CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

Ensino Remoto Emergencial

Princípios de Modelagem Matemática - 2020/1

Prof. Thiago Mattos

ROTEIRO PARA PROJETO DE SIMULAÇÃO

1 Introdução

Nesse projeto serão estudados três modelos de crescimento de interfaces rugosas:

1. Deposição aleatória (DA);
2. Deposição aleatória com relaxação superficial (DARS);
3. Deposição balística (DB).

Os modelos serão analisados em (1+1) dimensões, ou seja, a dinâmica consistirá na deposição de partículas sobre um substrato unidimensional de tamanho L. O crescimento das interfaces ocorrerá na direção perpendicular àquela do substrato.

A execução do trabalho ocorrerá em duas etapas: simulações computacionais e redação de um artigo.

2 Simulações

2.1 Características gerais

As simulações referentes aos modelos deverão seguir as seguintes diretrizes:

- Os algoritmos poderão ser implementados em qualquer linguagem de programação.
- A principal grandeza de interesse é a rugosidade $\omega(t)$ da interface [1, 2].
- Uma unidade de tempo t deverá corresponder à deposição de L partículas. Cada execução da simulação deverá ocorrer até $t_{\text{max}} = 10^4$. Caso o regime de saturação da rugosidade ainda não tenha sido alcançado até então, deve-se estender o valor de t_{max} até que se atinja tal regime.
- Considerar $L = 200, 400, 800, 1600$.
- Os resultados deverão ser apresentados em termos de médias tomadas a partir da execução de $N = 10^3$ amostras independentes[1]. Uma amostra independente consiste em fazer $h(x, t = 0) = 0$ para $0 \leq x \leq L$ e executar o algoritmo de deposição de partículas até $t = t_{\text{max}}$.

[1] Esse valor poderá ser maior ou menor, dependendo da qualidade dos resultados obtidos e do tempo de processamento necessário.

- **IMPORTANTE**: o gerador de números aleatórios **NÃO** deve ser reiniciado ao se iniciar a execução de uma nova amostra!

2.2 Objetivos

Para cada um dos modelos:

1. Produzir instantâneos (*snapshots*) das interfaces obtidas [2].
2. Produzir gráficos para a rugosidade em função do tempo, $\omega(t)$ [3].
3. Produzir gráficos verificando o colapso das curvas $\omega(L,t)$ [4].
4. Calcular os valores de α, β e z [5].

3 Artigo

3.1 Características gerais

O texto final a ser entregue deverá estar em formato de artigo científico e apresentar a seguinte estrutura:

- Folha de rosto: título, autores, instituição, período letivo e nome da disciplina e do professor;
- Resumo e Abstract;
- Introdução;
- Metodologia;
- Resultados;
- Discussão e Conclusão;
- Referências.

3.2 Questões

As seguintes questões deverão ser respondidas/discutidas na seção "Discussão e Conclusão":

1. Explique por que a rugosidade ω da interface cresce indefinidamente com o tempo na DA, em contraste com seu comportamento na DARS e na DB, nos quais a rugosidade atinge um regime de saturação. O que isso tem a ver com o tamanho L do substrato?
2. Uma classe de universidade pode ser caracterizada (ou identificada) pelos valores dos expoentes críticos ou de enrugamento a ela associados. Que tipo de características fundamentais compartilham os modelos que pertencem a uma mesma classe de universalidade?
3. Na DARS e na DB, a rugosidade se comporta de acordo com $\omega(L,t) \sim t^{\beta}$, para $t \ll t_{\mathrm{x}}$, e de acordo com $\omega(L,t) = \omega_{\mathrm{sat}}(L) \sim L^{\alpha}$, para $t \gg t_x$. É possível colapsar diversas curvas $\omega(L_1,t)$, $\omega(L_2,t)$, $\omega(L_3,t)$, etc. através da função de escala $f(u)$
$$\omega(L,t) \sim L^{\alpha} f\left(\frac{t}{t_{\mathrm{x}}}\right).$$
   Outra forma de obter esses colapso das curvas é através da função de escala $g(u)$

[2] cf. Fig.2.2 (p.21), Fig.4.2 (p.39) e Fig.5.2 (p.45) em [1]; Fig.2.1 (p.5), Fig.2.3 (p.8), Fig.2.6 (p.11), em [2]
[3] cf. Fig.2.3 (p.22) e Fig.2.4 (p.23) em [1]; Fig.2.2 (p.7), Fig.2.4 (p.8), em [2]
[4] cf. Fig.2.5 (p.24) e Fig.2.6 (p.25) em [1]; Fig.2.9 (p.14) em [2]
[5] cf. Fig.2.4 (p.8) em [2]

$$\omega(L,t) \sim t^{\beta} g\left(\frac{L}{t^{\varphi}}\right).$$

Calcule o valor do expoente φ para a DARS e para a DB.

4. Mostre que $\beta = \frac{1}{2}$ para a DA
   (a) utilizando diretamente uma abordagem probabilística discreta;
   (b) utilizando uma equação diferencial estocástica para o crescimento da interface.

5. O crescimento da interface produzida pela DARS pode ser descrito pela equação de Edwards-Wilkinson (EW)
$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \eta(x,t).$$
Sabendo que a interface é auto-afim, utilize argumentos de escala para obter os valores dos expoentes de enrugamento α, β e z para $d = 1$.

6. O crescimento da interface produzida pela DB pode ser descrito pela equação Kardar-Parisi-Zhang (KPZ)
$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2}\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + \eta(x,t).$$
Sabendo que a interface é auto-afim, calcule os valores dos expoentes de enrugamento α, β e z, aplicando as seguintes transformações de escala: $x \to bx$, $h \to b^{\alpha} h$ e $t \to b^{z} t$ (é necessário considerar que o termo não-linear é dominante em relação ao termo linear). Compare esses valores com aqueles obtidos nas simulações e explique eventuais discrepâncias.

7. Mostre que a equação EW permanece invariante quando submetida às seguintes transformações:
   (a) Translação no tempo: $t \to t + \delta t$;
   (b) Translação ao longo da direção do crescimento da interface: $h \to h + \delta h$;
   (c) Translação ao longo da direção perpendicular à do crescimento da interface: $x \to x + \delta x$;
   (d) Inversão em relação à direção do crescimento da interface: $x \to -x$;
   (e) Inversão em relação à altura média da interface: $h \to -h$.

8. Mostre que a equação KPZ permanece invariante quando submetida às seguintes transformações:
   (a) Translação no tempo: $t \to t + \delta t$;
   (b) Translação ao longo da direção do crescimento da interface: $h \to h + \delta h$;
   (c) Translação ao longo da direção perpendicular à do crescimento da interface: $x \to x + \delta x$;
   (d) Inversão em relação à direção do crescimento da interface: $x \to -x$.

9. Mostre que a equação KPZ **não** permanece invariante quando submetida à transformação de inversão em relação à altura média da interface: $h \to -h$.

Referências

[1] A-L. Barabási and H. E. Stanley, *Fractal Concepts In Surface Growth*, 1st ed., Cambridge (1995).

[2] MATTOS, T. G. *Autômatos Celulares e Crescimento de Interfaces Rugosas.* 2005. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte-MG.