

Estudo tridimensional do crescimento de superfícies rugosas utilizando autômatos celulares probabilísticos

Marcela R. Ferreira, Allbens Atman P. Faria,

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, CEFET-MG,
30510-000, Belo Horizonte, MG

E-mail: marcela.richele@gmail.com, atman@dppg.cefetmg.br,

Resumo: *Modelos de deposição de partículas têm atraído o interesse dos pesquisadores ao longo dos anos. Frente ao desafio de compreender melhor o seu comportamento, utilizamos um modelo de autômato celular probabilístico onde a probabilidade de transição depende do perfil de alturas para analisar o comportamento temporal da rugosidade durante o processo de formação de interfaces rugosas. Acreditamos que este trabalho pode esclarecer melhor a questão do panorama de Classes de Universalidade para modelos de deposição de partículas.*

Palavras-chave: *Autômatos Celulares Probabilísticos, Modelos de Deposição, Superfície Rugosa*

Introdução

A Física Estatística tem desempenhado um papel fundamental no estudo de sistemas complexos. Uma das propriedades marcantes de tais sistemas é a presença de leis de escala e potência que ocorrem geralmente em sistemas que se encontram fora do equilíbrio [2], apresentando comportamento universal singular na região crítica [11]. Os resultados das experiências, bem como diversos outros resultados teóricos, apontavam para a existência de classes de universalidade, definidas por alguns poucos expoentes críticos diferentes dos valores clássicos [17].

Trabalhos teóricos em criticalidade utilizam modelos simples que podem ser estudados analiticamente ou via simulações computacionais. Entender o estado crítico em sistemas que pertencem à determinada classe leva-nos à compreender todos os demais sistemas dessa classe [11, 3]. Como exemplo desses sistemas, podemos citar o crescimento de superfícies rugosas, que tem imposto vários desafios, já que um grande número de experimentos e simulações é realizado na tentativa de compreender melhor e quantificar o seu comportamento. Das técnicas computacionais utilizadas para atacar esse problema, uma se destaca por sua simplicidade: os autômatos celulares (CA) [14].

Os autômatos celulares são modelos computacionais onde o tempo e o espaço são ambos discretizados e a evolução do sistema obedece a regras específicas. Esses modelos permitem estudar sistemas de grande tamanho em um tempo aceitável e a um custo computacional relativamente baixo [16]. As regras que determinam a evolução temporal de um CA são locais, dependendo apenas do estado da vizinhança de um dado sítio e do seu próprio estado [23]. Tais regras podem ser determinísticas ou probabilísticas.

O CA unidimensional consiste em uma rede regular, finita em extensão, onde uma variável discreta 0 ou 1 está associada a cada sítio. Em passos de tempo discretos, o sistema evolui de forma irreversível [23] segundo regras locais fixas que associam o estado de um sítio no instante t com seu próprio estado e os estados de seus L primeiros vizinhos no instante de tempo anterior $t - 1$ [16, 13]. Definimos a vizinhança do sítio i no instante t como sendo o estado do próprio sítio e o estado de suas adjacências, $i + 1$ e $i - 1$, nesse mesmo instante de tempo.

Os Autômatos Celulares Probabilísticos (PCA), também conhecidos como Autômatos Celulares Estocásticos, são sistemas descritos por um conjunto de variáveis discretas definidas em uma rede, onde os estados de cada sítio são atualizados de forma síncrona e obedecem a regras probabilísticas, dependendo apenas do estado de seus vizinhos no passo de tempo anterior

(processo Markoviano discreto). Eles têm sido amplamente utilizados para descrever sistemas complexos [2, 5].

Frente ao desafio de compreender melhor o comportamento de um sistema complexo durante o crescimento de uma superfície rugosa, propomos um modelo de autômato celular probabilístico unidimensional, com condições de fronteira periódicas onde as probabilidades de transição dependem do perfil local das alturas. O modelo estudado é um processo Markoviano de tempo discreto em que a regra para atualizar o sistema é dada por probabilidades de transição dependentes do perfil de altura local, fornecido por uma representação de interfaces.

Crescimento de superfícies

Consideramos uma rede unidimensional finita, com L sítios que apresentava condição periódica de contorno. Simulamos uma deposição de partículas idênticas sob um substrato inicialmente liso, escolhendo aleatoriamente a posição em que cada uma delas é depositada. À medida que as partículas alcançavam o substrato, uma superfície rugosa começava a se formar. Na ausência de correlações na deposição, esperamos que a rugosidade cresça indefinidamente, obedecendo a uma lei de potência em relação ao tempo, da forma $w^2 \sim t$, onde w é a rugosidade e t o tempo.

Processos de deposição desse tipo ocorrem em passos de tempo discreto e são considerados fora do equilíbrio, pois o número de partículas é variável.

Esse processo caracteriza o modelo discreto mais simples - Deposição Aleatória - onde, temos uma interface definida pelo conjunto das alturas $h_i(t)_{i=1,2,\dots,L}$ sendo $h_i(t)$ o número de partículas depositadas no sítio i até o instante t . Dessa forma, as principais grandezas utilizadas para analisar a dinâmica de crescimento de uma interface são, a altura média e a rugosidade.

- A altura média da interface no tempo t , é $\bar{h}(t)$,

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

onde $h_i(t)$ corresponde ao número de partículas depositadas no sítio i até o tempo t e L é o tamanho do sistema;

- A rugosidade do perfil, w , é a medida da dispersão das alturas em torno da altura média

$$w(L, t) \equiv \sqrt{w_2(L, t)} = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [\bar{h}(t) - h_i(t)]^2} \quad (2)$$

A rugosidade é o principal parâmetro utilizado para avaliar o comportamento temporal dentro do sistema, pois ela se comporta segundo uma lei de escala podendo apresentar regimes distintos dependendo do intervalo considerado.

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

Esse modelo é conhecido como Deposição Aleatória com Relaxação Superficial (DARS) e sua dinâmica faz com que o perfil gerado seja mais suave ao longo do processo. O modelo em rede da DARS foi introduzido por Family [8] como uma representação simplificada de processos de deposição de vapor em substratos com baixas temperaturas.

Outro processo correlacionado é a Deposição Aleatória com Recusa (DAR) e consiste em evaporar imediatamente a partícula que foi depositada em um sítio que corresponde a um máximo local [1].

No modelo de Deposição Balística (DB), realiza-se o sorteio de um sítio em uma rede e solta-se uma partícula, que cai verticalmente em direção ao substrato e se fixa imediatamente ao alcançar o agregado. Essa regra de evolução permite que partículas se fixem lateralmente à interface, formando lacunas [1, 13].

O último modelo tratado é a Deposição Aleatória com Difusão (DAD). Ele foi proposto com o objetivo de descrever processos de deposição de vapor nos quais as forças de ligação na superfície são predominantes [21, 18].

Os trabalhos de M. J. Vold [20] e M. Eden [6] foram os primeiros a simular computacionalmente uma dinâmica de crescimento capaz de descrever superfícies observadas no cotidiano. Mas, foi em 1982, utilizando sedimentação de materiais granulares como modelo que, Edwards e Wilkinson [7] desenvolveram pioneiramente uma equação diferencial contínua, conhecida como equação Edwards-Wilkinson (EW), para a dinâmica temporal de uma interface rugosa. Por ser uma equação linear ela pôde ser resolvida analiticamente fornecendo os expoentes críticos em qualquer dimensão.

Outro trabalho desta época que merece destaque é o artigo de Kardar, Parisi e Zhang (KPZ) [12] que introduziram um termo não linear na equação EW e, através de técnicas analíticas, encontraram os expoentes críticos para $(1 + 1)$ dimensões. Para dimensões superiores ainda não há solução para esta equação. A equação contínua não-linear KPZ pertence a uma nova classe de universalidade (UC) e os expoentes críticos obtidos apresentaram excelente concordância com os resultados numéricos.

O comportamento das interfaces geradas durante o processo de crescimento de superfícies por deposição aleatória de partículas é avaliado, principalmente, pela rugosidade, pois ela se comporta segundo uma lei de escala podendo apresentar regimes distintos dependendo do intervalo considerado. Como exemplo, temos a DARS, onde a presença da relaxação superficial suaviza a interface, tornando o crescimento da rugosidade lento e limitado.

Definindo um passo de tempo como a deposição de uma camada L de partículas, faremos o estudo da evolução temporal da rugosidade. Esta cresce com uma lei de potência para escalas temporais curtas e atinge uma saturação após certo tempo, denominado tempo de saturação, t_x . Portanto, seu comportamento neste modelo depende da escala temporal de observação [2], Figura 2.

Para escalas temporais longas, a rugosidade apresenta dependência com o tamanho do sistema, pois, à medida que cresce, o tempo de saturação aumenta e, também, o valor da rugosidade de saturação.

Family e Vicsek [2, 9] propuseram uma lei capaz de colapsar as várias curvas obtidas em uma única função. O método proposto baseia-se na observação de que a rugosidade, normalizada pela rugosidade de saturação, é uma função do tempo, normalizado pelo tempo de *crossover*; portanto,

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (3)$$

onde f é a função de escala

$$f(u) \sim u^\beta, \text{ para } t \ll L^z \text{ e } f(u) \sim k, \text{ para } t \gg L^z, \quad (4)$$

sendo k uma constante. Assim temos $w(L, t) \sim t^\beta$ para tempos curtos $t \ll L^z$ e $w(L, t) \sim k \times L^\alpha$ para tempos longos. Dessa forma, para $t \rightarrow t_x$

$$w \simeq L^\alpha \sim t_x^\beta = L^{z\beta}, \text{ logo } \alpha = z\beta \text{ e } z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (5)$$

Esta relação envolvendo os três expoentes críticos é válida para qualquer processo que obedeça a Lei de Escala (3) [4].

O conjunto dos valores dos expoentes de enrugamento para um dado processo define a Classe de Universalidade (UC) a qual ele pertence. Sob esse prisma, se dois sistemas possuem os mesmos

valores para os expoentes de enrugamento, dizemos que eles pertencem à mesma UC e obedecem à mesma equação de crescimento.

Em síntese, considerando $d = (1 + 1)$, temos que os modelos DB e DAR possuem os mesmos valores para os expoentes de enrugamento $\alpha = \frac{1}{2}$, $\beta = \frac{1}{3}$, $z = \frac{3}{2}$, o que implica que ambos são descritos pela mesma equação, a equação KPZ, e dizemos que esses modelos estão na classe de universalidade KPZ. De maneira análoga, a DARS está na classe EW, caracterizada pelos expoentes $\alpha = \frac{1}{2}$, $\beta = \frac{1}{4}$, $z = 2$. Para a classe da DAD em temos $\alpha = \frac{3}{2}$, $\beta = \frac{3}{8}$, $z = 4$. Finalmente, a DA define uma quarta UC, com $\alpha = \frac{1}{2}$. Neste caso particular, os expoentes β e z não estão definidos, já que não existe saturação nesta dinâmica.

O Modelo

O presente trabalho consiste no estabelecimento de um processo de crescimento de interfaces rugosas, considerando partículas com morfologias iguais, para as quais atribuímos uma probabilidade de deposição dependente do perfil de alturas da vizinhança. O modelo é definido a partir da construção de um autômato celular probabilístico em $(1 + 1)$ dimensões considerando um anel de L sítios e condições periódicas de contorno, fazendo o sítio $i = 1$ ser vizinho do sítio $i = L$.

A partir desse substrato a interface é representada pelo vetor de altura $h(i, t)$ que é atualizado pelo estado do CA, $\tau(i, t)$, a cada passo de tempo como mostra a equação

$$h(i, t) = \sum_{\sigma=0}^t \tau(i, t), \tag{6}$$

gerando um perfil rugoso.

As probabilidades de transição são definidas para cada sítio, dependendo do perfil de altura entre seus vizinhos no passo de tempo anterior; as diferenças de altura à direita e esquerda são usadas para construir os parâmetros de simulação de modo a suavizar o perfil gerado. Três desses parâmetros são mantidos fixos - p_0 , p_1 e p_5 . Se os vizinhos da esquerda e direita estiverem em uma mesma altura; incrementamos a altura i com probabilidade $p_0 = 0,5$; se os vizinhos estiverem acima do sítio central, usamos $p_1 = 1$ e a partícula será depositada em um vale; se os vizinhos estiverem abaixo do sítio central, temos $p_5 = 0$, pois não desejamos que mais uma partícula seja depositada em um pico. As outras possibilidades, p_2 , p_3 e p_4 são usadas como parâmetros de controle. Dependendo dos valores das probabilidades, obteremos morfologias diferentes e expoentes críticos que determinarão as várias UCs. Estes parâmetros são resumidos na figura 1 [10]

p_i	l_i	r_i	Perfil
$p_0 = 0,5$	0	0	
$p_1 = 1$	< 0	< 0	
p_2	< 0	0	
	0	< 0	
p_3	< 0	> 0	
	> 0	< 0	
p_4	> 0	0	
	0	> 0	
$p_5 = 0$	> 0	> 0	

Figura 1: Modelo de PCA onde as probabilidade de transição dependem do perfil local de alturas. As probabilidades consideradas são definidas de acordo com as interações entre três regiões vizinhas.

Em nossas simulações, para cada conjunto de parâmetros, variamos o tamanho da rede e o

número de amostras. Nosso objetivo é a construção de um diagrama 3D com os três parâmetros de controle independentes - p_2 , p_3 e p_4 . Porém, diante do custo computacional para obter o diagrama 3D, optamos por fazer cortes bi-dimensionais e criamos camadas ao longo do eixo p_4 paralelas ao plano p_2p_3 . Dessa forma, trabalhamos em um plano e variando os parâmetros (p_2, p_3) entre 0 e 1. Realizamos também testes para valores intermediários, para definirmos a transição entre duas classes de universalidade. Em todas as simulações, medimos a rugosidade e encontramos valores para os expoentes próximos às classes já existentes.

Interessados no comportamento temporal da rugosidade, obtivemos os expoentes de enrugamento. Para isso, medimos a rugosidade da interface ao longo do tempo e impusemos uma condição inicial em que a interface é uma superfície lisa; assim, as correlações são pequenas no início da deposição, fazendo com que o sistema siga descorrelacionado como uma deposição aleatória, e a rugosidade cresce como uma lei de potência da forma $w \sim t^{1/2}$ [4].

Para tempos intermediários, a rugosidade passa a comportar-se como $w \sim t^\beta$ [19]. Um gráfico típico desta evolução mostra que, à medida que as partículas são depositadas, o valor da rugosidade aumenta gradualmente com uma lei de potência, demonstrando assim dois regimes distintos separados por um tempo de saturação t_x .

A lei de escala é dada por

$$w(L, t) \sim t^{\beta w} \text{ to } t \ll t_x, \tag{7}$$

e para $t \gg t_x$ o regime de crescimento cede lugar a um de saturação quando a rugosidade alcança um valor estacionário w_{sat} , ou seja [1]

$$w(L, t) \sim w_{sat} t^{\beta w} \text{ to } t \gg t_x, \tag{8}$$

Porém, o regime de saturação citado acima, depende do tamanho do sistema. À medida que L aumenta, a rugosidade de saturação também aumenta seguindo a lei de potência

$$w_{sat}(L) \sim L^\alpha, \tag{9}$$

onde α é o expoente de rugosidade e seu valor pode ser estimado pela inclinação da reta na construção do gráfico L em função de w_{sat} .

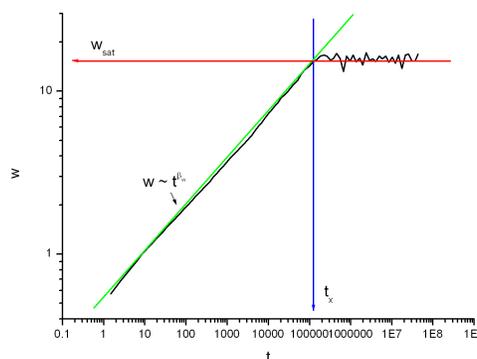


Figura 2: Gráfico em escala logarítmica típico para a evolução da rugosidade. Esse gráfico foi gerado a partir de um vetor de tamanho 10^4 com 10 amostras considerando $p_2 = 0,6$, $p_3 = 0,4$ e $p_4 = 0,4$.

O tempo de saturação t_x , estimado na Figura 2, também depende do tamanho do sistema e segue a lei de potência

$$t_x \sim L^z, \tag{10}$$

em que z é chamado de expoente dinâmico e seu valor pode ser estimado pela inclinação da reta encontrada, na construção do gráfico, L em função de t_x .

Uma forma de retirar a dependência em L da rugosidade de saturação seria colapsar todas as curvas de diferentes tamanhos utilizando as relações 8, 9 e 10, de modo que as curvas passam a saturar no mesmo valor. O resultado obtido sugere que $w(L, t)/w_{sat}(L)$ é uma função de t/t_x [1].

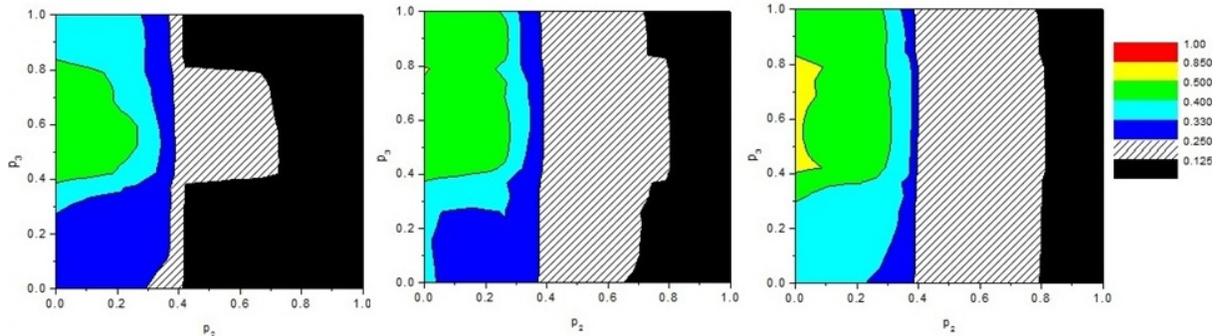


Figura 3: Mapeamento das classes de Universalidades: o gráfico da esquerda refere-se ao plano $p_4 = 0, 1$, o gráfico do meio refere-se ao plano $p_4 = 0, 2$ e o da direita refere-se ao plano $p_4 = 0, 3$. Construímos os diagramas aproximando os valores de β_w já existentes para cada UC.

Os dados da rugosidade em função do tempo foram utilizados para montar o diagrama de fases. Dado um conjunto de parâmetros obtivemos a rugosidade média em função do tempo e calculamos o valor do expoente β_w através de um ajuste por lei de potência. A partir desses resultados, construímos o mapeamento das classes de universalidades, utilizando os valores dos expoentes de enrugamento referentes as UCs - EW, KPZ, VLDS, RW, DP e CDP - e chegamos a algumas análises geométricas. Observando a Figura 3, notamos que o diagrama de fases possui linhas de transição separando as diferentes UCs existentes. Considerando p_4 tendendo para zero, p_3 com um valor muito baixo e p_2 para valores elevados, nos três gráficos percebemos uma predominância de crescimento correlacionado (DARS) tendendo para uma evolução da classe EW. Aparentemente, à medida que a classe EW está evoluindo, a classe KPZ, em azul, está diminuindo, cedendo espaço para as classes VLDS e RW. No gráfico central surge uma pequena amostra da classe DP que se expande no gráfico da esquerda. Em nenhum dos diagramas, até o momento, encontramos β_w próximo de 1 caracterizando uma percolação direcionada compacta.

Conclusão

Apresentamos nesse trabalho um estudo teórico e numérico do crescimento de interfaces rugosas através de simulações analisando as superfícies obtidas. Utilizamos um modelo de deposição considerando um CA com probabilidades de transição dependentes do perfil local de alturas. Consideramos um perfil inicialmente liso e partículas iguais, para um determinado grupo de parâmetros, variamos o tamanho do sistema e obtivemos sucesso em demonstrar um comportamento constante da evolução temporal da rugosidade e em encontrar expoentes críticos associados a diferentes UCs.

Esperamos num futuro próximo construir um diagrama de fases tridimensional completo deste modelo para uma análise mais profunda do comportamento do sistema. Outra perspectiva possível é a variação do formato das partículas e estender o mapeamento das classes de universalidades.

Referências

[1] S. G. Alves, Leis de Escala e Crossovers em Modelos de Crescimento, Tese (Doutorado), UFMG, 2006.

- [2] A.P.F. Atman, Aspectos Fractais em Sistemas Complexos, Tese (Doutorado), UFMG, 2002.
- [3] L. L. Azevedo et al., Agentes computacionais orientados à agentes para apoio à aprendizagem baseada em simulação, Anais SBIE, 2005.
- [4] A. Barabasi, H. Stanley, Fractal Concepts in Surface Growth, Cambridge Univ. Press, 1995.
- [5] E. Domany, W. Kinzel, Equivalence of cellular automata to ising models and directed percolation, Physical Review Letters, v.53, n.4, p311-314, 1984.
- [6] M. Eden, A two dimensional growth process, Univ. of California Press, Berkeley, p.223-239, 1961.
- [7] S. F. Edwards, D. R. Wilkinson, The surface statistics of granular aggregate, Proc. of The Royal Soc. of London, series A, Mathem. and Phys. Sci., v.381(1780), p.17-31, 1982.
- [8] F. Family, Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion. Journal of Physics A, v.19(8), p.L441-L446, 1986.
- [9] F. Family, T. Vicsek, Scaling of active zone in the eden process on percolation networks and ballistic deposition, Journal of Physics A, v.18, p.L75-L81, 1985.
- [10] M. R. Ferreira, Autômato Celular com probabilidades de transição dependentes da altura para o estudo do crescimento de superfícies, Dissertação (Mestrado), CEFETMG, 2009.
- [11] I. Gleria, R. Matsushita, S. Silva, Sistemas complexos, criticalidade e leis de potência, Revista Brasileira de Ensino de Física, v.26, n.2, p.99-108, 2004.
- [12] M. Kardar, G. Parisi, Y. C. Zhang, Dynamic scaling of growing interfaces, Physical Review Letters, v.56, n.9, p.889-892, 1986.
- [13] T. G. Mattos, Autômatos Celulares e Crescimento de Interfaces Rugosas, Dissertação(Mestrado), UFMG, 2005.
- [14] G. Melotti, Aplicação de Autômatos Celulares em Sistemas Complexos: Um estudo de casos em Espalhamento de Epidemias, Dissertação(Mestrado), UFMG, 2009.
- [15] J. G. Moreira, J. K. L. da Silva, S. O. Kamphorst, On the fractal dimension of self-affine profile, Journal of Physics A, v.27, n.8097, 1994.
- [16] H. F. V. Resende, Formação de padrões em meios granulares densos, Tese (Doutorado), UFOP, 2008.
- [17] S. R. A. Salinas, Introdução à Física Estatística, Editora da USP - Edusp, 2005.
- [18] S. D. Sarma, P. Tamborenea, A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular beam epitaxy, Physical Review Letters, v.66, n.3, p.325-328, 1991.
- [19] T. J. Silva, Modelos de Crescimento de Interfaces Rugosas. Tese de Doutorado, UFMG, 2001.
- [20] M. J. Vold, A numerical approach to the problem of sediment volume, J. COLL SCI, v.14, p.168-174, 1959.
- [21] D. E. Wolf, J. Vilain, Growth with surface diffusion, Europhysics Letters, v.13, n.5, p.389-394, 1990.
- [22] S. Wolfram, Statistical mechanics of cellular automata, Reviews of Modern Physics, v.55, n.3, p601-644, 1983.
- [23] S. Wolfram, Theory and applications of cellular automata, World Scientific, 1986.