, substituindo o termo $\int_0^{\infty} e^{-t} t^{\frac{n}{2}-1} dt$ pela função $\Gamma\left(\frac{n}{2}\right) = \int_0^{\infty} t^{\frac{n}{2}-1} e^{-t} dt$, da Eq. (A.4), teremos:

$$nV_{n(1)} \frac{1}{2} \int_0^{\infty} t^{\frac{n}{2}-1} e^{-t} dt = \frac{n}{2} V_{n(1)} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right).$$

Veja que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \times \int_{-\infty}^{\infty} \times \cdots \times \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \prod_{i=1}^n dx_i 2RdRe^{-R^2} \delta\left(R^2 - \sum_{j=1}^n x_j^2\right) = \frac{1}{2} nV_{n(1)} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right).$$

Agora, vamos fazer uma nova mudança de variáveis: $\begin{cases} y = R^2 \\ dy = 2RdR \end{cases}$ e, substituindo na primeira parte da equação acima, vamos encontrar:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \times \int_{-\infty}^{\infty} \times \cdots \times \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \prod_{i=1}^n dx_i dy e^{-y} \delta\left(y - \sum_{j=1}^n x_j^2\right) = \frac{1}{2} nV_{n(1)} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right). \quad \text{A.5}$$

Função Delta de Dirac

Com o objetivo de facilitar várias operações nos estudos de Física Matemática. Dirac propôs a introdução de uma função, denominada função delta $\delta(x)$, que representa uma função infinitamente concentrada e dada simbolicamente por:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x = 0 \\ 0, & \text{se } x \neq 0 \end{cases},$$

¹Um estudo mais detalhado será visto logo mais.

mas de tal forma que a integral de $\delta(x)$ seja a identidade²:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Para o desenvolvimento do nosso trabalho, precisamos ainda dos seguintes fatos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0).$$

Portanto, partindo da definição $\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x = x_0 \\ 0, & \text{se } x \neq x_0 \end{cases}$, e como sabemos que $y - \sum_{j=1}^n x_j^2 \neq 0$, temos:

$$\int_0^{\infty} e^{-y} \delta\left(y - \sum_{j=1}^n x_j^2\right) dy = e^{-\sum_{j=1}^n x_j^2},$$

substituindo na Eq. (A.5), temos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \times \int_{-\infty}^{\infty} \times \cdots \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^n dx_i e^{-\sum_{j=1}^n x_j^2} = \frac{n}{2} V_{n(1)} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right).$$

Lembre-se de que:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 e^{-x_1^2} \times \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 e^{-x_2^2} \times \cdots \times \int_{-\infty}^{\infty} dx_n e^{-x_n^2} &= \frac{n}{2} V_{n(1)} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right) \\ \pi^{\frac{1}{2}} \times \pi^{\frac{1}{2}} \times \cdots \times \pi^{\frac{1}{2}} &= \frac{n}{2} V_{n(1)} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right) \\ \left(\pi^{\frac{1}{2}}\right)^n &= \frac{n}{2} V_{n(1)} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right). \end{aligned}$$

Dessa forma, conseguimos calcular o volume de uma hipersfera de $R = 1$.

$$V_n(1) = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{n\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}.$$

E, por conseguinte, o volume de uma hipersfera n -dimensional será dado, então, por:

²Não vamos nos deter em informações mais expressivas a respeito do assunto, porém quem tiver maior interesse, poderá encontrar em (Física Matemática - Butkov).

$$V_n(R) = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{n\Gamma(\frac{n}{2})}R^n. \quad \text{A.6}$$

Usando as propriedades da Função Gama $\begin{cases} \Gamma(n+1) = n\Gamma(n) \\ \Gamma(\frac{n}{2}+1) = \frac{n}{2}\Gamma(\frac{n}{2}) \end{cases}$, temos que:

$$\frac{n}{2}\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)V_n(R) = \pi^{\frac{n}{2}}R^n$$

$$\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)V_n(R) = \pi^{\frac{n}{2}}R^n$$

$$V_n(R) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)}R^n.$$

Área da Hiperesfera

Para calcularmos a área superficial de uma hiperesfera, basta calcularmos a derivada do volume em relação ao raio. Para efeitos de cálculos, vamos tomar o volume da hiperesfera, a Eq. (A.6), logo:

$$\begin{aligned} A_n(R) &= \frac{d}{dR}V_n(R) \\ &= \frac{d}{dR}\left(\frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{n\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}R^n\right). \end{aligned}$$

Finalmente, a área superficial de uma hiperesfera é dada por:

$$A_n(R) = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}R^{n-1}.$$

Concluindo, dessa forma, a primeira parte do Apêndice.

APÊNDICE - B

APÊNDICE - B

Estudo da Função Gama - Γ

Neste apêndice, será creditado também o estudo da **Função Gama**.

Embora o estudo dessa função não seja muito importante em problemas físicos, ela aparece numa série de problemas que envolvem cálculo de probabilidades em mecânica estatística, ou em funções de onda, porém a aplicação mais direta está associada à descrição das funções de Bessel e Legendre.

Basicamente falando, a Função Gama estende a idéia do fatorial a partir da faixa de inteiros não-negativos, sendo assim, destacamos duas formas para definir essa função.

Duas Definições da Função Gama - Γ

Definição - 1.

A **Função Gama**, denotada por $\Gamma(x)$, estende a idéia do fatorial a partir da faixa de inteiros não-negativos, onde:

$$\Gamma(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1.2.3 \dots n}{x(x+1)(x+2) \dots (x+n)} n^x. \quad \text{B.1}$$

Essa definição de $\Gamma(x)$ é útil no desenvolvimento da forma de produto infinito de Weierstrass de $\Gamma(x)$. Veja que, substituindo x por $x + 1$, temos:

$$\Gamma(x + 1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1.2.3 \dots n}{(x + 1)(x + 2) \dots (x + 1 + n)} n^{x+1}$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1.2.3. \dots .n.n^x n^1 .x}{x(x+1)(x+2) \dots (x+n+1)} \right) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1.2.3. \dots .n}{x(x+1)(x+2) \dots (x+n)} n^x \cdot \frac{x.n^1}{(x+n+1)} \right) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1.2.3. \dots .n}{x(x+1)(x+2) \dots (x+n)} n^x \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x.n}{(x+n+1)} \\
&= \Gamma(x) \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x.n}{x+n+1} = \Gamma(x) \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} x = x\Gamma(x).
\end{aligned}$$

Daí, conclui-se facilmente que:

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x). \quad \text{B.2}$$

Definição - 2.

Uma outra definição usual para a **Função Gama** é denotada como a **integral de Euler**, conforme se observa na expressão abaixo:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt. \quad \text{B.3}$$

Essa integral imprópria converge para todo $x > 0$, e converge uniformemente no intervalo $\delta \leq 0 \leq K$ para quaisquer $\delta > 0$ e $K < \infty$; dessa forma, tem-se que a função $\Gamma(x)$ é contínua para todo $x > 0$.

Usando a nova definição, podemos demonstrar, também, que:

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$$

para isso basta fazer uso de integração por partes, veja:

$$\Gamma(x+1) = \int_0^{\infty} t^x e^{-t} dt$$

façamos: $\begin{cases} u = t^x \implies du = xt^{x-1} dt \\ dv = e^{-t} dt \implies \int dv = \int e^{-t} dt \implies v = -e^{-t} \end{cases}$, agora substituindo na expressão acima, temos:

$$\int_0^{\infty} t^x e^{-t} dt = t^x (-e^{-t}) - \int -e^{-t} .x.t^{x-1} dt$$

$$\begin{aligned}
&= -t^x \cdot e^{-t} \Big|_{t=0}^{t=\infty} + x \int t^{x-1} e^{-t} dt \\
&= x \int t^{x-1} e^{-t} dt \\
\Gamma(x+1) &= \int_0^{\infty} t^x e^{-t} dt = x \int t^{x-1} e^{-t} dt = x\Gamma(x) \\
\Gamma(x+1) &= x\Gamma(x).
\end{aligned}$$

Propriedades da Função Gama - Γ

Abordaremos, agora, propriedades que são essenciais aos estudos do referido tópico. Essas propriedades podem ser demonstradas tanto pela primeira definição, como pela segunda. Enfatizando que $\Gamma(x)$ não é definida para $x = 0, -1, -2, -3, \dots$. Temos então as seguintes propriedades:

P1) $\Gamma(1) = 1$

Demonstração: usando a primeira definição.

$$\begin{aligned}
\Gamma(1) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1.2.3 \dots n}{1.2.3 \dots n. (n+1)} n \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n}{1+n} = 1.
\end{aligned}$$

P2) $\Gamma(n+1) = n!$

Demonstração: para esta demonstração será usada a primeira definição em conjunto com a Eq. (B.2) e uso de indução finita.

$$\begin{aligned}
\Gamma(2) &= \Gamma(1+1) = 1\Gamma(1) = 1 = 1! \\
\Gamma(3) &= \Gamma(2+1) = 2\Gamma(2) = 2.1 = 2! \\
\Gamma(4) &= \Gamma(3+1) = 3\Gamma(3) = 3.2.1 = 3! \\
\Gamma(5) &= \Gamma(4+1) = 4\Gamma(4) = 4.3.2.1 = 4! \\
&\vdots \\
\Gamma(n+1) &= n\Gamma(n) = n.(n-1).(n-2) \dots 3.2.1 = n!.
\end{aligned}$$

Podemos concluir, que:

$$\Gamma(n+1) = n!$$

P3) $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$

Demonstração: usaremos agora a segunda definição, veja:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^{\infty} t^{\frac{1}{2}-1} e^{-t} dt = \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-t} dt$$

tomando $\begin{cases} t = v^2 \\ \frac{dt}{dv} = 2v \implies dt = 2v dv \end{cases}$, assim a integral toma a forma

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-t} dt &= \int_0^{\infty} (v^2)^{-\frac{1}{2}} e^{-v^2} 2v dv \\ &= 2 \int_0^{\infty} v^{-1} e^{-v^2} v dv \\ &= 2 \int_0^{\infty} e^{-v^2} dv \end{aligned}$$

como $\int_0^{\infty} e^{-v^2} dv = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ (A demonstração dessa integral encontra-se no livro Cálculo Avançado, Coleção Schaum), temos finalmente que:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = 2 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}.$$

P4) $\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{4^n \cdot n!} \sqrt{\pi}$

Para a demonstração da propriedade acima, precisamos verificar as seguintes condições envolvendo fatoriais:

$$2 \times 4 \times 6 \times \cdots \times 2n = 2^n \cdot n!$$

$$1 \times 3 \times 5 \times \cdots \times (2n-1) = \frac{(2n)!}{2^n \cdot n!}.$$

De fato

$$\begin{aligned} 2 \times 4 \times 6 \times \cdots \times 2n &= (2.1) \times (2.2) \times (2.3) \times \cdots \times (2.n) \\ &= (2.2.2. \cdots .2) (1.2.3. \cdots .n) = 2^n \cdot n!. \end{aligned}$$

Agora, para a segunda expressão, temos:

$$1 \times 3 \times 5 \times \cdots \times (2n-1) = \frac{1 \times 2 \times 3 \times 4 \times 5 \times \cdots \times (2n-1) \times (2n)}{2 \times 4 \times \cdots \times (2n)} = \frac{(2n)!}{2^n \times n!}.$$

Agora, podemos iniciar a demonstração de P4).

Demonstração: fazendo uso da Eq. (B.2) e indução finita, veja:

$$\begin{aligned} \Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\right) &= \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \\ \Gamma\left(2 + \frac{1}{2}\right) &= \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{3}{2} + 1\right) = \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2}\sqrt{\pi} = \frac{3.1}{2^2}\sqrt{\pi} \\ \Gamma\left(3 + \frac{1}{2}\right) &= \Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{5}{2} + 1\right) = \frac{5}{2}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{5}{2} \cdot \frac{3}{2}\sqrt{\pi} = \frac{5.3.1}{2^3}\sqrt{\pi} \\ \Gamma\left(4 + \frac{1}{2}\right) &= \Gamma\left(\frac{9}{2}\right) = \Gamma\left(\frac{7}{2} + 1\right) = \frac{7}{2}\Gamma\left(\frac{7}{2}\right) = \frac{7}{2} \cdot \frac{15}{2^3}\sqrt{\pi} = \frac{7.5.3.1}{2^4}\sqrt{\pi} \\ &\vdots \\ \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) &= \Gamma\left(\frac{2n-1}{2} + 1\right) = \frac{(2n-1)}{2}\Gamma\left(\frac{2n-1}{2}\right) = \\ &= \frac{(2n-1)}{2} \cdot \frac{(2n-3)(2n-5)\cdots 5.3.1}{2^{n-1}}\sqrt{\pi}. \end{aligned}$$

Usando o resultado, encontrado anteriormente, devemos agora substituir na expressão:

$$\begin{aligned} \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) &= \frac{(2n-1)(2n-3)(2n-5)\cdots 5.3.1}{2^n}\sqrt{\pi} \\ &= ((2n-1)(2n-3)(2n-5)\cdots 5.3.1) \cdot \left(\frac{1}{2^n}\sqrt{\pi}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{(2n)!}{2^n \times n!} \cdot \frac{1}{2^n} \sqrt{\pi} = \frac{(2n)!}{2^n \times 2^n \times n!} \sqrt{\pi} = \frac{(2n)!}{2^{2n} \times n!} \sqrt{\pi} \\
&= \frac{(2n)!}{4^n \cdot n!} \sqrt{\pi}.
\end{aligned}$$

P5) $\Gamma(n) \Gamma(1-n) = \frac{\pi}{\sin(\pi n)}, \forall n \notin \mathbb{Z}$

Para a demonstração da propriedade acima, inicialmente usaremos a Eq.(B.3), daí segue que:

$$\Gamma(z) \Gamma(\xi) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt \int_0^\infty e^{-u} u^{\xi-1} du,$$

usando a seguinte mudança de variáveis: $\begin{cases} t = x^2 \implies dt = 2x dx \\ u = y^2 \implies du = 2y dy \end{cases}$, e substituindo na expressão acima, encontramos;

$$\begin{aligned}
\Gamma(z) \Gamma(\xi) &= \int_0^\infty e^{-x^2} (x^2)^{z-1} 2x dx \int_0^\infty e^{-y^2} (y^2)^{\xi-1} 2y dy \\
&= \left(2 \int_0^\infty e^{-x^2} x^{2z-1} dx \right) \left(2 \int_0^\infty e^{-y^2} y^{2\xi-1} dy \right) \\
&= 4 \left(\int_0^\infty \int_0^\infty e^{-(x^2+y^2)} x^{2z-1} y^{2\xi-1} dy dx \right).
\end{aligned}$$

Agora é conveniente introduzirmos as coordenadas polares no plano, do seguinte modo $\begin{cases} x = \rho \cos \theta \\ y = \rho \sin \theta \end{cases}$, usando o jacobiano³, temos $dxdy = \rho d\rho d\theta$, daí substituindo na última expressão:

$$\begin{aligned}
\Gamma(z) \Gamma(\xi) &= 4 \left(\int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\rho^2} \rho^{2z-1} (\cos \theta)^{2z-1} \rho^{2\xi-1} (\sin \theta)^{2\xi-1} \rho d\rho d\theta \right) \\
&= 4 \left(\int_0^\infty e^{-\rho^2} \rho^{2(z+\xi)-1} d\rho \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2z-1} (\sin \theta)^{2\xi-1} d\theta \right).
\end{aligned}$$

A Função Beta é definida, como se segue abaixo:

$$\beta(m, n) = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2m-1} (\sin \theta)^{2n-1} d\theta,$$

³ $dy dm = \begin{bmatrix} \frac{dm}{d\rho} & \frac{dy}{d\rho} \\ \frac{dm}{d\theta} & \frac{dy}{d\theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\rho \sin \theta & \rho \cos \theta \end{bmatrix} = \rho \cos^2 \theta + \rho \sin^2 \theta = \rho$

e mais $\beta(m, n) = \beta(n, m)$, segue então:

$$\Gamma(z)\Gamma(\xi) = \left(2 \int_0^\infty e^{-\rho^2} \rho^{2(z+\xi)-1} d\rho\right) \beta(z, \xi).$$

Ainda é fácil ver que:

$$\Gamma(z + \xi) = 2 \int_0^\infty e^{-\rho^2} \rho^{2(z+\xi)-1} d\rho,$$

de onde tem-se:

$$\Gamma(z)\Gamma(\xi) = \Gamma(z + \xi) \beta(z, \xi) \implies \frac{\Gamma(z)\Gamma(\xi)}{\Gamma(z + \xi)} = \beta(z, \xi) = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta)^{2z-1} (\sin \theta)^{2\xi-1} d\theta.$$

Para completar a demonstração das propriedades, acima definidas, basta fazermos $\begin{cases} z = x \\ \xi = 1 - x \end{cases}$, daí

$$\frac{\Gamma(x)\Gamma(1-x)}{\Gamma(x+1-x)} = \frac{\Gamma(x)\Gamma(1-x)}{\Gamma(1)} = \beta(x, 1-x) = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\tan \theta)^{2x-1} d\theta$$

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\tan \theta)^{2x-1} d\theta.$$

Introduzindo novamente a mudança de variável, agora sob a forma $\tan^2 \theta = t \implies d\theta = \frac{dt}{2(\tan \theta)(1+\tan^2 \theta)}$ na expressão acima, obtém-se

$$\begin{aligned} \Gamma(x)\Gamma(1-x) &= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{(\tan^2 \theta)^x}{\tan \theta} \frac{dt}{2(\tan \theta)(1+\tan^2 \theta)} \\ &= \int_0^\infty \frac{t^{x-1}}{t+1} dt. \end{aligned}$$

Calculando a integral no plano complexo e usando o teorema dos resíduos, resulta:

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin \pi x}.$$

Concluindo com isso a nossa demonstração.

Referências Bibliográficas

- [1] **Mello**, B. A.; **Chaves**, A. S.; **Oliveira**, F. A.; Discrete atomistic model to simulate etching of a crystalline solid, *Phys. Rev. E*, **63**, 041113 (2001).
- [2] **Kindermann**, C.; Simulação numérica da competição entre modelos de crescimento de superfícies. Dissertação de Mestrado, UFSC - Florianópolis - SC, 2003.
- [3] **Barabasi**, A. -L. e **Stanley**, H. E. *Fractal Concepts in Surface Growth*. New York, Cambridge Univ. Press, 1995.
- [4] **Barreto**, A. M. F.; Implementação da Técnica de Dessorção Térmica Programada (TPD) usando Espectrometria de Massa Quadrupolo, Dissertação de Mestrado, Faculdade de Ciências e Tecnologia. Universidade Nova de Lisboa - FCT-UNL - Lisboa - Portugal, 2011.
- [5] **Family**, F. e **Vicsek**, T. *Dynamics of Fractal Surfaces*. World Scientific, 1991.
- [6] **Costa**, I. V. L.; Processos estocásticos: Difusão e crescimento. Tese de Doutorado, IF - UnB, Brasília - DF, 2006.
- [7] **Lesne**, A. e **Lagües** M.; *Scale Invariance From Phase Transitions to Turbulence*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg - 2012.
- [8] **Baroni**, M. P. M. A.; Análise matemático-computacional de superfícies irregulares: Aplicações para materiais ativos nanoestruturados. Dissertação de Mestrado, INPE - São Jose dos Campos, 2009.
- [9] **Dotto**, M. E. R.; Universalidade e Leis de Escala em Amostras de Silício Atacadas Quimicamente. Tese de Doutorado, Instituto de Física Gleb Wataghin - Unicamp, Campinas - SP, 2003.

-
- [10] **Altoé**, M. A. S.; Determinação do Expoente de Crescimento de Padrões Formados em Meios Granulares. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa - Viçosa - MG, 2011.
- [11] **Sander**, R. S.; Transições de fase para estados absorventes: Um estudo em redes regulares e complexas. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa - Viçosa - MG, 2011.
- [12] **Lipschutz**, S.; Álgebra Linear, (Tradução de: Roberto Ribeiro Baldino e Roberto Celso F. Costa). Coleção Schaum - Editora McGraw-Hill do Brasil, Ltda. 1980.
- [13] **Lima**, E. L.; Álgebra Linear. 3ªEd. Coleção Matemática Universitária - IMPA. Rio de Janeiro - RJ. 1998.
- [14] **Bouchara**, J. C.; **Carrara**, V. L.; **Hellmeister**, A. C. P.; **Salvitti**, R.; Cálculo Integral Avançado, EDUSP - São Paulo - SP, 1999.
- [15] **Maurer**, W. A.; Curso de Cálculo Diferencial e Integral - Vol. 3. Funções de Várias Variáveis e Aplicações, Editora Edgard Blucher Ltda. - São Paulo - SP, 1974.
- [16] **Andrade**, Lenimar Nunes de, Introdução á Computação Algébrica com Maple, coleção: Textos Universitários, ed. Sociedade Brasileira de Matemática.
- [17] **James**, B. R.; Probabilidade: Um curso em nível intermediário. 3ªEd. Coleção Projeto Euclides - IMPA. Rio de Janeiro - RJ. 2008.
- [18] **Oliveira**, E. C.; Tygel. M.; Métodos matemáticos para Engenharia. Textos Universitários - SBM - IMPA, Rio de Janeiro - RJ, 2005.
- [19] **Figueiredo**, D. G.; Análise I. Livros Técnicos e Científicos - LTC. Rio de Janeiro - RJ, 1996.
- [20] (Burgers, J. M.; The Nonlinear Diffusion equation (Riedel, Boston, 1974).
- [21] **Foster**, D., **Nelson**, D. R. e **Stephan**, M. J.; Phys. Rev. A 16, 732 (1977).
- [22] **Miranda**, V. G.; Estudo Numérico da Equação de Kardar, Parisi e Zhang. Dissertação de Mestrado, UFF - Niterói - RJ, 2009.

- [23] **Mattos**, T. G. de; Autômatos Celulares e Crescimento de Interfaces Rugosas. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais - MG, 2005.
- [24] **Costa**, I V. L.; **Fernandes**, H. A.; **Mello**, B. A.; **Oliveira**, F. A.; An analytical formulation for roughness based on celular automata. *arXiv:1208.5063*.
- [25] **Piacentini**, J. J.; Introdução ao Laboratório de Física. 2^aEd. rev. - Florianópolis - SC - Ed. da UFSC, 2005.
- [26] **Hiperesferas**. <http://www.cafequantico.com.br/volume-de-uma-hiperesfera/>.
- [27] **Oliveira**, A. M. de; **Silva**, A.; Biblioteca da Matemática Moderna - Vol 5. LISA - Livros Irradiantes S. A. - São Paulo - SP. 1982.
- [28] **Spiegel**, M. R.; Cálculo Avançado, (Tradução de: Alfredo Alves de Farias e Francisco Albuquerque Bastos). Coleção Schaum - Editora McGraw-Hill do Brasil, Ltda. 1978.
- [29] **Butkov**, E.; Física Matemática. Guanabara Dois S.A. Rio de Janeiro, 1978.