



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Marlon Ferreira Ramos

Propagação de Frentes em Meios Heterogêneos

Niterói
2011

Marlon Ferreira Ramos

Propagação de Frentes em Meios Heterogêneos

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Paulo Murilo Castro de Oliveira

Niterói
2011

Agradecimentos

Em primeiro lugar quero agradecer aos meus pais por tudo que fazem por mim: pelo mimo, pela compreensão e por acreditarem em mim mais do que eu mesmo.

Quero agradecer também à minha esposa Gabriela pelo carinho, pelos conselhos, por estar presente em todos os momentos da minha vida.

Obrigado ao meu orientador Professor Paulo Murilo, por tudo que me ensinou, pela atenção e por estar sempre presente quando precisei de ajuda.

Obrigado aos alunos e professores do Grupo de Sistema Complexos pelo tempo, pelas críticas, sugestões e amizades.

Obrigado a todos os professores da graduação e do mestrado. Quero agradecer especialmente ao professor Jürgen Stilck que contribuiu muito para minha formação.

Tenho que agradecer ao meu professor de física do Ensino Médio e agora colega de mestrado Anderson Tomaz por ter praticamente me adotado nesses últimos anos.

Por fim, agradeço ao CNPq e a FAPERJ pela ajuda financeira.

Resumo

Desenvolvemos um estudo sobre propagação de frentes unidimensionais, com cálculo de rugosidade, comprimento de correlação, etc. No modelo que criamos o valor mínimo de uma combinação da segunda com a quarta derivada da frente $h(x)$ é o parâmetro decisório para escolha da posição x onde ocorrerá o próximo deslizamento Δh de valor aleatório. Observam-se expoentes críticos que caracterizam correlações de longo alcance. O modelo é uma simplificação da formulação de Rice, na qual o parâmetro minimizado é uma integral ao longo de toda a frente. Desta forma, a característica de longo alcance já está embutida na receita. No nosso caso, a combinação das segunda e quarta derivadas é local, de forma que a correlação de longo alcance emerge naturalmente da própria dinâmica.

Abstract

We develop a study about one-dimensional propagation of fronts, with calculation of roughness, correlation length, etc.. In our model, the minimum value of a combination between the second and fourth derivative of the front $h(x)$ is the parameter decision for the position x where the next random slide Δh will occur. We observe critical exponents that characterize long-range correlations. The model is a simplification for Rice's formulation, in which the minimized parameter is an integral along the entire front. Thus, the long-range feature is already built into the recipe. In our case, the combination of the second and fourth derivatives is local, so the long-range correlations emerge naturally from the dynamics.

Sumário

Lista de Figuras	viii
Introdução	1
1 Modelos de Interface	4
1.1 Modelos Discretos	5
1.2 Modelos Contínuos	13
1.3 Transição de Depinning	20
2 Criticalidade auto-organizada e dinâmica extrema	25
2.1 Pilhas de Areia	26
2.2 Dinâmica Extrema	28
3 Descrição do modelo e Resultados	31
3.1 Implementação	31
3.2 Interação Elástica	34
3.3 Rugosidade e Função de Correlação	37
3.4 Distribuição de Atividade	42
3.5 Distribuição de Forças	49
4 Conclusão	55
A Discretização da Função $K(x)$	57
B Métodos Numéricos	60

B.1 Busca Binária	60
B.2 Transformada rápida de Fourier	64
Referências Bibliográficas	69

Lista de Figuras

1.1	De acordo com a regra da DB, a partícula A irá aderir à posição A' . Depois da deposição, A' se torna parte do agregado. Similarmente B irá aderir à posição B' .	5
1.2	Crescimento da rugosidade como função do tempo numa escala log-log, para diferentes tamanhos $L_1 < L_2 < L_3$.	6
1.3	Evolução temporal da superfície para tamanhos distintos. Escala logarítmica é usada para que a lei de potência possa ser vista como uma linha reta.	8
1.4	Exemplo de mudança de escala em uma função autoafim. Temos que reescalar o eixo x e o eixo y com fatores diferentes para que o objeto final reescalado tenha as mesmas propriedades estatísticas do objeto original.	10
1.5	A figura ilustra as propriedades de três modelos discretos diferentes: a) Eden Model, b) Deposição balística e c) RSOS Model.	11
1.6	Efeito da tensão superficial na morfologia da superfície.	16
1.7	Efeito do termo não linear na morfologia da superfície. Note que mais material é adicionado nas partes da interface onde a inclinação é maior, como resultado, a altura média da interface aumenta.	17
1.8	Ilustração das possíveis geometrias locais da frente. Mínimos locais são mais favoráveis energeticamente porque o número de possíveis ligações será maior.	19
1.9	Representação esquemática de uma interface se movendo em um meio aleatório.	21
1.10	Velocidade da frente como função da força externa.	22
3.1	Desenho esquemático da evolução temporal da força externa.	32
3.2	O tempo físico definido na equação 3.2 é considerado em função do número de passos t .	33

3.3	Curva da rugosidade obtida pelo colapso dos dados usando o procedimento descrito no capítulo 1, foram utilizadas 2000 amostras.	38
3.4	Gráfico das inclinações sucessivas contra $\log(t)$, para o tamanho $L = 1600$. . .	39
3.5	Gráfico da função de correlação para o caso Laplaciano puro. Usamos 2000 amostras nesse cálculo.	40
3.6	Espectro de potências da interface calculada para $B = 0$ e $B = 1$. A inclinação da reta verde é -3.5, o que equivale a um expoente de rugosidade igual a 1.25. .	40
3.7	Gráfico das inclinações consecutivas para o espectro de potências da frente com $s = 0.25$. Usamos uma rede de tamanho 512 e 1000 amostras.	41
3.8	Ponto onde ocorre o crossover k^* em função de $B^{-1/2}$, usamos 1000 amostras para uma rede de tamanho 1024.	42
3.9	Espectro de potências para as duas situações discutidas acima, com a segunda ou a quarta derivada sendo o termo predominante na interação elástica. A estimativa para α_2 é de 2.25. Na construção do gráfico, utilizamos uma rede de tamanho 1024 e 1000 amostras.	43
3.10	Gráfico da distância entre dois sítios ativos consecutivos. A inclinação da curva é aproximadamente 0.5, o que corresponde ao expoente $z = 2.0$, em acordo com o valor da equação 3.17.	45
3.11	Distribuição $p(r, \tau)$ para $\tau = 4, 16$ e 64 . Nessa figura consideramos só o termo Laplaciano na interação elástica e uma distribuição de forças de pinning aleatória. Foram usadas 1500 amostras e uma rede de tamanho 512.	48
3.12	Sequência de forças externas $F_c(t)$. A linha reta corresponde ao valor crítico $F^* = \max_t F_c(t)$	49
3.13	Distribuição de forças de depinning, $P(F_c)$	50
3.14	Distribuição de forças de depinning condicionadas pela distância d . Usamos uma rede de tamanho 512. Essas distribuições não estão normalizadas então elas representam sua contribuição para a distribuição global resultante (linha cheia).	51

3.15	A relação linear entre $\langle F_c \rangle$ e σ_{F_c} nos permite, através de extrapolação da curva, determinar o valor F^*	52
3.16	$\langle F_c \rangle$ e σ_{F_c} como função da distância entre sítios ativos sucessivos.	52
3.17	Depois de reescaladas as distribuições de forças de depinning correspondentes as distâncias $d = 8$, $d = 16$ e $d = 32$ colapsam em uma única curva. O tamanho do sistema é $L = 512$	53
B.1	Árvore binária onde a sequência 0.52, 0.27, 0.41, 0.75, 0.13, 0.63, 0.39, 0.18, 0.87, 0.79 é armazenada nessa ordem.	61
B.2	Conexão entre as entradas e as saídas em um passo fundamental da FFT, ilustrados em um diagrama chamado butterfly. A letra W na figura representa o módulo do fator exponencial, no nível mais interno da soma temos $W = 1$. . .	66
B.3	Os 3 estágios envolvidos no cálculo de uma DFT de tamanho de tamanho 8. . .	67
B.4	Butterfly geral utilizada no cálculo da DFT de tamanho 8. No desenho $W_0 = 1$, $W_1 = \sqrt{2}/2 + i\sqrt{2}/2$, $W_2 = i$ e $W_3 = -\sqrt{2}/2 + i\sqrt{2}/2$	67
B.5	Reordenamento da entrada na forma adequada para implementar FFT.	68

Introdução

Um campo importante da mecânica estatística é o estudo da evolução de superfícies e a transição entre diferentes morfologias de interfaces. Esse campo exerce um papel fundamental na descrição de muitos processos naturais. Alguns exemplos típicos são o crescimento de colônias de bactérias, a propagação de rachaduras, o fluxo de fluidos em meios porosos e até a formação de nuvens [1, 2, 3]. Apesar da diversidade desses processos, eles têm muito em comum. As interfaces e superfícies podem frequentemente ser descritas em termos de geometria fractal. As estruturas são autoafins, o que significa que as grandezas estatísticas que caracterizam a superfície são invariantes por uma mudança de escala e se relacionam como leis de potência.

As leis de potência associadas com uma interface ou superfície gerada por algum processo podem ser muito parecidas com as propriedades de escala de outro sistema que a princípio parece ser bem diferente do primeiro. Esta semelhança significa os mesmos expoentes das leis de potências. Os físicos a chamam de universalidade. Invariância por mudança de escala, expoentes críticos e universalidade são fenômenos observados no estudo das transições de fase contínuas, tema muito popular na mecânica estatística.

Dentro desse ramo, há um certo tipo de transição, chamada depinning, que tem sido muito estudada nos últimos anos. Em um experimento típico onde essa transição é observada, um fluido é empurrado através de um meio poroso. Se a força que empurra o fluido for pequena a penetração do líquido no meio estanca. Se a força for muito grande, o fluido se move cada vez mais rápido. A força mínima necessária que devemos aplicar para que o movimento continue indefinidamente é chamada força crítica. Se o líquido for empurrado com essa força a interface é autoafim. A transição de depinning se tornou um problema genérico e pode ser usada para descrever o movimento de interfaces em domínios magnéticos, propagação de rachaduras e

erosão do solo [4, 5, 2]. Em todos os casos há uma competição entre o efeito de rugosidade causado pela aleatoriedade do meio e o efeito de suavização causada pelas interações elásticas do objeto transportado (no caso do fluido a interação elástica é a tensão superficial). A classe de universalidade da transição é determinada pelo tipo de interação elástica.

Dependendo do tipo de sistema físico considerado, as forças elásticas são de curto ou de longo alcance. Em uma rede discreta, uma interação de curto alcance quer dizer que cada elemento só interage com seus vizinhos mais próximos, enquanto que no último caso, todos os elementos interagem entre si.

A interação de curto alcance mais usada na transição de depinning é modelada pelo Laplaciano da altura da interface. Outro tipo de interação muito usada na literatura é baseada em um trabalho de Rice [6] e é expressa por uma integral sobre toda a frente e portanto de longo alcance.

No modelo que estamos estudando, fazemos uma redução da teoria de Rice, restringido a interação aos primeiros e segundos vizinhos numa cadeia linear discreta. A interação final será uma combinação linear de segundas e quartas derivadas, a contribuição dos segundos vizinhos vem da quarta derivada. Portanto a interação é local, e toda e qualquer correlação espacial que por ventura venha a ser observada é fruto exclusivo da dinâmica de evolução. Uma motivação para incluir os segundos vizinhos vem de um modelo muito mais familiar, principalmente para os físicos estatísticos, o modelo de Ising.

O modelo de Ising é definido usualmente com interações entre primeiros vizinhos, mas também há variações com a inclusão da interação entre segundos vizinhos. Nesses modelos, dependendo do tipo de interação que se adicione, observamos uma mudança na classe de universalidade, isso acontece quando as interações são opostas e competem uma com a outra [7, 8, 9]. Na dissertação, investigamos quais as consequências da inclusão da quarta derivada nas quantidades que medimos.

A dissertação está organizada assim: no primeiro capítulo apresentamos as características mais importantes de modelos de crescimento de superfícies por deposição de partículas, descrevemos os modelos discretos e as equações diferenciais estocásticas que representam tais modelos no chamado limite hidrodinâmico. Esse capítulo estabelece de certa forma uma “lin-

guagem” que será usada: definimos as quantidades que normalmente são medidas, as leis de escala, os expoentes críticos, etc. No capítulo 2, estudamos a transição de depinning. Há muitas abordagens para esse problema, ele pode ser estudado integrando as equações diferenciais, com o grupo de renormalização, com simulações computacionais e outros mais. Usamos a abordagem computacional e a simulação da propagação da frente foi feita com um tipo especial de dinâmica, chamada de dinâmica extrema, onde a frente é compelida a estar sempre próxima da criticalidade.

A maneira usual pela qual sistemas sintonizam a si próprios na situação crítica corresponde a duas escalas de tempo bem distintas. Escala de longa duração: o sistema é gradualmente carregado por ação externa, alguma tensão interna aumenta lentamente. Escala de curta duração: o sistema não suporta o nível de tensão atingido e se rompe rapidamente, a tensão volta ao nível baixo normal. É o caso do lento movimento das placas tectônicas umas em relação às outras, e os consequentes terremotos[10, 11].

Nos modelos de dinâmica extrema, admite-se que cada elemento do sistema tem sua própria capacidade de resistência à tensão, e a ruptura se dá sempre no elemento atualmente mais fraco, o menos resistente. Nos modelos de depinning isso se traduz em substituir a força externa constante, por uma força que aumenta progressivamente com o tempo até que um sítio da frente se mova, o que corresponde a um evento de depinning. A consequência direta é que a frente se moverá com uma velocidade finita mas próxima de zero. Portanto, a própria dinâmica do sistema encarrega-se de sintonizá-lo na situação crítica.

No capítulo 3, descrevemos detalhes do modelo e da simulação. Apresentamos também nossos resultados; na primeira parte os resultados se referem à morfologia da interface, na segunda parte estudamos a distribuição espacial e temporal de eventos de depinning, chamada de mapa de atividade. Por último, estudamos a distribuição estatística das forças de depinning.

Finalmente, no último capítulo apresentamos nossas conclusões e perspectivas de trabalhos futuros.

Capítulo 1

Modelos de Interface

De forma simples, uma superfície ou interface pode ser definida como a separação entre dois meios. A forma das superfícies que encontramos no cotidiano tem características surpreendentes e que às vezes não são notadas. No entanto, o estudo de interfaces tem aplicações na indústria e na tecnologia, e serve para explicar diversos fenômenos naturais como o crescimento de colônias de bactérias, a propagação de rachaduras e as linhas de fluxo em um supercondutor.

A descrição quantitativa de uma interface foi um desafio para os físicos durante muitos anos. Chegou-se a utilizar mais de 32 parâmetros e funções para caracterizar uma superfície [12]. Felizmente existem “leis” básicas que são comuns a muitas superfícies. A tarefa de descrever uma superfície pode ser muito simplificada usando conceitos de geometria fractal e invariância de escala.

As superfícies podem ser estudadas através de modelos discretos ou por equações diferenciais. Modelos discretos de deposição de partículas, que servirão como um guia inicial para o nosso estudo, geram superfícies que exibem as propriedades essenciais dos modelos de crescimento. A superfície será definida como um conjunto $\{h_i\}$ de alturas medidas em relação a uma reta de referência. Nas equações diferenciais contínuas esse conjunto de alturas será substituído por um campo de alturas $h(x)$.

1.1 Modelos Discretos

Os modelos discretos são usualmente definidos em uma rede hipercúbica de d dimensões com $N = L^d$ sítios, onde a cada sítio está associada uma variável h_i que representa a altura da interface no sítio i . O conjunto de todas as alturas $\{h_i\}$ representa o estado do sistema que evolui de acordo com certas regras dinâmicas estocásticas.

Para caracterizar a evolução da interface quantitativamente definimos a altura média $\bar{h}(t)$ e a rugosidade¹ $w(t)$:

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{N} \sum_i h_i(t), \quad w(t) = \left[\frac{1}{N} \sum_i h_i^2(t) - \left(\frac{1}{N} \sum_i h_i(t) \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (1.1)$$

Em muitos casos a interface apresenta leis simples. Um modelo didático que apresenta tais leis é a deposição balística (DB) que foi inicialmente proposto para o estudo de agregados coloidais [13]. Nesse modelo partículas são soltas de uma posição qualquer acima da interface. A partícula segue uma trajetória retilínea vertical até atingir a superfície, aderindo ao primeiro sítio ao longo da sua trajetória que tem um vizinho “ocupado” (veja a figura 1.1).

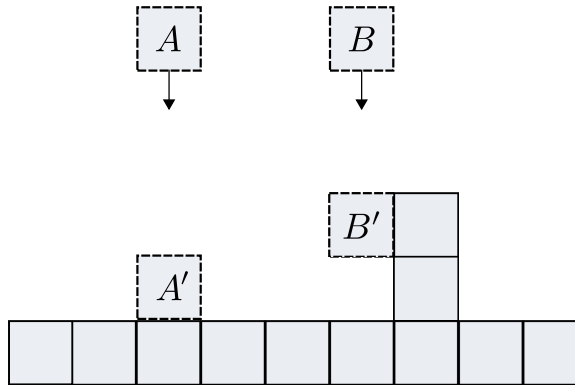


Figura 1.1: De acordo com a regra da DB, a partícula A irá aderir à posição A' . Depois da deposição, A' se torna parte do agregado. Similarmente B irá aderir à posição B' .

Em sistemas finitos, começando a dinâmica com uma rede reta ($h_i = 0 \forall i$), a evolução temporal da superfície tem dois regimes separados por um tempo transiente t_\times . Um gráfico típico da evolução temporal da rugosidade é mostrado na figura 1.2.

¹A rugosidade é uma grandeza estatística. O valor de w na verdade é obtido a partir da média de várias medidas independentes da quantidade acima.

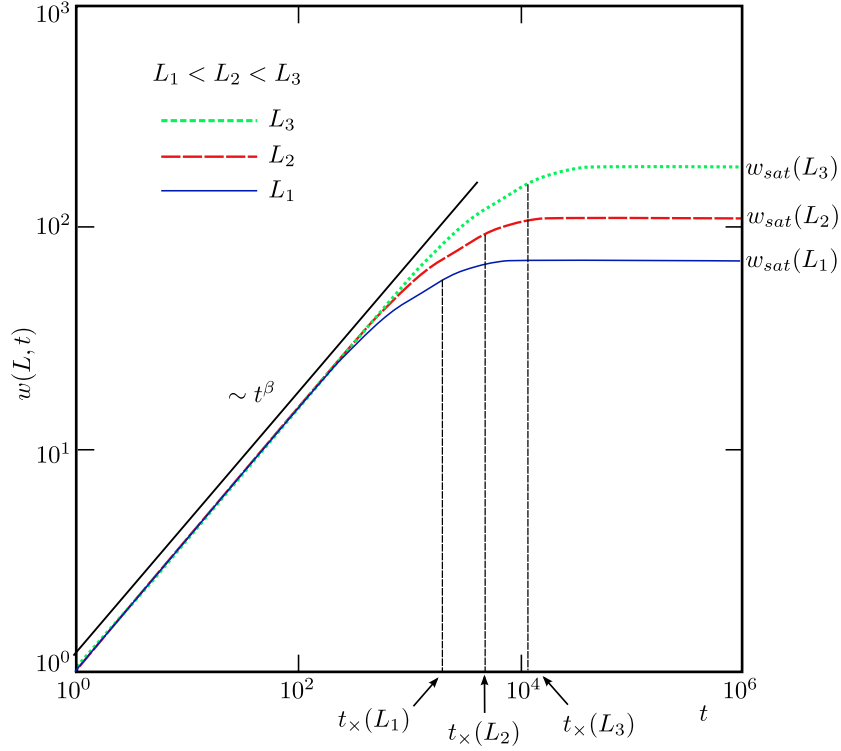


Figura 1.2: Crescimento da rugosidade como função do tempo numa escala log-log, para diferentes tamanhos $L_1 < L_2 < L_3$.

1. Inicialmente, a rugosidade aumenta como uma potência do tempo

$$w(L, t) \sim t^\beta \quad t \ll t_x, \quad (1.2)$$

onde o expoente β é chamado de expoente de crescimento. O tempo é definido como o número de partículas depositadas dividido por L , ou seja, uma unidade de tempo corresponde à deposição de L partículas.

2. O crescimento não continua indefinidamente, mas é seguido por um regime de saturação (a região horizontal na figura) depois que a interface “esquece” a configuração inicial e a rugosidade atinge um valor de saturação, w_{sat} . Na figura 1.2, três curvas diferentes correspondem à evolução temporal de superfícies obtidas com valores diferentes de L . À medida que L aumenta, o valor de w_{sat} também aumenta e a dependência segue, outra vez, uma lei de potência, agora espacial,

$$w_{sat}(L) \sim L^\alpha \quad t \gg t_\times, \quad (1.3)$$

onde α é o expoente de rugosidade.

3. O tempo de crossover t_\times (às vezes chamado de tempo de saturação) no qual a interface muda de comportamento também depende do tamanho do sistema,

$$t_\times \sim L^z, \quad (1.4)$$

onde z é o expoente dinâmico.

Existe uma maneira de colapsar os dados da figura 1.2 em uma única curva:

- Considera-se $w(L, t)/w_{sat}(L)$ como função do tempo, isso resultará em curvas saturadas no mesmo valor, independente do tamanho do sistema.
- Considera-se a rugosidade como função de t/t_\times , com isso todas as curvas irão saturar no mesmo tempo escalonado catacterístico (Veja figura 1.3).

Essas observações sugerem que w/w_{sat} é uma função de t/t_\times somente, isto é,

$$\frac{w(L, t)}{w_{sat}(L)} \sim f\left(\frac{t}{t_\times}\right), \quad (1.5)$$

onde $f(u)$ é a chamada função de escala. Substituindo w_{sat} e t_\times por 1.3 e 1.4, obtemos a relação de escala de Family-Vicsek

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (1.6)$$

A função de escala tem o comportamento

$$f(u) = \begin{cases} u^0 & \text{se } u \gg 1 \\ u^\beta & \text{se } u \ll 1. \end{cases} \quad (1.7)$$

Os expoentes α , β e z não são independentes. Na figura 1.3 se nos aproximarmos do ponto de saturação ($t_\times, w_{sat}(t_\times)$) pela esquerda, encontramos, de acordo com a equação 1.2, $w(t_\times) \sim$

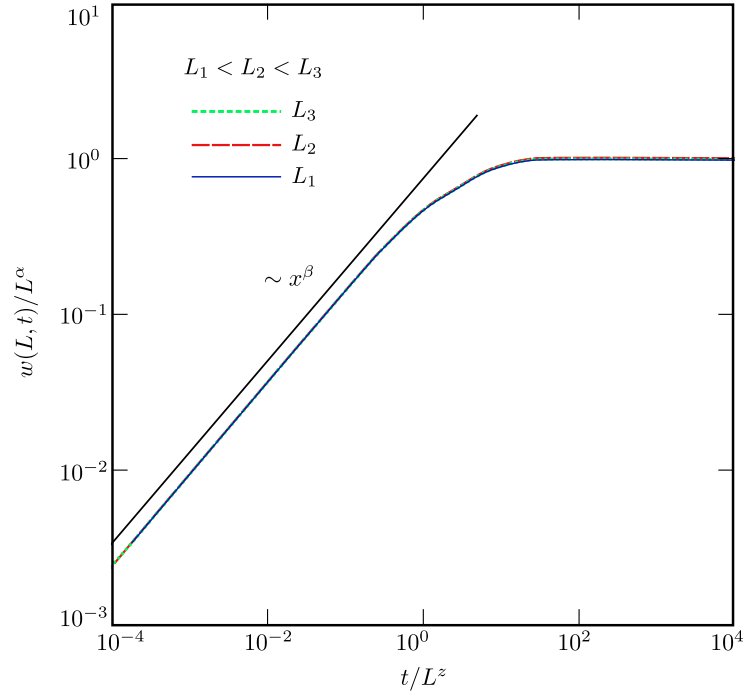


Figura 1.3: Evolução temporal da superfície para tamanhos distintos. Escala logarítmica é usada para que a lei de potência possa ser vista como uma linha reta.

t_{\times}^{β} . No entanto, fazendo o mesmo limite pela direita, temos, da equação 1.3, $w(t_{\times}) \sim L^{\alpha}$. Dessas duas relações segue que $t_{\times}^{\beta} \sim L^{\alpha}$, o que segundo a equação 1.4, implica que

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

O procedimento descrito acima para colapsar as curvas, que será usado várias vezes durante a dissertação, foi introduzido pela primeira vez em 1945 por Guggenheim, num gráfico experimental da linha de coexistência líquido-vapor de oito substâncias diferentes. Em 1965, Widom fez uma hipótese, chamada de hipótese de escala, que se tornou uma das ferramentas mais usadas no estudo das transições de fase contínuas [14]. A hipótese de escala foi posteriormente validada pelo grupo de renormalização e rendeu um prêmio Nobel para K. Wilson em 1982 [15, 16].

Ainda não descrevemos o que significa invariância de escala. Se uma função $f(x, y)$ tem a propriedade

$$f(x, y) = \lambda f(\lambda^a x, \lambda^b y), \quad (1.9)$$

então a função $f(x, y)$ é invariante pela mudança de escala $x \rightarrow \lambda^a x$ e $y \rightarrow \lambda^b y$, para um valor de λ arbitrário. Na equação 1.9, a e b são chamados de expoentes críticos. Em linguagem matemática, dizemos que $f(x, y)$ é uma função homogênea generalizada de x e y . A hipótese que Widom fez foi de que nas proximidades do ponto crítico, a parte singular do potencial termodinâmico obedece a relação 1.9.

Com a hipótese de escala em mente, vamos fazer a transformação

$$L \rightarrow L' \equiv \lambda L, \quad h \rightarrow h' \equiv \lambda^\alpha h \quad t \rightarrow t' \equiv \lambda^z t, \quad (1.10)$$

na equação 1.6 temos

$$w(L', t') = L'^{\alpha} f\left(\frac{t'}{L'^z}\right) = \lambda^\alpha L^\alpha f\left(\frac{\lambda^z t}{\lambda^z L^z}\right) = \lambda^\alpha w(L, t), \quad (1.11)$$

o que mostra ser $w(L, t)$ invariante sob a transformação 1.10. Leis de potência são o exemplo mais comum de funções homogêneas generalizadas. Uma forma alternativa de colapsar os dados da figura 1.2 em uma função de escala é usar

$$w(L, t) \sim t^\beta g\left(\frac{L}{t^{1/z}}\right), \quad \text{com } \beta = \alpha/z. \quad (1.12)$$

Para deduzir a equação acima basta usar a equação 1.11 e escolher $\lambda = t^{-1/z}$.

A superfície descrita pela função $h(x)$ com a propriedade 1.10 é dita autoafim. Em termos gerais, a equação 1.10 indica que um objeto autoafim deve ser reescalado de maneiras diferentes horizontal e verticalmente: se multiplicarmos x por um fator λ horizontalmente temos que multiplicar h por um fator λ^α verticalmente para que o objeto seja invariante (Veja a figura 1.4). Em uma figura autoafim determinística, a invariância significa que o objeto reescalado é idêntico ao original. No nosso caso, temos um objeto autoafim aleatório o que significa que as quantidades estatísticas (rugosidade) são as mesmas para o sistema reescalado e o sistema original. Para o caso especial que $\alpha = 1$ o objeto é chamado autossimilar ou fractal.

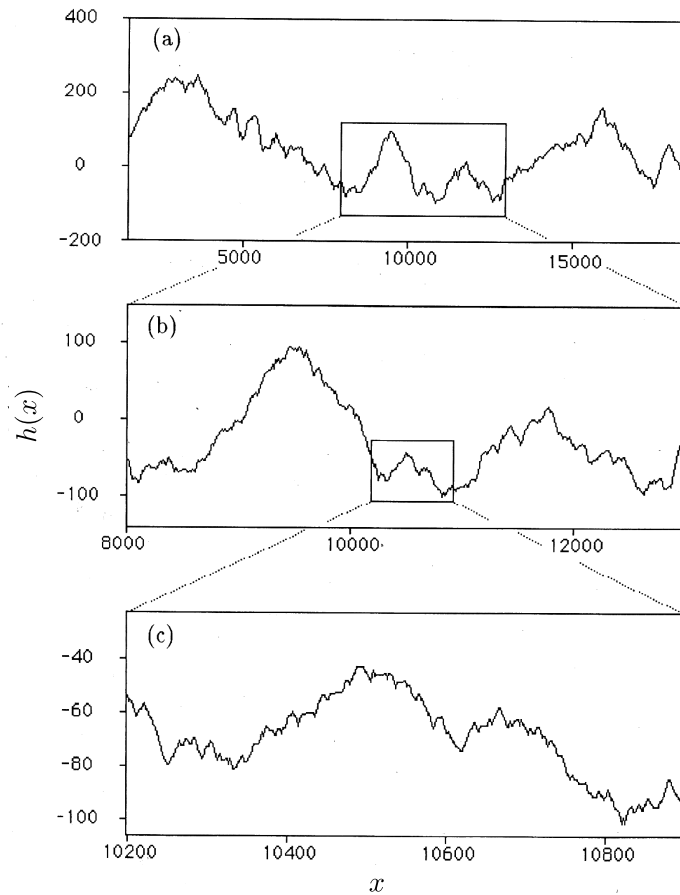


Figura 1.4: Exemplo de mudança de escala em uma função autoafim. Temos que reescalar o eixo x e o eixo y com fatores diferentes para que o objeto final reescalado tenha as mesmas propriedades estatísticas do objeto original.

Vamos considerar dois outros modelos discretos, também definidos em uma rede unidimensional de tamanho L e com condições periódicas de contorno em x . As estruturas resultantes estão ilustradas na figura 1.5.

1. **Eden model:** Uma linha de partículas é colocada na base e fazemos o cluster crescer escolhendo aleatoriamente um dos sítios do perímetro.
2. **Restricted solid-on-solid model (RSOS):** Uma coluna é escolhida aleatoriamente e a altura é aumentada uma unidade desde que a condição $|h_i - h_{i+1}| \leq 1$ não seja violada, ou seja, a diferença de altura entre sítios adjacentes pode ser no máximo 1.

Apesar da figura 1.5 sugerir mais diferenças que semelhanças e a despeito das diferentes regras dinâmicas em cada modelo, os expoentes que caracterizam a interface são aproxima-

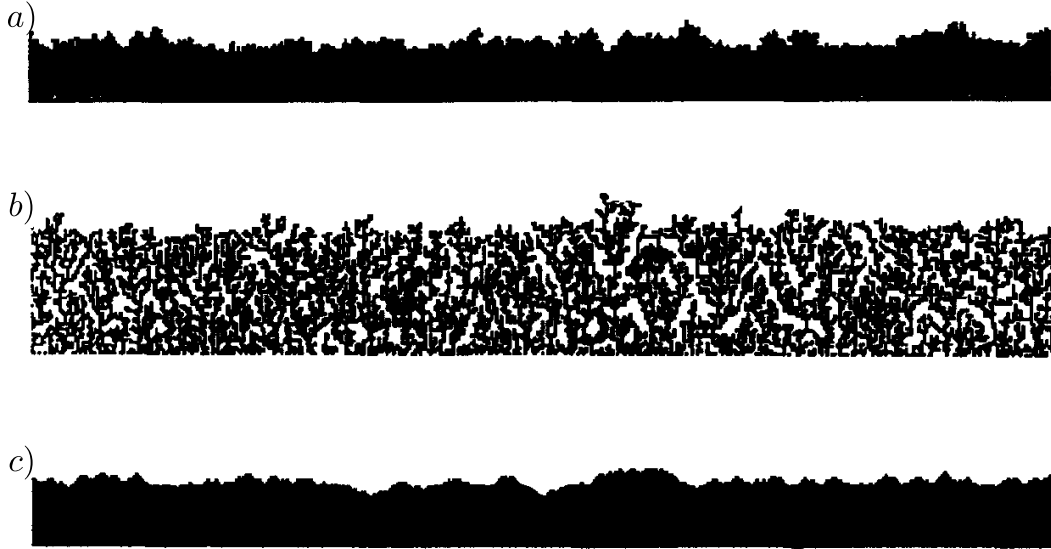


Figura 1.5: A figura ilustra as propriedades de três modelos discretos diferentes: a) Eden Model, b) Deposição balística e c) RSOS Model.

mente os mesmos [17].

Esses expoentes são usados para definir classes de universalidade. Tipicamente cada classe de universalidade é caracterizada por certas simetrias do sistema e podem ser associadas com uma equação diferencial estocástica. Simulações numéricas para a DB em uma dimensão fornecem os valores [2]:

$$\alpha = 0.47 \pm 0.02, \quad \beta = 0.33 \pm 0.06. \quad (1.13)$$

Uma característica importante da DB e que é comum a outros modelos discretos é que correlações se desenvolvem ao longo da superfície, isso implica que sítios diferentes não são completamente independentes. Embora a interação seja local, a “informação” sobre a altura de cada sítio se espalha globalmente, o que caracteriza a criticalidade. A distância típica em que um elemento do sistema “sabe sobre” os outros - a distância característica sobre a qual eles estão correlacionados - é chamada comprimento de correlação e denotada por $\xi_{||}$ [2].

A existência de correlações no sistema está por trás do mecanismo que leva à saturação. No começo do crescimento, os sítios não estão correlacionados. Durante o processo $\xi_{||}$ cresce com o tempo. Para uma rede finita $\xi_{||}$ não cresce indefinidamente porque é limitado pelo tamanho do sistema. Quando $\xi_{||}$ atinge o tamanho do sistema, a superfície toda se torna correlacionada,

resultando na saturação da rugosidade. Portanto, na saturação,

$$\xi_{\parallel} \sim L, \quad t \gg t_{\times}, \quad (1.14)$$

utilizando a equação 1.4 podemos escrever

$$\xi_{\parallel} \sim t^{1/z}, \quad t \ll t_{\times}. \quad (1.15)$$

Um comprimento de correlação perpendicular, ξ_{\perp} , caracteriza as flutuações na direção de crescimento e tem o mesmo comportamento que $w(L, t)$ [2].

Para uma superfície autoafim, há duas outras maneiras de se estimar o expoente de rugosidade. Uma delas é através do cálculo da função de correlação definida por

$$C(x) = [\langle [h(x + x') - h(x')]^2 \rangle_{x'}]^{1/2}. \quad (1.16)$$

As alturas da interface são consideradas no mesmo instante de tempo, por isso não vamos escrever a dependência temporal explicitamente. As medidas devem ser feitas no estado estacionário. O expoente de rugosidade pode ser determinado pela relação

$$C(x) \sim x^{\alpha}, \quad x \ll \xi_{\parallel}. \quad (1.17)$$

Embora a equivalência entre o expoente α da equação acima e o expoente de rugosidade não seja transparente, vários estudos numéricos mostraram que os expoentes são os mesmos. Na verdade, muitas vezes α é definido pela equação 1.17.

Alguns experimentos medem o fator de estrutura $S(k)$ definido como

$$S(k) = |\hat{h}(k)|^2, \quad \text{onde} \quad \hat{h}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int h(x) e^{ikx} dx, \quad (1.18)$$

o fator de estrutura deve obedecer uma lei de escala na forma

$$S(k) \sim k^{-1-2\alpha}. \quad (1.19)$$

A equação acima fornece um meio alternativo de estimar o expoente α . Para demonstrá-la, considere uma definição diferente, mas equivalente [18] à equação 1.16 para a função de correlação,

$$C(x) = \left\{ \frac{1}{L} \int h(x+x')h(x')dx' \right\}^{1/2} = [\langle h(x+x')h(x') \rangle_{x'}]^{1/2}. \quad (1.20)$$

O comportamento de $C(x)$ continua sendo dado pela equação 1.17. Com o teorema de Wiener-Khinchin podemos relacionar $S(k)$ com a transformada de Fourier do quadrado da função de correlação [19], temos que

$$S(k) = \frac{L}{2\pi} \int C^2(x)e^{ikx}dx. \quad (1.21)$$

Vamos fazer a mudança de variável $x = \lambda x'$ na integral 1.21

$$S(k) = \frac{L}{2\pi} \int C^2(\lambda x')e^{i\lambda kx'}\lambda dx' = \lambda^{2\alpha+1}S(\lambda k) \quad (1.22)$$

no último passo usei a relação $C^2(x) \sim x^{2\alpha}$ que implica em $C^2(\lambda x) \sim \lambda^{2\alpha}C^2(x)$. Da mesma forma, vemos que a equação 1.22 implica que $S(k)$ se comporta como indicado pela equação 1.19.

1.2 Modelos Contínuos

As teorias contínuas representam o limite $t \rightarrow \infty$ e $L \rightarrow \infty$ de modelos discretos. Esse é o chamado limite hidrodinâmico. Estabelecer links diretos entre os modelos discretos e as equações contínuas não é simples. No entanto, vimos que o comportamento de escala não depende muito dos detalhes microscópicos. Para encontrar a equação diferencial relacionada com determinado modelo, usamos o princípio de que tal equação deve ser a mais simples possível compatível com as simetrias do sistema. Se $h(x, t)$ for uma função unívoca, esperamos que a equação de crescimento tenha a forma:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = G(h, x, t) + \eta(x, t), \quad (1.23)$$

onde $G(h, x, t)$ é uma função geral da altura, da posição e do tempo. A função $\eta(x, t)$ é o termo de ruído e tem as propriedades

$$\langle \eta(x, t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = 2D\delta(x - x')\delta(t - t'), \quad (1.24)$$

e é o responsável por introduzir a aleatoriedade na superfície [20]. Inicialmente, vamos considerar as seguintes simetrias:

1. invariância translacional no espaço $x \rightarrow x + \Delta x$. Essa simetria elimina a dependência explícita em x na equação de crescimento.
2. invariância translacional no tempo $t \rightarrow t + \Delta t$, que elimina a dependência em t .
3. invariância translacional ao longo da direção de crescimento $h \rightarrow h + \Delta h$, eliminará a dependência direta em h .
4. invariância sob reflexões no espaço $x \rightarrow -x$. Essa simetria vai eliminar as derivadas ímpares de $h(x)$.
5. invariância sob reflexões com respeito a altura média $h \rightarrow -h$, eliminará as potências pares da derivada de h , termos como $(\nabla h)^2$, $(\nabla h)^4$, etc ².

As 3 primeiras simetrias são necessárias porque a equação de crescimento não pode depender da origem do sistema de coordenadas. A quarta simetria traduz o fato que a interface deve permanecer invariante sob uma rotação de 180 graus em relação ao eixo perpendicular à direção de propagação. A última simetria, pode ser quebrada em alguns modelos como veremos a seguir.

Com essas considerações a forma de $G(h, x, t)$ se reduz a

$$G(h, x, t) = (\nabla^2 h) + (\nabla^4 h) + \dots + (\nabla^{2n} h) + (\nabla^2 h)(\nabla h)^2 + \dots + (\nabla^{2k} h)(\nabla h)^{2j}. \quad (1.25)$$

²Considere a equação $\partial_t(h) = (\nabla h)^2$, fazendo a transformação $h \rightarrow -h$, temos $\partial_t(h) = -(\nabla h)^2$. Por causa dessa mudança no sinal da equação, o termo $(\nabla h)^2$ deve ser excluído da equação de crescimento.

Como dissemos anteriormente, as equações diferenciais representam o limite de $L \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$, assim conseguimos simplificar ainda mais a equação 1.25.

O termo $\nabla^4 h$ é irrelevante em comparação com $\nabla^2 h$ no limite hidrodinâmico. Irrelevante quer dizer que esse termo não muda os expoentes críticos. Já vimos que a transformação $x \rightarrow x' = \lambda x$ implica, para uma superfície autoafim, que $h \rightarrow h' = \lambda^\alpha h$. Como resultado dessa transformação teremos para $\nabla'^4 h'$ e $\nabla'^2 h'$

$$\nabla^2 h \rightarrow \nabla'^2 h' = \lambda^{\alpha-2} \nabla^2 h \quad (1.26)$$

e

$$\nabla^4 h \rightarrow \nabla'^4 h' = \lambda^{\alpha-4} \nabla^4 h. \quad (1.27)$$

Daí, para escalas de comprimento grandes $\lambda \rightarrow \infty$, o termo Laplaciano determina o comportamento de escala [2].

Argumentos similares eliminam outros termos, restando apenas $\nabla^2 h$, assim somos levados à equação de Edwards-Wilkinson (EW) [20]:

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(x, t). \quad (1.28)$$

Aqui ν é a tensão superficial, o termo $\nu \nabla^2 h$ é uma força elástica que tende a suavizar a superfície [21]. A figura 1.6 ilustra esse efeito. Considere que no tempo t a altura da interface seja $h(x, t)$ (linha vermelha), em um tempo $t + \delta t$ a altura da superfície é $h(x, t + \delta t) \approx h(x, t) + \delta t \times \nu \nabla^2 h(x, t)$, onde descartamos o termo de ruído. O efeito da tensão superficial é redistribuir a altura da superfície. A equação de EW está associada ao modelo discreto de deposição com relaxação: depois de ser depositada em uma posição i qualquer, permitimos que a partícula se mova para um de seus vizinhos próximos $i - 1$ e $i + 1$ caso a altura desses seja menor do que em i . O processo de relaxação tem o papel de redistribuir as flutuações na altura da interface, da mesma maneira que o termo $\nu \nabla^2 h$.

Podemos obter os expoentes da equação de EW resolvendo-a exatamente ou usando argumentos de escala. Se usarmos a transformação 1.10 na equação 1.28 teremos

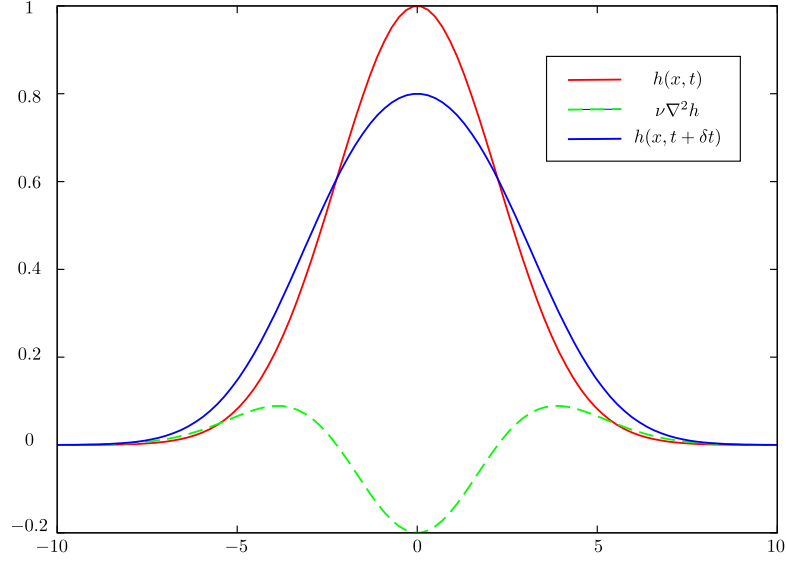


Figura 1.6: Efeito da tensão superficial na morfologia da superfície.

$$\lambda^{\alpha-z} \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \lambda^{\alpha-2} \nabla^2 h + \lambda^{-1/2-z/2} \eta(x, t). \quad (1.29)$$

O último termo foi obtido usando a equação 1.24 e a propriedade $\delta(ax) = a^{-1} \delta(x)$ da função delta.

$$\begin{aligned} \langle \eta(\lambda x, \lambda^z t) \eta(\lambda x', \lambda^z t') \rangle &= 2D \delta(\lambda x - \lambda x') \delta(\lambda^z t - \lambda^z t') \\ &= 2D \lambda^{-1-z} \delta(x - x') \delta(t - t') \\ &= \lambda^{-1-z} \langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Para que a equação 1.29 seja invariante cada termo deve ser independente de λ , o que nos fornece os expoentes (para 1D):

$$\alpha = 1/2, \quad z = 2, \quad \text{então} \quad \beta = 1/4. \quad (1.31)$$

Em muitos casos a simetria 5 é quebrada por algum mecanismo de crescimento lateral. Daí, termos não lineares são incluídos na equação de crescimento. Incluindo o termo $(\nabla h)^2$ na

equação 1.28, obtemos a equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ):

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(x, t), \quad (1.32)$$

onde λ é chamado excesso de velocidade. É instrutivo considerar a construção anterior que usamos para o termo Laplaciano para interpretar geometricamente o termo não linear (veja a figura 1.7).

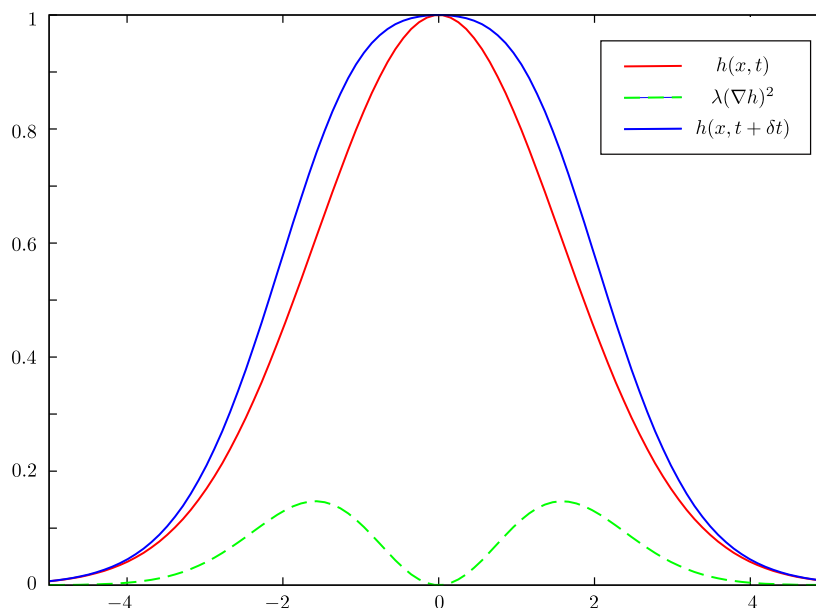


Figura 1.7: Efeito do termo não linear na morfologia da superfície. Note que mais material é adicionado nas partes da interface onde a inclinação é maior, como resultado, a altura média da interface aumenta.

Como o termo $(\nabla h)^2$ é sempre positivo, temos um aumento na altura da interface com adição de “matéria”. O efeito do termo não linear é bem diferente do termo Laplaciano que reorganiza a altura da interface de tal maneira que a massa total permaneça constante.

Infelizmente, a transformação 1.10 não funciona na equação KPZ, ficaremos com 3 relações para 2 expoentes α e z , o que impossibilita o cálculo. Os expoentes da equação 1.32 só são conhecidos exatamente em uma dimensão, através de cálculos que envolvem o grupo de renormalização, nesse caso os expoentes são [20]:

$$\alpha = 1/2, \quad \beta = 1/3 \quad z = 3/2. \quad (1.33)$$

Comparando com os expoentes obtidos numericamente para a DB (1.13), encontramos uma semelhança notável, sugerindo que a DB pertence à mesma classe de universalidade da equação KPZ.

Em muitos experimentos, depois das partículas serem depositadas na superfície, elas se difundem. Essa é a situação encontrada, por exemplo, em fenômenos de crescimento MBE [2, 22]. Vamos supor que depois que as partículas sejam depositadas, não podem mais deixar o substrato. Nesse caso, é óbvio que o número de partículas N_p se conserva e será dado por:

$$N_p = \int \rho(x) dx, \quad (1.34)$$

onde $\rho(x)$ é a densidade de partículas na posição x . A altura da interface no ponto x estará relacionada com a densidade ρ . Como o número de partículas se conserva, a altura da interface deve obedecer a equação da continuidade:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}. \quad (1.35)$$

A corrente \mathbf{j} está relacionada com o potencial químico μ . A matéria tende a se mover de regiões com maior potencial químico para regiões com menor potencial químico³. Dito isso, \mathbf{j} deve ser direcionada pelo gradiente do potencial químico local,

$$\mathbf{j} \propto \nabla \mu. \quad (1.36)$$

O movimento de uma região para outra depende do número de ligações que uma partícula deve romper para que a difusão ocorra. O número de ligações aumenta com a curvatura local da interface em dado ponto. Se a curvatura é positiva, $\nabla^2 h > 0$, o número de ligações tende a ser grande, e se $\nabla^2 h < 0$ esse número é menor (Veja a figura 1.8).

A suposição mais simples é que μ seja proporcional à $\nabla^2 h$

$$\mu \propto -\nabla^2 h. \quad (1.37)$$

Combinando esses resultados, chegamos a equação:

³Veja a seção 2-8 do livro Thermodynamics and an introduction to thermostatics de Herbert B. Callen.

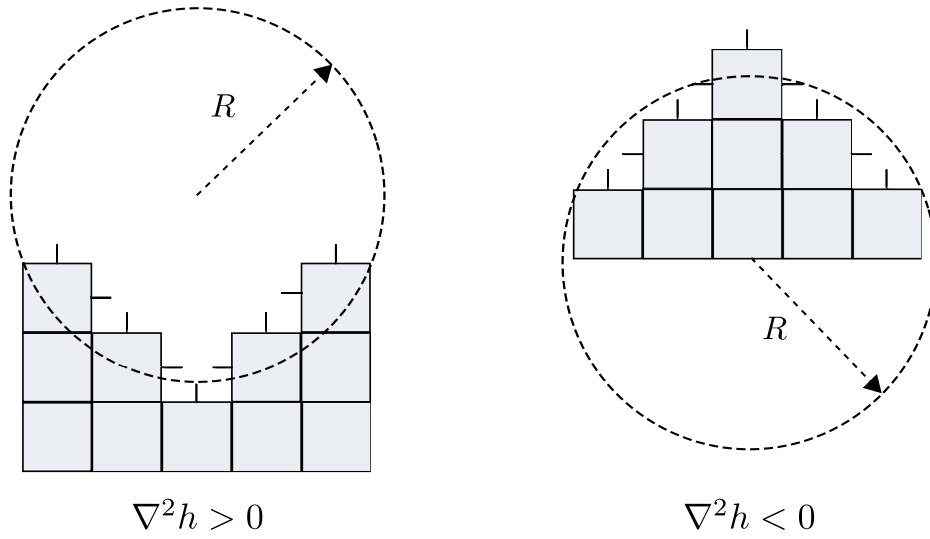


Figura 1.8: Ilustração das possíveis geometrias locais da frente. Mínimos locais são mais favoráveis energeticamente porque o número de possíveis ligações será maior.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -K\nabla^4 h. \quad (1.38)$$

Vamos acrescentar à equação acima o termo F , que representa o fluxo de partículas, e η que será a parte responsável pela aleatoriedade que é inerente ao processo.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F - K\nabla^4 h + \eta. \quad (1.39)$$

A equação 1.39 foi proposta de maneira independente por Wolf e Villain [23], e Das Sarma e Tamborenea [24].

Junto com a difusão de partículas, outro processo importante em experimentos de MBE é a dessorção de partículas: depois de depositadas, algumas partículas deixam a superfície. A probabilidade de dessorção vai depender do quão fortemente as partículas estão ligadas à superfície. Esse fenômeno terá uma conexão com μ . Deixando de lado por um momento a difusão, o processo de deposição-dessorção é governado pela diferença entre o potencial químico médio $\bar{\mu}$ e o potencial químico local

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -B[\mu - \bar{\mu}], \quad (1.40)$$

usando a equação 1.37 e considerando novamente os outros processos discutidos acima (difusão, etc), ficamos com a equação [2]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - K \nabla^4 h + B\bar{\mu} + F + \eta. \quad (1.41)$$

A equação 1.41 produz uma interface mais rica, do ponto de vista geométrico, que as outras equações discutidas até agora. A quarta derivada introduz um efeito de competição que leva a um crossover entre duas regiões com expoentes de rugosidade diferentes [2]. Esse efeito será discutido mais adiante.

Nos concentramos até agora em modelos que descrevem a deposição de partículas. Na próxima seção veremos que interfaces autossimilares também estão presentes em uma situação física bem diferente.

1.3 Transição de Depinning

Considere uma partícula pontual de massa m sendo empurrada por uma força externa F em uma mesa com atrito. A partícula é estacionária até que a força externa seja maior que a força de atrito estático F_c . Se a força externa foi maior que F_c , a partícula terá a equação de movimento

$$m \frac{d^2 h}{dt^2} = F - F_c - \gamma \frac{dh}{dt}, \quad (1.42)$$

o último termo do lado direito é a força de atrito viscoso. Depois de um período inicial de aceleração, a partícula atingirá uma velocidade constante v devido às forças de viscosidade. Nesse regime, a aceleração é nula. A transição entre o regime estático e o regime dinâmico é chamada de transição de depinning⁴. O parâmetro de ordem da transição é a velocidade, e para F perto de F_c , a velocidade se comportará segundo a lei de potência

$$v \sim (F - F_c)^\theta, \quad (1.43)$$

⁴Em português, o termo mais apropriado seria transição de desancoramento, mas esse termo é tão pouco usado que vamos utilizar o termo em inglês.

onde θ é chamado de expoente de velocidade, no nosso exemplo $\theta = 1$.

Vamos generalizar a situação anterior: agora, considerando um objeto extenso, ao invés de uma partícula. Supomos que as interações entre as partes do objeto não são fortes o suficiente de maneira que o objeto transportado possa ser considerado elástico. O exemplo mais familiar seria uma interface em um meio poroso (figura 1.9). Considere que uma força constante F (*driving force*), seja aplicada no sistema fazendo com que esse se mova. Se F for pequena, ela não será suficiente para vencer a resistência do meio, algumas partes poderiam se mover deformando a frente de propagação mas eventualmente a interface pararia. Aumentando F , alguns segmentos voltariam a se mover parando apenas onde a resistência fosse muito forte e se F fosse grande o suficiente, seria possível vencer todas os pontos de resistência e o movimento continuaria indefinidamente, talvez com alguma velocidade constante v , se a força for justo a necessária para anular a aceleração. Existe uma força $F = F^*$ que separa os regimes onde a interface fica parada (pinning) ou se move indefinidamente [5].

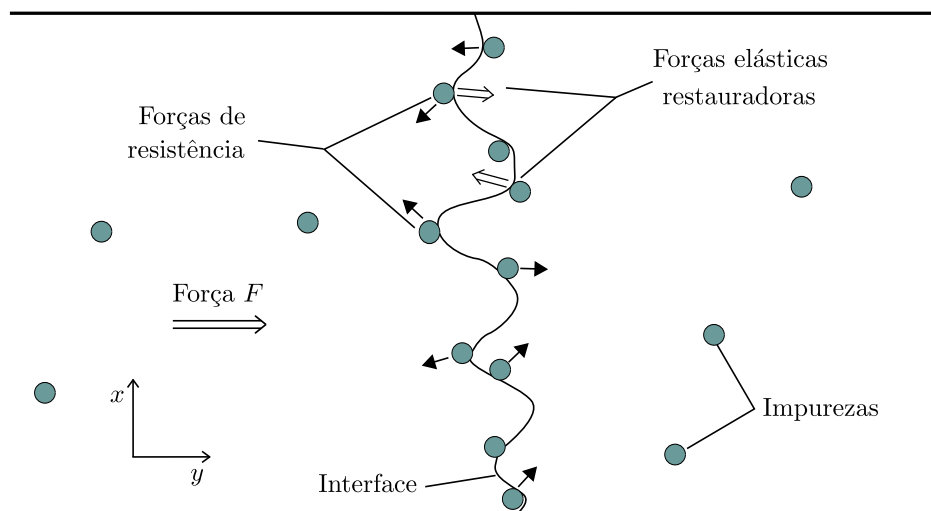


Figura 1.9: Representação esquemática de uma interface se movendo em um meio aleatório.

Considere uma linha em duas dimensões orientada ao longo do eixo x . A configuração da linha em um tempo t é descrito pelo campo de alturas $h(x, t)$. Em muitos casos, onde a viscosidade predomina sobre o termo de inércia, a velocidade de um ponto da curva será dada por

$$\frac{dh(x)}{dt} = F + F_{el} + \eta(x, h). \quad (1.44)$$

O primeiro termo do lado direito é a força externa uniforme que funciona como parâmetro de controle. O meio aleatório exerce forças de resistência sobre a interface e essas forças são representadas pelo termo $\eta(x, h)$. Com a suposição de que o meio é translacionalmente invariante, a média desse termo é zero. O termo F_{el} descreve as interações elásticas entre partes diferentes da linha [25]. A constante γ que multiplica o termo $\partial h/\partial t$, dando a dimensão correta para a equação 1.44, foi considerada igual a 1 por conveniência. Na ausência de força externa, a interface ficará parada. Se adicionarmos uma força externa pequena a interface tende a se mover, mas eventualmente ficará presa pelas impurezas, $\partial h/\partial t = 0$ para todos os pontos. Para forças maiores que a força crítica F^* , a linha se move com uma velocidade média finita (veja a figura 1.10). Se $F \gg F^*$, a velocidade crescerá linearmente com F . Nas proximidades de F^* , a velocidade, que é o parâmetro de ordem da transição, segue a equação

$$v \sim (F - F^*)^\theta. \quad (1.45)$$

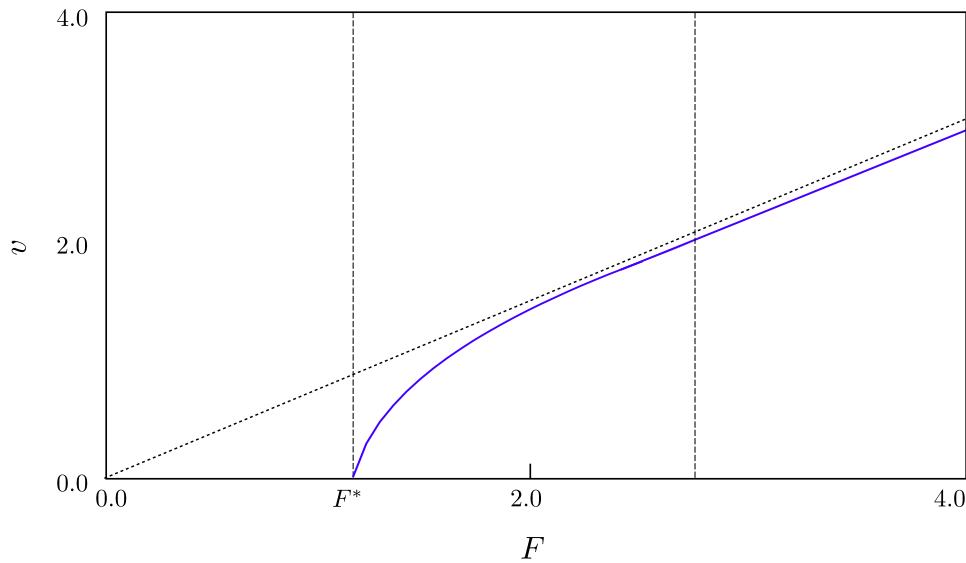


Figura 1.10: Velocidade da frente como função da força externa.

O movimento da interface para $F \rightarrow F^*$ pela direita não é uniforme. Em um dado momento, a interface terá partes que estão presas e outras parte que estarão se movendo, quando o efeito combinado das forças que movem o sistema superarem a força de resistência de uma dada região, a interface salta para a próxima região que apresenta uma resistência mais forte. No estado crítico, a interface é invariante por mudança de escala e apresenta o comportamento

descrito na primeira seção.

Denotamos por ξ o comprimento de correlação que corresponde ao tamanho característico das regiões presas. À medida que nos aproximamos da força crítica, o tamanho dessas regiões diverge como

$$\xi \sim (F - F^*)^{-\nu}, \quad (1.46)$$

onde ν é chamado de expoente do comprimento de correlação. Os saltos de uma configuração para outra podem ser descritos em termos de “avalanches”. A distribuição do tamanho desses saltos segue uma lei de potência. A probabilidade de observar um salto de tamanho r maior do que um certo tamanho l é dada por [26]

$$P(r > l) \propto l^{-\kappa}. \quad (1.47)$$

O tempo de duração de uma avalanche escala com $t(\xi) \sim \xi^z$. Daí, os quatro expoentes α , θ , z e ν caracterizam a interface nesse tipo de transição. Esses expoentes podem ser relacionados [2, 25], durante um salto de tamanho ξ a frente se move uma distância ξ^α durante um tempo ξ^z

$$v \sim \frac{\xi^\alpha}{\xi^z} \sim |F - F^*|^{\nu(z-\alpha)} \Rightarrow \theta = \nu(z - \alpha). \quad (1.48)$$

Não podemos terminar esse capítulo sem falar da equação *quenched* KPZ ou QKPZ, que talvez seja a equação mais estudada nesse contexto. A equação KPZ não pode ser formalmente “deduzida”, mas é construída a partir de argumentos de simetria como o que usamos antes. As simetrias são as mesmas da equação EW com exceção da simetria 5. Se a interface tem uma velocidade finita, então a condição $h \rightarrow -h$ é quebrada, introduzindo termos não-lineares na equação de movimento [25]. A equação QKPZ é dada por

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = F + \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(x, h), \quad (1.49)$$

onde o ruído térmico $\eta(x, t)$ na equação KPZ 1.32 é substituído por um ruído fixo (quenched noise), perto da criticalidade esse tipo de ruído é mais importante que o ruído térmico [27] (ou

equivalentemente podemos pensar que estamos no limite de temperatura zero).

Vários modelos discretos caem em duas classes de universalidade distintas, ambas descritas pela equação 1.49. Não vamos entrar em detalhes, mas basicamente o que distingue essas classes é a relevância do termo não linear. Para a primeira classe temos $\lambda = 0$ (ou $\lambda \rightarrow 0$ quando $F \rightarrow F^*$) enquanto na segunda o termo não-linear é diferente de zero [20, 28].

Capítulo 2

Criticalidade auto-organizada e dinâmica extrema

Nesse capítulo faremos uma introdução sobre o tema criticalidade auto-organizada (SOC)¹. O avanço desse tópico pode ser atribuído ao trabalho seminal de Bak, Tang e Wiesenfeld [29] que introduziram em 1987 um modelo de pilha de areia, considerado como o primeiro exemplo claro de SOC. Esse trabalho abriu o caminho para uma variedade de modelos computacionais que também exibem SOC, e entre eles temos a transição de depinning.

O termo criticalidade auto-organizada se refere a uma classe de modelos, onde o sistema é atraído para o estado crítico sem que nenhum parâmetro de controle precise ser ajustado, a própria dinâmica do sistema encarrega-se de sintonizá-lo na situação crítica, depois de um certo tempo transiente. Durante algum tempo se considerou a SOC como um fenômeno separado, sem relação com as transições de fase usuais. No entanto, na última década foram estabelecidas conexões entre SOC e modelos que exibem uma transição de fase para estados absorventes [30] (um estado absorvente é tal que se o sistema atingir esse estado, não pode mais deixá-lo).

Duas classes de SOC podem ser distinguidas. A primeira delas é representada pelos modelos de pilha de areia. Nesses modelos, partículas (“areia”) são depositadas no sistema a uma taxa r e deixam o sistema a uma taxa ϵ . O estado estacionário, que corresponde à densidade de partículas constante no tempo, é atingido quando há um balanço entre as taxas r e ϵ . A dinâmica local consiste em um tipo de redistribuição de partículas. No limite em que r e $\epsilon \rightarrow 0^+$, o sistema

¹Do inglês *self-organized criticality*.

exibe um padrão de atividades que é invariante por mudança de escala. A adição e remoção de partículas acontecem a uma taxa infinitamente lenta quando comparado com a dinâmica local que ocorre à taxa unitária.

A segunda categoria, exemplificada pelo modelo Bak-Sneppen [31] e pela transição de depinning, envolve um certo tipo de dinâmica chamada extrema, onde o elemento do sistema que extremiza uma dada quantidade será o próximo a ser atualizado.

2.1 Pilhas de Areia

Começamos descrevendo um modelo simples de Caminhantes Aleatórios Ativados (ARW)². Cada sítio j de uma rede de tamanho L , com condições periódicas de contorno, tem um número z_j de caminhantes aleatórios. Inicialmente, distribuimos N caminhantes aleatórios entre os sítios. Cada caminhante é independente dos demais, podendo ir para qualquer sítio vizinho com igual probabilidade. A única restrição será que se um sítio tiver $z_i = 1$, ou seja, um único caminhante, então esse deve permanecer parado até outro caminhante se juntar a ele [32].

Há dois tipos de configuração: ativa, na qual pelo menos um sítio tem dois ou mais caminhantes; e absorvente, no qual nenhum sítio tem mais de um caminhante e portanto todos os caminhantes estão imóveis. Se $N > L$ só configurações ativas são possíveis, e o movimento dos caminhantes continua indefinidamente. Se $N \leq L$, as duas configurações são possíveis. Vamos considerar a densidade $\zeta \equiv N/L - 1$. Se começamos a dinâmica para um dado ζ no estado ativo, podemos nos perguntar se o sistema vai permanecer no estado ativo ou se eventualmente cairá em uma configuração absorvente. Ora, se ζ for pequena é mais provável que o sistema caia na configuração absorvente, mas parece razoável que se ζ for suficientemente grande, próxima de 1, a probabilidade de atingir o estado absorvente se torne tão pequena que o sistema permaneça no estado ativo. O que queremos dizer é que deve existir uma densidade crítica ζ_c que separa essas duas fases.

Realmente, estudos de campo médio sobre ARW e simulações de Monte Carlo confirmam essa intuição de que há uma transição de fase no modelo. Essa transição é contínua com o parâmetro de ordem dado pela densidade de sítios ativos ρ_a . Para ζ perto de ζ_c , ρ_a se comporta

²do inglês *Activated Random Walks*.

como uma lei de potência, $\rho_a \sim (\zeta - \zeta_c)^\beta$, com $\zeta_c \approx 0.7169$ e $\beta = 0.43$ [32].

O ARW tem um ponto crítico tradicional, precisamos ajustar o parâmetro de ordem ζ para seu valor crítico ζ_c a fim observar a transição, o que dificilmente pode ser chamado de criticalidade *auto-organizada*. Para ver a conexão do ARW com SOC, vamos considerar o modelo de pilhas de areia de Manna que tem a mesma regra dinâmica local que ARW [33]. No modelo de pilhas de areia de Manna a dinâmica é feita em paralelo. O ARW também pode ser definido com dinâmica paralela; mesmo com essa mudança o modelo continua tendo uma transição de fase para estados absorventes.

A diferença fundamental entre o modelo de Manna e o ARW é que o modelo de Manna permite adição e remoção de caminhantes. O modelo de Manna é definido com condições de contorno abertas, assim quando um caminhante atinge qualquer uma das extremidades, há uma probabilidade de 1/4 (em 2 dimensões) do caminhante deixar o sistema. Se permitimos que isso aconteça, o sistema vai atingir eventualmente o estado absorvente. Quando o sistema atingir esse estado, adicionamos mais um caminhante em um sítio da rede escolhido ao acaso.

A sequência de configurações ativas entre duas adições sucessivas de um caminhante é definida como uma avalanche; as avalanches podem envolver qualquer número de sítios, desde zero até o sistema inteiro. No estado estacionário (ζ é constante no tempo) a distribuição de avalanches ocorre em todas as escalas, e segue uma lei de potência $P(s) \sim s^{-\tau}$, onde s é o número de sítios envolvidos em uma dada avalanche. Portanto, o modelo de pilhas de areia de Manna exibe invariância de escala no estado estacionário.

Diferente do ARW que exibe invariância de escala somente quando *ajustamos* a densidade de sítios para o seu valor crítico ζ_c , no modelo de Manna a densidade é atraída para seu valor crítico. Não há nada de esotérico nisso: na fase ativa onde $\zeta > \zeta_c$ temos $d\zeta/dt < 0$, já que as partículas só podem deixar o sistema, enquanto que na fase absorvente temos $\zeta < \zeta_c$ e adição de partículas $d\zeta/dt > 0$. Conclusão: a única densidade estacionária possível será ζ_c .

Quando adicionamos uma partícula no sistema fazemos $\zeta \rightarrow \zeta + 1/L$. Por outro lado, as partículas deixam o sistema a uma taxa $d\zeta/dt \propto L^{-1}\rho_b$, onde ρ_b é densidade de sítios ativos na fronteira. As condições r e $\epsilon \rightarrow 0^+$, mencionadas no início do capítulo, são obtidas no limite $L \rightarrow \infty$, o que já é uma exigência para que se tenha uma transição de fase. Essa prescrição

introduz no modelo a separação infinita entre duas escalas de tempo que é essencial para o aparecimento de SOC.

Há outra variante para o modelo do ARW que também exhibe invariância de escala no estado estacionário. As regras são as mesmas do modelo de Manna. A única mudança é que a cada passo de tempo um sítio ativo (com $z_i \geq 2d$) transfere um único caminhante para cada um dos seus $2d$ vizinhos. Vamos chamar isso de desabamento. Agora, a única aleatoriedade está na configuração inicial. Esse é o modelo de pilhas de areia Bak-Tang-Weisenfeld.

2.2 Dinâmica Extrema

Vamos considerar uma interface linear, descrita pela equação 1.44. Para alcançar a transição descrita na seção anterior precisaríamos ajustar a força F para seu valor crítico F^* . No entanto, podemos modificar o modelo para que o sistema seja atraído para esse estado. O que vamos fazer é substituir a força constante F por um vínculo de velocidade constante v . Quando fizermos o limite $v \rightarrow 0$, nos aproximamos da transição. Isto é conseguido através de uma dinâmica extrema que consiste em adaptar a força externa para que só um sítio possa se desprender em cada passo de tempo [32].

A interface é discretizada. Do ponto de vista dinâmico podemos pensar que estamos prendendo cada sítio da rede a uma mola e movemos a outra ponta da mola com velocidade V . Nesse caso, a força externa será dada por $F = k(Vt - h_i)$ e a equação de movimento se escreve

$$\frac{dh_i}{dt} = F_{el,i} + k(Vt - h_i) + \eta_i, \quad (2.1)$$

onde k é a constante da mola. Se puxarmos a mola com uma velocidade muito grande o movimento será suave $\dot{h} = V$. Para $V \rightarrow 0^+$ o movimento da interface, será composto de saltos como aqueles descritos no capítulo anterior, e a interface exibirá invariância de escala. Aqui V faz um papel análogo a r nas pilhas de areia. O ajuste de F em F^* é substituído pelo ajuste de $V \rightarrow 0^+$. Parece haver diferenças fundamentais entre os modelos de pilha de areia e o modelo de interface, mas a despeito de todas as diferenças várias conexões podem ser feitas. Vamos explorar a seguir como o modelo BTW pode ser mapeado em equação análoga à equação de

uma interface.

Considere o modelo BTW em duas dimensões. vamos chamar de H_i o número de vezes que o sítio i liberou uma partícula desde do tempo zero. O número de ocupação difere do seu valor inicial $z_i(0)$ devido à perda e ao ganho de partículas. O número de partículas que o sítio perdeu desde $t = 0$ será dado por $4H_i$, porque em cada passo o sítio i sempre perde 4 partículas. O ganho será $\sum_{nn} H_j$, já que o sítio i ganha uma partícula cada vez que um dos seus vizinhos libera partículas. O número de ocupação do sítio i , vai ser dado por:

$$\begin{aligned} z_i(t) &= z_i(0) - 4H_i(t) + \sum_{nn} H_j \\ &= z_i(0) + \nabla_D^2 H_i(i), \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde $\nabla_D^2 H_i(i)$ é a versão discreta do laplaciano. Vamos usar a notação $\frac{dH_i}{dt}$ para indicar a taxa na qual a variável $H_i(t)$ salta para $H_i(t) + 1$. Essa taxa é igual a 1 se $z_i(t) \geq 4$ e é igual a zero, caso contrário. Podemos escrever a equação dinâmica para H_i como

$$\frac{dH_i}{dt} = \Theta[z_i(0) + \nabla_D^2 H_i(i) - 3], \quad (2.3)$$

onde a $\Theta(x) = 1$ se $x > 0$ e zero caso contrário. Vamos definir F como $\zeta - 3$ e η_i como $z_i(0) - \zeta$, com essas definições a equação 2.3 se escreve:

$$\frac{dH_i}{dt} = \Theta[\nabla_D^2 H_i(i) + F + \eta_i]. \quad (2.4)$$

Pensando em $H_i(t)$ como a altura discretizada de uma interface a equação 2.4 representa uma interface dinâmica como a descrita anteriormente. Ajustando ζ para seu valor crítico ζ_c é análogo a ajustar a força para seu valor crítico F^* . Se substituirmos a variável discreta H_i pela variável contínua $H(x, t)$ e substituirmos Θ pelo seu argumento, temos a equação de Edwards-Winkinson para crescimento de superfícies com desordem colunar. Essa similaridade sugere que o modelo BTW e a equação de EW pertencem à mesma classe de universalidade, mas isso é uma questão em aberto. Também é possível pensar numa representação em termos de H_i para o modelo de Manna, embora seja bem mais difícil devido à natureza estocástica do modelo.

No próximo capítulo, vamos apresentar o modelo que investigamos. A força elástica afeta a classe de universalidade da transição. Aproximando o tipo mais usado de interação elástica de longo alcance, chegamos em um tipo de interação que inclui primeiros e segundos vizinhos. Muitos conceitos que foram apresentados até agora serão usados no nosso estudo.

Capítulo 3

Descrição do modelo e Resultados

Nesse capítulo vamos apresentar o modelo de transição de depinning que investigamos. Na primeira seção descrevemos mais detalhes da dinâmica do modelo, e em seguida discutimos o papel exercido pela interação elástica. Na seção 3.3 estimamos grandezas relacionadas à morfologia da interface, à rugosidade e à função de correlação. Nas seções seguintes estudamos o mapa de atividades e a distribuição de forças.

3.1 Implementação

Em cada instante de tempo, a interface será representada por uma função $h(x)$. A orientação da interface é ao longo do eixo x , enquanto a propagação acontece na direção perpendicular y . Para simulações numéricas, a frente é discretizada em uma rede regular de tamanho L com condições periódicas de contorno. O tempo também é discretizado e incrementado por uma unidade a cada movimento da frente. Esse tempo é uma forma simples de ordenar os eventos sucessivos, mas não corresponde ao tempo físico. O movimento da frente para uma dada força F depende da competição entre a força dos pontos de resistência $\eta(x, h(x))$ e as interações elásticas da frente, que discutiremos com mais detalhes na seção 3.2.

Para estudar a transição de depinning, nós movemos a frente através de uma dinâmica extrema. Como vimos, esse tipo de dinâmica consiste em adaptar, a força externa para que somente um sítio possa se desprender a cada passo de tempo. Dada uma força externa F , o critério para desprender uma posição particular da frente é

$$F > F_i(t) = F_i^{el}(h_j) + \eta_i(h_i(t)). \quad (3.1)$$

Podemos definir o sítio extremo i^* , h_{i^*} tal que $F_c(t) \equiv F(x^*, t) = \min_x[F_i(t)]$ é a menor força externa a ser aplicada para que somente um sítio avance. A dinâmica extrema então consiste em adaptar, em cada passo de tempo, a força externa exatamente em F_c . A dinâmica real pode ser pensada como se a força externa aumentasse progressivamente de 0 até o valor em que o sítio i^* possa se desprender. O mecanismo pode ser qualquer: poderia ser alguém puxando uma mola como descrito no capítulo anterior, ou simplesmente aumentar a pressão exercida sobre o fluido em um experimento como o de Hele-Shaw¹. Essa fase de acumulação (aumento gradativo da força) é muito lenta de forma que o salto (descarga de tensão) que produzirá pode ser considerado instantâneo. Depois do salto, a força é reduzida novamente a zero e um novo ciclo de acumulação lenta se inicia.

Podemos estabelecer uma correspondência entre o tempo da simulação e o tempo físico. Supõe-se que o força aumenta linearmente com o tempo (físico). Assim a evolução temporal da força será como a mostrada na figura 3.1.

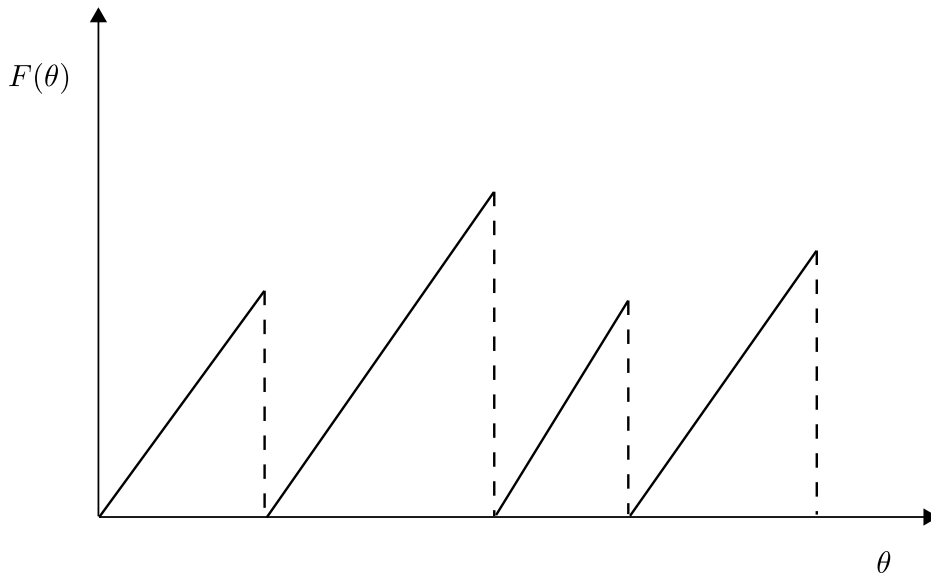


Figura 3.1: Desenho esquemático da evolução temporal da força externa.

O tempo físico θ será dado por

¹Para uma discussão sobre o experimento de Hele-Shaw veja o capítulo 11 da referência [2].

$$\theta = A \sum_{i=0}^t F_c(t_i), \quad (3.2)$$

onde A é uma constante. O valor de θ depende da distribuição estatística de F_c . Em todos os testes que fizemos o tempo físico é proporcional ao número de passos (veja a figura 3.2), de forma que para todos os efeitos o tempo físico é proporcional ao tempo de simulação. Não se observa nenhuma mudança nos expoentes críticos, por exemplo da rugosidade, se considerarmos a evolução $w(\theta)$ ou $w(t)$

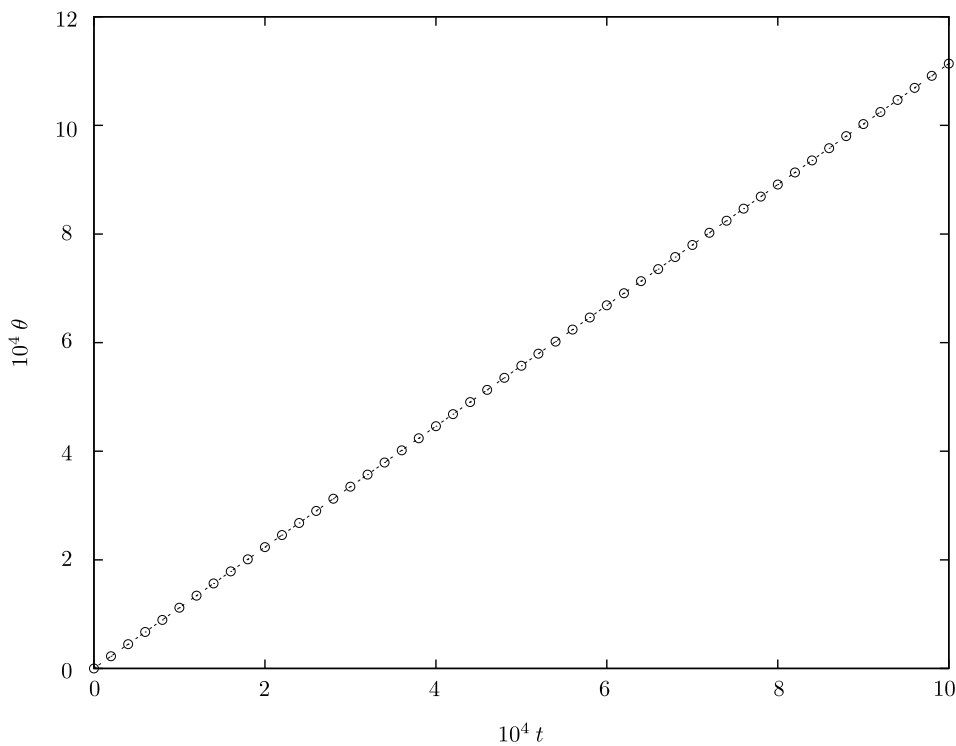


Figura 3.2: O tempo físico definido na equação 3.2 é considerado em função do número de passos t .

A aleatoriedade dos pontos de resistência é descrita por um conjunto de pontos distribuídos de maneira aleatória. Do ponto de vista numérico, a cada passo de tempo incrementamos a altura do sítio extremo com um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1. Assumimos que a amplitude da força de resistência é idêntica. Uma outra alternativa seria considerar uma distribuição uniforme para os pontos de resistência (rede regular) mas com magnitudes aleatórias. Desde que algum elemento estocástico seja introduzido não observamos uma mudança no comportamento crítico do sistema [26, 34].

A simulação computacional do modelo corresponde a executar a sequência:

1. identificar o sítio extremo i^* .
2. avançar a frente na posição i^* com um incremento aleatório.
3. atualizar o valor de η_{i^*} para o valor correspondente a nova posição $h(i^*)$.
4. atualizar a força elástica da frente para levar em consideração este avanço.

A maior parte do tempo é consumido na identificação do sítio extremo. Uma implementação numérica eficiente chamada busca binária [10] pode ser usada para reduzir o custo computacional em cada iteração a $\log_2 L$ operações. Veja o apêndice B.1.

3.2 Interação Elástica

A distorção da interface causada pelas impurezas do meio induzem forças elásticas restauradoras na superfície que tendem a suavizá-las. A classe de universalidade é determinada pela natureza da força elástica [4, 26, 34].

Usando a aproximação de que a inclinação de $h(x)$ não será muito grande, a força elástica será linear com respeito a $h(x)$ [26, 34]

$$F_{el} = \int G(x - x')h(x')dx'. \quad (3.3)$$

Dependendo da situação física considerada as forças elásticas podem ser de curto ou de longo alcance. Por exemplo, no experimento de Hele-Shaw, temos que $G \approx \delta''$, a segunda derivada da função delta de Dirac. Portanto,

$$F_{el} = \int \frac{d^2\delta(x - x')}{dx^2}h(x')dx' = \frac{d^2h}{dx^2}, \quad (3.4)$$

onde usamos a propriedade da delta

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \int \delta^{(n)}(x - x')f(x')dx'. \quad (3.5)$$

A interação elástica dada pelo Laplaciano também descreve a tensão superficial de uma membrana que é esticada². O modelo com esse tipo de interação tem sido exaustivamente estudado. O expoente de rugosidade nesse caso é 1.25 [34].

No nosso modelo, a interação elástica é baseada em um modelo de propagação de rachaduras introduzido por Rice [6]. Na Teoria de Rice a interação não é local na sua formulação, toda a frente é incluída na receita de interação através de uma função $K(x)$ dada por:

$$F_{el} = K(x) = \text{p.v.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{h(x') - h(x)}{(x' - x)^2} dx', \quad (3.6)$$

onde p.v. significa valor principal. O tipo de interação dada pela equação 3.6 é uma das mais usadas em modelos em que se supõe que interação seja de longo alcance³. A ideia aqui é truncar essa integral. Se tomarmos uma cadeia discreta, considerarmos a soma 3.6 em x' para cada x e truncá-la apenas nos termos correspondentes aos dois vizinhos $x' = x + 1$ e $x' = x - 1$, ela se reduz à segunda derivada. Truncá-la um pouco além, com a inclusão de $x' = x + 2$ e $x' = x - 2$, corresponde a considerar também a quarta derivada e assim por diante, veja o apêndice A. Considerando só os dois primeiros termos a equação 3.6 se reduz a,

$$Q(x) = -\frac{d^2h}{dx^2} + B\frac{d^4h}{dx^4}, \quad (3.7)$$

a versão discretizada da equação acima é

$$Q_i = -\frac{h_{i+1} - 2h_i + h_{i-1}}{(\Delta x)^2} + B\frac{h_{i+2} - 4h_{i+1} + 6h_i - 4h_{i-1} + h_{i-2}}{(\Delta x)^4}. \quad (3.8)$$

Com ingredientes apenas locais na vizinhança de cada x , não a frente toda já incluída na receita de interação, esperamos extrair o comportamento crítico oriundo apenas da dinâmica sem contaminações devidas às correlações de longo alcance embutidas na equação 3.6.

Se a interação já é de longo alcance, os vários elementos do sistema se atraem ou se repelem mesmo muito distantes entre si (gravitação, por exemplo) é evidente que esses mesmos elementos ficarão irremediavelmente correlacionados, uma perturbação sofrida por um deles se reflete em todos os outros. Não é esse tipo de sistemas que nos interessa. Nossas interações são

²Ver o livro *The Feynman Lectures on Physics* capítulo 12.

³Exemplos típicos são encontrados na referência [35].

de curto alcance (no caso de propagação de rachaduras físicas, são interações eletromagnéticas entre átomos ou moléculas neutras, portanto de curto alcance. No caso da evolução biológica, cada ser vivo interage apenas com alguns vizinhos e não com todos os outros seres vivos). O que nos interessa é a emergência de correlações de longo alcance, apesar das interações diretas serem de curto alcance: durante a evolução dinâmica, um elemento influencia seu vizinho, este influencia outro um pouco mais afastado, e assim por diante como uma onda, de forma que a perturbação num dado elemento acaba por afetar o sistema todo a longo prazo. A propagação de rachaduras é assim, e a evolução biológica também.

A interpretação geométrica do termo $\nabla^4 h$ não é tão simples quanto a do termo Laplaciano, que como já foi dito, é responsável por redistribuir a altura da interface. Dependendo do valor de B , os efeitos de cada um dos termos na equação 3.7 são diferentes e competem entre si. No espaço de Fourier, a interação elástica será dada por

$$\hat{F}_{el}(k) = k^2 \hat{h}(k) + Bk^4 \hat{h}(k). \quad (3.9)$$

O termo Laplaciano será proporcional a k^2 , enquanto que o termo bi-laplaciano será proporcional a k^4 , portanto esse termo é dominante em altas frequências enquanto que o termo $\nabla^2 h$ é dominante para frequências baixas. Vamos chamar de k^* a frequência tal que as duas interações sejam comparáveis. Temos então que $k^* \approx B^{-1/2}$. O comprimento associado a essa frequência será dado por $l^* \approx B^{1/2}$. Esperamos que grandezas como a rugosidade e a função de correlação tenham dois regimes diferentes: um acima e outro abaixo de l^* . A derivada quarta introduz no modelo essa escala de comprimento característica que é inexistente no caso Laplaciano puro.

Na equação 3.7 deixamos o parâmetro B livre, mas há uma condição que restringe o intervalo em que B pode representar uma interface autoafim. Devemos escolher o valor dos coeficientes que multiplicam as segundas e quartas derivadas de tal maneira que a interface não tenha um crescimento instável, ou seja, que o crescimento não fique restrito à um só ponto. Se a interação envolve apenas a segunda derivada, devemos escolher o sinal negativo, caso contrário o crescimento é instável. Fixado o sinal da segunda derivada, restringimos os valores do coeficiente B . Suponha que iniciamos a dinâmica com uma interface reta, com exceção de um único ponto i^* ,

$$h_i = \begin{cases} H & \text{se } i = i^* \\ 0 & \text{se não.} \end{cases} \quad (3.10)$$

Para essa interface teste, o valor de Q_i será

$$Q_i = \begin{cases} -2H + 6BH & \text{se } i = i^* \\ BH & \text{se } i = i^* \pm 2 \\ -H - 4BH & \text{se } i = i^* \pm 1. \end{cases} \quad (3.11)$$

Se impusermos que $Q_{i^*} < Q_{i^* \pm 2}$ e $Q_{i^*} < Q_{i^* \pm 1}$, ou seja, que o sítio i^* seja o sítio extremo, o movimento da interface ficará restrito a esse único ponto. Aplicando essa imposição à equação 3.11 chegamos a $B < -0.3$. Como um crescimento desse tipo não nos interessa, restringimos todas as simulações a valores de $B > -0.3$.

3.3 Rugosidade e Função de Correlação

A primeira grandeza que medimos foi a rugosidade definida na equação 1.1. Começando a simulação com uma rede plana, medimos a evolução da rugosidade em função do tempo para vários tamanhos de rede e vários valores do parâmetro B . Para colapsar as curvas, usamos o procedimento descrito na primeira seção. A figura 3.3 mostra os resultados obtidos com o valor de $B = 0$ na equação 3.7 (caso Laplaciano puro).

O melhor colapso foi obtido usando $z = 2.3$ e $\alpha = 1.25$. O valor do expoente de crescimento β pode ser estimado de duas maneiras distintas: através da relação $z = \alpha/\beta$ ou através de uma medida direta da inclinação da curva mostrada na figura 3.3. Uma técnica útil é considerar a inclinação consecutiva $\beta_s(t)$, que nada mais é do que a inclinação local da curva $\log(w)$ contra $\log(t)$ ajustado sobre uma região de tamanho s . Metodologicamente, ajustamos uma reta entre $\log(t)$ e $\log(t + s)$, depois fazemos o gráfico das inclinações obtidas contra $\log(t)$. Espera-se que, na região onde a forma de escala 1.2 é válida, as inclinações sucessivas fiquem em torno de uma linha horizontal na ordenada β . A figura 3.4 mostra as inclinações consecutivas obtidas a partir da curva 3.3.

Note que a linha reta horizontal, em torno de 0.74, se estende por uma pequena região, onde

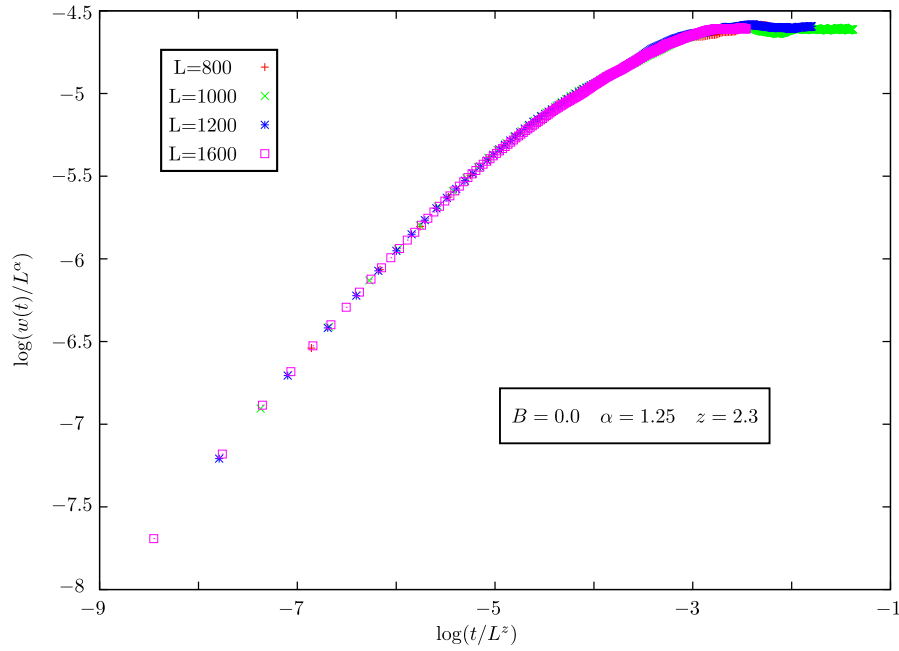


Figura 3.3: Curva da rugosidade obtida pelo colapso dos dados usando o procedimento descrito no capítulo 1, foram utilizadas 2000 amostras.

esperávamos ter um platô bem definido.

Para aplicar a equação 1.8, temos que considerar a mesma definição de tempo dada no capítulo 1, em que um passo de tempo corresponde a deposição de L partículas. Aqui estamos usando um passo de tempo como sendo um movimento elementar da interface. Vamos chamar provisoriamente o expoente dinâmico do nosso modelo de z' . As duas definições do expoente dinâmico estão relacionadas por $z' = z + 1$, como discutiremos na seção 3.4. O valor indicado para β pela equação 1.8 é aproximadamente 0.96, em claro desacordo com o valor de 0.74 que estimamos através do método das inclinações consecutivas.

A verdade é que a rugosidade é uma grandeza problemática em modelos de depinning com dinâmica extrema. Relações alternativas entre os expoentes para esses casos foram propostas nas referências [36, 37, 38], onde se conjecturou que a forma de escala de Family-Vicsek não se aplica ao estado estacionário e na referência [35] se faz a hipótese de que ela nunca se aplica. Portanto, não confiamos nos expoentes estimados através da rugosidade.

Felizmente, as informações que seriam extraídas do cálculo da rugosidade podem ser obtidas a partir de outras grandezas com mais confiabilidade.

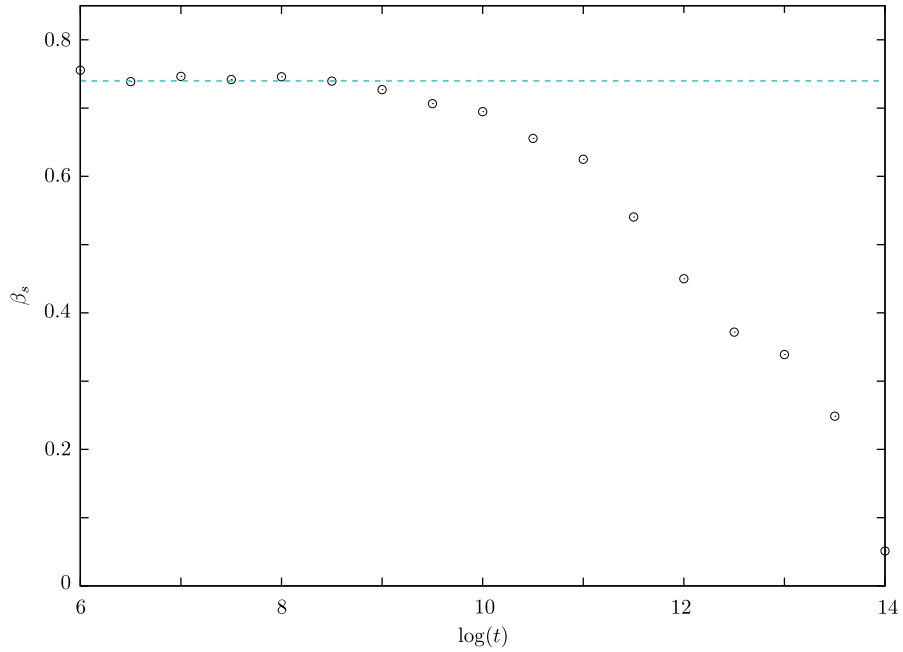


Figura 3.4: Gráfico das inclinações sucessivas contra $\log(t)$, para o tamanho $L = 1600$.

O espectro de potências de uma superfície autossimilar tem a forma de escala $k^{-1-2\alpha}$ e no espaço real a função de correlação escala com x^α . Primeiro, vamos considerar os resultados para a função de correlação ainda no caso Laplaciano (figura 3.5).

Para obter o colapso para diferentes tamanhos de L , reescalamos as curvas fazendo $x \rightarrow x/L$, $C(x) \rightarrow C(x)/L^\alpha$, com $\alpha = 1.25$. Observe que a inclinação da reta pontilhada na figura 3.5 é igual a 1. Nos casos onde $\alpha > 1$ a relação de escala 1.17 deve ser corrigida por $C(x) \sim L^{\alpha-1}x$ [26]. A figura 3.5 evidencia a validade dessa forma de escala.

Só para $B = 0$ o valor $\alpha = 1.25$ colapsa bem as curvas. Para os outros valores de B não é possível colapsar as curvas com um único expoente, o que é um indicativo de que $C(x)$ tenha 2 regimes distintos.

Para testar nossa hipótese de crossover, discutida na seção 3.2, estudamos o espectro de potências da interface, a figura abaixo mostra os nossos resultados para $B = 0$ e $B = 1$. Nessa figura fica claro que temos um crossover em um certo ponto k^* , com a inclusão da quarta derivada. O apêndice B.2 mostra como calcular a transformada de Fourier de um conjunto discreto de pontos e descreve um método para fazer os cálculos de maneira otimizada.

Resta saber se a dependência de k^* com B tem a forma $k^* \propto B^{-1/2}$. A dificuldade desse

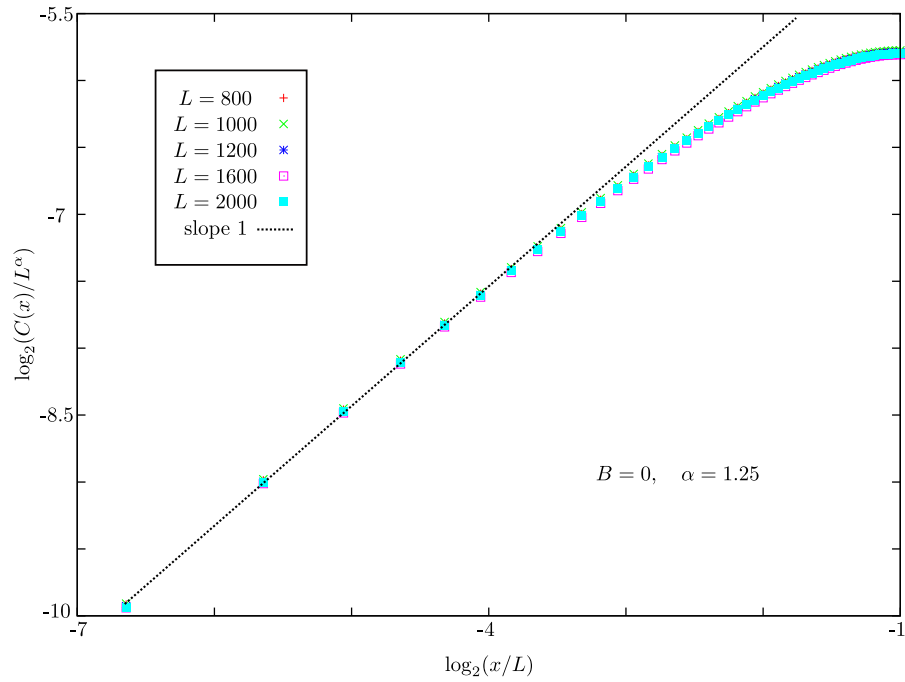


Figura 3.5: Gráfico da função de correlação para o caso Laplaciano puro. Usamos 2000 amostras nesse cálculo.

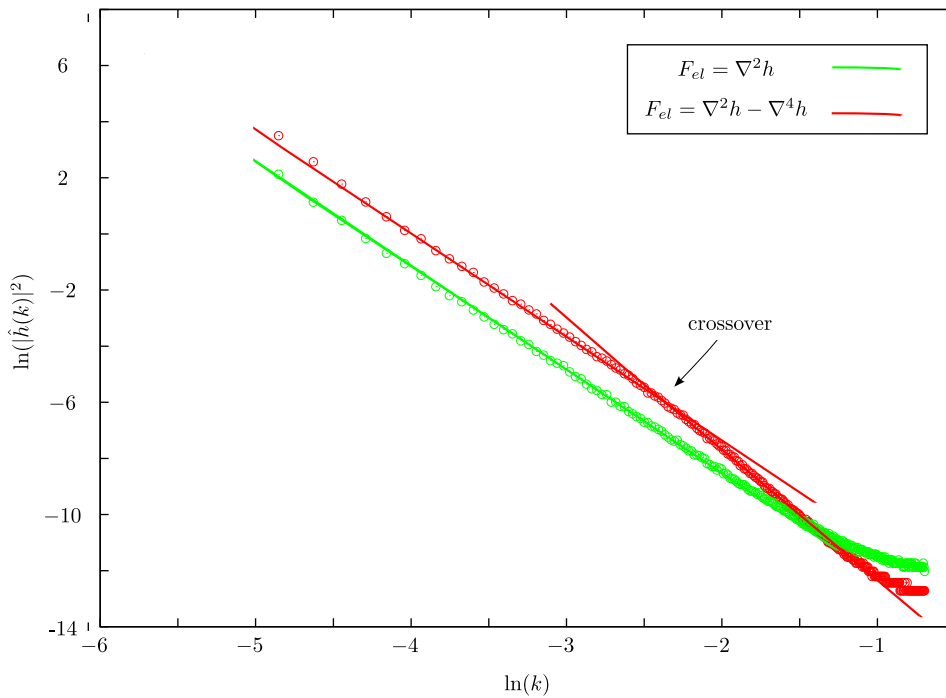


Figura 3.6: Espectro de potências da interface calculada para $B = 0$ e $B = 1$. A inclinação da reta verde é -3.5 , o que equivale a um expoente de rugosidade igual a 1.25 .

teste é determinar com precisão o ponto onde acontece a mudança de comportamento em $S(k)$.

Utilizamos o método das inclinações consecutivas. Como temos duas inclinações diferentes,

espera-se que o gráfico das inclinações consecutivas tenha duas regiões aproximadamente horizontais. A escolha do tamanho s é muito importante, se escolhermos um valor de s grande não podemos determinar com precisão o valor de k^* , escolhendo um valor pequeno ajustamos a curva em poucos pontos e temos um erro grande associado a essa medida. Nossos resultados estão na figura 3.7. Para $B = 0$, não há desvios do primeiro platô, à medida que aumentamos o valor de B observamos que um desvio acontece para valores de k cada vez menores. Definimos o valor de k^* , como o ponto onde começamos a observar um desvio do primeiro platô.

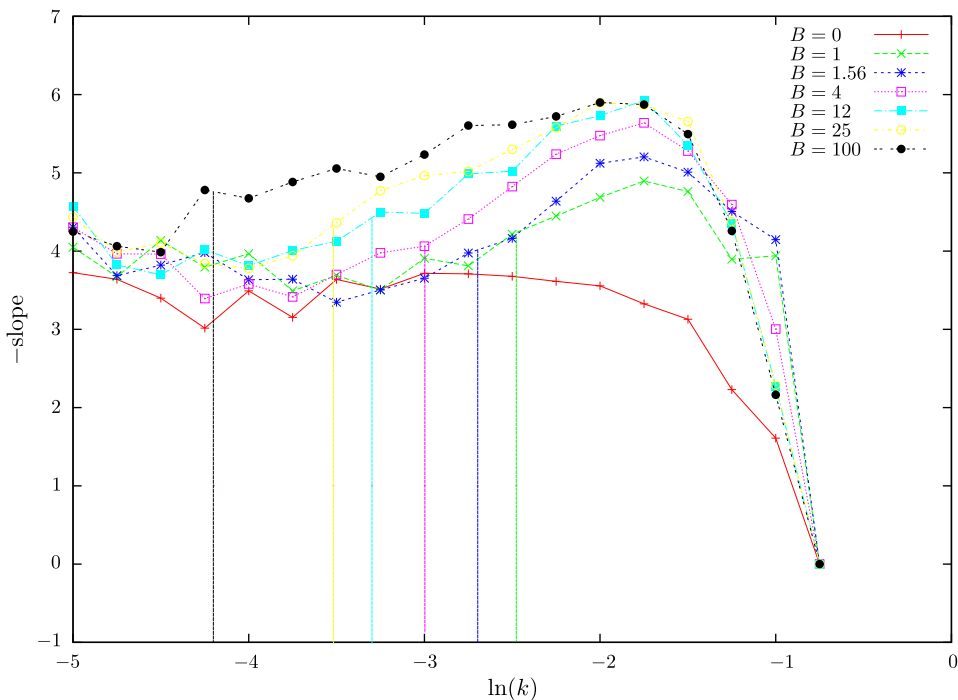


Figura 3.7: Gráfico das inclinações consecutivas para o espectro de potências da frente com $s = 0.25$. Usamos uma rede de tamanho 512 e 1000 amostras.

Finalmente construímos o gráfico de k^* contra $B^{-0.5}$ (figura 3.8). Apesar dos desvios, encontramos a reta da figura 3.8 que apoia nossa hipótese.

Temos dois cut-offs no espectro de potências, um relacionado ao tamanho finito da rede (valores de k pequenos) e outro relacionado a discretização do espaço (valores grandes de k). Se a interação elástica for Laplaciana temos uma única reta entre essas duas regiões, quanto maior a rede maior a extensão da reta. A reta tem inclinação -3.5 , o que equivale a $\alpha = 1.25$. Acrescentando a quarta derivada, temos duas retas na região entre os cut-offs, com dois expoentes de rugosidade α_1 e α_2 , mas precisamos de uma rede enorme para determinar as duas inclinações com precisão razoável. Supondo que os dois expoentes sejam bem definidos, ou

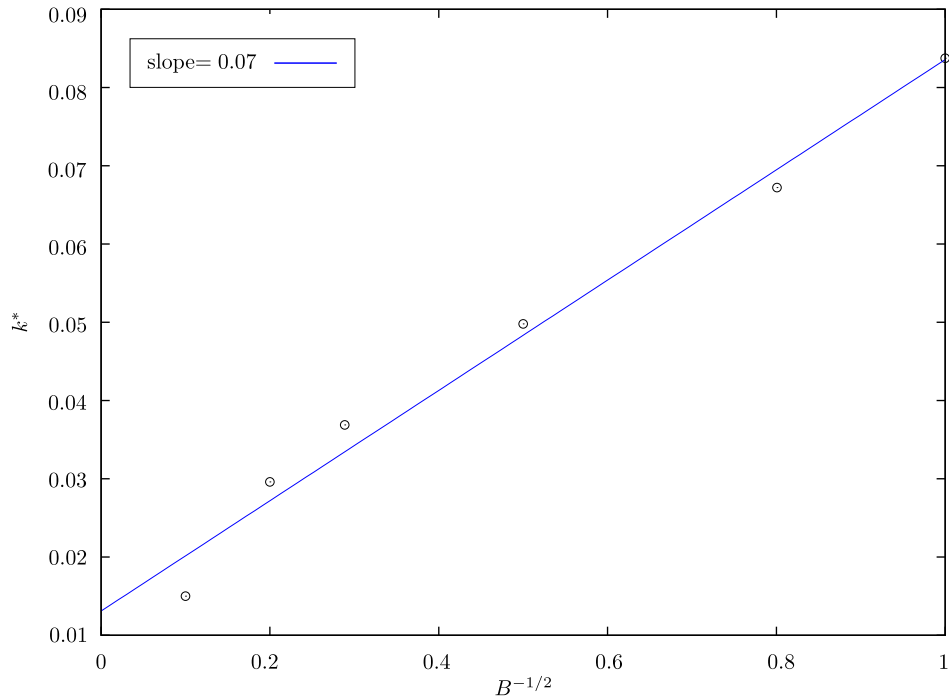


Figura 3.8: Ponto onde ocorre o crossover k^* em função de $B^{-1/2}$, usamos 1000 amostras para uma rede de tamanho 1024.

seja, o valor dos expoentes é o mesmo para todos os valores de B , poderíamos estimar o valor de α_2 considerando uma interação onde a contribuição da quarta derivada é predominante. Por exemplo, com $B = 100$ teríamos novamente uma única reta na região entre os cutoffs, mas com inclinação α_2 . Na figura 3.9, além do espectro de potências para $B = 100$, consideramos novamente a curva do caso Laplaciano para compararmos as inclinações. A estimativa numérica para α_2 é de 2.25.

3.4 Distribuição de Atividade

Vimos na seção 1.3 que perto da transição a frente se propaga em avalanches. No contexto da dinâmica extrema, uma avalanche causada pela força F corresponde a uma sequência de eventos de depinning tal que a $F_c(t) < F$. Uma quantidade diretamente relacionada com as avalanches será estudada nessa seção.

Considere que $x^*(t)$ seja o sítio ativo⁴ em um certo instante t e $x^*(t + \tau)$ o sítio ativo no instante $t + \tau$. Para analisar as correlações no espaço e nos tempos é interessante estudar a

⁴a partir de agora, vamos usar também a terminologia *sítio ativo* como sinônimo para sítio extremo.

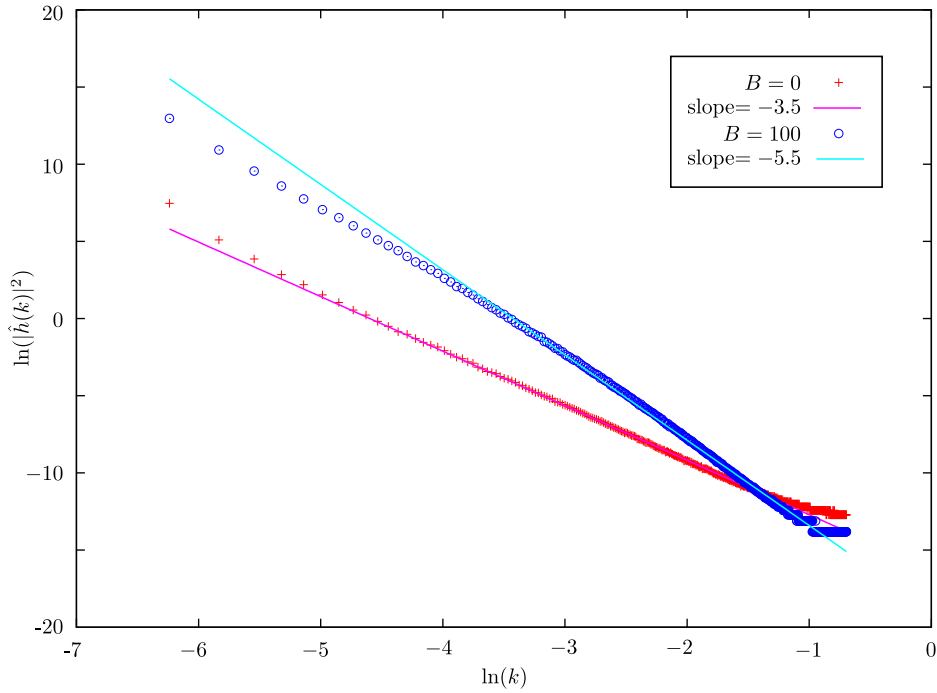


Figura 3.9: Espectro de potências para as duas situações discutidas acima, com a segunda ou a quarta derivada sendo o termo predominante na interação elástica. A estimativa para α_2 é de 2.25. Na construção do gráfico, utilizamos uma rede de tamanho 1024 e 1000 amostras.

distribuição de probabilidades $p(r, \tau)$ de que, depois de uma sequência de τ movimentos, o sítio ativo tenha se movido uma distância r , ou seja, $r = |x^*(t + \tau) - x^*(t)|$.

A partir de simulações numéricas, observamos que a dependência de $p(r, \tau)$ pode ser estudada através da seguinte relação de escala:

$$p(r, \tau) = \tau^{-1/z'} \phi \left(r/\tau^{1/z'} \right) \quad (3.12)$$

onde

$$\phi(x) = \begin{cases} x^0 & \text{se } x \ll 1 \\ x^{-b} & \text{se } x \gg 1. \end{cases} \quad (3.13)$$

Tal função de escala foi proposta a primeira vez por Furuberg *et al.* no estudo da percolação de invasão [39].

Através da equação acima, vemos que no estado estacionário a atividade de espalha tipicamente sobre uma distância

$$\xi \equiv \langle r \rangle = \int_0^\infty rp(r, \tau) dr \propto \tau^{1/z'} \quad (3.14)$$

A definição acima é justificável, porque se encaixa com a nossa noção de comprimento de correlação. Nesse sentido z' é o expoente dinâmico “real” que governa toda a correspondência entre tempo e espaço no estado estacionário. Note, no entanto que uma convenção diferente é usada para z' , por causa da definição do tempo. Em particular, temos que a atividade se espalha por todo o sistema para um tempo $\tau \propto L^{z'}$, daí $t = \tau/L \propto L^{z'-1}$. Portanto z' deve ser comparado com $z + 1$. Como vamos nos restringir ao estudo da dinâmica extrema, vamos usar z por simplicidade.

É possível estabelecer uma conexão entre o expoente de rugosidade α com o expoente dinâmico z . Considere um ponto inicial (x_0, t_0) . Após um tempo τ , a atividade terá se espalhado por uma distância média $\xi(\tau)$ ao redor de x_0 . O número de passos necessários para cobrir a área entre as duas frentes no tempo t_0 e $t_0 + \tau$ será proporcional a $\Delta h \Delta x$. Como a frente tem um perfil autoafim com expoente de rugosidade α temos $\Delta h \propto \Delta x^\alpha$. Como resultado, temos para τ escala como

$$\tau = \xi^{1+\alpha}, \quad (3.15)$$

comparando com 3.14, concluímos que

$$z = 1 + \alpha, \quad (3.16)$$

essa relação é observada em simulações numéricas onde $0 \leq \alpha \leq 1$. Para valores de α maiores, temos $\Delta h \propto \Delta x$ por saturação, e daí

$$z = 2. \quad (3.17)$$

Para calcular $\xi_{||}$ medimos a distância entre a posição do sítio extremo em t e o primeiro sítio extremo. Essa distância cresce como uma lei de potência e satura em $L/4$ (veja figura 3.10). A mesma curva também é obtida medindo-se a distância média entre sítios extremos consecutivos

com a interface já no estado estacionário.

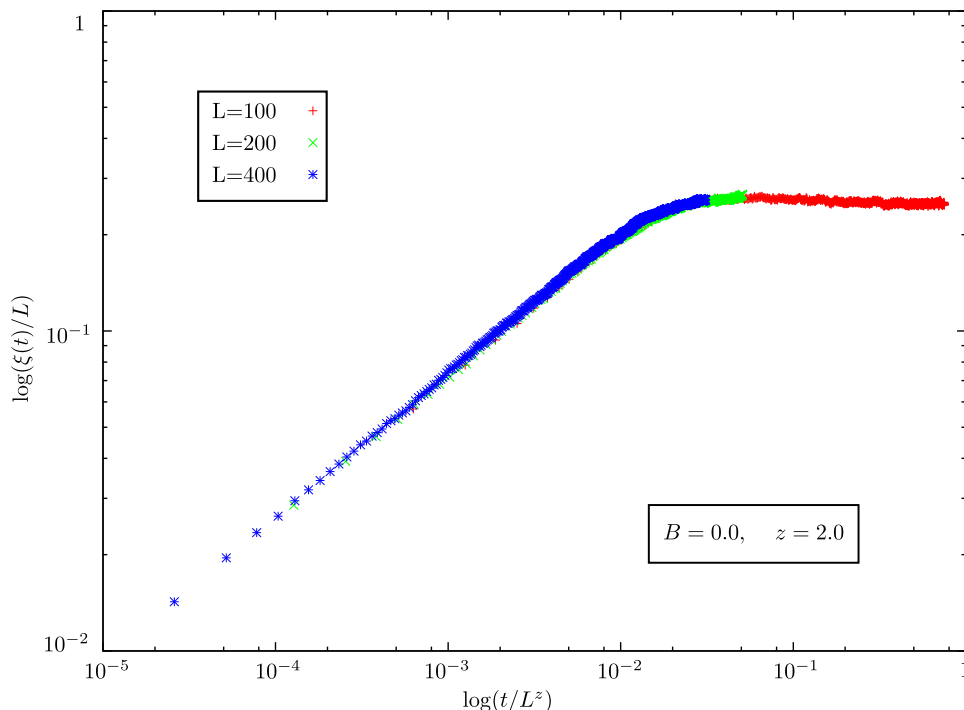


Figura 3.10: Gráfico da distância entre dois sítios ativos consecutivos. A inclinação da curva é aproximadamente 0.5, o que corresponde ao expoente $z = 2.0$, em acordo com o valor da equação 3.17.

A maneira como a atividade está distribuída no espaço e no tempo é controlada pela distribuição $p(d, 1)$ de saltos elementares entre dois sítios ativos consecutivos, note que a distância r nada mais é que a soma de todos os saltos $d_i = [x(t_i + 1) - x(t_i)]$ sucessivos. Vamos fazer a hipótese (crua) de que podemos desprezar as correlações temporais, essa hipótese será confirmada ou rejeitada pelos resultados. Sabemos que a distribuição de probabilidade de uma variável x que é a soma de duas variáveis aleatórias independentes x_1 e x_2 com distribuições $p_1(x_1)$ e $p_2(x_2)$ é dada por⁵,

$$p(x) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x_1)p(x - x_1)dx_1, \quad \text{i.e.,} \quad \hat{p}(z) = \hat{p}_1(z)\hat{p}_2(z), \quad (3.18)$$

a densidade de probabilidade $p(x)$ é o produto de convolução das densidades de probabilidade individuais, enquanto a função característica $\hat{p}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x)e^{izx}dx$ é simplesmente o produto das funções características das duas variáveis. Podemos generalizar esse resultado para a soma

⁵para refrescar a memória leia os primeiros capítulos da referência [30].

de N variáveis aleatórias $x = \sum_i^N x_i$. A distribuição resultante será o produto de convolução das N distribuições. Usando esse resultado temos então que a distribuição de probabilidades $p(r, \tau)$ pode ser escrita como o produto de convolução da distribuição $p(r, 1)$ com ela mesma τ vezes.

A primeira tentativa para determinar a distribuição $p(r, \tau)$ seria usar o teorema central do limite. De maneira resumida, esse teorema afirma que se uma sequência de N variáveis aleatórias x_1, x_2, \dots, x_N independentes e identicamente distribuídas então a variável aleatória $x = \sum_i^N x_i$ possui a distribuição de probabilidades Gaussiana

$$p(x) \approx \exp\left(-\frac{x - Nx_0}{2\sigma^2}\right), \quad \text{para } N \gg 1, \quad (3.19)$$

onde x_0 e σ são a média e variância de $p_i(x_i)$. Para que o teorema central do limite seja válido é necessário que a média e a variância existam. Os resultados numéricos mostram que a distribuição $p(r, 1)$ se comporta como uma lei de potência $p(r, 1) \sim r^{-b}$. O m -ésimo momento de $p(r, 1)$ é dado por:

$$\langle r^m \rangle = \int_{r_{cut}}^{\infty} r^m p(r, 1) dr = A \frac{r^{m-b+1}}{m-b+1} \Big|_{r_{cut}}^{\infty}, \quad (3.20)$$

na expressão acima r_{cut} é um limite inferior a partir do qual vale a lei de potência e A é uma constante. Vemos que os momentos só são bem definidos para $m < b - 1$. No nosso caso, onde $2 < b < 3$ só a média existe, a variância é infinita e o teorema central do limite não se aplica. Felizmente, existe uma generalização do teorema central do limite [40] mostrado por Gnedenko e Kolmogorov e que essencialmente é o seguinte: se muitas variáveis aleatórias com distribuição de probabilidades dadas por $p_i(x_i) \sim |x_i|^{1+\mu}$, com $0 < \mu < 2$, são somadas, então sua soma será distribuída de acordo com uma distribuição de Lévy $L_\mu(x)$ estável. Uma distribuição é dita estável se

$$p(x)dx = p_i(x_i)dx_i \quad \text{com} \quad x = a_N x_i + b_N, \quad (3.21)$$

isto é, se a forma da distribuição é invariante por dilatação ($a_N \neq 1$) e por translação ($b_N \neq 0$). Existem poucas distribuições que são estáveis. A condição para que uma distribuição seja estável é

$$\text{distribuição estável} \iff \hat{p}(z) = \exp(-a|z|^\mu), \quad 0 < \mu \leq 2. \quad (3.22)$$

A afirmação está ligeiramente simplificada e cobre somente as distribuições que são simétricas ao redor de zero. A distribuição gaussiana corresponde a $\mu = 2$, as distribuições de Lévy estáveis são as que tem $\mu < 2$. Em geral, não existe representação analítica para a distribuição $L_\mu(x)$. Assintoticamente, as distribuições de Lévy se comportam como

$$L_\mu(x) \sim \frac{1}{|x|^{\mu+1}}, \quad |x| \rightarrow \infty. \quad (3.23)$$

A função característica da distribuição de probabilidade que governa a soma de N variáveis x_i cada uma delas com função característica $\hat{L}_\mu(z)$ será dada por

$$[\hat{L}_\mu(z)]^N = \exp(-aN|z|^\mu) \quad (3.24)$$

e a distribuição de probabilidades é dada pela anti-transformada de Fourier,

$$L_\mu(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-izx} e^{-aN|z|^\mu} dz. \quad (3.25)$$

Reescalando as variáveis como

$$z' = zN^{1/\mu}, \quad x' = xN^{-1/\mu} \quad (3.26)$$

e substituindo na equação 3.25, temos:

$$L_\mu(x) = N^{-1/\mu} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iz'x'} e^{-a|z'|^\mu} dz' = N^{-1/\mu} L_\mu(xN^{-1/\mu}), \quad (3.27)$$

isto é, a distribuição da soma de N variáveis aleatórias tem a mesma distribuição de uma única variável sob reescala. Em outras palavras a distribuição é autossimilar [41].

Depois desse breve interlúdio podemos usar esses conceitos no nosso problema. A distribuição $p(r, 1)$ converge para uma distribuição de Lévy L_{b-1} que no infinito se comporta como uma lei de potência (equação 3.23). Usando a relação 3.27, com $N = \tau$ e $\mu = b - 1$, obtemos:

$$p(r, \tau) \approx \frac{1}{\tau^{1/(b-1)}} L_{b-1} \left(\frac{r}{\tau^{1/(b-1)}} \right), \quad (3.28)$$

que comparada com a equação 3.12 leva à relação

$$b = 1 + z. \quad (3.29)$$

A figura 3.11 mostra $p(r, \tau)$ para $\tau = 4, 16$ e 64 no caso Laplaciano. O expoente z é estimado através do colapso das curvas, na figura usamos $z = 2$ que prediz o valor $b = 3$. Observamos nas nossas simulações que o expoente b depende do tipo de força de pinning. Se a distribuição do módulo das forças de pinning é aleatória encontramos $b = 2.88$, como na figura 3.11. Esse resultado subestima ligeiramente o valor $b = 3$, o que pode ser interpretado como quase ausência de correlações. Considerando que a força de pinning é a mesma em todos os pontos o expoente b é um pouco menor em torno de 2.65. Nenhuma mudança significativa foi encontrada com a adição da quarta derivada na interação elástica.

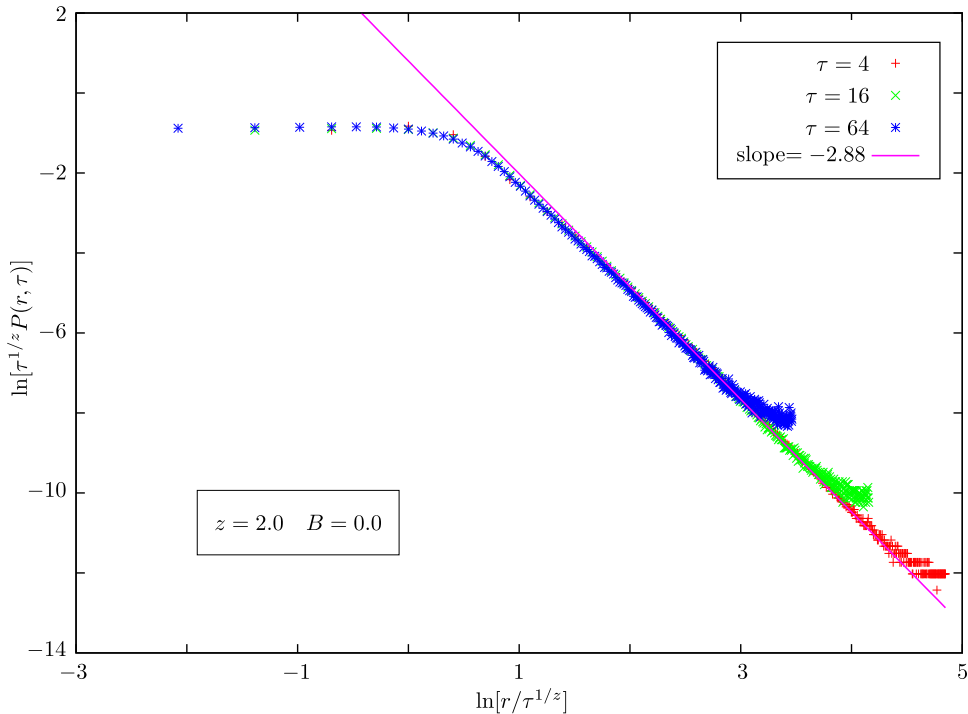


Figura 3.11: Distribuição $p(r, \tau)$ para $\tau = 4, 16$ e 64 . Nessa figura consideramos só o termo Laplaciano na interação elástica e uma distribuição de forças de pinning aleatória. Foram usadas 1500 amostras e uma rede de tamanho 512.

3.5 Distribuição de Forças

Na dinâmica extrema a cada passo de tempo ajustamos a força externa para um valor $F_{ext} = F_c(t)$ tal que somente um sítio pode se mover. Por definição, a força crítica F^* seria a menor força constante a ser aplicada para que a frente se mova indefinidamente, o que corresponde a máxima força F_c sobre todas as configurações: $F^* = \max_t[F_c(t)]$. Na figura 3.12 mostramos o valor da força externa (ou força de depinning) em uma sequência de 1000 passos da dinâmica e na figura (3.13) a distribuição estatística dessas forças. Todos os resultados dessa seção correspondem ao caso Laplaciano.

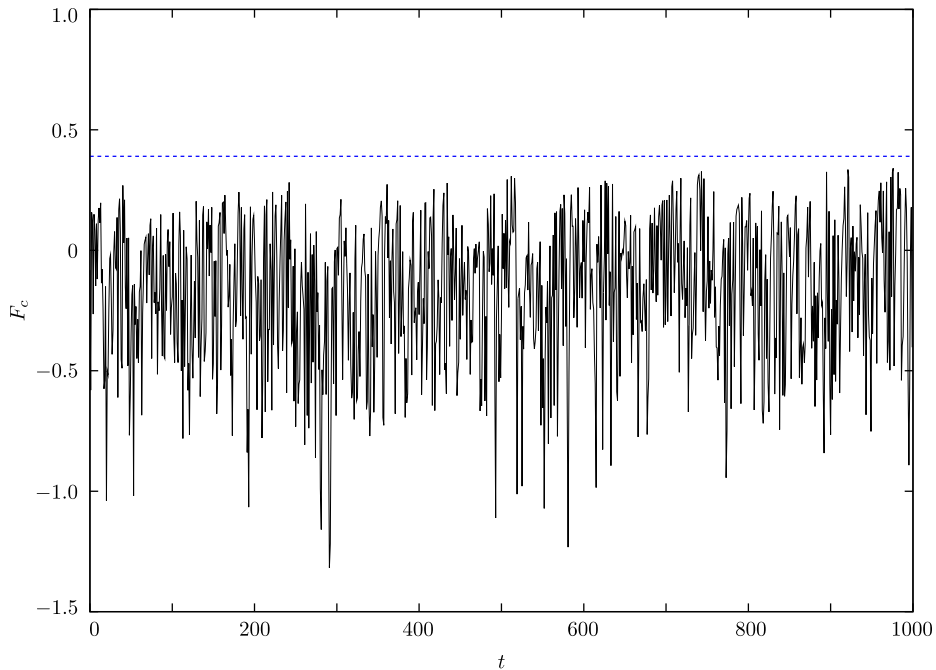


Figura 3.12: Sequência de forças externas $F_c(t)$. A linha reta corresponde ao valor crítico $F^* = \max_t F_c(t)$.

Vamos fazer a hipótese que perto da força crítica, a distribuição $P(F_c)$ se comporta como

$$P(F_c) \propto (F^* - F_c)^\varepsilon. \quad (3.30)$$

Na simulação o valor de F^* pode ser estimado como o máximo valor de F_c sobre todo o ensemble de eventos de depinning. Como só podemos simular um sistema com tamanho L , nossa estimativa terá efeitos de tamanho finito. Existe um truque para calcular F^* com mais precisão [4, 42]. Condicionando a distribuição de forças de depinning pela distância d

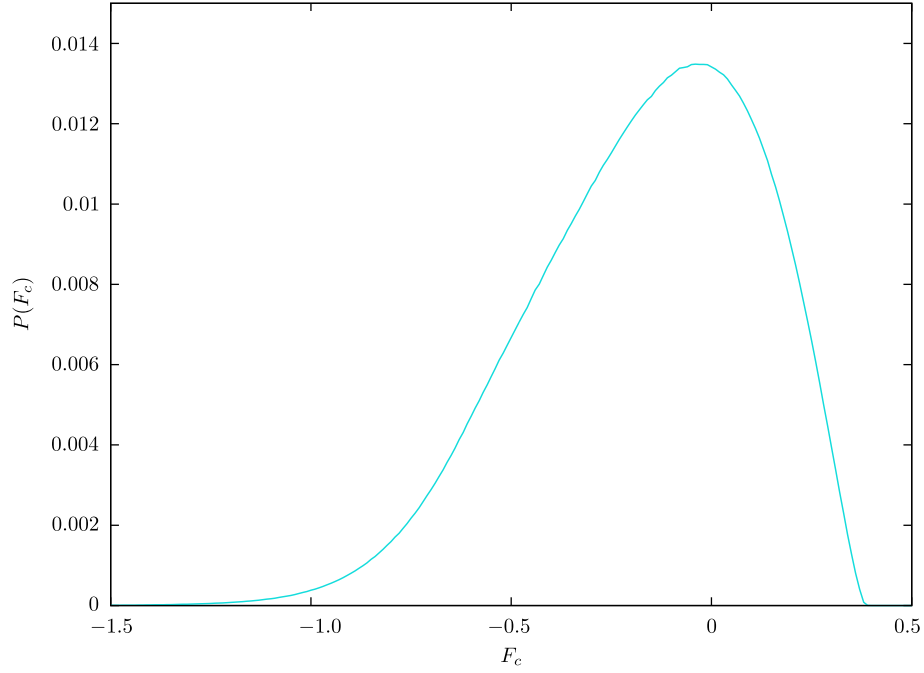


Figura 3.13: Distribuição de forças de depinning, $P(F_c)$.

entre sítios ativos consecutivos podemos construir a distribuição $P(F_c|d)$, em outras palavras: $P(F_c|d)$ é a probabilidade de que a força de depinning seja igual a F_c dado que a distância entre dois sítios ativos consecutivos é d . Na figura 3.14 sobrepusemos a distribuição original (linha cheia) e as contribuições de cada uma das distribuições $P(F_c|d)$. As curvas têm um formato similar, a menos de algum fator de escala, podemos supor então que as curvas mostradas na figura 3.14 podem ser colapsadas em uma única. Na referência [26] é proposta a seguinte forma de escala para $P(F_c|d)$:

$$P(F_c|d) = \frac{1}{d^{-a}} \psi \left(\frac{F^* - F_c}{d^{-a}} \right). \quad (3.31)$$

Vamos calcular a quantidade $\delta F_c(d) \equiv (F^* - \langle F_c \rangle_d)$ a partir da equação (3.31):

$$\begin{aligned} F^* - \langle F_c \rangle_d &= \int (F^* - F_c) d^a \psi \left[\frac{F^* - F_c}{d^{-a}} \right] dF_c \\ &= - \int d^{-a} u \psi(u) du \\ &\propto d^{-a}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

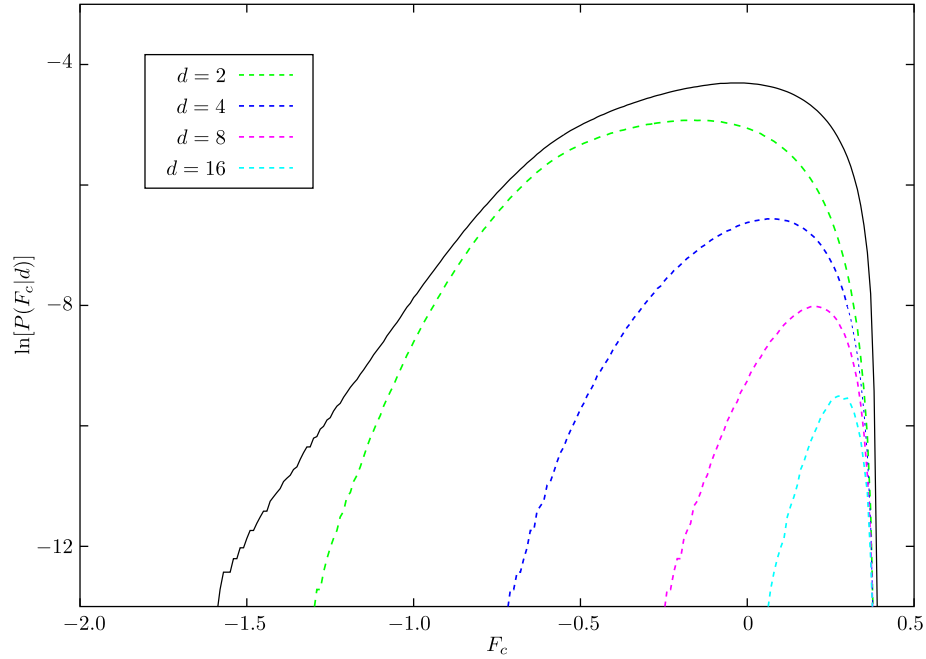


Figura 3.14: Distribuição de forças de depinning condicionadas pela distância d . Usamos uma rede de tamanho 512. Essas distribuições não estão normalizadas então elas representam sua contribuição para a distribuição global resultante (linha cheia).

Um cálculo análogo mostra que o desvio padrão $\sigma_{F_c} = \sqrt{\langle F_c^2 \rangle - \langle F_c \rangle^2}$ também escala com d^{-a} . A principal consequência da equação (3.31) é que temos uma relação linear entre $\langle F_c \rangle$ e σ_{F_c} :

$$\langle F_c \rangle_d = F^* - A\sigma_{F_c}. \quad (3.33)$$

Quando σ_{F_c} se anula, temos que $\langle F_c \rangle = F^*$, então, por extrapolação da curva mostrada na figura 3.15 podemos determinar F^* . O resultado obtido é

$$F^* = 0.39. \quad (3.34)$$

Usando o valor acima para F^* , fizemos o gráfico de δF_c e σ_{F_c} contra d na escala logarítmica. Observamos um comportamento linear (Fig. 3.16), correspondendo a leis de potências com um expoente aproximadamente igual a $a = 0.75$. Vale lembrar aqui que o comprimento de correlação diverge perto de F^* ,

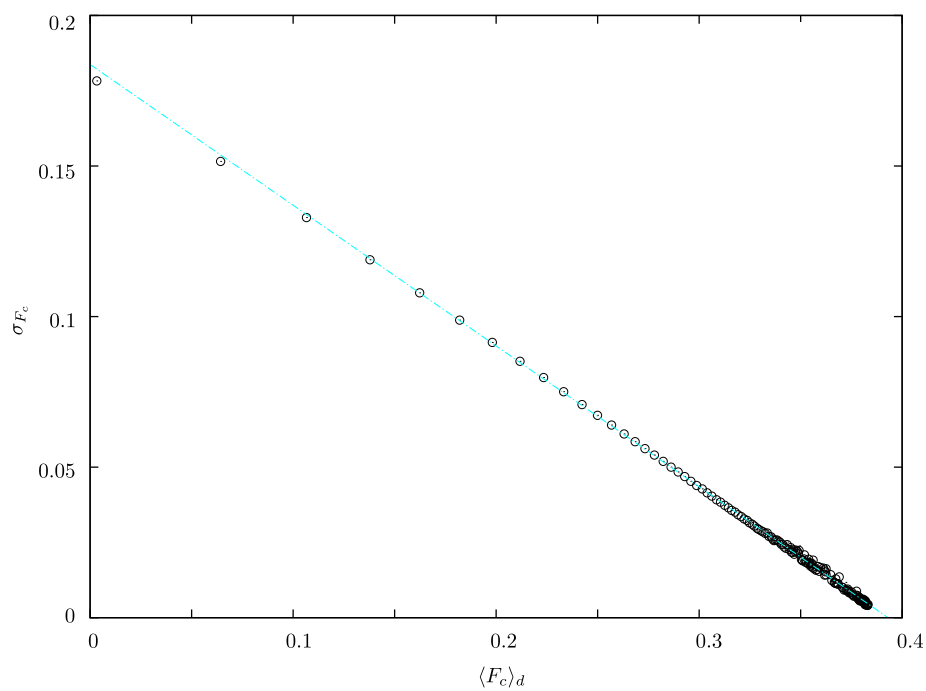


Figura 3.15: A relação linear entre $\langle F_c \rangle$ e σ_{F_c} nos permite, através de extrapolação da curva, determinar o valor F^* .

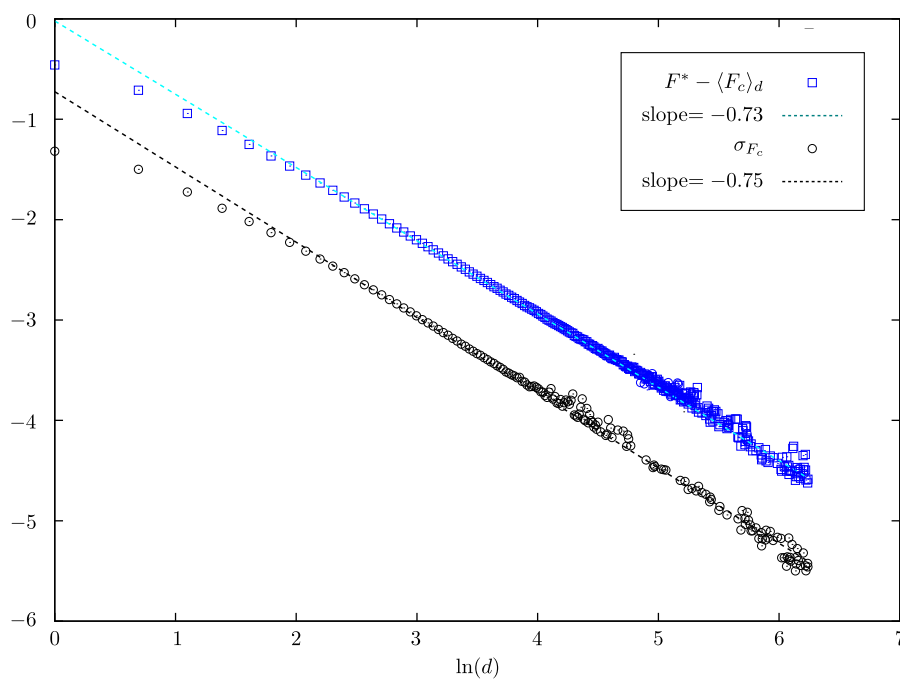


Figura 3.16: $\langle F_c \rangle$ e σ_{F_c} como função da distância entre sítios ativos sucessivos.

$$\xi \sim (F^* - F)^{-\nu}. \quad (3.35)$$

No nosso caso, $\langle F_c \rangle$ faz o papel de F , comparando com a equação 3.32, podemos identificar

o expoente $1/a$ com o expoente ν . Há ainda uma maneira de relacionar ν com α . Sobre uma região de tamanho L , temos que $\Delta h \approx L^{\alpha-1} \Delta x$. Daí, $\nabla^2 h \approx L^{\alpha-2}$, e a curvatura típica sobre uma região de tamanho ξ próximo de L será da ordem de $\xi^{\alpha-2}$. As flutuações de força de depinning devem ser equilibradas pela força elástica para desprender tal segmento: $(F^* - F) \sim \xi^{1/\nu}$. Portanto,

$$\alpha + \frac{1}{\nu} = 2. \quad (3.36)$$

Essa relação foi proposta na referência [25]. O valor $a = 2 - \alpha$ é consistente com a estimativa numérica.

Finalmente, verificamos (figura 3.17) que as distribuições $P(F_c|d)$ podem ser colapsadas em uma única curva.

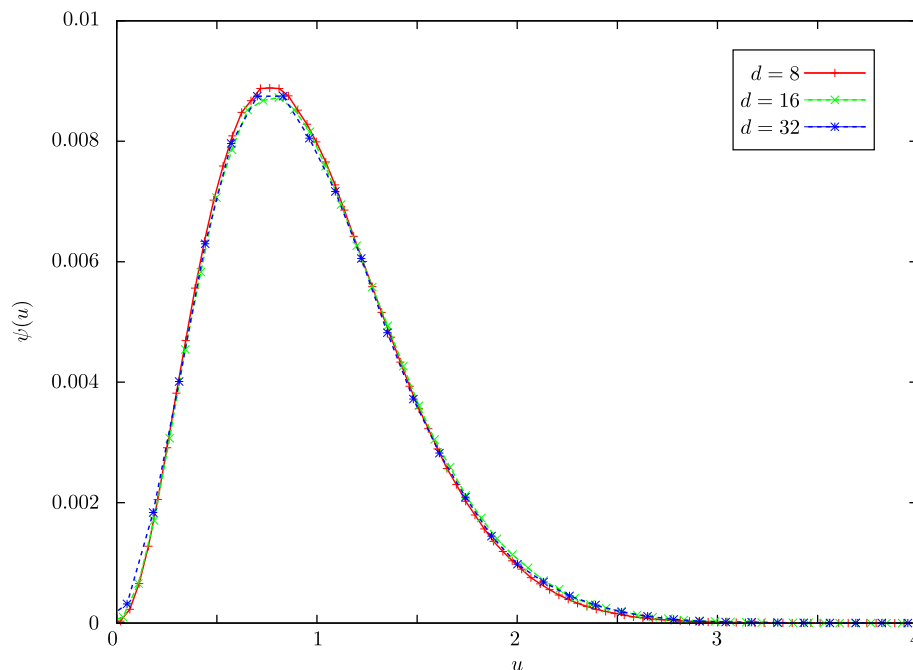


Figura 3.17: Depois de reescaladas as distribuições de forças de depinning correspondentes as distâncias $d = 8$, $d = 16$ e $d = 32$ colapsam em uma única curva. O tamanho do sistema é $L = 512$.

O conhecimento da distribuição de distâncias $p(r, 1) = p(d)$, discutida na seção anterior, nos permite derivar uma relação entre o expoente ε definido na equação 3.30 e o expoente b (que também foi definido na seção anterior). Lembrando que se temos duas variáveis aleatórias

x e y com densidades de probabilidade $p(x)$ e $p(y)$ então

$$p(y) = \int p(y|x)p(x)dx, \quad (3.37)$$

onde $p(x|y)$ é a densidade de probabilidade de x condicionada por y . Daí, podemos escrever

$$P(F_c) = \int P(F_c|l)p(l)dl, \quad (3.38)$$

substituindo $P(F_c|l)$ pela equação 3.31 e $p(l)$ por l^{-b} , temos

$$\begin{aligned} P(F_c) &= \int l^{1/\nu}\psi [(F^* - F_c)l^{1/\nu}] l^{-b}dl \\ &= (F^* - F_c)^{-1+b\nu-\nu} \int u^{1-b\nu+\nu+1}\psi(u)du \\ &\propto (F^* - F_c)^{(b-1)\nu-1}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Obtemos, portanto, o comportamento da distribuição de forças de depinning F_c perto do limiar com a forma descrita pela equação 3.30. A relação entre os expoentes é

$$\varepsilon = (b - 1)\nu - 1 \approx 1.6. \quad (3.40)$$

A distribuição de forças não é universal e depende da definição de avanço do sítio extremo e da intensidade da força causada pelas impurezas.

Capítulo 4

Conclusão

Nessa dissertação estudamos um modelo de transição de depinning através de uma dinâmica extrema. Nesses modelos, o tipo de interação entre os elementos do sistema determina a classe de universalidade do mesmo. A interação elástica que usamos é uma simplificação da formulação de Rice, onde os elementos interagem entre si através de uma integral sobre toda a frente de propagação. Truncando essa integral restringimos a interação aos primeiros e segundos vizinhos, sendo assim o comportamento crítico do sistema emerge da própria dinâmica. O tempo usado na dinâmica a princípio é artificial, correspondendo apenas a ordenação de eventos de equilíbrio sucessivos. No entanto, mostramos que é possível fazer uma conexão com o tempo físico, e para o cálculo dos expoentes não faz diferença considerarmos um ou o outro.

A interação modelada pelo termo Laplaciano foi estudada na literatura, no estado estacionário a interface é auto-afim com um expoente de rugosidade α igual a 1.25, com a inclusão da quarta derivada na interação elástica, temos um efeito competitivo que introduz uma escala de comprimento característico no sistema. Apesar da simplicidade do modelo, a interface gerada a partir dele é muito rica do ponto de vista geométrico. A superfície é auto-similar no estado estacionário com dois expoentes de rugosidade dependendo da escala de comprimento considerada. A rugosidade, que é uma grandeza típica no estudo de interfaces dinâmicas, se mostrou especialmente difícil de ser trabalhada, com uma relação de escala diferente da relação clássica de Family-Vicsek. Melhores resultados foram obtidos com o cálculo da função de correlação no espaço real e de Fourier. No espaço de Fourier observamos um crossover entre dois regimes, o ponto onde ocorre o crossover é proporcional a raiz de B como era esperado.

O expoente dinâmico parece ser o mais robusto de todos os que foram medidos mantendo sempre o valor 2, independente da contribuição da quarta derivada.

Ainda há o que ser explorado no problema. O primeiro passo na continuação do trabalho seria simular o modelo em sistemas maiores para calcular com precisão o segundo expoente de rugosidade e o ponto de crossover. Outras grandezas estatísticas podem ser analisadas em modelos de dinâmica extrema. Em particular, se propôs [26] que o avanço da frente é controlado por um conjunto de sítios subcríticos que exhibe uma estrutura fractal. O papel que a temperatura exerce também pode ser considerado, as novas propriedades de escala que aparecem com a introdução da temperatura podem ser discutidas com base na distribuição de forças de depinning à temperatura zero.

Apêndice A

Discretização da Função $K(x)$

No nosso modelo a interação elástica é baseada na fórmula de Rice, introduzida no contexto de propagação de rachaduras, dada por

$$K(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{h(x') - h(x)}{(x' - x)^2} dx'. \quad (\text{A.1})$$

Vamos usar cadeia discreta em uma dimensão, e denotar por Δx o intervalo entre pontos sucessivos. Fazendo $x_n = n\Delta x$ e $h_n = h(n\Delta x)$ para $n = \dots, -1, 0, 1, \dots$, a expressão (A.1) assume a forma

$$K_n \equiv K(x_n) = \sum_{x'=-\infty}^{x'=+\infty} \frac{h'_n - h_n}{(x'_n - x_n)^2} \Delta x'. \quad (\text{A.2})$$

Agora, vamos truncar a soma (A.2) nos termos correspondentes a $x' = x_{n+1}$ e $x' = x_{n-1}$, isto é,

$$\begin{aligned} K_n &= \sum_{x'=x_{n-1}}^{x'=x_{n+1}} \frac{h'_n - h_n}{(x'_n - x_n)^2} \Delta x' \\ &= \left(\frac{h_{n+1} - h_n}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{n-1} - h_n}{(\Delta x)^2} \right) \Delta x'. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

De uma forma mais sugestiva, temos que

$$K_n = \left(\frac{h_{n+1} - 2h_n + h_{n-1}}{(\Delta x)^2} \right) \Delta x'. \quad (\text{A.4})$$

A expressão entre chaves é a versão discretizada da segunda derivada. Conclusão: a integral (A.1) corresponde à segunda derivada se truncada nos primeiros vizinhos. Continuando com o mesmo procedimento, vamos incluir também os segundos vizinhos, $x' = x_{n+2}$ e $x' = x_{n-2}$ em A.2

$$\begin{aligned} K_n &= \left(\frac{h_{n+2} - h_n}{(4\Delta x)^2} + \frac{h_{n+1} - h_n}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{n-1} - h_n}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{n-2} - h_n}{4(\Delta x)^2} \right) \Delta x' \\ &= \frac{1}{4}h_{n+2} + h_{n+1} - \frac{5}{2}h_n + h_{n-1} + \frac{1}{4}h_{n-2}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde de uma linha para outra fizemos $\Delta x = 1$. A equação A.5 é uma combinação linear de segunda e quarta derivadas discretizadas. Lembrando que a versão discretizada da derivada quarta é

$$\left. \frac{d^4 h}{dx^4} \right|_{x_n} = \frac{h_{n+2} - 4h_{n+1} + 6h_n - 4h_{n-1} + h_{n-2}}{(\Delta x)^4} \quad (\text{A.6})$$

temos então que,

$$\begin{aligned} A(h_{n+1} - 2h_n + h_{n-1}) + B(h_{n+2} - 4h_{n+1} + 6h_n - 4h_{n-1} + h_{n-2}) \\ = \frac{1}{4}h_{n+2} + h_{n+1} - \frac{5}{2}h_n + h_{n-1} + \frac{1}{4}h_{n-2}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Igualando os termos, obtemos o sistema:

$$A - 4B = 1 \quad (\text{A.8})$$

$$B = \frac{1}{4} \quad (\text{A.9})$$

$$6B - 2A = -\frac{5}{2}. \quad (\text{A.10})$$

Resolvendo esse sistema simples, encontramos os valores $A = 2$ e $B = 1/4$. Portanto nossa aproximação resulta na função

$$K(x) = 2\frac{d^2h}{dx^2} + \frac{1}{4}\frac{d^4h}{dx^4} = 2\left(\frac{d^2h}{dx^2} + \frac{1}{8}\frac{d^4h}{dx^4}\right). \quad (\text{A.11})$$

O fator 2 é irrelevante porque estamos interessados no valor extremo de $K(x)$. Vamos considerar a interação um pouco mais geral, e deixar livre o coeficiente que multiplica a quarta derivada. Daí, nossa interação será

$$K(x) = \frac{d^2h}{dx^2} + B\frac{d^4h}{dx^4}. \quad (\text{A.12})$$

Apêndice B

Métodos Numéricos

Nesse apêndice descrevemos 2 métodos numéricos que usamos para fazer as simulações. O primeiro deles é a busca binária. Esse método é importante em qualquer problema de dinâmica extrema. O segundo método é a transformada rápida de Fourier (FFT), que usamos para calcular os expoentes no espaço dos momentos. Para a busca binária apresentamos as principais rotinas na linguagem C.

B.1 Busca Binária

A etapa mais custosa computacionalmente da implementação é encontrar o valor de F_c em cada passo de tempo. A implementação mais simples seria armazenar todos os valores de F_i , o valor da força que age sobre o sítio i , em um vetor e varrê-lo sequencialmente registrando a cada passo o valor do sítio com o menor valor de F_i . Dessa maneira precisaríamos de N comparações, o que dificultaria a simulação de sistemas grandes. Uma boa alternativa a essa busca linear seria a construção de uma árvore binária com os valores de F_i . Nesse apêndice, discutimos como fazer uma implementação eficiente do método.

A árvore tem uma raiz, abaixo da qual existem dois sítios, um à esquerda e um à direita, e assim por diante. Veja a figura (B.1). A primeira entrada será a raiz. Se a segunda entrada for maior do que a primeira, então ela será armazenada do lado direito da raiz; caso contrário, do lado esquerdo. Para cada nova entrada da sequência, comparamos seu valor com a raiz, decidindo se vamos prosseguir à direita ou à esquerda. Depois, repetimos a comparação no

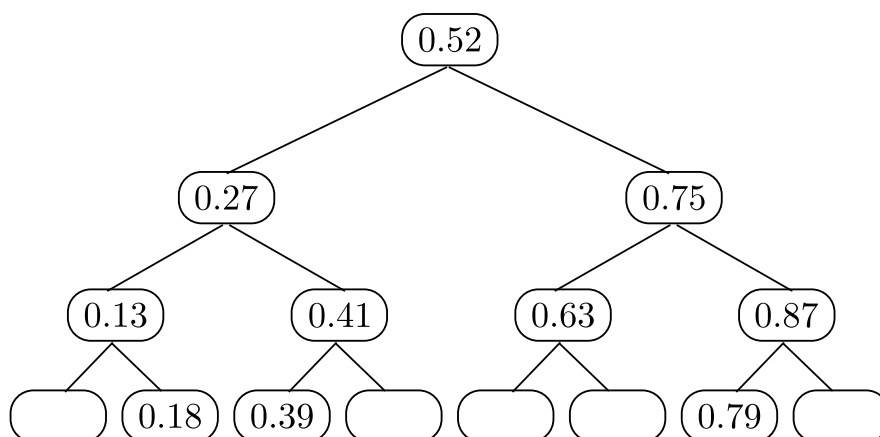


Figura B.1: Árvore binária onde a sequência 0.52, 0.27, 0.41, 0.75, 0.13, 0.63, 0.39, 0.18, 0.87, 0.79 é armazenada nessa ordem.

novo sítio, decidindo outra vez se vamos para a direita ou esquerda, e assim por diante, até que um sítio vazio seja encontrado.

Esta construção torna fácil o trabalho de encontrar o menor valor armazenado na árvore: nos movemos ao longo da árvore para baixo, começando da raiz, indo sempre para a esquerda até encontrar o último sítio ocupado. A vantagem sobre a busca linear é seguir apenas um ramo da árvore. Não é difícil perceber que um ramo tem em média um tamanho da ordem de $\log_2(N)$, muito menor do que N , principalmente para sistemas grandes. Para implementar o método precisamos de 3 rotinas, a seguinte rotina na linguagem C encontra o menor valor armazenado na árvore

```

unsigned minimum() {
/* encontra o menor valor da arvore binaria */
    unsigned    i, j;
    j = root;
    do i = j; while(j=left[i]);
    return(i);
}

```

A rotina que insere um elemento na árvore pode ser feita com

```

void put(new) unsigned new; {
/* inclui uma nova entrada na arvore binaria */
    unsigned i, j, lf, f;
    j = root; f = F[new];
    do {i = j;
        if(f<F[i]) {j = left[i]; lf = 1;}
        else {j = right[i]; lf = 0;}
    } while(j);
    top[new] = i;
    if(lf) left[i] = new; else right[i] = new;
}

```

Ao invés de usar as facilidades do uso de ponteiros em C, definimos explicitamente os vetores `top[]`, `left[]` e `right[]`. Isto implica em um custo maior de memória do computador, mas faz o código ficar mais claro. Além disso, a memória disponível nos computadores pessoais de hoje é mais do que suficiente para nossos propósitos. O elemento `left[i]` armazena a posição do sítio à esquerda do i -ésimo elemento da sequência, no exemplo da figura, `left[1]=4`, porque à esquerda do sítio 1, que tem o valor 0.27, temos o sítio com o valor 0.13 que ocupa a posição 4 da sequência (começando a contar do zero). Uma terceira rotina é necessária para remover uma entrada da árvore. Essa é a rotina mais complicada e merece uma explicação mais cuidadosa. Suponha que queiramos remover a entrada K da árvore. Para isso, considere as entradas L e R abaixo de K (à direita e à esquerda, respectivamente), e a entrada A abaixo de L (à direita). Se a posição L está vazia, K é substituída por R , se não por L . Se L , R e A estão ocupadas, então A é transferida para a primeira posição vazia ao longo do ramo mais à esquerda de R .

```

void remove(K) unsigned K; {
/* remove uma entrada da arvore binaria */
    unsigned t, L, R, A, i, j;
    t = top[K]; L = left[K]; R = right[K];

```



```

top[K] = left[K] = right[K] = 0;
A = right[L];
if(t) {
    if(L) {
        if(K==left[t]) left[t] = L; else right[t] = L;
        top[L] = t;
        if(R) {top[R] = L; right[L] = R;
            if(A) { /* re-position of A */
                j = R;
                do i = j; while(j=left[i]);
                top[A] = i; left[i] = A;
            }
        }
    }
}
else {
    top[R] = t;
    if(K==left[t]) left[t] = R; else right[t] = R;
}
}
else { /* remove a raiz */
    if(L) {root = L; top[root] = 0;
        if(R) {top[R] = root; right[root] = R;
            if(A) {
                j = R;
                do i = j; while(j=left[i]);
                top[A] = i; left[i] = A;
            }
        }
    }
}
}

```

```

else {root = R; top[root] = 0;}
}
}

```

B.2 Transformada rápida de Fourier

Nessa seção vamos apresentar um método para estimar a transformada de Fourier de um número discreto de pontos [19]. Suponha que temos N entradas h_i , tal que

$$h_i \equiv h(x_i), \quad x_i \equiv i\Delta, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N - 1. \quad (\text{B.1})$$

Buscamos por estimativas para os números de onda:

$$k_n \equiv \frac{n}{\Delta N}, \quad n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}. \quad (\text{B.2})$$

Note que temos $N + 1$ e não N valores. Acontece que os dois valores extremos de n não são independentes (de fato, eles são iguais), mas todos os outros valores são independentes, isso reduz a conta para N . O próximo passo é a aproximar a integral de Fourier por uma soma discreta:

$$F(k_n) = \int_{-\infty}^{\infty} h(x) e^{i2\pi k_n x} dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} h_j e^{i2\pi k_n x_j} \Delta = \Delta \sum_{j=0}^{N-1} h_j e^{i2\pi n j / N}. \quad (\text{B.3})$$

O somatório final é chamado de transformada de fourier discreta (DFT) e é denotada por H_n ,

$$H_n = \sum_{j=0}^{N-1} h_j e^{i2\pi n j / N}. \quad (\text{B.4})$$

A DFT não depende de nenhum parâmetro dimensional, tal como a discretização Δx , e tem as mesmas propriedades de simetria da transformada de Fourier contínua.

Até agora, fizemos o índice n variar de $-N/2$ a $N/2$, mas é fácil notar que (B.4) é periódica em n com período N . Portanto, $H_{-n} = H_{N-n}$ com $n = 1, 2, \dots$. É conveniente, para que H_n

e h_i variem sobre o mesmo intervalo, fazer o índice n em H_n variar de 0 a $N - 1$. Para isso fazemos $n \rightarrow n + N$ e usamos a periodicidade de B.4. Quando essa convenção é seguida $n = 0$ corresponde ao número de onda 0, os números de onda positivos correspondem aos valores $1 \leq n \leq N/2 - 1$, e os números de onda negativos correspondem a $N/2 + 1 \leq n \leq N - 1$. O valor $n = N/2$ corresponde aos números de onda $\pm N/2$.

A fórmula da transformada de Fourier discreta *inversa*, que recupera o conjunto h_j é

$$h_j = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} H_n e^{-i2\pi nj/N}. \quad (\text{B.5})$$

As únicas diferenças são o sinal da exponencial e o fator $1/N$. Isso significa que uma rotina que calcule a DFT serve, com o mínimo de modificação, para calcular a DFT inversa.

Para fazer um programa que calcule a DFT, basta fazer um laço duplo e calcular, para cada n , a soma dos produtos de h_i pela exponencial. O número de operações exigidas é da ordem de N^2 , o que exige um custo computacional muito grande. É possível, através de um algoritmo chamado FFT¹ reduzir o número de operações para uma ordem de $N \log_2(N)$. Esse algoritmo ficou conhecido no meio dos anos 60, a partir dos trabalhos de Cooley e Tukey². Vamos explorar agora alguns truques que podemos usar para acelerar os cálculos.

Uma DFT de tamanho N pode ser reescrita como duas somas, uma para j par e outra para j ímpar, cada soma terá $N/2$ elementos

$$\begin{aligned} H_n &= \sum_{j=0}^{N-1} h_j e^{i2\pi jn/N} \\ &= \sum_{j=0}^{N/2-1} h_{2j} e^{i2\pi jn/(N/2)} + e^{i2\pi n/N} \sum_{j=0}^{N/2-1} h_{2j+1} e^{i2\pi jn/(N/2)}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Essa divisão da DFT é chamada de lema de Danielson-Lanczos. O interessante desse lema é que ele pode ser aplicado recursivamente: dividimos a soma par nos índices $j = 0, 4, \dots$ e $j = 2, 6, \dots$, e fazemos o mesmo para os índices ímpares. Por exemplo, para $N = 8$, temos:

¹do inglês *Fast Fourier transform*.

²Hoje sabemos que métodos para calcular DFT de maneira eficiente foram descobertos antes, de maneira independente por muitas pessoas, começando por Gauss em 1805!

$$H_n = [(h_0 + h_4 e^{i\pi n}) + e^{i\frac{\pi}{2}n} (h_2 + h_6 e^{i\pi n})] + e^{i\frac{\pi}{4}n} [(h_1 + h_5 e^{i\pi n}) + e^{i\frac{\pi}{2}n} (h_3 + h_7 e^{i\pi n})] \quad (\text{B.7})$$

Agora, temos $3 = \log_2(8)$ níveis de somatório: o mais profundo entre parêntesis, o do meio entre colchetes e o mais externo. Em cada nível o expoente que multiplica o segundo termo é o mesmo. A observação mais importante para acelerar os cálculos é a periodicidade dos expoentes ($e^{\phi+2\pi} = e^\phi$).

A exponencial $e^{i\pi n}$ que multiplica o segundo termo da soma que está entre parêntesis tem período 2, ou seja, ele é a mesma para $n = 0, 2, 4, 6$ e $n = 1, 3, 5, 7$. Nesse nível precisamos de 8 somas no total (4 somas vezes 2 que é o período). Na prática, nesse estágio, é como se tivéssemos 4 transformadas de Fourier de tamanho 2. Note ainda que as exponenciais para n par são iguais a 1 e para n ímpar são iguais a -1. O reaproveitamento do fator exponencial é ilustrado na figura B.2.

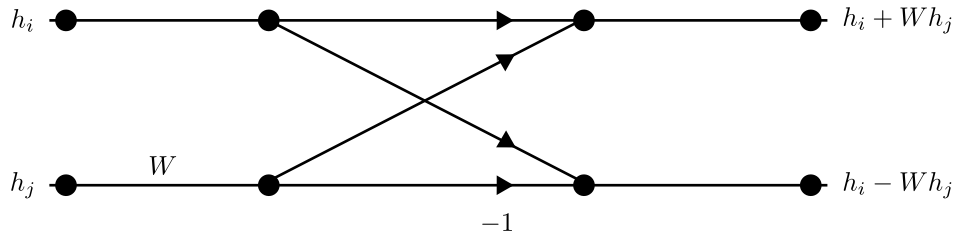


Figura B.2: Conexão entre as entradas e as saídas em um passo fundamental da FFT, ilustrados em um diagrama chamado butterfly. A letra W na figura representa o módulo do fator exponencial, no nível mais interno da soma temos $W = 1$.

No outro nível, o expoente $e^{i\pi n/2}$ que multiplica o segundo termo da soma tem período 4, ele é o mesmo para $n = 0, 4$ onde é igual a 1, para $n = 2, 6$ é igual -1, para $n = 1, 5$ vale i e para $n = 3, 7$ vale $-i$. Teremos outra vez 8 somas no total (2 somas vezes o período que é 4).

Por fim, no nível mais externo temos um expoente para cada n . Temos novamente, 8 somas, o valor do expoente $e^{i\pi n/4}$ para $n = 4, 5, 6$ e 7 é obtido trocando o sinal do valor encontrado para $n = 0, 1, 2$ e 3 respectivamente.

Então, em cada nível o cálculo envolve 8 somas. Em termos de N , temos $\log_2(N)$ níveis com N somas em cada nível, o que resulta em um número de operações da ordem de $N \log_2(N)$.

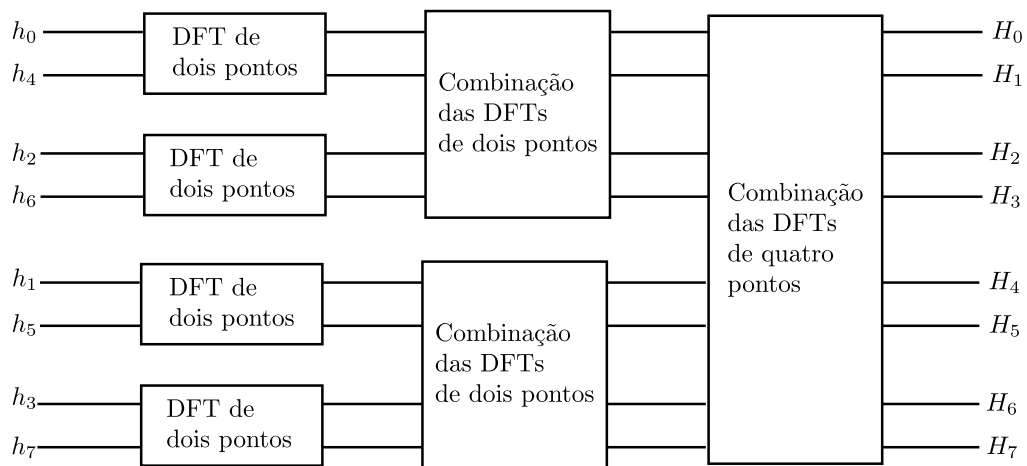


Figura B.3: Os 3 estágios envolvidos no cálculo de uma DFT de tamanho de tamanho 8.

Em resumo, temos agora um método para calcular a transformada rápida de Fourier. O método envolve 3 estágios: primeiro, o cálculo de 4 transformadas de Fourier de tamanho 2, depois, usando o resultado anterior, calculamos 2 transformadas de Fourier de tamanho 4 e, por último, calculamos a transformada de Fourier de tamanho 8 utilizando o resultado dos passos anteriores.

A combinação das transformadas menores até formar a transformada final é ilustrada na figura B.3

A butterfly geral para a o cálculo de uma DFT de tamanho 8 é mostrada na figura B.4

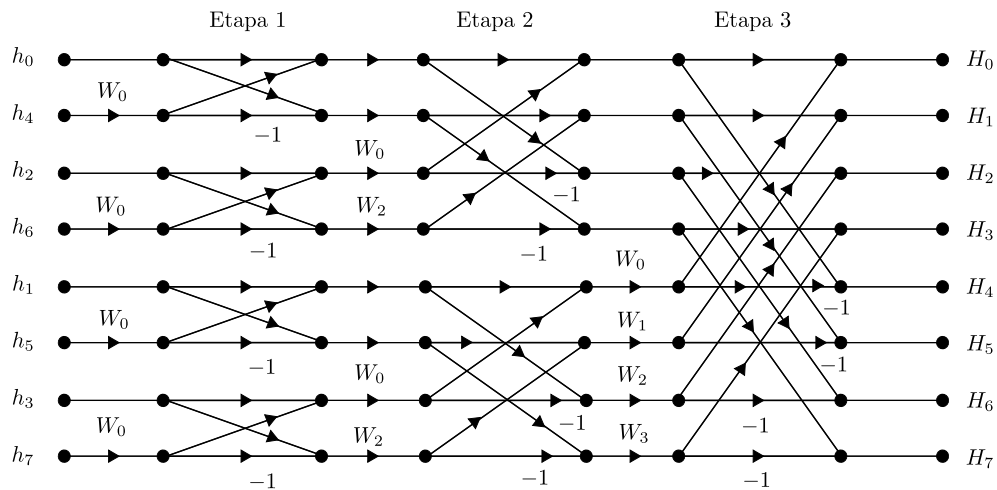


Figura B.4: Butterfly geral utilizada no cálculo da DFT de tamanho 8. No desenho $W_0 = 1$, $W_1 = \sqrt{2}/2 + i\sqrt{2}/2$, $W_2 = i$ e $W_3 = -\sqrt{2}/2 + i\sqrt{2}/2$.

Para finalizar, temos que descrever a organização da entrada h_i na ordem em que aparece na equação B.7 $\{h_0, h_1, h_2, h_3, h_4, h_5, h_6, h_7\} \rightarrow \{h_0, h_4, h_2, h_6, h_1, h_5, h_3, h_7\}$. Essa nova ordem é resultado de sucessivas divisões em termos pares e ímpares, na representação binária o resultado

disso é inverter a ordem dos bits. Veja a figura esquemática abaixo.

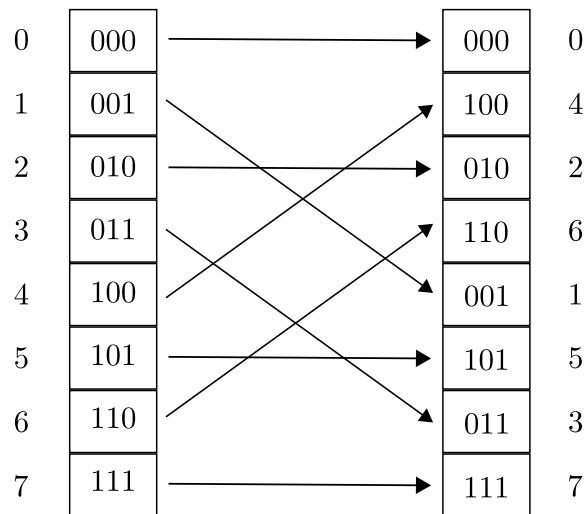


Figura B.5: Reordenamento da entrada na forma adequada para implementar FFT.

Entendemos então como o método funciona e a sua utilidade. Para os nossos propósitos é suficiente. A FFT é um algoritmo padrão e existem muitos pacotes e softwares que fazem a FFT de maneira otimizada. Basicamente todos esses pacotes usam a receita descrita nesse apêndice.

Referências Bibliográficas

- [1] P. Meakin. *Fractals, scaling e growth far from equilibrium*. Cambridge University Press, 1998.
- [2] A. L. Barabási e H. Stanley. *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge University Press, 1995.
- [3] F. Family e T. Vicsek. *Dynamics of Fractal Surfaces*. World Scientific, 1991.
- [4] Y. Charles, S. Roux F. Hild, e D. Vandembroucq. *Int. J. Mod. Phys. C*, 13:751–757, 2002.
- [5] D. S. Fisher. *Physics Reports*, 301(1-3):113 – 150, 1998.
- [6] H. Gao e J. R. Rice.
- [7] W. Selke. *Physics Reports*, 170(4):213 – 264, 1988.
- [8] B. Widom. *The Journal of Chemical Physics*, 84(12):6943–6954, 1986.
- [9] P. Upton e J. Yeomans. *Phys. Rev. B*, 40(1):479–492, Jul 1989.
- [10] J.S. Sá Martins e P. M.C. de Oliveira. *Brazilian Journal of Physics*, 34:1077 – 1101, 2004.
- [11] P. Bak. *How Nature Works: the Science of Self-Organized*. Oxford University Press, 1997.
- [12] P. Meakin. *Physics Reports*, 235(4-5):189 – 289, 1993.
- [13] M. J. Vold. *Journal of Colloid Science*, 14(2):168 – 174, 1959.
- [14] B. Widom. *The Journal of Chemical Physics*, (11):3892–3897, 1965.
- [15] S. R. A. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. Edusp, 2005.

- [16] H. E. Stanley. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1987.
- [17] T. Halpin-Healy and Y. Zhang. *Physics Reports*, 254(4-6):215 – 414, 1995.
- [18] G. Palasantzas. *Solid State Communications*, 100(10):705 – 710, 1996.
- [19] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, e W. T. Vetterling. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [20] H. Hinrichsen. *Advances in Physics*, 49:815, 2000.
- [21] R. Feynman. *The Feynman Lectures on Physics*, volume 1. Addison Wesley Longman, 1970.
- [22] J. Krug. *Advances in Physics*, 46(2):139–282, 1997.
- [23] D. E. Wolf e J. Villain. Growth with surface diffusion. *EPL (Europhysics Letters)*, 13(5):389, 1990.
- [24] S. Das Sarma e P. Tamborenea. *Phys. Rev. Lett.*, 66(3):325–328, 1991.
- [25] M. Kardar. *Physics Reports*, 301(1-3):36, 1997.
- [26] D. Vandembroucq, R. Skoe, e S. Roux. *Phys. Rev. E*, 70:051101, 2004.
- [27] F. D. A. A. Reis. *Brazilian Journal of Physics*, 33:501 – 513, 09 2003.
- [28] L. A. N. Amaral, A. L. Barabási, H. A. Makse, e H. E. Stanley. *Phys. Rev. E*, 52(4):4087–4104, 1995.
- [29] P. Bak, C. Tang, e K. Wiesenfeld. *Phys. Rev. Lett.*, 59(4):381–384, Jul 1987.
- [30] T. Tomé e M. J. de Oliveira. *Dinâmica estocástica e Irreversibilidade*. Edusp, 2001.
- [31] P. Bak e K. Sneppen. *Phys. Rev. Lett.*, 71(24):4083–4086, 1993.
- [32] R. Dickman, M. Muñoz, A. Vespignani, e S. Zapperi. *Brazilian Journal of Physics*, 30:27–41, 2000.

- [33] S. S. Manna. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24(7):L363, 1991.
- [34] A. Tanguy, M. Gounelle, e S. Roux. *Phys. Rev. E*, 58(2):1577–1590, 1998.
- [35] S. Krishnamurthy, A. Tanguy, e S. Roux. *Eur. Phys. J. B*, 15(1):149–153, 2000.
- [36] H. Leschhorn e L. Tang. *Phys. Rev. E*, 49(2):1238–1245, 1994.
- [37] Z. Olami, I. Procaccia, e R. Zeitak. *Phys. Rev. E*, 49(2):1232–1237, 1994.
- [38] M. Paczuski. *Phys. Rev. E*, 52(3):R2137–R2140, 1995.
- [39] L. Furuberg, J. Feder, A. Aharony, e T. Jøssang. *Phys. Rev. Lett.*, 61(18):2117–2120, 1988.
- [40] V. V. Gnedenko e A. N. Kolmogorov. *Limit Distributions of Sums of Independent Random Variables*. Addison-Wesley, 1968.
- [41] Johannes Voit. *The Statistical Mechanics of Financial Markets*. Springer, 2003.
- [42] Y. Charles, D. Vandembroucq, F. Hild, e S. Roux. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(7):1651 – 1669, 2004.