CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DE INTERFACES RUGOSAS

MARCELA RICHELE FERREIRA

BELO HORIZONTE
ABRIL DE 2018

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

MARCELA RICHELE FERREIRA

ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DE INTERFACES RUGOSAS

Tese de Doutorado apresentado ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados

Orientador: Allbens Atman Picardi Faria

BELO HORIZONTE
ABRIL DE 2018

Ferreira, Marcela Richele
F383e Estudo da propagação de interfaces rugosas. / Marcela Richele Ferreira. – – Belo Horizonte, 2018.
xi, 104 f. : il.

Tese (doutorado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, 2018.
Orientador: Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria

Bibliografia

1. Aspereza de Superfície. 2. Autômato Celular. 3.Mecânica da fratura. I. Faria, Allbens Atman Picardi. II. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. III. Título

CDD 511.8

Elaboração da ficha catalográfica pela Bibliotecária Elisângela Gonçalves Barbieri CRB-6: 2624 / CEFET-MG

Esta folha deverá ser substituída pela cópia digitalizada da folha de aprovação fornecida pelo Programa de Pós-graduação.

Agradecimentos

Embora o doutoramento seja um trabalho individual, sabemos que ele só é possível mediante a contribuição de muitas outras pessoas. Por essa razão gostaria de deixar meus sinceros agradecimentos a todos.

Ao professor Allbens pela valiosa orientação, confiança, paciência e constante incentivo;

Aos meus pais Miguel e Sônia pela dedicação e apoio;

Aos meus irmãos Isabelle, Michelly e Ricardo pelo carinho fraterno;

Ao meu esposo Rogério pelo carinho, enorme paciência e compreensão nos momentos difíceis;

A todos os colegas do PPGMMC, em especial ao Gustavo Martins, pela amizade, companheirismo e momentos de descontração;

Aos colegas da Coordenação de Matemática do CEFET-MG pelo apoio;

Aos demais amigos e familiares pelo incentivo e atenção;

Aos professores e funcionários do CEFET-MG, em especial ao professor Bruno André, pelos diversos auxílios;

Ao PMMH/ESPCI pela oportunidade da realização do doutorado sanduíche;

Aos pesquisadores Damien e Sylvain pela orientação;

À Capes e ao CEFET-MG pelo suporte financeiro.

Resumo

O crescimento de interfaces rugosas tem atraído a atenção dos pesquisadores ao longo dos anos devido a sua vasta gama de aplicações. Esse crescimento pode ocorrer de diversas formas e a compreensão do processo físico que controla a formação e morfologia das estruturas geradas depende, muitas vezes, da elaboração de um modelo simplificado. Sendo assim, esta tese tem por objetivo analisar a propagação de interfaces em duas situações distintas: crescimento de superfícies rugosas por deposição de partículas e movimentação de uma linha elástica em um meio heterogêneo. Inicialmente, focamos no estudo dos modelos discretos de crescimento por deposição de partículas, a fim de associá-los às diferentes classes de universalidade. Entender o estado crítico de sistemas que pertencem a uma determinada classe leva-nos à compreensão de todos os demais sistemas dessa classe. Para a realização dessa análise, utilizamos um novo modelo de Autômato Celular Probabilístico em $(1 + 1)$ dimensões, capaz de reproduzir uma ampla gama de padrões, permitindo a análise dos mais variados sistemas. As regras de transição que determinam a atualização desse autômato dependem do perfil local e são definidas a partir da diferença de alturas entre os vizinhos à direita e à esquerda do sítio central. Conforme o conjunto de parâmetros escolhidos, obtivemos morfologias distintas e expoentes críticos associados às diferentes classes de universalidade. Esses resultados permitiram um mapeamento das principais classes encontradas na literatura. Posteriormente, abordamos o comportamento da interface produzida durante a propagação de uma fratura, a partir da separação de duas placas. À medida que esses sólidos se separam, forma-se uma linha elástica que se movimenta sobre o substrato. Se a superfície é homogênea, a propagação da interface ocorre uniformemente. Caso contrário, a movimentação acontece de forma irregular, ficando retida em alguns pontos, devido aos diferentes valores de tensão superficial. Para analisar o comportamento da interface durante sua propagação, implementamos um modelo computacional capaz de gerar diferentes tipos de superfícies a partir da variação de alguns parâmetros. Dentre os parâmetros de controle escolhidos para a construção do substrato, incluímos a variação angular dos pontos de *pinning*, ou seja, modificamos a correlação do ruído congelado. Analisando essas alterações, foi possível perceber que alguns dos parâmetros de controle não interferem significativamente no comportamento temporal da rugosidade quando aplicados isoladamente. Os processos de propagação de interfaces analisados neste trabalho são considerados fenômenos críticos fora do equilíbrio e dependem de parâmetros que podem ser modificados de acordo com cada modelo. A partir da variação desses parâmetros, foi possível encontrar diferentes interfaces onde analisamos o comportamento temporal da rugosidade. Com os dados obtidos foi possível, na primeira parte da tese, fazer um mapeamento das principais classes de universalidade encontradas na literatura - EW, KPZ, DA, DP e CDP. No segundo modelo, observamos que o comportamento temporal da rugosidade apresentou alterações mediante a variação angular

entre 0° e 60° e mostrou-se mais acentuado quando essa variação estava associada à alteração do comprimento de correlação na direção x.

Palavras-chave: Propagação de Interfaces Rugosas; Modelos Discretos de Crescimento; Autômatos Celulares Probabilísticos; Fratura; Transição *Depinning*.

Abstract

Growth of rough interfaces has attracted the attention of researchers over the years due to its wide range of applications. This growth can occur in several ways and understanding of the physical process that controls the formation and morphology of the generated structures often depends on the elaboration of a simplified mathematical model. Thus, this thesis aims to analyze the propagation of interfaces in two distinct situations: growth of rough surfaces by deposition of particles and movement of an elastic line in a heterogeneous environment. Initially, we focused on the study of discrete models of growth by deposition of particles to associate them with the different universality classes. Understanding the critical state of systems belonging to a given class leads us to the understanding of all other systems of this class. To perform this analysis, we used a new probabilistic-cellular automata model in $(1+1)$ dimensions, which is able to reproduce a wide range of patterns allowing the analysis of the most varied systems. Transition rules that determine the update of this automaton depend on the local profile and are defined from the difference of heights between the right and left neighbors of the central site. According to the chosen set of parameters, we obtained distinct morphologies and critical exponents associated with the different universality classes. Later, we discuss the behavior of the interface produced during the propagation of a fracture from the separation of two plates. As these solids separate, an elastic line is formed which moves on the substrate. If the surface is homogeneous, the interface propagation occurs uniformly. Otherwise, the movement happens irregularly, being retained in some points, due to the different values of surface tension. To analyze the behavior of the interface during its propagation, we implemented a computational model capable of generating different types of surfaces from the variation of some parameters. Among the control parameters chosen for substrate construction, we included the angular variation of the pinning points, that is, we changed the correlation of the frozen noise. The processes of interface propagation analyzed in this work are considered out-of-equilibrium critical phenomena and depend on parameters that can be modified according to each model. From the variation of these parameters it was possible to find different interfaces where we analyzed the temporal behavior of the roughness. With the obtained data it was possible, in the first part of the thesis, to map the main universality classes found in the literature - EW, KPZ, DA, DP and CDP. In the second model, we observed that the temporal behavior of the roughness presented changes with the angular variation and was more pronounced when this variation was associated with the alteration of some other parameter.

Keywords: Spread of Rough Interfaces; Discrete Growth Models; Probabilistic Cellular Automata; Fracture; Depinning transition.

Lista de Figuras

Figura 1 – Grade de um CA 8
Figura 2 – Representação da Borda de um CA 8
Figura 3 – Vizinhança do CA bidimensional 9
Figura 4 – Triângulo de Pascal 10
Figura 5 – Estados possíveis do CA elementar 12
Figura 6 – Regra 90 13
Figura 7 – Representação da Regra 90 14
Figura 8 – Transição de fases 16
Figura 9 – Tabela de Probabilidades $(1+1)D$ 20
Figura 10 – Representação de Interfaces 27
Figura 11 – Modos de Crescimento sólido-sobre-sólido 29
Figura 12 – Representação dos modos de crescimento camada por camada 30
Figura 13 – Representação do modo de crescimento Volmer-Weber 30
Figura 14 – Comportamento do crescimento da rugosidade na DA 31
Figura 15 – Deposição Aleatória com Relaxação Superficial 32
Figura 16 – Comportamento temporal da rugosidade em modelos com correlação . 33
Figura 17 – Expoentes de rugosidade e dinâmico 34
Figura 18 – Tabela: Classe de Universalidade 34
Figura 19 – Modelo de crescimento DARS 36
Figura 20 – Comparação dos modelos de crescimento DA e DARS 37
Figura 21 – Deposição Balística 39
Figura 22 – Perfil gerado pela Deposição Balística 40
Figura 23 – Percolação por ligações 42
Figura 24 – Percolação Direcionada 44
Figura 25 – Modos de Ruptura 48
Figura 26 – Fratura interfacial 55
Figura 27 – Representação da linha elástica em um meio aleatório 56
Figura 28 – Modelo *depinning* de percolação direcionada 61
Figura 29 – Modelo *depinning* de percolação direcionada bloqueada 62
Figura 30 – Representação esquemática do modelo *depinning* 63
Figura 31 – Perfil dos Parâmetros 66
Figura 32 – Diagrama de fases 69
Figura 33 – Diagrama de fases 3D 70
Figura 34 – Diagrama de fases completo 71
Figura 35 – Diagrama de fases do *skewness* 72
Figura 36 – Diagrama de fases da curtose 73

Figura 37 – Paisagem Determinística 75
Figura 38 – Variação da tenacidade por coluna 76
Figura 39 – Paisagem Heterogênea 77
Figura 40 – Comportamento temporal da rugosidade associado à variação angular . 79
Figura 41 – Comportamento temporal da rugosidade associado à variação do comprimento de correlação na direção paralela à propagação 80
Figura 42 – Comportamento temporal da rugosidade associado à variação do comprimento de correlação na direção perpendicular à propagação 80
Figura 43 – Comportamento temporal da rugosidade associado a variação do tamanho do sistema na direção paralela à propagação 81
Figura 44 – Comportamento temporal da rugosidade associado à variação do tamanho do sistema na direção perpendicular à propagação da interface . . 81
Figura 45 – Determinação do expoentes de rugosidade e dinâmico 82
Figura 46 – Represntação da interface no processo *depinning* 83
Figura 47 – Tabela de Probabilidades $(2+1)D$ 85

Lista de Abreviaturas e Siglas

CA	Autômato Celular
CDP	Percolação Direcionada Compacta
CVD	Deposição química de vapor
DA	Deposição Aleatória
DAD	Deposição Aleatória com Difusão
DAR	Deposição Aleatória com Recusa
DARS	Deposição Aleatória com Relaxação Superficial
DB	Deposição Balística
DCA	Autômato Celular Determinístico
DKCA	Autômato Celular de Domany-Kinzel
DP	Percolação Direcionada
DPD	*Depinning* Percolação Direcionada
DT	Das Sarma-Tamborenea
ESPCI	*École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la ville de Paris*
EW	Edwards-Wilkinson
FPZ	Zona do Processo de Fratura
H	Expoente de Hurst
KK	Kim-Kosterlitz
KPZ	Kardar-Parisi-Zhang
LEFM	Mecânica da Fratura Linear Elástica
MF	Campo médio
NN	*Next neighbor*
NNN	*Near next neighbor*

PCA	Autômato Celular Probabilístico
PMMH	*Laboratoire de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes*
RW	*Random Walk*
SOD	*Depinning* auto-organizado
SOS	*Solid-on-solid*
UC	Classe de Universalidade
WV	Wolf-Villain

Sumário

1 – Introdução **1**

2 – Autômatos Celulares **6**

2.1 Definição 7

2.2 Introdução histórica 9

2.3 Autômatos Celulares Determinísticos 11

2.4 Autômatos Celulares Probabilísticos 15

2.5 Modelo de PCA em $(1+1)$ dimensões 17

3 – Crescimento de Interfaces **22**

3.1 Crescimento de Filmes Finos 22

3.2 Geometria das Superfícies Rugosas 26

3.3 Modelos de Crescimento por Deposição 28

3.4 Percolação 41

4 – Fratura **45**

4.1 Definição 46

4.2 Da elasticidade linear à ruptura 46

4.3 Modelos da zona do processo de fratura 48

4.4 Transição *Depinning* 54

4.5 Classes de Universalidade 58

4.6 *Pinning* via Percolação direcionada 60

4.7 Modelo da Propagação de Fratura 62

5 – Análise da propagação de interfaces **65**

5.1 Mapeamento das classes de universalidades 66

5.2 Rugosidade no processo *depinning* 74

6 – Perspectivas de trabalhos futuros **84**

7 – Conclusão **87**

Referências **89**

Capítulo 1

Introdução

O processo de crescimento é um fenômeno que apresenta uma vasta gama de aplicações, desempenhando um papel importante em muitos procedimentos de interesse científico e prático. Grande parte das formas na Natureza ou das estruturas criadas em laboratório são originadas de algum tipo de crescimento (KOTRLA, 1992). Como exemplo, podemos citar a formação de estruturas desde o crescimento de cristais ao desenvolvimento embrionário de plantas e animais, ou mesmo produção de microchips (MEAKIN, 1993). A disseminação de epidemias ou proliferação de organismos podem ser vistas como processos de crescimento, em um sentido generalizado. Dessa maneira, observa-se que esses processos têm relevância em diferentes campos científicos como ciência dos materiais, físico-química, medicina, sociologia *etc*. (KOTRLA, 1992).

O crescimento de superfícies pode evoluir de diferentes formas e a compreensão do processo físico que controla a formação e morfologia dessas estruturas representa, muitas vezes, um grande desafio (MEAKIN, 1993). Diante disso, faz-se necessária a elaboração de modelos mais simplificados que descrevam as principais características dessa evolução, facilitando o estudo dessa nova estrutura gerada.

Sistemas em equilíbrio apresentam propriedades que não se alteram espontaneamente e tendem a permanecer nesse estado. O equilíbrio termodinâmico, em especial, acontece quando não há alteração mecânica, química ou térmica no sistema. Quase todos os sistemas encontrados na natureza não se apresentam em equilíbrio termodinâmico, uma vez que estão sujeitos ao fluxo de matéria, energia ou reações químicas. Alguns desses processos são bastante complexos e exemplos típicos incluem fluxo de fluidos em meios porosos (BARRER, 1948; BEAR, 1988; BARABASI et al., 1992; KESSLER; LEVINE; TU, 1991; PARISI, 1992; ATMAN, 1998), deposição de vapor químico (CVD) (MEAKIN et al., 1986; PARK; SUDARSHAN, 2001; REINA et al., 2008), propagação de fraturas (ALAVA; NUKALA; ZAPPERI, 2006; SANTUCCI et al., 2007; LAURSON; SANTUCCI; ZAPPERI, 2010; ZEHNDER, 2012), corrosão (OPPENHEIM et al., 1991; LIANG; ZHAO, 2012), propagação

de incêndios florestais (OSHER, 1988; BERESTYCKI; HAMEL, 2002), crescimento de colônias de bactérias (KOUTSOUMANIS; LIANOU, 2013; VICSEK, 1992a; FARRELL et al., 2013) *etc*.

Apesar da diversidade dos eventos citados, eles têm muito em comum, pois todos podem ser descritos pelo mesmo conjunto de equações. Esses sistemas são caracterizados pela existência de um grande número de agentes que interagem, apresentando um comportamento coletivo de auto-organização sem a necessidade de um controlador central (BAR-YAM, 1997).

Alguns processos citados acima, como propagação de fluidos, fraturas e incêndios florestais, podem ser identificados como propagação de interfaces. A evolução dessas estruturas ocorre pela movimentação de uma linha que separa dois meios e é caracterizada por meio da análise de eventos decorridos próximo a ela (MEAKIN, 1993).

Outro exemplo que pode ser estudado sob o ponto de vista da propagação de interfaces é o crescimento de superfícies por deposição. O estudo dessas estruturas iniciou-se em 1938 com Ivan Stranski e Lyubomir Krastanov, que desenvolveram modos primários de crescimento por deposição de partículas (VENABLES, 2000; OURA et al., 2003). Porém, foi na década de 1960 com os trabalhos pioneiros de Vold (VOLD, 1959) e Eden (EDEN, 1961), que os modelos discretos de crescimento começaram a sobressair. As estruturas geradas próximas à interface não exibiam formas geométricas regulares da geometria euclidiana.

Na década de 1980, estudos desenvolvidos por Mandelbrot (MANDELBROT, 1982) discutiam como mensurar essas formas irregulares usando-se uma nova geometria – a Geometria Fractal. Ela permite definições conceituais matemáticas de muitas formas naturais, como litorais, montanhas ou partes de organismos vivos, entre outras. Com a disseminação dos seus conceitos e outros da física estatística moderna (escalonamento, universalidade *etc*.), a dinâmica de crescimento de superfícies rugosas atraiu atenção considerável (FAMILY, 1990; VILLAIN, 1991) e teve seu auge na década de 1990, quando pesquisadores se interessaram pelo fenômeno de crescimento fractal (VICSEK, 1992a; MANDELBROT, 1982). Várias revisões sobre modelos de crescimentos microscópicos foram desenvolvidas (HERRMANN, 1986; JULLIEN; BOTET, 1986; WEEKS; GILMER, 1979; LANGER, 1980) do ponto de vista da nova geometria que resulta em objetos com dimensões não inteiras (MANDELBROT, 1982).

O processo de evolução dessas estruturas é um fenômeno fora do equilíbrio (AMAR; FAMILY, 1990; AMAR; FAMILY, 1993) que depende também das propriedades microscópicas da interface, da força de ligação entre as partículas e de outros parâmetros que podem ser modificados de acordo com cada modelo. Esses modelos podem gerar uma superfície rugosa e essa interface pode pertencer a uma classe especial de fractais denominados

auto-afins. Os objetos auto-afins são invariantes sob uma transformação anisotrópica de escala, ou seja, uma mudança diferente de escala em cada direção não altera a morfologia do objeto.

Na maioria dos trabalhos, os modelos utilizados para descrever o crescimento de superfícies possuem três fatores em comum: (a) um fluxo constante de partículas que podem aderir ao substrato; (b) o caráter aleatório da deposição de partículas neste substrato; (c) a difusão de partículas (relaxação) sobre a superfície. Além disso, esse modelos podem ser classificados em dois tipos diferentes: os determinísticos, que são totalmente definidos pelos valores dos parâmetros e condições iniciais; os probabilísticos, que possuem alguma aleatoriedade própria. Independentemente do tipo de crescimento, a evolução da superfície pode gerar um objeto compacto com uma superfície anisotrópica (MANDELBROT, 1982) e pode estar associado a outros problemas, como criticalidade auto-organizada (BAK; TANG; WIESENFELD, 1987; BAK; TANG; WIESENFELD, 1988; GLERIA; MATSUSHITA; SILVA, 2004), por exemplo.

Nesta tese limitamos os estudos ao segundo modelo - os probabilísticos ou estocásticos, uma vez que nos concentramos em explorar a propagação de interfaces rugosas de dois pontos de vista distintos: crescimento de superfícies por deposição de partículas e, posteriormente, movimentação da interface em um meio desordenado gerada a partir da propagação de uma fratura. Para cada caso, elaboramos um modelo computacional capaz de descrever o comportamento temporal da rugosidade.

Na primeira parte do trabalho, foi empregada uma técnica computacional que se destaca por sua simplicidade – os autômatos celulares (CA) (NEUMANN, 1966). Eles podem ser usados em vários problemas, com destaque para a investigação da auto-organização de sistemas dinâmicos em Física Estatística (RICHELE, 2009).

Em 2009, elaboramos um modelo de autômato celular probabilístico (PCA) em $(1+1)$ dimensões[1], para estudar o crescimento de superfícies do tipo sólido-sobre-sólido (RICHELE, 2009). O modelo pode ser considerado um processo Markoviano de tempo discreto, em que as regras de transição dependem do perfil de altura da vizinhança. As diferenças de altura à direita e à esquerda do sítio central foram usadas para construir os parâmetros de simulação. À medida que o autômato é atualizado, um novo perfil vai se formando e sua morfologia pode ser obtida a partir da representação de interfaces do CA. A análise dessa morfologia é realizada usando-se da rugosidade, uma das principais grandezas utilizadas para se avaliar o comportamento temporal das correlações no sistema. Em 2015, mostramos que esse modelo é capaz de reproduzir uma ampla gama de padrões, cujos expoentes críticos estão associados a diferentes classes de universalidade (RICHELE; ATMAN, 2015). Por meio do método do expoente de crescimento, consideramos um determinado conjunto

[1] $(1+1)$ **dimensões:** rede unidimensional $+$ evolução temporal.

de parâmetros do modelo para construir um diagrama de fases bidimensional. No trabalho atual, propomos uma variação do modelo, possibilitando a construção de um diagrama tridimensional e uma análise mais completa dos perfis gerados.

A segunda parte dessa pesquisa possibilitou analisar o crescimento de superfícies por meio da propagação de interfaces, ou seja, uma interface que se expande ou se movimenta em uma determinada direção, como pode ser observado, por exemplo, em propagação de fraturas (PATINET et al., 2011; PATINET et al., 2013; PATINET; VANDEMBROUCQ; ROUX, 2013). Esse tema foi proposto pelo pesquisador Damien Vandembroucq, do Laboratório de Física e Mecânica de Meios Heterogêneos (PMMH), da Escola Superior de Física e Química Industrial da cidade de Paris (ESPCI). Pensando na proximidade com o objeto de pesquisa inicial e focando em um assunto mais atual, Vandembroucq sugeriu esse tema para o estágio de doutorado sanduíche. O trabalho consistia em separar duas placas e observar o comportamento da linha elástica formada no limite da divisão desses dois sólidos. A superfície gerada por essa separação pode ser homogênea ou heterogênea. Se assumirmos que ela é heterogênea, a propagação da linha irá ocorrer de forma irregular, gerando uma interface rugosa. Assim, a análise do sistema ocorreu a partir do comportamento temporal da rugosidade.

Toda a dinâmica citada é estudada como a movimentação da interface em um meio aleatório e caracterizada por uma transição *depinning* [2] [3]. Essa transição depende da força aplicada sobre as placas: se a força é fraca, os sólidos não se separam e consequentemente, a interface não se movimenta, ou seja, o sistema permanece em estado estacionário; se a força aplicada for maior que um valor crítico, as placas irão se separar e a interface começará a se mover, fazendo com que o sistema saia do estado estacionário (KARDAR; ERTAS, 1994). Porém, como o meio é heterogêneo, ele irá apresentar pontos com valores de intensidade de tensão diversos, fazendo com que a movimentação da linha ocorra de forma irregular (AMARAL et al., 1995a; AMARAL et al., 1995b). Dessa forma, se em um determinado ponto o valor da tensão é elevado, a linha ficará ancorada nesse local e continuará se propagando em outros pontos que apresentarem um valores menores de tensão.

Observe que os modelos de crescimento de interfaces explorados, seja por deposição de partículas ou propagação de interfaces, são fenômenos fora do equilíbrio e suas análises foram realizadas a partir da observação do comportamento temporal da rugosidade.

Com o intuito de facilitar a compreensão deste trabalho, dividimos a tese em 6 capítulos. No capítulo 2, apresentaremos os autômatos celulares, uma classe de modelos computacionais que possui uma vasta aplicação e no qual se concentra grande parte das contribuições desta

[2] ***Pinning***: ancoramento ou retenção da interface
[3] ***Depinning***: desancoramento a interface

tese. Introduziremos o assunto apresentando suas definições, principais características, algumas aplicações e finalizaremos com a apresentação do nosso modelo de autômato celular probabilístico em $(1 + 1)$ dimensões.

O capítulo 3 iniciará com um breve estudo dos modelos de crescimento de superfícies por deposição de partículas, apresentando alguns trabalhos e técnicas utilizadas em sua caracterização. Mostraremos que a evolução dessas superfícies produz uma rugosidade que possui propriedades de escala universais. Essas características podem ser associadas a expoentes críticos que governam o comportamento do sistema e identificam as diferentes classes de universalidade. Posteriormente, os modelos de crescimento serão abordados de forma analítica e sua construção comparada com resultados numéricos simulacionais. Finalizaremos o capítulo falando sobre a Percolação e mostraremos a relação desse processo de propagação de interfaces com o modelo de transição *depinning*, apresentado no capítulo 4.

No capítulo 4, faremos um breve estudo sobre fraturas, iniciando com a apresentação de algumas características e principais modelos desenvolvidos na literatura. Posteriormente, mostraremos o processo de transição *depinning*, as principais classes de universalidade associadas a ele, e o associaremos ao nosso modelo.

No capítulo 5, apresentamos as contribuições originais desta tese, com aplicações dos conceitos discutidos nos capítulos precedentes. Utilizamos dois modelos computacionais distintos para analisar a propagação de interfaces. No primeiro, usamos a representação de interfaces do CA para simular modelos de deposição de partículas e mapear as classes de universalidade associadas a cada modelo. No segundo, exploramos um protótipo capaz de reproduzir o processo de transição *depinning* e analisar o comportamento da linha elástica em um meio desordenado. A caracterização de um processo ocorre próximo à interface; assim, em ambos os modelos focamos nessa região e analisamos o comportamento temporal da rugosidade dessa interface. Finalmente, encontramos os expoentes críticos associados à propagação da interface em um meio aleatório durante o processo *depinning* e mostramos que o nosso modelo de autômato celular probabilístico é capaz de reproduzir esse sistema para um determinado conjunto de parâmetros.

O capítulo 6 apresenta algumas das principais perspectivas de trabalhos futuros.

Finalmente, apresentamos nossas conclusões sobre este trabalho no capítulo 7.

Capítulo 2

Autômatos Celulares

Muitos fenômenos da Natureza são modelados por meio de equações; outros não permitem essa técnica (MELOTTI, 2009), mas podem ser estudados a partir dos conceitos de sistemas complexos (BAR-YAM, 1997; PEARCE; MERLETTI, 2006). Como exemplos desses sistemas, pode-se citar: dinâmica de populações, mercados financeiros, relações sociais, crescimento de interfaces rugosas, entre outros (BAR-YAM, 1997; PEARCE; MERLETTI, 2006).

Em geral, os sistemas complexos são formados por um número elevado de elementos com interações locais não-lineares que levam a uma auto-organização, mas dificultam a obtenção de resultados analíticos (MELOTTI, 2009; WOLFRAM, 1994). Entretanto, uma forma relativamente simples de se estudar esse tipo de sistema é usando-se modelos computacionais. Entre as técnicas existentes, escolhemos uma que se destaca pela sua simplicidade e versatilidade – os Autômatos Celulares.

Autômatos celulares (CA) são usados como modelos matemáticos simples na investigação da auto-organização em Mecânica Estatística (WOLFRAM, 1983). Eles surgiram no final da década de 1960 com estudos realizados por John von Neumann (NEUMANN, 1966) que os utilizou na modelagem de sistemas biológicos autorreprodutivos. Entretanto, os autômatos ficaram mais conhecidos após os trabalhos de Wolfram no final da década de 1980, quando o autor demonstrou que um CA pode exibir comportamento complexo, mesmo sendo inicializado com regras simples, e evoluir para padrões de auto-organização (WOLFRAM, 1983). Esse tipo de fenômeno, por exemplo, contribui para a compreensão da formação de padrões espontâneos.

Este capítulo descreve os aspectos gerais que definem um CA, apresentando alguns exemplos que evidenciam suas características fundamentais. Essas características os tornam atraentes como ferramenta matemática para a modelagem de sistemas físicos. Um exemplo possível de aplicação desse protótipo é apresentado na última seção, onde será

exibido um modelo de CA que é capaz de reproduzir a propagação de interfaces rugosas.

2.1 Definição

Os autômatos celulares (CA) são modelos matemáticos computacionais discretos (ERMENTROUT; EDELSTEIN-KESHET, 1993) construídos sobre uma rede regular, que podem apresentar tamanho finito ou infinito (WOLFRAM, 1983). As condições de fronteira do modelo são escolhidas de forma a ditar como o mesmo interage em suas extremidades. Em redes multidimensionais, por exemplo, as condições podem variar em cada direção (SIMPSON; LANDMAN; HUGHES, 2010; SIMPSON et al., 2007). Mais comumente, as condições de fronteira são periódicas, tratando dois sítios em extremos opostos como vizinhos (BAKER; SIMPSON, 2012; DEUTSCH; DORMANN, 2005; GOLINELLI; MALLICK, 2006).

A forma e a dimensão de cada rede são definidas com base na aplicação do modelo (DURRETT, 1994; LEE et al., 1995). Ela é constituída por sítios idênticos que podem assumir k estados possíveis: para $k = 2$, define-se os estados vazio 0 ou ocupado 1. Esses estados podem variar após cada iteração e são responsáveis por determinar o estado seguinte (MORAES, 2007). A evolução das células depende, também, de regras pré-estabelecidas que podem ser determinísticas ou probabilísticas (SCHULMAN; SEIDEN, 1978; WOLFRAM, 1983). Além de apresentar interações locais, a atualização acontece de forma síncrona em todos os sítios, conduzindo a uma dinâmica global de auto-organização (WOLFRAM, 1983; MORAES, 2007) que, na maioria das vezes, é irreversível (BERTO; TAGLIABUE, 2017). Dessa forma, o valor de cada sítio é determinado de acordo com a vizinhança no passo de tempo anterior (WOLFRAM, 1983; SIMPSON; LANDMAN; HUGHES, 2010).

Os elementos básicos que compõem um autômato celular são (MORAES, 2007):

- **Célula:** é um espaço de memória que armazena os estados dos sítios, desde o caso mais simples representado por números binários até casos mais complexos em que as células podem apresentar vários estados, possuindo mais de uma propriedade. Dependendo da modelagem proposta, a forma geométrica de cada célula pode assumir diversas configurações, mais de uma dimensão e até variar a quantidade de ocupantes.
- **Grade:** rede espacial onde as células estão dispostas. A rede que apresenta maior simplicidade é a unidimensional, disponibilizando uma acomodação onde todas os sítios estão arranjados lado a lado; entretanto, existem grades em qualquer dimensão, conforme pode ser visto na Figura 1.
  Quando analisada matematicamente, o tamanho da grade do CA pode ser infinito, se

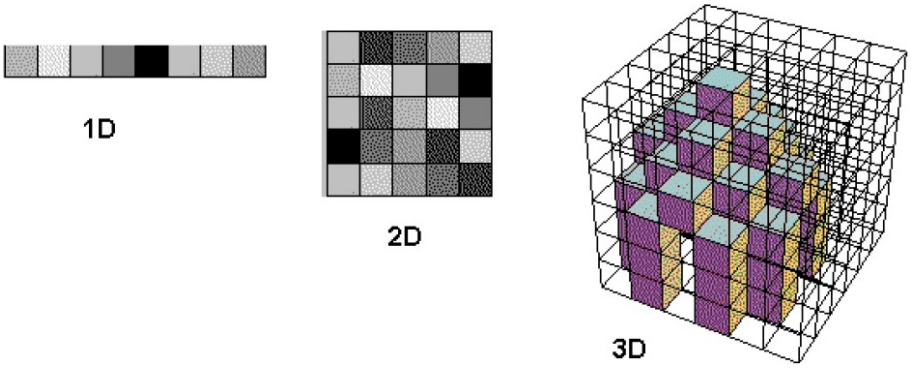


Figura 1 – *Representação de redes regulares: unidimensional (1D), bidimensional (2D) e tridimensional (3D) de um autômato celular. Retirado de (MORAES, 2007).*

considerarmos os limites laterais, ou finito, quando deve-se definir as condições de limite para se saber o que acontece nas bordas, onde a vizinhança é incompleta. De acordo com Pfeifer et al. (2001), há três possibilidades de se resolver este problema, como pode ser observado na Figura 2:

- Limite fixo: suponha que existam sítios "fantasmas"ao redor da grade com um estado pré-definido; isso pode ser feito descrevendo-se como serão os estados das células no contorno da grade, mantendo-os durante a interação;
- Limite periódico: suponha que os sítios de uma borda sejam vizinhos dos sítios da borda oposta;
- Limite reflexivo: suponha que células da borda são refletidas internamente à grade.

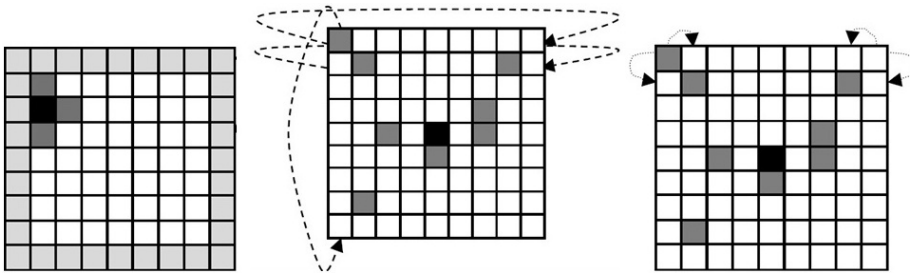


Figura 2 – *As representações da borda de um CA: a primeira rede ilustra uma representação fixa da borda, onde os sítios em cinza claro representam os sítios "fantasmas"; a segunda rede ilustra uma condição periódica de contorno, em que o início e o final da seta indicam quais sítios são vizinhos; e a terceira representa uma vizinhança reflexiva, ou seja, o sítio é refletido na posição indicada pela seta. Retirado de (MORAES, 2007).*

- **Vizinhança:** é a determinação da fronteira que cada célula terá dentro da grade. Existem algumas configurações que definem quais serão as direções em que ocorrerá o processo evolutivo dos estados das células. Por exemplo (observe a Figura 3):
  - Vizinhança de von Neumann: ocorre com quatro células - acima, abaixo, à direita

e à esquerda da célula central. O raio (r) desta definição é 1, porque somente os primeiros vizinhos serão considerados - *next neighbor* (NN).

– Vizinhança de Moore: é uma ampliação da vizinhança de von Neumann, onde as diagonais também são consideradas como células vizinhas - *near next neighbor* (NNN).
– Vizinhança aleatória: as células ficam espalhadas pela grade de forma não ordenada.

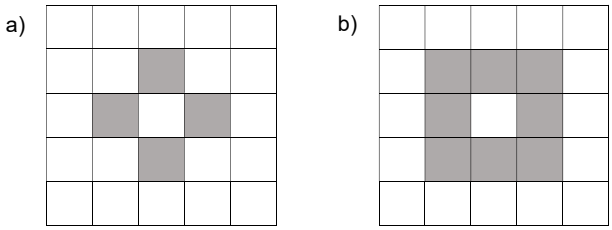


Figura 3 – *Exemplos de vizinhança para CAs bidimensionais. Na evolução do CA, o sítio central é atualizado de acordo com uma regra que depende dos valores dos vizinhos sombreados. À esquerda temos a vizinhança de von Neumann e à direita, a vizinhança de Moore.*

O conceito de vizinhança especifica quais serão os vizinhos de uma célula, pois as regras de transição serão aplicadas baseadas nos estados da vizinhança e da célula central. Se considerarmos a vizinhança de von Neumann, citada acima, temos $2^5 = 32$ estados de vizinhança possíveis o que leva a $2^{32} \approx 10.000.000.000$ possíveis regras de transição. Para a vizinhança de Moore, temos $2^9 = 512$ estados de vizinhança possíveis, gerando $2^{512} \approx 10^{154}$ regras de transição local.

Após estabelecermos as definições fundamentais, vamos considerar alguns exemplos de CAs. Na próxima seção 2.2 faremos uma pequena introdução histórica dos autômatos. Na seção 2.3, faremos uma breve análise dos autômatos celulares determinísticos (DCA) por intermédio dos CAs elementares (ou CAs de Wolfram) que, apesar da enorme simplicidade de sua construção, são capazes de produzir estruturas fractais e de apresentar os elementos essenciais para a ocorrência de um regime caótico. Na seção 2.4, apresentaremos as principais características de um autômato celular probabilístico (PCA).

2.2 Introdução histórica

Os autômatos celulares podem ser suficientemente simples para permitir uma análise matemática detalhada, porém são complexos o bastante para descrever uma ampla variedade de fenômenos não triviais (ATMAN, 2002), obedecendo às regras locais e gerando padrões globais (ILACHISNKI, 2001). Exemplo desse tipo de comportamento pode ser observado no algoritmo utilizado para se obter os coeficientes de uma expansão binomial. O conhecido

"Triângulo de Pascal", onde a soma de dois elementos de uma linha será igual ao elemento representado na linha abaixo deles, apresenta uma regra semelhante à regra de atualização de um CA. Dessa forma, este pode ser considerado o protótipo de um CA, como pode ser observado na Figura 4 (ATMAN, 2002).

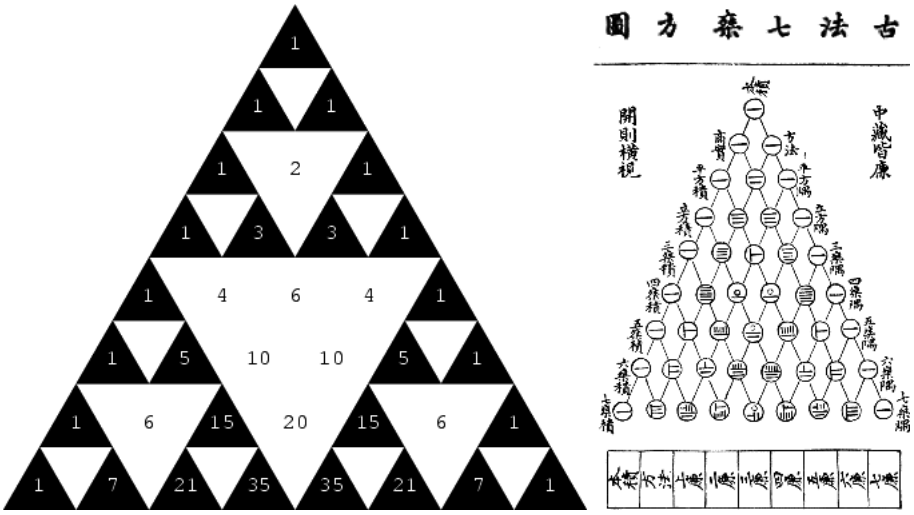


Figura 4 – *Triângulo de Pascal: na figura à esquerda os coeficientes ímpares foram pintados de preto e os pares de branco, revelando a estrutura do triângulo de Sierpinski; na figura à direita, foi reproduzido o mais antigo triângulo de Pascal, datado de* 1303*. Retirado de (PEITGEN; JURGUENS; SAUPE, 1992).*

A ideia estruturada de um autômato celular surgiu pela primeira vez na década de 1940, quando Stanislaw Ulam usou um sistema baseado em rede para modelar o crescimento de cristais (PICKOVER, 2009). Por recomendação de Ulam, John von Neumann começou a usar um modelo semelhante, desenvolvendo o primeiro modelo de CA em 1952 (WOLFRAM, 2002). Entre outras coisas, von Neumann estava interessado em criar uma máquina simples de autorreprodução biológica (PESAVENTO, 1995). As pesquisas envolvendo CAs continuaram ao longo dos anos 60, sendo que a maioria envolvia teoremas altamente técnicos sobre as capacidades computacionais dos modelos (WOLFRAM, 2002).

Em 1970, John Conway propôs um modelo de CA bidimensional chamado de Jogo da Vida (GARDNER, 1970). Embora o jogo em si tenha pouco significado físico do mundo real, ele ganhou esse nome devido a sua dinâmica populacional. O jogo simula o processo de evolução de células biológicas que possuem dois estados: vivo - 1 ou morto - 0.

O Jogo da Vida é um modelo de CA de tempo discreto, ou seja, os eventos ocorrem no intervalo de tempo determinado, gerando uma nova configuração para o estado dos sítios no próximo passo de tempo. É também determinista; portanto, uma dada configuração a qualquer momento sempre originará uma nova configuração no próximo passo. São considerados 9 vizinhos (vizinhança de Moore): o sítio central e os 8 sítios que o cercam. Esses eventos correspondem a: subpopulação, que indica a extinção devido à solidão;

população estável; superlotação, que indica um excesso de população, causando falta de alimento. As regras são simples e podem ser resumidas (MELOTTI, 2009) como:

- uma célula viva com um vizinho vivo ou nenhum vivo, morre por solidão;
- uma célula viva com mais do que três vizinhos vivos, morre por superpopulação;
- uma célula viva com dois ou três vizinhos vivos, sobrevive no próximo instante de tempo;
- em uma célula vazia com exatamente três vizinhos vivos, ocorre um nascimento.

O jogo evolui sobre uma rede bidimensional infinita, partindo de uma configuração inicial com um número finito de 1 e todas as outras células com valor 0. Durante a dinâmica do Jogo da Vida, pode-se notar grupos de células chamados piscantes. Esses grupos apresentam-se em blocos que alteram constantemente entre dois estados de acordo com as regras. Caso estes blocos não sejam tocados, irão piscar indefinidamente. Outra estrutura encontrada são os *gliders*, que deslizam pelo CA em diagonal até encontrarem uma célula viva (MELOTTI, 2009).

O resultado final do Jogo da Vida é quase sempre constituído por estruturas localizadas, *gliders* e piscantes, que oscilam periodicamente ao longo do tempo e que, a partir de qualquer configuração inicial, podem alcançar três estados possíveis (SALDANA; TABARES; YU, 2002):

- Extinção: todas as células morrem;
- Estabilidade: a evolução do sistema converge para um estado estável;
- Oscilação: o sistema entra em uma fase oscilante.

Desde a sua publicação, o Jogo da Vida, de Conway, tem atraído muito interesse, por causa das maneiras surpreendentes em que os padrões podem evoluir. O jogo fornece um exemplo de propriedades emergentes[1] e de auto-organização.

2.3 Autômatos Celulares Determinísticos

Enquanto a maior parte dos pesquisadores estava interessada no Jogo da Vida, Stephen Wolfram estava desenvolvendo estudos com outra perspectiva - CAs unidimensionais em tempo discreto (WOLFRAM, 1983). Wolfram considerou o estado de um sítio e de seus primeiros vizinhos à direita e à esquerda, diminuindo o número de casos e possibilitando a análise de todos os possíveis CAs determinísticos em uma dimensão, com dois estados possíveis - $0, 1$. Esses CAs são chamados de elementares.

[1] **Propriedades emergentes:** são propriedades que surgem/emergem, a partir das interações e arranjos de componentes de um sistema que, tomados individualmente, não produzem aquela característica ou estrutura.

Considerando-se os dois estados citados acima e a interação entre três vizinhos, é possível descrever $2^3 = 8$ combinações como pode ser observado na Figura 5.

Estado 0	$\longrightarrow$	$\mathbf{0x2^2 + 0x2^1 + 0x2^0}$	$\longrightarrow$	**000**
Estado 1	$\longrightarrow$	$\mathbf{0x2^2 + 0x2^1 + 1x2^0}$	$\longrightarrow$	**001**
Estado 2	$\longrightarrow$	$\mathbf{0x2^2 + 1x2^1 + 0x2^0}$	$\longrightarrow$	**010**
Estado 3	$\longrightarrow$	$\mathbf{0x2^2 + 1x2^1 + 1x2^0}$	$\longrightarrow$	**011**
Estado 4	$\longrightarrow$	$\mathbf{1x2^2 + 0x2^1 + 0x2^0}$	$\longrightarrow$	**100**
Estado 5	$\longrightarrow$	$\mathbf{1x2^2 + 0x2^1 + 1x2^0}$	$\longrightarrow$	**101**
Estado 6	$\longrightarrow$	$\mathbf{1x2^2 + 1x2^1 + 0x2^0}$	$\longrightarrow$	**110**
Estado 7	$\longrightarrow$	$\mathbf{1x2^2 + 1x2^1 + 1x2^0}$	$\longrightarrow$	**111**

Figura 5 – *Tabela de estados possíveis de um autômato celular determinístico. Retirado de (RICHELE, 2009).*

Para cada um desses casos, o sítio central tem duas opções no próximo passo – vivo ou morto – assim teremos $2^8 = 256$ regras determinísticas diferentes. Um valor bem reduzido, se comparado às 2^{18} regras do Jogo da Vida.

Ao se analisar as combinações citadas acima, é possível identificar duas características importantes (WOLFRAM, 1983):

- Ausência de Fontes: A vizinhança 000 evolui para o estado 0, $000 \rightarrow 0$, no próximo passo de tempo, o que faz com que um estado nulo com vizinhança identicamente nula permaneça inalterado;
- Simetria de Reflexão: Os estados inicias $1(001)$ e $4(100)$, ou $3(011)$ e $6(110)$ evoluem para o mesmo estado, apresentando uma simetria que irá garantir a homogeneidade na evolução do CA.

Essas particularidades geram um subgrupo de $2^5 = 32$ estados que são considerados válidos, conhecidas como regras legais e que possuem simetria de reflexão.

As regras dos CAs em uma dimensão podem ser classificadas em três tipos (WOLFRAM, 2002):

- Legal - Uma regra é "legal" se apresenta ausência de fontes e simetria de reflexão.
- Totalística - Uma regra é "totalística" se x_i^{t+1} depende somente da soma de x_i^t sobre as posições da vizinhança. Por exemplo, $x_i^{t+1} = f(x_{i-1}^t + x_i^t + x_{i+1}^t)$. Das 32 regras legais apenas 8 são totalísticas.

- Periférica - Uma regra é "periférica" se o estado de um determinado sítio depende do estado de seus vizinhos no passo anterior, mas não do seu próprio estado.

Como exemplo, observe a Regra 90 na Figura 6.

000	001	010	011	100	101	110	111	
↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	
0	1	0	1	1	0	1	0	
$0x2^0$	$1x2^1$	$0x2^2$	$1x2^3$	$1x2^4$	$0x2^5$	$1x2^6$	$0x2^7$	= Regra 90

Figura 6 – *Regra 90: A primeira linha apresenta cada uma das 8 combinações possíveis para uma vizinhança de três sítios com estados binários. A segunda linha exibe o valor do sítio central após a atualização no passo de tempo subsequente. Essa regra é a representação de número 90 na base dois, 01011010. Retirado de (RICHELE, 2009).*

As condições iniciais de um autômato celular determinístico (DCA) podem ser aleatórias e com evolução irreversível[2], podendo gerar estados homogêneos ou padrões autosemelhantes (WOLFRAM, 1983).

Wolfram (WOLFRAM, 1984) classificou os padrões obtidos nesses modelos em quatro tipos:

- **Evolução para estado homogêneo:** Após um número finito de passos de tempo, o sistema atinge um estado homogêneo, no qual todos os sítios possuem o mesmo valor. Porém, partindo de certas configurações iniciais excepcionais, o sistema pode não evoluir para esse estado, ingressando em ciclos não triviais. Todavia, a fração dessas configurações excepcionais decai rapidamente à medida que o tamanho do sistema aumenta. Como exemplos de regras que evoluem para o estado homogêneo, temos: $0, 4, 16, 32, 36, 48, 54, 60$ e 62.
- **Evolução para estado periódico:** Os padrões gerados são constituídos por estruturas periódicas persistentes, com períodos tipicamente curtos. Como exemplos que evoluem para este estado podemos citar as regras: $8, 24, 40, 56$ e 58.
- **Evolução para padrão caótico:** As regras pertencentes a essa classe possuem forte dependência das condições iniciais, apresentando uma grande instabilidade com relação a pequenas variações nos estados iniciais. Esse comportamento caótico pode ser identificado observando-se a evolução de um CA definido pela medida, ao longo do tempo, da diferença entre ele e sua cópia, sobre a qual se aplica um dano, que pode ser, por exemplo, a alteração do estado de um sítio. Algumas das regras que evoluem para o estado caótico são: $2, 6, 10, 12, 14, 18, 22, 26, 28, 30, 34, 38, 42, 44, 46$ e 50. Alguns padrões dessa classe aparentam maior regularidade que outros, sendo

[2] **Irreversível:** A irreversibilidade trata da impossibilidade de se obter estados anteriores.

que esse grau de regularidade está relacionado com o grau de irreversibilidade das regras (WOLFRAM, 1984).

- **Evolução para estruturas complexas localizadas:** os autômatos dessa classe apresentam uma repetição irregular, no tempo, de padrões com diferentes escalas e posições no espaço. Combinam, de certo modo, regularidade, com alguma imprevisibilidade. Apesar da classificação, alguns autores consideram que este tipo de CA se situa entre as classes caótica e periódica. Wolfram (1984) considera a possibilidade de que as regras pertencentes a essa classe possam apresentar a propriedade de computação universal - configurações iniciais adequadas podem especificar procedimentos algorítmicos arbitrários, fazendo com que o sistema funcione como um computador para aplicações gerais, capaz de avaliar qualquer função computável. Como exemplos de regras que evoluem para estruturas complexas, temos: 20 e 52.

Para as três primeiras classes citadas acima, flutuações nas quantidades estatísticas são normalmente encontradas, tornando-se progressivamente menores à medida que um número maior de sítios é considerado. Para a quarta classe, aparentemente as flutuações não diminuem à medida que o número de sítios aumenta (WOLFRAM, 1984).

Observe a regra caótica 90 na Figura 7. Ela fornece um padrão não trivial, ou seja, nem todos os autômatos determinísticos seguem o mesmo comportamento. Alguns evoluem para o estado homogêneo onde todos os sítios ficam nulos imediatamente (regras 0 e 60), outros permanecem inalterados (regras 4 e 36).

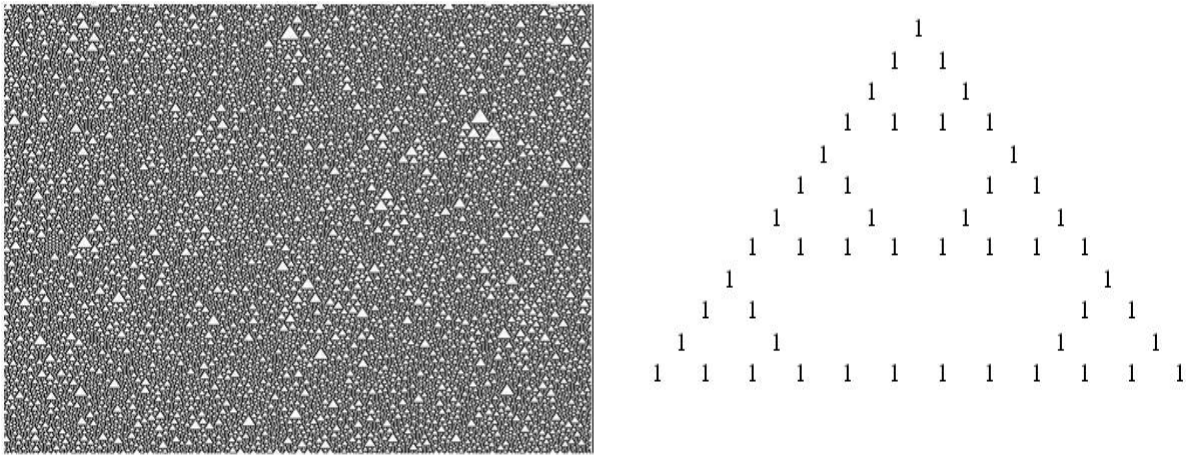


Figura 7 – *Representação da Regra 90: À esquerda temos padrões espácio-temporais produzidos pela regra a partir de um estado inicial aleatório e à direita a evolução temporal dos oito primeiros passos de tempo cujo o estado inicial é composto por um sítio central no estado 1 e os outros no estado 0. Retirada de (WOLFRAM, 1983)*

Wolfram foi o primeiro a demonstrar que um CA pode exibir comportamento complexo, mesmo com regras locais simples. Sua classificação demonstra que tais regras podem

levar a uma espécie de auto-organização, o que contribui inicialmente para uma maior compreensão do fenômeno de formação espontânea de padrões (WOLFRAM, 1982).

2.4 Autômatos Celulares Probabilísticos

Os Autômatos Celulares Probabilísticos (PCA), também conhecidos como Autômatos Celulares Estocásticos, são sistemas cuja atualização é determinada a partir de algumas distribuições de probabilidades. Também podem ser classificados como sistemas irreversíveis, ou seja, uma vez atingido um estado final, não retorna ao estado inicial ou a quaisquer estados intermediários. Além disso, a atualização síncrona do sistema é difícil de ser descrita por meio de uma equação analítica. Entretanto, é possível reproduzir a evolução temporal do sistema por meio de sua distribuição de probabilidades (ATMAN, 2002).

Os PCAs desempenham um papel importante na modelagem matemática de vários fenômenos biológicos, sociais e físicos. Como exemplo podemos citar processos epidemiológicos onde a propagação de uma doença ocorre de forma estocástica (SAYAMA, 2015). De um modo geral, eles apresentam grande sucesso em descrever fenômenos nestas áreas, caracterizando-se como um dos modelos fundamentais para representar sistemas complexos (ATMAN, 2002). Eles podem modelar reações químicas, crescimento de cristais, turbulência, problemas biológicos ou outros processos não lineares fora do equilíbrio, como também podem ser mapeados em modelos de Mecânica Estatística em $(1+1)$ dimensões. Os PCAs podem exibir, mesmo em uma dimensão, transição de fase contínua com expoentes críticos universais e leis de escala (DOMANY; KINZEL, 1984).

Como um exemplo de PCA, temos o autômato celular de Domany-Kinzel (DKCA), introduzido em 1984 (DOMANY; KINZEL, 1984). Este PCA é especialmente útil no estudo de catálise em reações químicas e percolação direcionada em redes quadradas (MARTINS et al., 1991). O DKCA consiste de uma rede unidimensional com N sítios de $i = 1, 2, 3, ...N$, com condições de contorno periódicas. Cada sítio i da rede possui dois estados possíveis $\sigma_i = 0$ ou $\sigma_i = 1$, tal como nos CAs estudados por Wolfram (WOLFRAM, 1986). Os autores introduziram as taxas de transição probabilísticas $\omega_i(\sigma_i|\sigma^{'}) = \omega_{DK}(\sigma_i|\sigma^{'}_{i-1}, \sigma^{'}_{i+1})$ que assumem uma forma totalística, ou seja, dependem exclusivamente da soma entre os estados de sua vizinhança (DOMANY; KINZEL, 1984),

$$p_0 \equiv \omega(1|00) = 0; \tag{1}$$

$$p_1 \equiv \omega(1|10) = \omega(1|01); \tag{2}$$

$$p_2 \equiv \omega(1|11). \tag{3}$$

Assim, $\omega_{DK}(0|\sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1}) = 1 - \omega_{DK}(1|\sigma'_{i-1}, \sigma'_{i+1})$.

A evolução temporal deste autômato depende dos valores das probabilidades condicionais. Dependendo dos valores destas probabilidades e lembrando que, por definição, toda probabilidade é normalizada, a evolução temporal $(t \to \infty)$ conduz a um estado homogêneo, onde todos os sítios estão no estado 0 (conhecido como fase congelada) ou a um estado que possui uma fração finita de sítios no estado 1 (fase ativa). Desse modo, o DKCA apresenta uma transição de fase contínua entre as fases congelada e ativa mesmo para uma dimensão $(d = 1)$, caracterizada por um expoente crítico universal associado a um parâmetro de ordem definido como a fração de sítios no estado 1 (MARTINS et al., 1991). Observe a Figura 8. Dentro da fase ativa, existe uma região que é sensível às condições iniciais (fase caótica), ou seja, dados dois autômatos sujeitos à mesma regra de evolução e à mesma sequência de números aleatórios, mas com estados iniciais diferindo apenas no estado de um único sítio, eles atingirão, após um tempo suficientemente longo, estados completamente diferentes. Ao contrário, na fase ativa não caótica, esta pequena diferença conduz a estados finais próximos (MARTINS et al., 1991).

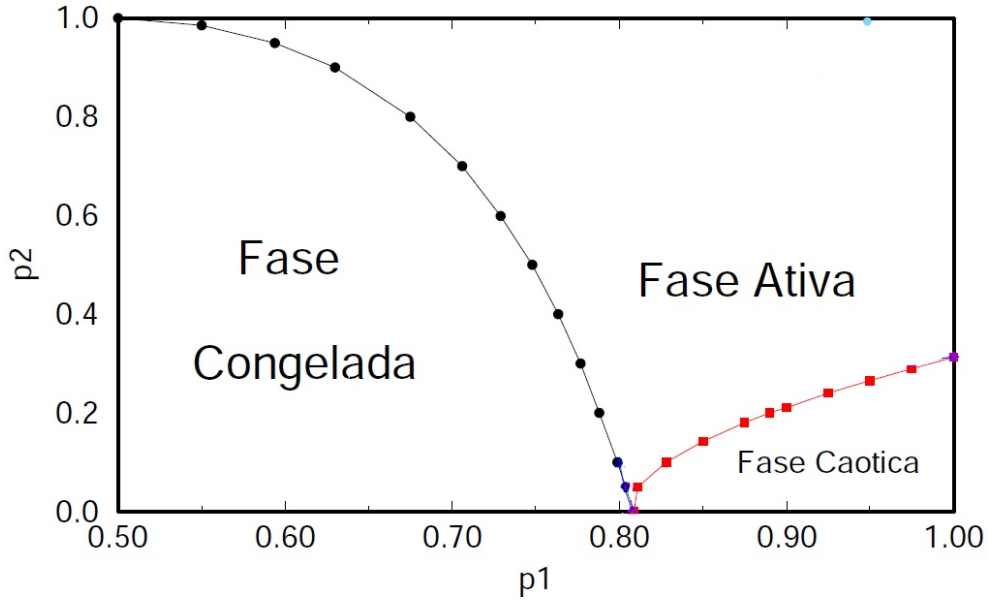


Figura 8 – *Diagrama de fases que representa a transição da fase congelada para ativa com a presença de uma pequena região sensível às condições iniciais - fase caótica. Considerando $p_2 = 0$ tem-se p_1 próximo de 0.8, para $p_1 = 1$ tem-se p_2 próximo de 0.3. Retirada de (ATMAN; MOREIRA, 2000).*

O DKCA é um dos modelos mais estudados na Mecânica Estatística fora do equilíbrio, possuindo todos os elementos básicos para a irreversibilidade (DOMANY; KINZEL, 1984). O

modelo possui regras locais de curto alcance, tal como o Modelo de Ising[3], mas diferencia-se exatamente por possuir uma transição de fase em $d = 1$ (ATMAN, 2002). Essa transição pode ser estudada fixando-se o valor de p_2 e variando-se o parâmetro p_1. O parâmetro de ordem do modelo é a densidade de sítios ativos, ρ, que, na criticalidade ou ponto crítico, onde os limites de fase desaparecem sob temperatura e pressão críticas, apresenta um comportamento do tipo lei de potência.

$$\rho \propto (p_1 - p_{1c})^{\beta}, \text{ quando } p_1 \to p_{1c}^{+} \ , \tag{4}$$

onde p_{1c} é o valor crítico do parâmetro p_1. Esse valor é próximo de 0.81 quando $p_2 = 0$. As linhas do gráfico da Figura 8 indicam uma transição de fase para o estado absorvente[4] no DKCA, exceto no ponto terminal $(p_2 = 1, p_1 = \frac{1}{2})$ (DOMANY; KINZEL, 1984). Nesse ponto, o sistema pertence à classe de percolação direcionada compacta e $\beta = 0$, indicando uma transição descontínua. Os expoentes críticos da classe de percolação direcionada não são conhecidos exatamente, enquanto a classe CDP[5] possui resultados exatos (KINZEL, 1985). O DKCA também apresenta uma fase caótica, associada ao espalhamento de danos envolvendo um par de autômatos (MARTINS et al., 1991).

Até este momento nos limitamos à definição de CA apresentando suas principais características, classificação e uma pequena introdução teórica. Na próxima seção, mostraremos a metodologia utilizada na elaboração de um modelo de PCA, expondo sua versatilidade na construção de interfaces. Discutiremos uma nova proposta que possibilitará a análise mais detalhada do comportamento da rugosidade durante o processo de crescimento de superfícies.

2.5 Modelo de PCA em $(1 + 1)$ dimensões

O estudo do crescimento de interfaces tem despertado o interesse de cientistas de diferentes áreas desde o início do século XX (BAUER, 1958; FRANK; MERWE, 1949; STRANSKI; KRASTANOV, 1938; VOLMER; WEBER, 1926), por apresentar implicações diretas no desenvolvimento da indústria e tecnologia. Esse crescimento é um regime complexo presente em diferentes sistemas e caracterizado por um conjunto de processos que ocorrem durante a sua formação. Uma das grandezas utilizadas na compreensão da dinâmica do crescimento dessas interfaces é a rugosidade (BARABASI; STANLEY, 1995; MEAKIN; RAMANLAL, 1998). A análise do processo de enrugamento durante a evolução dessas superfícies ajudou

[3] Modelo de Ising é um modelo que descreve o comportamento de sistemas de elementos individuais que alteram o seu estado de acordo com o estado dos vizinhos.

[4] **Estado Absorvente:** Um estado de uma cadeia de Markov é um estado absorvente se, uma vez atingido, é impossível sair dele (TIJMS, 2003).

[5] A percolação será apresentada com mais atenção no capítulo 3

na compreensão de suas propriedades físicas, como identificação dos expoentes críticos, capturando seu comportamento essencial de escala universal e previsão das condições para o crescimento de novas multicamadas, que formam a base da indústria moderna de microestruturas, como microchips por exemplo (HALPIN-HEALY; PALASANTZAS, 2014; ALMEIDA et al., 2014; OHRING, 2002). As diferentes aplicações impuseram vários desafios tecnológicos, gerando um grande número de estudos experimentais, teóricos e de simulação (BARABASI; STANLEY, 1995; MEAKIN; RAMANLAL, 1998; VICSEK, 1992a). Desde meados do século XX, com a evolução da computação, observa-se um crescimento em pesquisas envolvendo a simulação computacional, uma vez que ela permite tratar sistemas de diferentes tamanhos e número de partículas (MEAKIN; RAMANLAL, 1998; BOCCARA, 2004; SPRINGEL et al., 2005).

No contexto dos fenômenos de crescimento de superfícies, a simulação foi útil na reprodução de modelos de deposição de partículas, permitindo uma análise mais detalhada desse tipo de processo. Dentre as técnicas computacionais utilizadas para atacar esse problema, escolhemos uma que se destaca pelo seu potencial como ferramenta matemática para modelagem de sistemas físicos, os autômatos celulares (CA) (NEUMANN, 1966).

Esses modelos permitem o estudo de sistemas de grande porte em tempo razoável e custo computacional relativamente baixo. Suportam uma grande variedade de parâmetros capazes de reproduzir a complexidade espacial de diversas formas, funções e padrões. Trabalham com atualização síncrona, fazendo com que todos os sítios se atualizem ao mesmo tempo. Possibilitam a análise de suas estruturas em espaço e tempo separados ou combinados e apresentam condição periódica de contorno. Além disso, eles possuem uma estrutura precisa com mecanismos completamente conhecidos para uma análise matemática, ou seja, os autômatos podem ser simples o suficiente para uma investigação matemática analítica. Além disso, exibem em alguns casos, complexidade suficiente para descrever uma grande variedade de fenômenos não triviais (WOLFRAM, 1986).

Na literatura, podemos encontrar vários trabalhos que empregaram os autômatos celulares no estudo de interfaces. Entre eles podemos citar Atman e Moreira (ATMAN; MOREIRA, 2000) que introduziram o método do expoente de crescimento para identificar a transição de fase e o utilizaram na construção do diagrama de fases do DKCA. Basicamente o método consiste em estudar o comportamento da rugosidade na interface autoafim gerada pela representação de interfaces do DKCA. A representação de interfaces mapeia o autômato em um modelo de crescimento do tipo sólido-sobre-sólido (SOS) (BARABASI; STANLEY, 1995).

Em trabalhos mais recentes (MATTOS; ATMAN; MOREIRA, 2006; MATTOS; ATMAN; MOREIRA, 2007), um modelo de CA foi utilizado para estudar as equações contínuas relacionadas às diferentes classes de universalidade, associando as regras do autômato à versão

discreta da equação contínua correspondente. As simulações mostraram um bom acordo dos expoentes de rugosidade medidos com suas respectivas classes de universalidade, motivando o desenvolvimento do modelo apresentado nesse trabalho.

Em 2009, propusemos uma maneira diferente de construir as probabilidades de transição de PCA, a fim de compreender melhor o problema de crescimento de superfície do tipo sólido-sobre-sólido (SOS) (RICHELE, 2009). Esse trabalho foi enriquecido com análises mais precisas e publicado em 2015 (RICHELE; ATMAN, 2015). No artigo consideramos o perfil de altura local gerado pela evolução temporal da representação da interface dos autômatos (SALES; MARTINS; MOREIRA, 1997; ATMAN; MOREIRA, 2000) a fim de especificar as regras de transição em função das características morfológicas da evolução da interface. Este modelo permite associar um conjunto específico de probabilidades de transição microscópicas às diferentes classes de universalidade e, eventualmente, determinar os valores das regras de transição que reproduzem algumas características de partículas microscópicas. Esta característica pode ser usada para prever o comportamento das superfícies geradas por diferentes combinações de partículas, como deposição de vapor químico, por exemplo. Também esperamos que este modelo possa ser útil na exploração de algumas características de rugosidade cinética (BARABASI; STANLEY, 1995), além da análise das funções de distribuição das flutuações de altura (HALPIN-HEALY; PALASANTZAS, 2014; ALMEIDA et al., 2014; HALPIN-HEALY, 2013; HALPIN-HEALY, 2012).

O modelo de PCA citado (RICHELE; ATMAN, 2015) é unidimensional e apresenta condições periódicas de contorno de forma a obtermos um anel com L sítios, sendo $(i = 1, 2, ..., L)$. O estado de cada sítio é representado por σ_i e o mesmo apresenta dois valores possíveis 0 ou 1. O estado do sistema no instante t é dado pelo conjunto $\sigma_i(t)$: se $\sigma_i(t) = 1$, uma partícula é depositada, caso contrário, não há deposição e o perfil permanece inalterado. Assim, o modelo é um processo Markoviano discreto com regras de atualização probabilísticas. Essas probabilidades dependem da morfologia local do perfil gerado pela representação de interfaces do autômato (SALES; MARTINS; MOREIRA, 1997). O procedimento resulta em um processo de crescimento superficial que consiste em somar todos os valores assumidos pelas variáveis $\sigma_i(t)$ ao longo dos primeiros t passos de tempo.

As probabilidades de transição para cada sítio foram construídas considerando-se o perfil de alturas dos primeiros vizinhos, à direita r_i e à esquerda l_i, no passo de tempo anterior: $r_i(t) = h_i(t) - h_{i+1}(t)$ e $l_i(t) = h_i(t) - h_{i-1}(t)$, respectivamente. Assim, se $r_i = l_i = 0$ tem-se uma superfície localmente plana com a sua altura i incrementada com probabilidade $p_0 = 0.5$; se r_i e l_i são ambos negativos, temos um mínimo local e a partícula será depositada em um vale com probabilidade $p_1 = 1$; caso contrário, se r_i e l_i são ambos positivos, temos $p_5 = 0$, pois não é desejado que mais uma partícula seja depositada em um máximo local. As demais possibilidades, p_2, p_3 e p_4 são utilizadas como parâmetros de

controle: se r_i é negativo e $l_i = 0$ (ou o caso simétrico) usamos p_2; quando r_i é positivo e l_i é negativo (ou o caso simétrico) temos p_3; se r_i é positivo e $l_i = 0$ (ou o caso simétrico) temos p_4. Esses parâmetros estão resumidos na tabela da Figura 9. Dependendo dos valores das probabilidades, obtém-se diferentes morfologias e expoentes críticos associados às várias UCs.

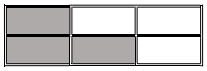
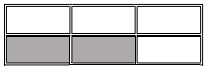
p_i	ℓ_i	r_i	Perfil
$p_0 = 0.5$	0	0	
$p_1 = 1$	< 0	< 0	
p_2	< 0	0	
	0	< 0	
p_3	< 0	> 0	
	> 0	< 0	
p_4	> 0	0	
	0	> 0	
$p_5 = 0$	> 0	> 0	

Figura 9 – *As regras de transição dos parâmetros foram definidas de acordo com as interações entre os primeiros vizinhos - as diferenças de altura à direita e à esquerda foram usadas na construção dos parâmetros de simulação.*

Em análises anteriores (RICHELE; ATMAN, 2015), optamos por um corte bidimensional criando um vínculo entre os parâmetros $p_4 = 1 - p_2$, uma vez que o perfil de alturas descrito por p_4 pode ser considerado como antissimétrico ao de p_2. A partir dos resultados das simulações, foi possível a realização do mapeamento das UCs usando-se a construção de uma bacia de atração $p_2 \times p_3$.

As contribuições deste trabalho residem em uma análise do diagrama tridimensional construído a partir dos parâmetros de controle p_2, p_3 e p_4, permitindo sua variação entre 0 e

0.99. Em todas as simulações, medimos a rugosidade ao longo do tempo e encontramos os valores dos expoentes próximos às classes de universalidade já existentes. Assim, as correlações do sistema foram incorporadas pelos parâmetros de transição e expressas por meio do comportamento da rugosidade $w(L,t)$.

Nessa sessão foi mostrada a construção do modelo de PCA a partir das regras de transição. Esse modelo foi proposto com a motivação de se estudar os diferentes processos de crescimento de interfaces. No capítulo 5, serão apresentados os resultados encontrados nas simulações realizadas usando-se a representação de interfaces do autômato associada a alguns modelos de crescimento e mapeamento das classes de universalidade.

Capítulo 3

Crescimento de Interfaces

O mundo entrou em uma nova era de materiais. Essa mudança, observada facilmente em documentações governamentais e acadêmicas, demonstra uma busca pela criação de novos materiais que são projetados para satisfazer as necessidades humanas (HAHN, 1994). Essa intensa busca, associada aos avanços da tecnologia, tem sido o grande desafio das indústrias, devido a sua importância na sociedade contemporânea. Nas últimas décadas, várias técnicas foram desenvolvidas com o intuito de compreender melhor as propriedades das superfícies geradas a partir desses materiais. Normalmente, as propriedades de um material dependem dos seus componentes, da posição das partículas em sua superfície e do tipo de ligação existente entre elas (PANCOTTI, 2005). Exemplo desse tipo de estudo pode ser observado em pesquisas desenvolvidas por engenheiros, cientistas, químicos, físicos *etc*, que buscam modelos cada vez mais realistas do crescimento de filmes finos a partir do início do século XX (BAUER, 1958; FRANK; MERWE, 1949; STRANSKI; KRASTANOV, 1938; VOLMER; WEBER, 1926). Esses filmes têm despertado grande interesse desde o final da década de 1990 devido a sua aplicação em LEDs, lasers, detectores de ultravioleta, semicondutores em geral, dentre outros (BARABASI; STANLEY, 1995). A análise da morfologia dessas estruturas ajudou na compreensão de suas propriedades físicas, capturando seus comportamentos essenciais de escala universal. Ela prevê as condições para o crescimento de novas multicamadas que formam a base da indústria moderna (HALPIN-HEALY; PALASANTZAS, 2014; ALMEIDA et al., 2014; OHRING, 2002).

3.1 Crescimento de Filmes Finos

A ideia do estudo de filmes finos surgiu com Richard Phillips Feynman, no final da década de 1950, quando ministrou uma palestra na Califórnia, intitulada *"There is plenty of room at the bottom"*. Nessa conferência ele mencionou a possibilidade de se manipular a matéria a partir de suas moléculas e átomos (FEYNMAN, 1960). Desde então, cientistas do mundo inteiro desenvolveram pesquisas nessa área, conhecida como nanotecnologia. Esses estudos

buscam compreender e controlar diversos fenômenos previstos em escala nanométrica, em sua maioria explicados pelas teorias da mecânica quântica, que prevêem efeitos diferentes daqueles observados na física clássica (FIORENTINI, 2008).

Entretanto, a obtenção experimental de estruturas nanométricas só foi possível no final da década de 1960 quando se criou a epitaxia por feixes moleculares (MBE). Essa técnica consiste no crescimento de filmes cristalinos sob um substrato (FIORENTINI, 2008) e pode ser dividido em dois grupos (KASAP; CAPPER, 2006):

- Crescimento de filmes pela reação da superfície do substrato com as substâncias presentes. Como exemplo, podemos citar a oxidação e a nitretação térmica do Silício e a obtenção de Silicetos pela reação do Silício com filmes metálicos depositados.
- Crescimento de filmes por deposição sem reação com o substrato. Esse tipo de crescimento pode ser dividido em três subgrupos:
  - Deposição química a partir da fase vapor (CVD): os filmes são formados pela reação química de espécies na superfície do substrato. Quando o processo é utilizado para formar filmes monocristalinos ele é denominado epitaxia;
  - Deposição física a partir da fase vapor: neste processo as espécies do filme são arrancadas fisicamente de uma fonte, por evaporação ou por impacto de íons (*Sputtering*), e se deslocam até o substrato onde condensam na forma de um filme;
  - Deposição a partir de líquidos: neste processo a espécie, em forma líquida, é gotejada e centrifugada sobre o substrato.

Normalmente os filmes são formados pela condensação de átomos ou moléculas de vapor sobre o substrato. O processo de crescimento pode ser dividido em três zonas (HERMAN; SITTER, 1996): a primeira é chamada de zona de geração, onde os materiais são evaporados para então seguir em direção ao substrato; a segunda é conhecida como zona de mistura e fica entre as fontes de evaporação e o substrato. Recebe este nome pois é ali que os diferentes elementos evaporados se misturam antes de chegar ao substrato. A terceira é chamada de zona de cristalização onde ocorrem todos os processos físico-químicos do crescimento. O processo se inicia pela formação de pequenos aglomerados de material, denominados núcleos, espalhados aleatoriamente sobre a superfície do substrato. O mecanismo de fixação é denominado adsorção química, quando ocorre a transferência de elétrons entre o material do substrato e a partícula depositada; caso isso não ocorra, chamamos de adsorção física. Átomos adsorvidos migram sobre a superfície do substrato interagindo com outros para formar os núcleos. À medida que mais átomos interagem, os núcleos crescem. Quando os núcleos entram em contato uns com os outros ocorre a coalescência que resulta em estruturas maiores. O processo continua formando canais e buracos que serão preenchidos com novos núcleos até a formação de um filme contínuo.

Esse fenômeno é importante na formação de nano-ilhas epitaxiais e podem levar a diferentes modelos de crescimento devido à formação de diversos padrões de nucleação (VENABLES, 2000).

O processo citado é uma técnica sofisticada e precisamente controlada, que permite o crescimento de filmes monocristalinos. Esse crescimento se dá por meio do fluxo de partículas provenientes do aquecimento de fontes sólidas, que incidem sobre a superfície do substrato, possibilitando a evolução de estruturas sobre a mesma. A maioria dos modelos teóricos considera que, ao atingirem o substrato, as partículas interagem várias vezes, podendo visitar diferentes sítios até alcançarem o equilíbrio termodinâmico (VENABLES, 2000).

Como foi dito anteriormente, uma molécula pode se fixar ao substrato por adsorção física ou química. Se considerada, em especial, a adsorção química, a migração superficial das partículas depende da energia de ligação existente entre elas. Essa técnica experimental de adsorção de partículas a partir da fase de vapor saturado na CVD, em geral, assemelha-se aos diversos processos de crescimento por deposição do tipo sólido sobre sólido (SOS). Nesse tipo de sistema, a cada intervalo de tempo, certa posição no substrato tem uma probabilidade de receber uma partícula de acordo com a afinidade existente entre ela e a morfologia local.

Sabe-se que a morfologia da superfície dos filmes é um dos aspectos mais importantes na eficiência dos dispositivos. Uma das ferramentas utilizadas no estudo da dinâmica de evolução morfológica dessa estrutura é a teoria de escala, que envolve a análise da rugosidade. A investigação comportamental da grandeza citada fornece a medida de dispersão de alturas do perfil em torno da altura média e apresenta uma dinâmica de variação espacial e temporal de escalas (MATTOS; ATMAN; MOREIRA, 2006; SARMA; TAMBORENEA, 1991).

A rugosidade das superfícies possui propriedades de escalas universais, as quais podem ser associadas a expoentes críticos que governam o comportamento do sistema e caracterizam as diferentes classes de universalidade. Dessa forma, a análise das interfaces geradas pode ser verificada a partir do estudo do comportamento temporal da rugosidade (BARABASI; STANLEY, 1995).

Essa grandeza tem sido utilizada, não só no estudo do crescimento de filmes finos, como também na análise do crescimento de superfícies irregulares em geral (VOLD, 1959; EDEN, 1961; EDWARDS; WILKINSON, 1982; FAMILY, 1986; KIM; KOSTERLITZ, 1989; WOLF; VILLAIN, 1990). Outro destaque importante na análise da rugosidade pode ser atribuído a Das Sarma e Tamborenea (SARMA; TAMBORENEA, 1991). Neste trabalho os autores declararam que existem três questões principais que precisam ser respondidas no estudo

de crescimento de superfícies:

> (1) *What are the universality classes' for various kinetic growth models?* (2) *What are the critical dimensionalities for the various models? (In particular, are there kinetic phase transitions in physically realizable dimensions?)* (3) *What, if any, is the relationship between various kinetic growth models and actual vapor-deposition growth processes?*

No decorrer dos anos, vários trabalhos foram desenvolvidos na área e auxiliaram, de alguma forma, para responder essas indagações. Das Sarma e Tamborenea (1991), por exemplo, contribuíram no que se referem às questões (1) e (3) acima, ou seja, quais são as diferentes classes de universalidades associadas aos modelos de crescimento cinético e qual a relação, caso exista, entre os vários modelos de crescimento cinético e processos reais de crescimento por deposição de vapor, respectivamente. Nesse artigo eles estudaram um novo modelo de crescimento cinético baseado em MBE, onde as partículas depositadas podem sofrer relaxação, maximizando o número de ligações. Richele e Atman (2015), por sua vez, apresentaram um modelo de PCA capaz de reproduzir uma ampla gama de padrões, para estudar o crescimento da interface do tipo sólido sobre sólido (SOS) a partir dos expoentes de rugosidade e associá-los às diferentes classes de universalidade. Da mesma forma, este presente trabalho procura também contribuir com as questões acima, quando tenta desenvolver um estudo teórico e numérico do crescimento de interfaces rugosas, por meio de simulações, permitindo uma análise mais completa do panorama de classes de universalidade.

Ainda sobre a questão (1), Disrattakit, Chanphana e Chatraphorn (2016) calcularam os expoentes de crescimento e a distribuição de rugosidade dos modelos em $(2+1)$ dimensões de Das Sarma-Tamborenea (DT), Wolf-Villain (WV) e modelos de Curvatura Maior para investigar os efeitos das técnicas de redução de ruído sobre a distribuição da rugosidade. Os resultados encontrados indicaram que essas técnicas afetaram a largura da interface nos regimes de crescimento e saturação. No estado estacionário, as técnicas de redução de ruído não parecem ter nenhum impacto na distribuição de rugosidade do modelo DT, mas alteraram significativamente a distribuição de rugosidade dos modelos WV e e de Curvatura Maior para as curvas de distribuição normal. Convencionalmente, a classe de universalidade de um modelo de crescimento discreto é identificada calculando-se o dimensionamento da largura da interface e identificação dos expoentes de enrugamento. Este método requer simulações em larga escala para minimizar os efeitos de tamanho finito nos resultados. As técnicas de redução de ruído foram usadas para promover os comportamentos assintóticos dos modelos de crescimento.

Em outro trabalho, Carrasco e Oliveira (2016), usando simulações numéricas, identificaram que as distribuições de altura do regime de crescimento e as covariâncias espaciais e

temporais são universais em modelos pertencentes à classe MBE não linear. Porém, apesar de apresentarem os mesmos expoentes críticos, ela se divide em subclasses que dependem das condições iniciais.

Merkh, Spivey e Lu (2016) estudaram a evolução morfológica de filmes finos durante a deposição sob variação da pressão atmosférica usando os métodos de Monte Carlo. Alguns parâmetros foram variados a fim de modelar o efeito da condição experimental de alta pressão. Porém, um regime de crescimento, onde a rugosidade da superfície permaneceu invariante após atingir um valor crítico, não foi classificada por nenhuma classe de universalidade existente.

No que se refere à questão (2), onde Das Sarma e Tamborenea (1991) desejam saber se existe transição de fase cinética em dimensões realizáveis, Yan, Kessler e Sander (1990) analisam o expoente de rugosidade a partir de simulações numéricas indicando transições de fases, entre regimes de acoplamento fraco e forte, em um modelo de crescimento superficial.

Kim (1992) comentou o artigo anterior encontrando uma taxa de crescimento dependente da inclinação e uma transição de fase trivial. Kimy e Yook (1997), por sua vez, utilizam modelos do tipo SOS com saltos de distância finita, para estudar a classe de universalidade Kardar-Parisi-Zhang (KPZ).

Oliveira, Alves e Ferreira (2013) estudaram os regimes dinâmicos de modelos pertencentes à classe KPZ em $d = 2 + 1$ dimensões considerando geometrias planas e curvas. Os autores mostraram que o comportamento das distribuições de altura, em tempo finito, são dependentes da geometria encontrada.

Na seção 3.2 serão mostrados alguns dos modelos de crescimento discretos mais conhecidos na literatura. O estudo desses modelos será realizado por meio da análise das superfícies rugosas geradas a partir da deposição de partículas, em especial suas propriedades morfológicas e expoentes críticos. O capítulo será finalizado com a apresentação das classes de universalidade às quais cada modelo pode estar associado.

3.2 Geometria das Superfícies Rugosas

Como foi dito anteriormente, o estudo dessas superfícies dá-se a partir da análise do comportamento temporal da rugosidade $w(L, t)$. Essa técnica, que pode ser estudada a partir do mapeamento da interface de um autômato celular, consiste em considerar o perfil gerado a partir da variação espacial, somando a variável estocástica ao longo do tempo para determinar sua altura média.

Sendo assim, consideramos $h(i,t)$ um vetor de alturas que é atualizado pelo estado dos sítios σ_i em cada passo de tempo: se $\sigma_i = 1$, uma partícula é depositada no local; caso contrário, não há deposição de partículas e o perfil permanece inalterado.

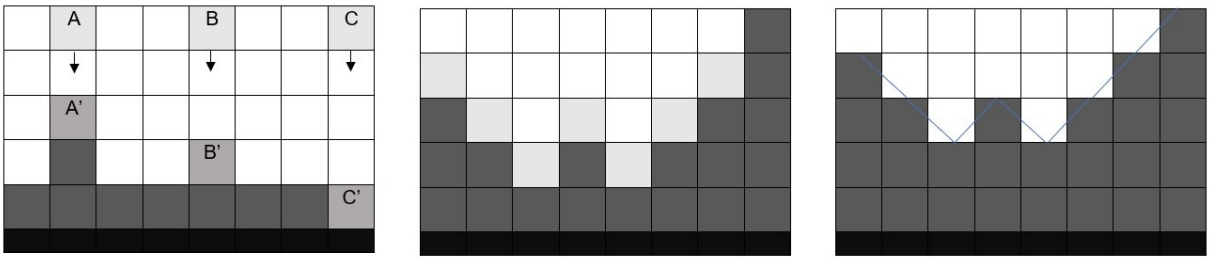


Figura 10 – *Representação da interface através da atualização do vetor de alturas. À esquerda tem-se um substrato preto com uma primeira camada de partículas, em cinza escuro, e algumas partículas que estão sendo depositadas, em cinza claro. No desenho central é possível observar a evolução do perfil, onde os sítios em cinza claro representam partículas recentemente depositadas. No desenho à direita, tem-se um perfil bem evoluído com uma linha azul representando a rugosidade do perfil.*

Esse procedimento resulta em um mapeamento do processo de crescimento por meio da representação de interfaces (observe a Figura 10). O método consiste em somar todos os valores assumidos por $\sigma_i(\tau)$ durante os primeiros passos de tempo e considerar o perfil gerado como indicado na Equação 5

$$h_i(t) = \sum_{\tau=0}^{t} \sigma_i(\tau) \quad , \tag{5}$$

que está associada à altura local do perfil.

Posteriormente calcula-se a altura média, $\overline{h}(t)$, usando-se a Equação 6

$$\overline{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} h_i(t), \tag{6}$$

onde $h_i(t)$ corresponde ao número de partículas depositadas no sítio i até o tempo t, e L é o tamanho do sistema. Se o valor de deposição for constante, a altura média aumenta linearmente com o tempo, ou seja, $\overline{h}(t) \sim t$.

A partir do valor de $\overline{h}(t)$, é possível determinar a largura do perfil, que caracteriza a

rugosidade, $w(L,t)$, do perfil gerado a partir da Equação 7

$$w(L,t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}[\overline{h}(t) - h_i(t)]^2}. \tag{7}$$

A rugosidade é a principal medida utilizada na avaliação do comportamento temporal de uma interface dentro do sistema. Assim, a maneira como cada superfície evolui, exibe diferentes comportamentos da rugosidade e associa cada evolução a um modelo de crescimento distinto.

Voltando à Figura 10, tem-se um substrato inicialmente liso que começa a receber partículas a todo instante; após algum tempo é possível observar a formação de uma superfície rugosa. O estudo da superfície formada é realizado em duas etapas: primeiro, determina-se as regras de deposição das partículas e, posteriormente, analisa-se a rugosidade da interface gerada. Essa interface é considerada como a última camada, por envolver a separação de dois meios.

3.3 Modelos de Crescimento por Deposição

Diversos modelos de crescimento podem ser obtidos a partir das diferentes regras de deposição e serão estudados usando o comportamento da rugosidade e as propriedades das interfaces geradas durante o processo de crescimento.

Se consideramos uma rede unidimensional com L sítios indexados por $i = 1, 2, 3, ..., L$, faremos uma deposição de partículas sobre o substrato. À medida que as partículas são depositadas, ocorre a formação de camada sobre camada. Esse processo é considerado o modelo de crescimento mais simples e pode ser descrito pela equação

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = f(x,t), \tag{8}$$

onde $f(x,t)$ indica o número médio de partículas depositadas na posição x e $\dfrac{\partial h}{\partial t} = f(x,t)$, representa a velocidade do crescimento de camada por camada.

Existem três principais modos de crescimento associados a essa equação e podem ser observados na Figura 11. A primeira coluna apresenta o modo de crescimento Frank-van der Merwe. Esse tipo de processo ocorre quando os átomos do filme têm uma ligação com o substrato mais forte que a ligação existente entre eles. Assim os átomos se espalham por toda a superfície, exibindo um crescimento do tipo camada sobre camada. A coluna central representa um crescimento de ilhas do tipo Volmer-Weber. Nesse modo de crescimento,

a força de ligação entre as partículas é maior que a força de ligação entre a partícula e o substrato. O modelo representado na coluna da direita é conhecido como o modelo de Stranski-Krastanov. O processo inicia com a geração de algumas poucas monocamadas, seguindo de uma formação de ilhas (PIMPINELLI; VILLAIN, 1999; OURA et al., 2003; VENABLES, 2000).

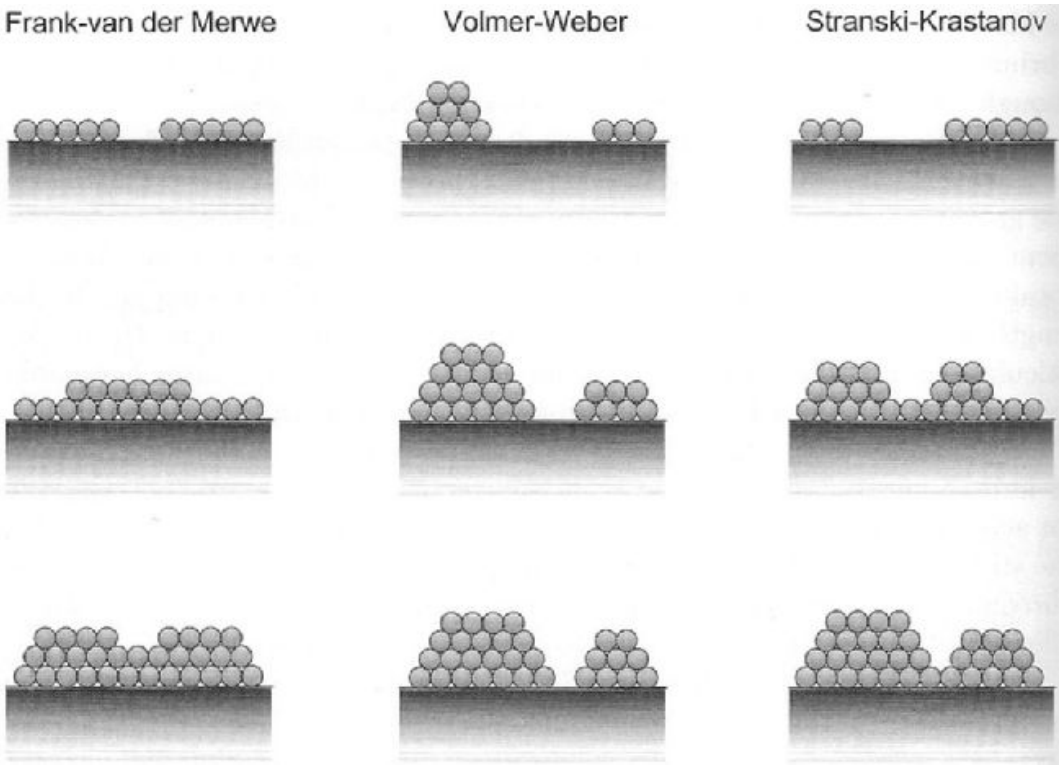


Figura 11 – *Os três principais modos de evolução são nomeados a partir dos seus idealizadores originais: Coluna I - Frank-van der Merwe (crescimento camada por camada); Coluna II - Volmer-Weber (crescimento de ilhas); Coluna III - Stranski-Krastanov (crescimento de ilhas com camada). Figura retirada de (PHYSICS, 2017) em 17/02/2017.*

O modelo de autômato celular probabilístico que elaboramos e apresentamos no capítulo 2, é capaz de reproduzir cada um dos modelos de crescimento expostos nessa seção. Como primeiro exemplo, observe a Figura 12 que reproduz de forma clara os modos de crescimento citados acima.

Esses três modos de crescimento podem ocorrer dependendo da temperatura do substrato, da taxa de deposição e da energia superficial disponível. Na Figura 13, temos uma representação da formação de ilhas, descrita por Volmer-Weber. Observamos claramente a formação de ilhas sem a presença de monocamadas.

Outro modelo de crescimento bastante simples é a Deposição Aleatória (DA). Esse modelo pode ser associado a uma classe de universalidade que recebe o mesmo nome. É um processo de deposição extremamente simplificado do ponto de vista teórico e simulacional:

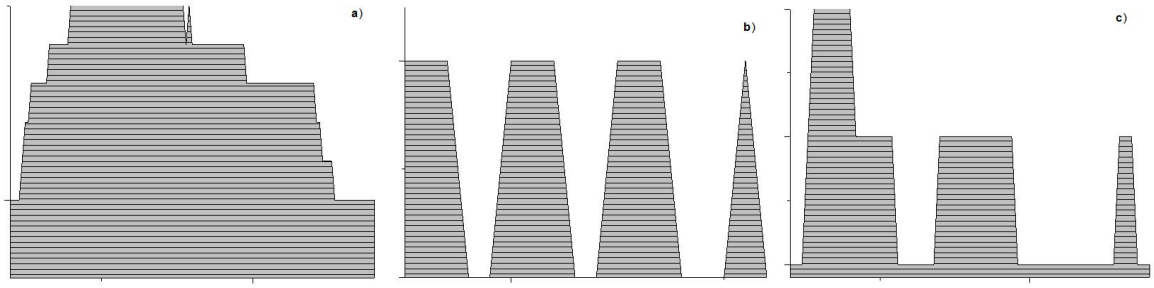


Figura 12 – *Representação dos modos de crescimento camada por camada gerado a partir do modelo de PCA. O sistema possui tamanho* $L = 200$*. Em* (a) *é possível observar estruturas análogas às obtidas através do modo de crescimento Frank-van der Merwe, em* (b) *Volmer-Weber e em* (c) *Stranski-Krastanov.*

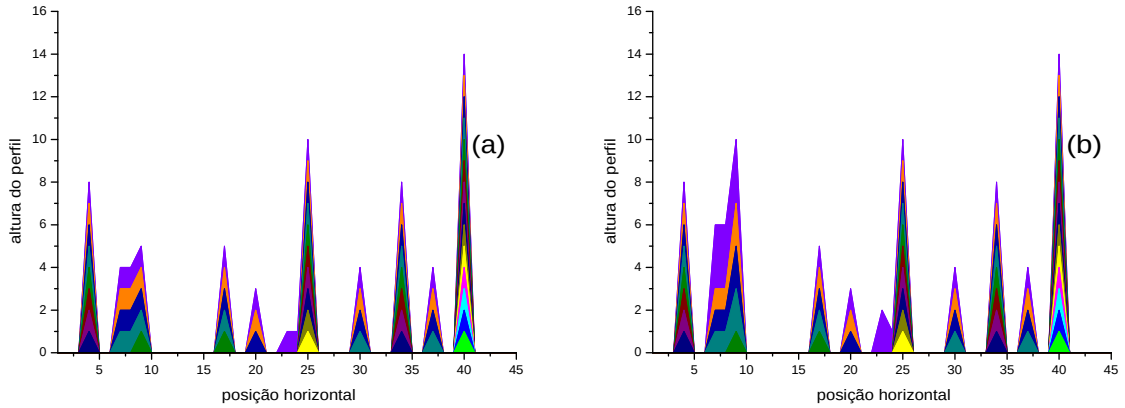


Figura 13 – *A construção da representação do modo de crescimento de Volmer-Weber a partir da variação dos parâmetros de controle do modelo de PCA: (a)* $p_2 = 0.0$*,* $p_3 = 0.0$ *e* $p_4 = 0.0$*; (b)* $p_2 = 0.0$*,* $p_3 = 0.0$ *e* $p_4 = 0.1$*.*

um sítio é escolhido aleatoriamente sobre uma superfície e a partícula cai verticalmente em direção ao substrato. Como o processo não apresenta correlações, a rugosidade cresce indefinidamente com o tempo, da forma $w \sim t^{\frac{1}{2}}$, não ocorrendo a saturação da interface. Observe a Figura 14. O sistema é completamente descorrelacionado e a rugosidade nunca alcança o estado estacionário, impossibilitando a formação de superfícies autoafins (BARABASI; STANLEY, 1995).

O modelo de DA pode ser descrito pela equação diferencial contínua de crescimento

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = F + \eta(x,t). \tag{9}$$

Essa equação é semelhante à equação de crescimento camada por camada, uma vez que o primeiro termo indica o número de partículas que alcança o substrato por unidade de tempo. Deve-se observar que o fluxo de partículas em cada local não é uniforme, uma

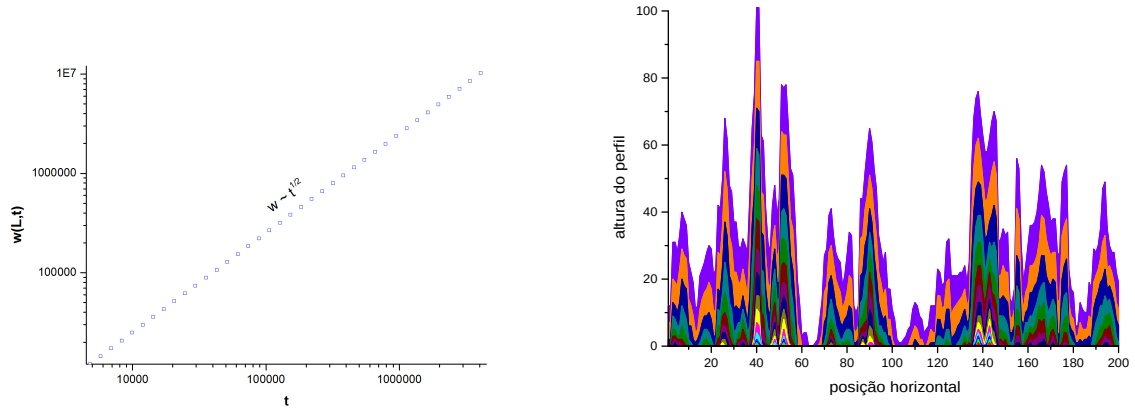


Figura 14 – *Representação do comportamento da rugosidade na DA. À esquerda, exibimos um gráfico do crescimento da rugosidade em relação ao tempo* $w \sim t^{\frac{1}{2}}$*. À direita, temos a representação da interface gerada pelo vetor de tamanho* $L = 200$ *e conjunto de probabilidades* $p_2 = 0.2$*,* $p_3 = 0.5$ *e* $p_4 = 0.4$*.*

vez que elas são depositadas em posições aleatórias. O termo η exprime as flutuações aleatórias no processo de deposição e apresenta as seguintes propriedades:

$$\langle \eta(x,t) \rangle = 0 \tag{10}$$

onde $\langle ... \rangle$ indica valor esperado e

$$\langle \eta(x,t)\eta(x',t') \rangle = 2D\delta^d(x-x')\delta(t-t'). \tag{11}$$

A Equação 11 indica um ruído branco sem correlação espacial ou temporal, sendo δ a função Delta de Dirac[1], D uma constante e d a dimensão da superfície. A média sobre o produto $\langle \eta(x,t)\eta(x',t') \rangle$ é zero, exceto para o caso especial em que $t = t'$ e $x = x'$.

O próximo processo a ser considerado é o modelo de crescimento do tipo deposição aleatória com relaxação superficial (DARS). Nesse sistema, a partícula que é depositada em um pico realiza uma relaxação em busca de um mínimo local dentro de uma distância finita, como pode ser verificado por meio da indicação das setas na Figura 15.

O início do processo decorre assim como na DA, o sistema não apresenta correlações e a rugosidade cresce com $w(L,t) \sim t^{\frac{1}{2}}$. O aumento da deposição de partículas gera correlação entre as alturas vizinhas, que se estende por toda a superfície. Nesse momento, com $t \ll t_x$, sendo t_x o tempo de saturação, a taxa de crescimento da rugosidade diminui

[1] **Delta de Dirac:** é uma distribuição na reta real, que vale infinito no ponto zero e zero no restante da reta. Seu análogo no domínio discreto é o delta de Kronecker, que assume os valores 0 e 1.

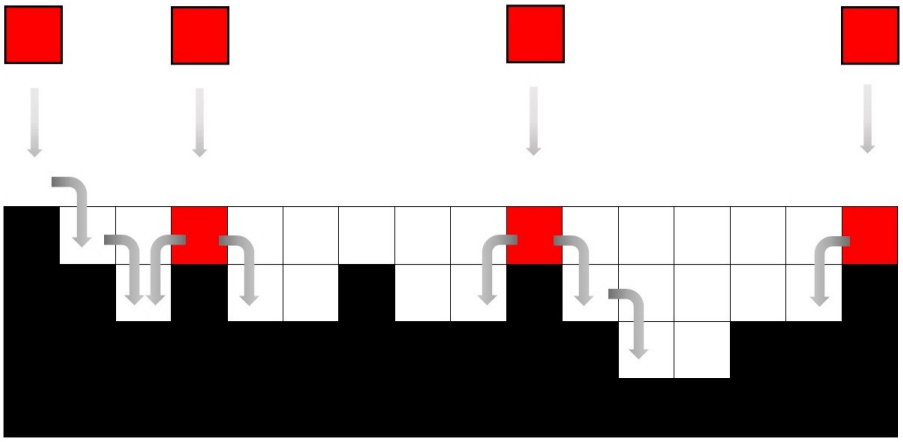


Figura 15 – *Deposição aleatória com relaxação superficial - a partícula recém-depositada não adere imediatamente ao local, ela pode migrar para um vizinho mais próximo que possui uma altura mais baixa. Nesse caso foi considerado até o segundo vizinho.*

como $w(L,t) \sim t^{\frac{1}{4}}$. Assim, para tempos curtos $w(L,t) \sim t^{\beta_w}$, sendo β_w o expoente de crescimento. Para tempos longos $t \gg t_x$, a rugosidade atinge a largura de saturação e entra em estado estacionário $w_{sat}(L,t) \sim L^{\alpha}$, onde α representa o expoente de rugosidade. Essa dinâmica pode ser observada na Figura 16. O gráfico foi construído para um sistema de tamanho $L = 10000$ e por meio dele é possível determinar o valor de w_{sat}, traçando uma reta sobre a parte estacionária da curva, paralela ao eixo x.

Repetindo o mesmo procedimento para diferentes valores de L, é possível construir um gráfico $log \times log$ com os valores de $w_{sat} \times L$ e a inclinação desse indica o valor de α. Observe a Figura 17(a).

O tempo de saturação t_x, algumas vezes chamado tempo de *crossover*, também segue uma lei de potência com o tamanho do sistema, $t_x \sim L^z$, onde z é o expoente dinâmico. Esse expoente pode ser calculado de forma semelhante ao expoente α sendo determinado usando-se a inclinação do gráfico $log \times log\, t_x \times L$ (FAMILY; VICSEK, 1985; FAMILY, 1986). Veja a Figura 17(b).

Family e Vicsek (FAMILY; VICSEK, 1985) propuseram uma lei de escala, para colapsar as curvas obtidas com tamanhos diferentes do sistema em uma única função (BARABASI; STANLEY, 1995). O método propõe a construção de um gráfico $w/w_{sat} \times t/t_x$, ou seja, a rugosidade normalizada pela rugosidade de saturação é uma função do tempo normalizado

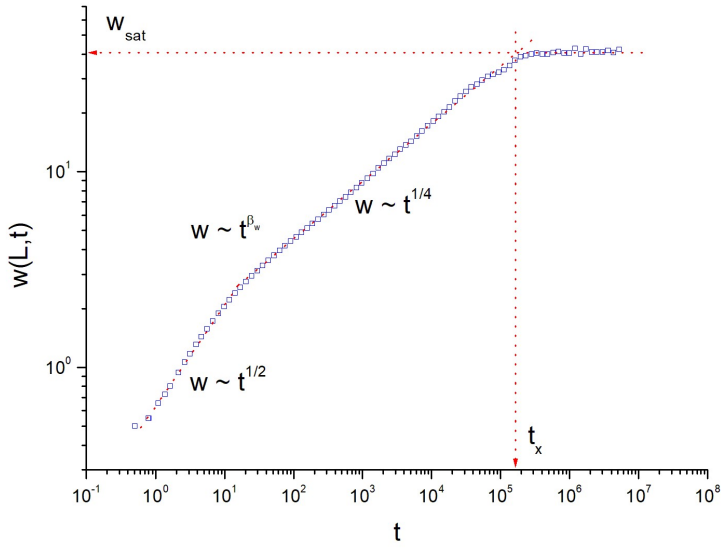


Figura 16 – *Representação do comportamento temporal da rugosidade em modelos de crescimento que apresentam correlação, considerando um vetor* $L = 10000$ *e conjunto de parâmetros* $p_2 = 0.1$, $p_3 = 0.99$ *e* $p_4 = 0.0$. *Este gráfico exibe o comportamento típico da evolução temporal da rugosidade* $w \sim t^{\beta_w}$ *e seus momentos de crescimento:* $w(L,t) \sim t^{\frac{1}{2}}$ *e* $w(L,t) \sim t^{\frac{1}{4}}$. *Além disso, ele também indica o tempo de crossover* t_x *e o valor da rugosidade de saturação* w_{sat}.

pelo tempo de saturação (*crossover*), portanto

$$w(L,t) \sim L^{\alpha} f\left(\frac{t}{L^z}\right), \tag{12}$$

onde f é uma função de escala $f(u) \sim u^{\beta}$ para $t \ll L^z$ e $f(u) \sim k$ para $t \gg L^z$, sendo k uma constante. Assim, tem-se $w(L,t) \sim t^{\beta}$ para tempos curtos ($t \ll L^z$) e $w(L,t) \sim L^{\alpha}$ para tempos longos ($t \gg L^z$). Dessa forma, para $t \to t_x$ tem-se $w \simeq L^{\alpha} \sim t_x^{\beta} = L^{z\beta}$, logo, $\alpha = z\beta$, de forma que

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \tag{13}$$

A Equação 13 relaciona os três expoentes críticos e é válida para qualquer processo que obedeça à relação 12 (BARABASI; STANLEY, 1995). Os expoentes de rugosidade acima, associados a um determinado processo, definem uma classe de universalidade (UC). Observe a tabela na Figura 18. Dessa forma, pode-se dizer que, quando dois sistemas têm os mesmos valores de expoentes críticos, eles pertencem a uma mesma classe de universalidade e podem ser descritos por uma mesma equação de crescimento (BARABASI; STANLEY, 1995; HALPIN-HEALY; PALASANTZAS, 2014; ALMEIDA et al., 2014). Sabe-se

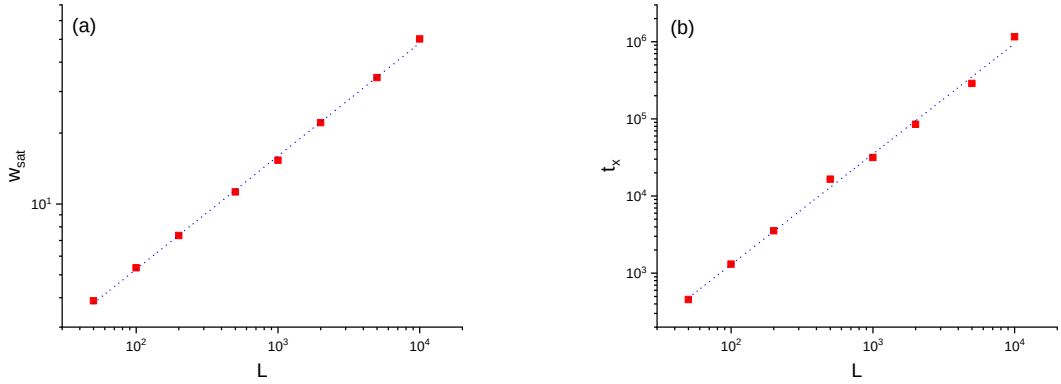


Figura 17 – *Os gráficos foram construídos em escala logarítmica, a partir do modelo de autômato celular probabilístico utilizando o conjunto de parâmetros* $p_2 = 0.6$, $p_3 = 0.1$ *e* $p_4 = 0.8$. *Em (a) o expoente de rugosidade* α *é determinado a partir da inclinação do gráfico* $w_{sat} \times L$. *Em (b) o expoente dinâmico* z *é calculado a partir da inclinação do gráfico* $t_x \times L$.

também que, dada uma UC, todo sistema pertencente àquela classe apresenta as mesmas características (BARABASI; STANLEY, 1995). Assim, a importância no estudo envolvendo a rugosidade deve-se ao fato dessa grandeza estar diretamente ligada às UCs (SARMA; TAMBORENEA, 1991; MATTOS; ATMAN; MOREIRA, 2006).

Classe de Universalidade	α	β	z	Exemplo de Modelos de Crescimento
DA	não está definido	$\frac{1}{2}$	não está definido	DA
EW	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	2	DARS
KPZ	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{3}{2}$	DB, DAR, Eden
DAD	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{8}$	4	DAD

Figura 18 – *A tabela apresenta algumas classes de universalidades, seus expoentes de escala e modelos de crescimento que podem estar associados a cada classe.*

A tabela da Figura 18, além de mostrar algumas classes de universalidade e o conjunto de expoentes que define cada classe, também cita alguns modelos de crescimento que

estão associados à determinada classe. A caracterização desses modelos está diretamente ligada à sua forma e evolução.

Na DARS, por exemplo, vimos que as correlações levam eventualmente à saturação da interface (FAMILY, 1986) e o estudo da evolução temporal dessa superfície mostrou que a rugosidade cresce com uma lei de potência para escalas temporais curtas e atinge uma saturação após certo tempo. Portanto, o comportamento da rugosidade nesse modelo depende da escala temporal de observação. A presença da relaxação superficial suaviza a interface, tornando o crescimento da rugosidade lento e limitado. Esse modelo foi proposto por Family (FAMILY, 1986), baseado na descrição teórica de Edwards e Wilkinson (EDWARDS; WILKINSON, 1982) que em 1982 utilizaram sedimentação de materiais granulares como modelo e desenvolveram pioneiramente uma equação diferencial contínua, conhecida como Equação EW, para a dinâmica temporal de uma interface rugosa.

Observe os gráficos da Figura 19 que reproduz o modelo de crescimento DARS. Uma pequena variação nos parâmetros de controle provoca uma pequena mudança no perfil de crescimento sem perder sua principal característica - perfil menos rugoso que a DA. É importante ressaltar que, apesar dos gráficos apresentarem um perfil mais rugoso que aqueles encontrados na DARS, os valores dos expoentes de enrugamento estão de acordo com a classe de universalidade EW, associada e esse modelo.

Devido à relaxação, o modelo de DARS apresenta uma taxa de deposição maior em mínimos locais, que correspondem a pontos onde a segunda derivada é positiva, em uma análise da relação contínua. Uma equação simples surge quando temos o Laplaciano de h positivo - $\nabla^2 h$, que indica preferência pela deposição de partículas em vales ao invés de picos. Quando essa correlação é introduzida na equação contínua, obtém-se a Equação 14 (EW) (CHUI; WEEKS, 1978; EDWARDS; WILKINSON, 1982) que está associada a este modelo

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = F + \nu \nabla^2 h + \eta(x,t). \tag{14}$$

O coeficiente linear ν é, às vezes, chamado de tensão superficial, uma vez que $\nu \nabla^2 h$ tende a suavizar a interface. Para $\nu > 0$, regiões de vale $\nabla^2 h > 0$ crescem com uma taxa maior que àquelas correspondentes a picos $\nabla^2 h < 0$ (MATTOS, 2005). O termo de ruído $\eta(x,t)$ incorpora o caráter estocástico (aleatório) da equação.

A Equação EW (14), originou-se de uma generalização da Equação 9, onde uma interface correlacionada, caracterizada por apresentar altura $h(x,t)$, é calculada da seguinte forma

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = G(h,x,t) + \eta(x,t), \tag{15}$$

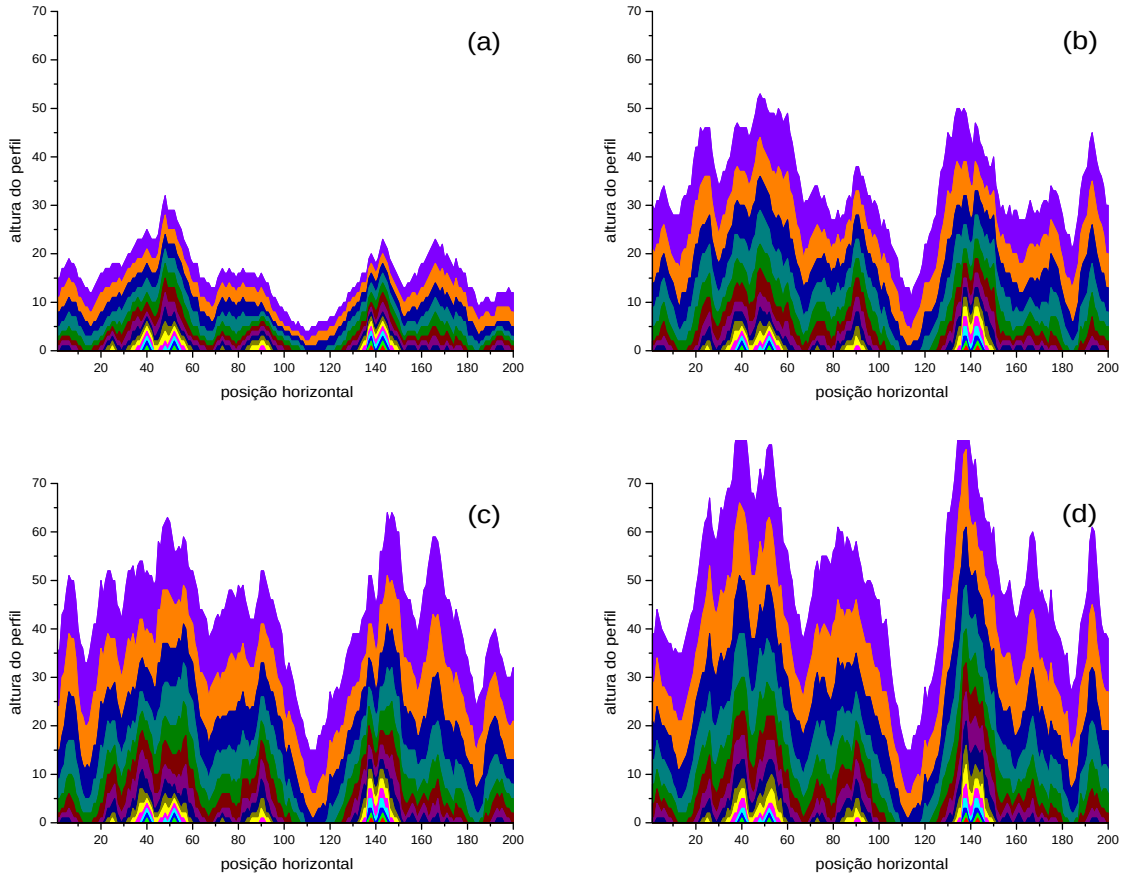


Figura 19 – *Estruturas análogas ao modelo de crescimento por deposição aleatória com relaxação superficial: (a)* $p_2 = 0.7$, $p_3 = 0.2$ *e* $p_4 = 0.0$*; (b)* $p_2 = 0.7$, $p_3 = 0.2$ *e* $p_4 = 0.1$*; (c)* $p_2 = 0.7$, $p_3 = 0.2$ *e* $p_4 = 0.2$*; (d)* $p_2 = 0.7$, $p_3 = 0.2$ *e* $p_4 = 0.3$*. Observe que, para diferentes conjuntos de parâmetros, é possível obter representações distintas do modelo DARS sem perder suas características.*

sendo $G(h, x, t)$ uma função geral que depende da altura e da posição da interface, assim como do tempo.

O próximo passo para se chegar na equação de crescimento a partir da generalização acima é compreender as principais simetrias que a Equação 15 deve seguir (BARABASI; STANLEY, 1995):

- Invariância em relação à translação temporal – essa simetria exclui uma dependência explicita do tempo na função $G(h, x, t)$.
- Invariância em relação à translação ao longo da direção de crescimento – a regra de crescimento não deve depender do local onde é definido o valor inicial de h.
- Invariância em relação à translação ao longo da direção perpendicular ao crescimento – a equação não deve depender do valor de x.
- Simetria de rotação e inversão na direção de crescimento – excluem as derivadas de

ordem ímpar em relação às coordenadas espaciais. Por exemplo: em ∇h, se $x \to -x$, então $\frac{\partial h}{\partial(-x)} = \frac{-\partial h}{\partial x}$, ou seja, $\frac{\partial h}{\partial x}$ muda de sinal nesta transformação e por isso deve ser excluído da equação de crescimento. Note-se que $(\nabla h)^2$ e $\nabla^2 h$ ambos sobrevivem a esta transformação, uma vez que eles têm um número par de derivadas em x.

- Simetria *up/down* para h – essa simetria está intimamente ligada à natureza de equilíbrio da interface, ou seja, ela determina que as flutuações na interface sejam semelhantes em relação à altura. Essa simetria só se aplica quando a velocidade média de crescimento da interface é igual à taxa de deposição.

A principal propriedade que torna a Equação 14 linear é a existência da simetria ascendente em h.

Em contraste ao modelo DA, na DARS a partícula será depositada em um mínimo local, gerando um perfil menos rugoso do que a DA. Essa observação se confirma na análise da Figura 20.

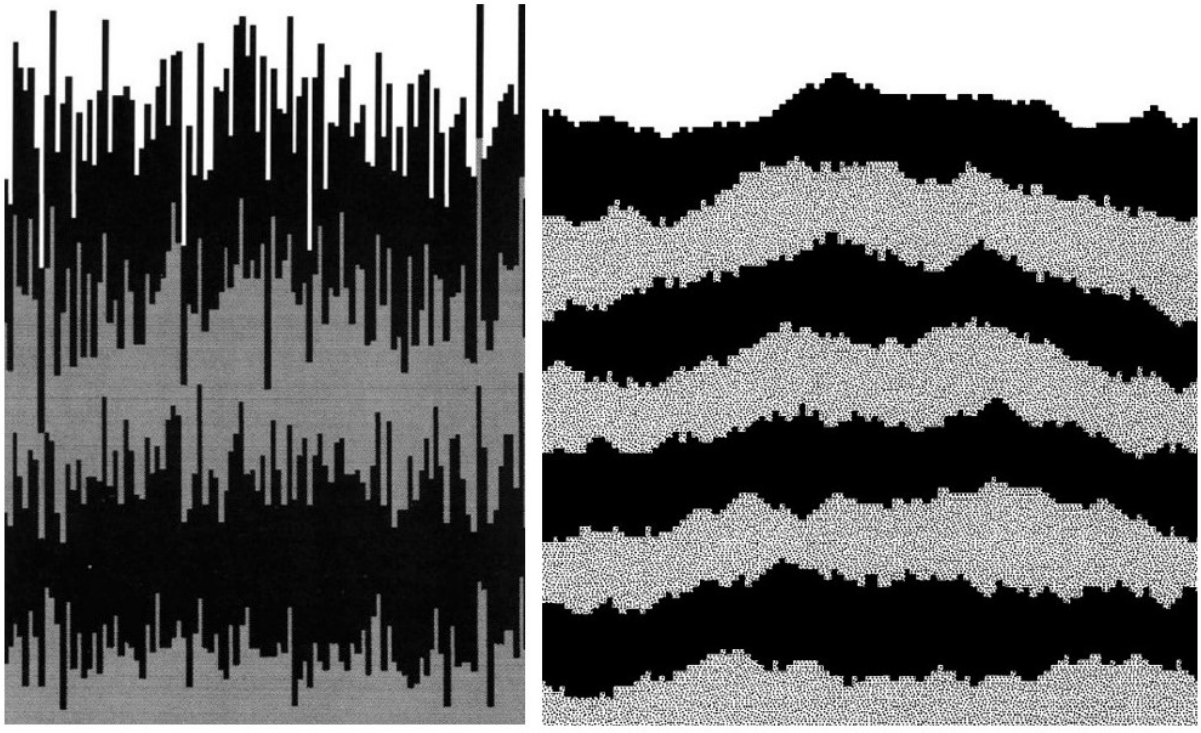


Figura 20 – *Considerando um sistema de tamanho $L = 100$, à esquerda temos a típica interface gerada pelo modelo de DA e à direita DARS. Figura retirada de (BARABASI; STANLEY, 1995).*

Isso acontece porque na DARS, as correlações diminuem gradualmente o ritmo de crescimento da rugosidade w, fazendo com que a grandeza entre em um regime estacionário após um tempo de *crossover* t_x.

Esse modelo de crescimento está associado à classe de universalidade Edwards-Wilkinson (EW). A principal diferença entre as classes EW e DA são as correlações entre sítios vizinhos, presentes na EW (2° termo da equação 14) e que estão ausentes em DA (BARABASI; STANLEY, 1995).

A Equação 14 foi a primeira equação contínua usada para estudar o crescimento de interfaces por deposição de partículas. Nesse processo de crescimento, como foi visto anteriormente, a partícula atinge a superfície e relaxa em direção à um mínimo local. Porém, existem situações em que a partícula adere à superfície imediatamente ao alcançar o substrato, permitindo, inclusive, uma aderência lateral. Para implementar essa mudança de comportamento foi necessário o acréscimo de um termo não-linear à Equação 14. Essa modificação foi proposta por Kardar, Parisi e Zhang (KARDAR; PARISI; ZHANG, 1986) e a nova equação foi chamada de KPZ.

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = F + \nu\nabla^2 h + \lambda(\nabla h)^2 + \eta(x,t), \tag{16}$$

onde o termo $\nu\nabla^2 h$ descreve a relaxação da interface causada por uma tensão superficial ν, como já foi dito anteriormente, $\lambda(\nabla h)^2$ é o termo não linear que reproduz a dinâmica do crescimento lateral por meio do parâmetro λ (observe a Figura 21) e $\eta(x,t)$ é o ruído.

Os modelos associados a essa equação, também estão associados à classe de universalidade KPZ. Para a sua construção, é preciso compreender a diferença entre o modelo de deposição aleatória com relaxação superficial e um modelo de crescimento associado à classe de universalidade KPZ (KARDAR; PARISI; ZHANG, 1986), como por exemplo, deposição balística.

O modelo de deposição balística (DB) foi originalmente proposto para descrever a formação de rocha sedimentar e foi amplamente utilizado no estudo de crescimento de filmes porosos (VOLD, 1959). Nesse modelo, as partículas caem verticalmente em direção ao substrato e agregam-se ao primeiro sítio encontrado (BARABASI; STANLEY, 1995; KRUG, 1997). O processo, que foi estudado por Vold (VOLD, 1959), apresenta duas variações, sendo a primeira delas a aderência ao vizinho mais próximo (NN), permitindo que partículas se fixem lateralmente à interface, formando lacunas e gerando uma estrutura descompacta. A segunda variação permite que as partículas se fixem na diagonal de um vizinho – modelo de próximo vizinho mais próximo (NNN), como pode ser observado na Figura 21. Essas duas variações do modelo pertencem à mesma classe de universalidade, uma vez que eles compartilham o mesmo conjunto de expoentes críticos α, β e z (KRUG; MEAKIN; HALPIN-HEALY, 1992). Observe na Figura 22 o perfil gerado por esse processo de deposição. O protótipo de PCA apresentado no capítulo 2 não é capaz de reproduzir uma estrutura semelhante a este modelo, uma vez que sua evolução não gera lacunas vazias.

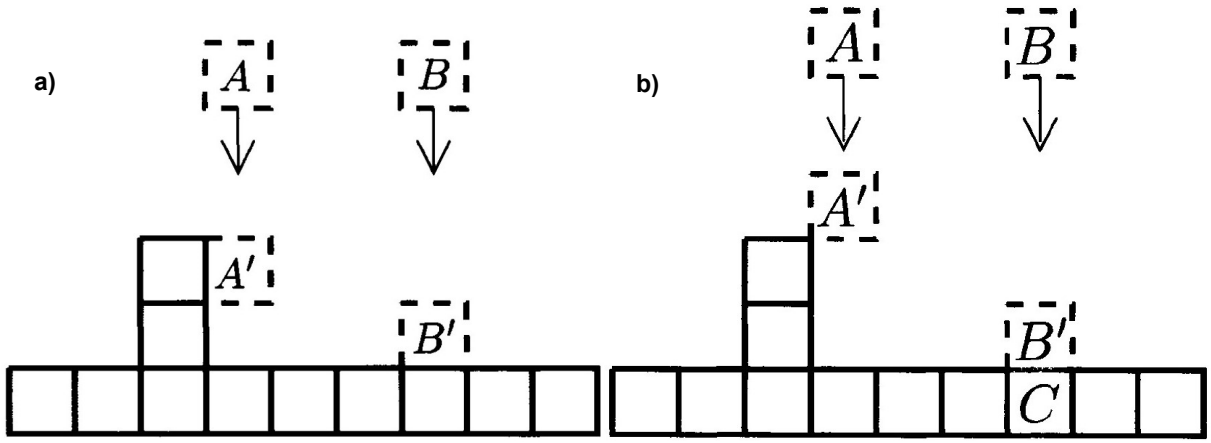


Figura 21 – *Representação do modelo de crescimento por deposição balística. Escolhe-se uma posição aleatória sobre o substrato e deixa-se a partícula cair verticalmente em sua direção. Em (a) tem-se a regra de aderência NN, onde a partícula adere lateralmente ao sítio mais próximo. Em (b) tem-se a regra NNN, quando a partícula adere diagonalmente ao sítio mais próximo. Retirado de (BARABASI; STANLEY, 1995).*

Ao comparar os modelos acima, percebe-se que na DARS as partículas chegam à superfície e relaxam em busca de um mínimo local, enquanto que na DB elas se agregam ao primeiro sítio que encontram, gerando um crescimento lateral. Esse último tipo de crescimento geralmente implica a presença da não-linearidade e faz com que a velocidade média de crescimento da interface seja maior que a taxa de deposição (BARABASI; STANLEY, 1995).

A Equação 16 é considerada uma das equações mais simples que descreve o crescimento não linear e apresenta quatro, das cinco regras de simetria citadas acima. Ela falha apenas na simetria *up/down* relativa à altura $h(x,t)$ da interface, por apresentar uma força motriz que determina uma direção de crescimento particular. Na DB, por exemplo, essa simetria é quebrada devido à propriedade de crescimento lateral do modelo.

Outro modelo presente na classe KPZ é o Modelo de Eden. Nesse processo, o crescimento ocorre na zona ativa, ou seja, nos primeiros vizinhos dos sítios localizados na fronteira da superfície não ocupada (EDEN, 1961). Esse modelo foi idealizado para a reprodução do crescimento de tumores, formação de colônias de células, como bactérias ou cultura de tecidos. Existem quatro variações do modelo, de acordo com a probabilidade de ocupação dos sítios da periferia (JULLIEN; BOTET, 1985); na versão A, cada sítio da periferia tem a mesma probabilidade de ser ocupado; na versão B, a probabilidade de ocupação de um sítio da periferia será proporcional ao número de primeiros vizinhos ocupados; já na versão C, um vizinho da fronteira é sorteado aleatoriamente e em seguida escolhe-se um dos seus primeiros vizinhos desocupados para se fazer a deposição. Resultados simulacionais mostram que as versões do modelo fornecem os mesmos valores para os expoentes

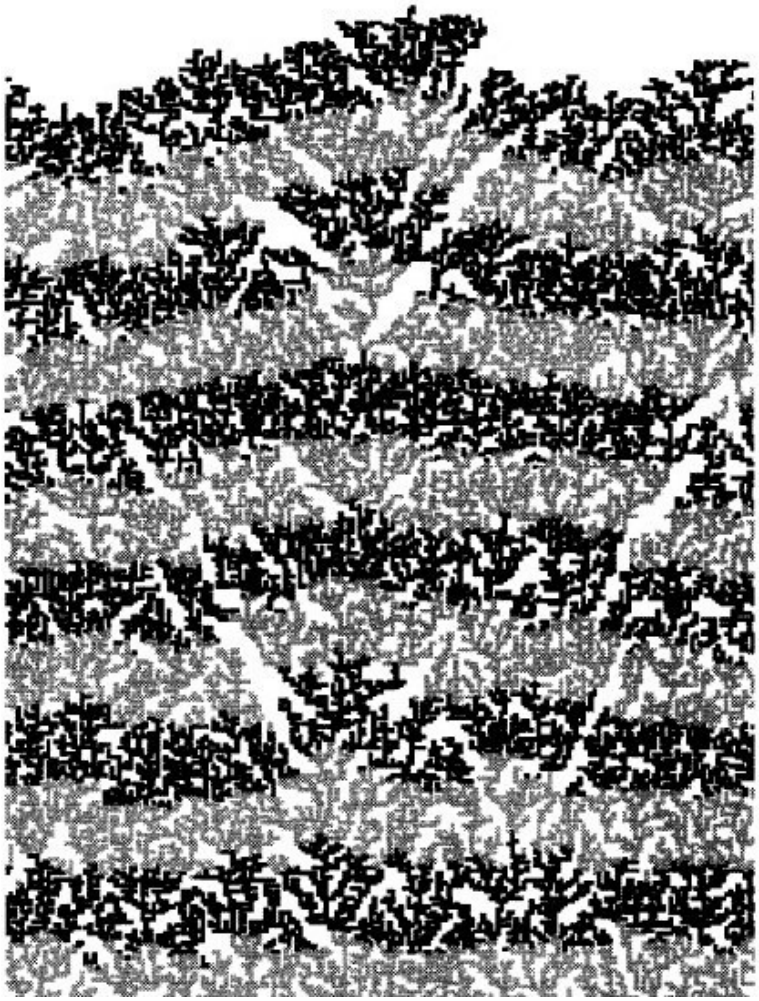


Figura 22 – *Representação do perfil gerado pela deposição de partículas a partir do modelo de deposição balística. Observe a formação de lacunas e o aumento da rugosidade com o tempo. Retirado de (BARABASI; STANLEY, 1995).*

críticos, consequentemente pertencem à mesma classe de universalidade. Porém o tempo de relaxação para o estado estacionário é diferente para cada um deles; a versão C é a mais rápida (WOLF; KERTESZ, 1987).

O próximo modelo de deposição associado à classe KPZ é a Deposição Aleatória com Recusa (DAR). Introduzida por Kim e Kosterlitz (1989), consiste em se recusar imediatamente uma partícula depositada em um máximo local. Dessa forma, a altura média da interface cresce com uma velocidade inferior à taxa de deposição. A rugosidade, nesse modelo, possui um comportamento semelhante ao apresentado na DB, porém, sua estrutura é compacta. O processo DAR é bastante semelhante ao modelo DARS, porém, a diferença de alturas encontradas na interface é restrita, levando a uma suavização da mesma.

O último modelo de deposição estudado é a Deposição Aleatória com Difusão limitada (DAD), proposto por Wolf e Villain (1990) e Sarma e Tamborenea (1991) na mesma época,

embora tenha sido desenvolvidos de forma totalmente independentes. Nesse modelo a partícula depositada procura maximizar o número de ligações, difundindo-se para sua vizinhança.

Até esse momento, o trabalho concentrou-se nos principais modelos de crescimento por deposição de partículas apresentados na literatura. Cada um deles está associado a uma equação contínua de crescimento, assemelhando-se por apresentar um ruído branco, que não exibe correlação espacial ou temporal.

3.4 Percolação

A partir de agora exibiremos uma outra classe de fenômenos, onde o crescimento não ocorre por deposição e sim por propagação.

A percolação é um exemplo desse tipo de fenômeno. A interface se move em um meio desordenado e encontra uma resistência diferente em cada ponto. Essa evolução apresenta um ruído congelado, influenciado por uma resistência local que não muda explicitamente com o tempo, mas apenas com a localização. Apesar de apresentar regras muito simples, sua teoria tem sido aplicada com sucesso para descrever uma grande variedade de sistemas naturais, tecnológicos e sociais. Como exemplo de aplicação, podemos citar a propagação de incêndios (STAUFFER; AHARONY, 2003), transição de fase em sólidos (STANLEY, 1988; STAUFFER; AHARONY, 2003), difusão em meios desordenados (SAHINI, 1994), infiltração e filtração de água nos solos ou rochas (WANGEMANN; KOHL; MOLUMELI, 2000; STEVIKA et al., 2004), transição *depinning* (FAMILY; VICSEK, 1985; TANG; LESCHHORN, 1992) *etc*.

A percolação é um ramo da teoria das probabilidades que trata das propriedades dos meios aleatórios. Os pioneiros nesse estudo foram Flory (1941) e Stockmayer (1943), que tinham como objetivo descrever as ramificações de pequenas moléculas que interagiam para formar outras maiores. Entretanto, os autores não denominaram esta teoria como sendo um processo de percolação.

Na literatura matemática, os processos de percolação foram introduzidos, com essa terminologia, em 1957, por Broadbent e Hammersley (1957) como um modelo matemático simples para estudar a propagação de fluidos em meios desordenados. A percolação representa um fenômeno físico que pode ser visto como um processo dinâmico para a conectividade de meios porosos (DANTAS, 2006). Um modelo de percolação é uma coleção de pontos distribuídos no espaço. Se dois pontos são adjacentes eles podem ter posições fixas e ligações aleatórias entre eles ou, as posições podem ser aleatórias e as ligações determinadas por uma regra que depende das posições. Os modelos resultantes são conhecidos como percolação de ligação e percolação de sítios, respectivamente. A palavra aleatória deve ser

entendida como a probabilidade de ocorrer uma dada configuração. Os sítios ou ligações de uma rede são ocupados formando-se aglomerados. Quando um aglomerado forma um caminho que conecta os lados opostos desta rede, diz-se que o sistema percolou. Pode haver muitos caminhos entre essas extremidades, mas se houver pelo menos um caminho, os pontos serão conectados. Em muitas aplicações, será interessante saber a probabilidade de um determinado par de pontos estar conectado. Isso é conhecido como conexão entre pares e dependerá das posições relativas dos pontos e de outros parâmetros do modelo, como a densidade. A presença de um caminho pode, por exemplo, permitir o fluxo de fluido, a propagação de doenças ou a passagem de uma mensagem telefônica (ESSAM, 1989).

Esse processo pode ser descrito por modelos estocásticos onde um fluido determinístico escoa por um meio aleatório (STAUFFER; AHARONY, 2003). O meio por onde o fluido passa é definido como sendo um material sólido que possui um certo número de poros em pontos escolhidos aleatoriamente. Para que ocorra a passagem do fluido, o número de cavidades deve ser suficientemente grande. Caso contrário, os poros ficarão isolados, impedindo o escoamento (STAUFFER; AHARONY, 2003). A passagem do fluido ocorre entre sítios vizinhos como pode ser observado na Figura 23.

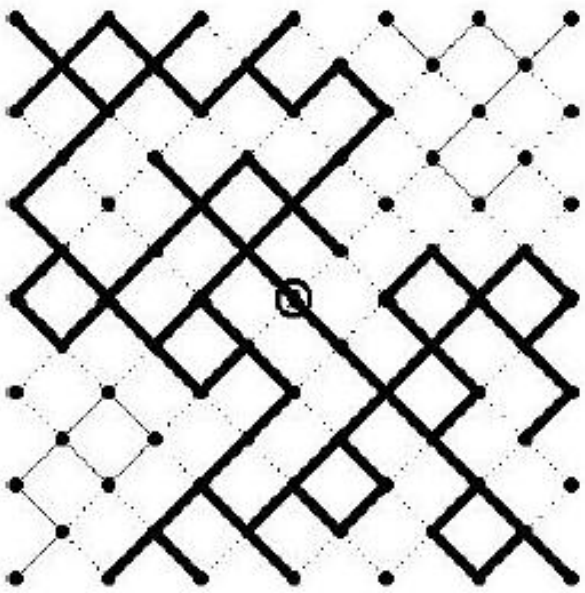


Figura 23 – *Ilustração da percolação isotrópica por ligações. Retirada de (DANTAS, 2006).*

O conceito de propagação de um fluido hipotético através de um meio aleatório foi tratado por Broadbent e Hammersley (1957), pioneiros na teoria da percolação, como percolação e difusão. Na difusão, a aleatoriedade é atribuída ao fluido, ou seja, o fluido decide por onde as partículas irão se deslocar no meio poroso. Na percolação, a ênfase está na aleatoriedade do meio, isto é, o meio determina os caminhos para o fluxo das partículas.

Nas últimas décadas foram propostos novos modelos de percolação, ampliando sua utiliza-

ção como importante ferramenta teórica. A percolação no seu formato original foi definida como um modelo geométrico de conectividade aleatória, chamada de percolação isotrópica[2] (SANTOS, 2015), passando a ser conhecida como percolação ordinária (ZARA, 2000). Como outros exemplos mais conhecidos atualmente temos a percolação direcionada (BLEASE, 1977), a percolação elástica (FENG; SEN, 1984; MOUKARZEL; DUXBURY, 1999), a percolação quântica (MOOKERJEE; DASGUPTA; SAHA, 1995), entre outras. Estes modelos podem ser aplicados em diversas áreas, tais como crescimento urbano (MAKSE et al., 1998), escoamento de fluido em meio poroso (SAHIMI, 1993), evolução temporal das galáxias (SCHULMAN; SEIDEN, 1982) *etc*.

Um modelo simples para a percolação é constituído por uma rede finita formada por sítios que podem assumir dois estados: vazio - 0 ou ocupado - 1. Cada sítio pode estar ocupado aleatoriamente com uma probabilidade p ou estar vazio com probabilidade $(1-p)$, independentemente do estado de seus vizinhos. Ao conjunto de sítios de primeiros vizinhos ocupados chamamos de aglomerado ou *cluster*. O processo pode ter início em um ou mais sítios e o tamanho do *cluster* irá depender do número de sítios conectados por ele. Quando a concentração p de sítios ocupados é baixa, eles ficam distribuídos isoladamente ou formam apenas pequenos aglomerados. Para um dado valor da probabilidade de ocupação p_c, chamado de limiar de percolação, surge um aglomerado que passa a conectar os lados opostos dessa rede, denominado aglomerado percolante. É importante ressaltar que diferentes origens podem gerar o mesmo aglomerado (SANTOS, 2015). O problema básico da percolação é determinar qual é a concentração mínima de sítios ocupados para haver um estado percolativo (TOME; OLIVEIRA, 2001).

Além da percolação por sítios, descrita acima, existe também a percolação por ligações (*bond percolation*). Nessa situação, dois sítios vizinhos são conectados por uma linha. Cada linha pode corresponder a uma ligação aberta com probabilidade p, ou fechada com probabilidade $(1-p)$. Dessa forma, um *cluster* é um conjunto de sítios conectados por ligações abertas. Já a percolação de sítios e ligações é a combinação dos dois casos considerados anteriormente.

A percolação direcionada, introduzida por Broadbent (BROADBENT; HAMMERSLEY, 1957), pode ser definida do mesmo modo que a percolação de sítios, ligações ou sítios e ligações, porém as conexões possuem uma direção específica no espaço, ou seja, é uma variante anisotrópica[3] da percolação isotrópica. Os canais tornam-se uma espécie de válvula que funciona apenas em uma direção, como pode ser observado na Figura 24. A rede é composta por camadas com um certo números de sítios em cada uma delas. Os sítios de determinada camada estão ligados aos sítios vizinhos da camada superior e inferior, mas

[2] **Isotrópico:** é a caracterização de uma substância que possui as mesmas propriedades físicas, independentemente da direção considerada.

[3] **Anisotrópica:** significa que certas propriedades físicas dependem da direção em que são medidas.

não aos sítios da mesma camada (TOME; OLIVEIRA, 2001; ATMAN, 2002).

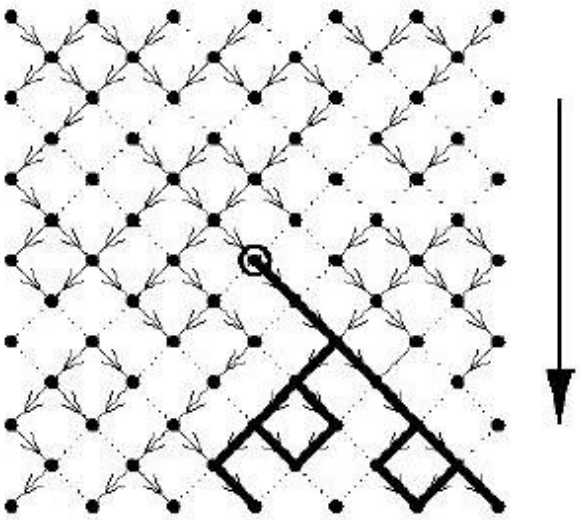


Figura 24 – *Ilustração do processo de percolação direcionada por ligações. Note que neste caso, existe uma direção privilegiada. Retirada de (DANTAS, 2006).*

A percolação direcionada compacta (CDP), além de obedecer a uma determinada orientação pré-definida, corresponde a um conjunto compacto de extensão finita na direção de um dos eixos (ESSAM, 1989).

Assim como os modelos de crescimento anteriores, a percolação também está associada a uma classe de universalidade. A Percolação Direcionada está associada à UC que recebe o mesmo nome do modelo e pode ser identificada pelo expoente crítico de crescimento $\beta = 0.85$. A Percolação Direcionada Compacta, nome que identifica também a classe de universalidade à qual está associada, possui $\beta = 1$.

Além disso, a percolação de um fluido em um meio aleatório pode ser considerada uma expressão generalizada que permite a descrição de diversos sistemas. Como exemplo, é possível citar a propagação de fraturas, onde a ponta da trinca avança de forma irregular, procurando no meio, um caminho que apresente uma resistência baixa ou nula. Esse processo pode ser descrito considerando uma estrutura inicial onde a altura de todos os sítios é zero. Posteriormente, escolhe-se um sítio vizinho à interface, se ele é ativo a superfície avança, caso contrário nada acontece. O crescimento da superfície pode ser retido por um aglomerado de sítios inativos. O modelo apresenta uma transição de percolação direcionada que também caracteriza uma transição *depinning*. Um estudo sobre esse assunto será exposto no capítulo 4 onde a propagação de fraturas será analisado sob o ponto de vista de uma transição *depinning*.

Capítulo 4

Fratura

Historicamente podemos afirmar que o estudo sobre a mecânica da fratura sempre foi de grande importância para o homem. Esta área teve início na Idade da Pedra, quando o homem aprendeu a fabricar ferramentas cortantes (COTTERELL, 2002). Posteriormente, gregos e egípcios desenvolveram técnicas e conhecimento em trincar pedras para a confecção de monumentos. Na Idade Média europeia, manuscritos indicam fraturas em armas de bronze. Na época do Renascimento, Leonardo da Vinci $(1452 - 1519)$ foi o primeiro a registrar um estudo do dimensionamento de fratura usando-se um aparelho que media a resistência de arames de aço com diferentes tamanhos e mesma espessura ((VINCI, 1894) apud (COTTERELL, 2002)). Outro momento importante foi a Revolução Industrial $(1820-1840)$, na qual se sucedeu uma enorme transformação tecnológica e socioeconômica, culminando no surgimento de diversas invenções. Porém, todo esse avanço da automatização da indústria veio acompanhada de diversos problemas relacionados a fraturas ou quebras de elementos mecânicos devido à projetos mal elaborados, negligência durante a construção ou operação da estrutura (ANDERSON, 2005). A Teoria da Fratura Moderna fundamentou-se, inicialmente, nos trabalhos de Griffith (GRIFFITH, 1921; GRIFFITH, 1924), cujas investigações se concentravam na resistência das placas de vidro com trincas. Alguns anos mais tarde, devido às fraturas e trincas que surgiram, principalmente nas estruturas de navios, durante a II Guerra Mundial $(1939 - 1945)$, diversos cientistas foram encorajados a estudar as causas de determinados tipos de fraturas mecânicas que ocorreram durante a guerra.

O campo da Mecânica da Fratura amadureceu significativamente nas últimas décadas do Século XX, sobretudo devido à evolução computacional. Com isso, importantes avanços, principalmente no que se refere a problemas práticos, foram difundidos, tornando-se uma disciplina importante na área de engenharia (ROSA, 2002; CHOPIN, 2010).

Nesse capítulo será abordado de maneira rápida o processo de fratura, sua definição, bem como suas principais características. Posteriormente, será apresentado um estudo do

comportamento de uma interface gerada durante o processo de propagação de trincas.

4.1 Definição

Fratura é a separação de um objeto em duas ou mais partes, quando submetido a processos de tensão, corrosão, desgaste excessivo, fadiga *etc*. A área de conhecimento que representa e encontra respostas às diversas questões relacionadas a esse processo é a Mecânica da Fratura (ANDERSON, 2005). Essa ciência está envolvida no estudo do comportamento de trincas em materiais sólidos (ROSA, 2002; ZEHNDER, 2012) e é uma ferramenta importante na melhoria do desempenho mecânico dos materiais e seus componentes, uma vez que descreve a magnitude e a distribuição do campo de tensões na vizinhança da trinca. Além disso, permite prever se a trinca, presente em um componente, irá se propagar até a ruptura completa do material, quando submetido a alguma força (ERDOGAN, 2000; ROSA, 2002).

4.2 Da elasticidade linear à ruptura

Todos os materiais se rompem quando submetidos a uma carga com uma força ou tensão muito elevada, seja ela de tração ou compressão. No entanto, a resistência mecânica do material também é utilizada para se avaliar a possibilidade de ruptura, que pode variar sob certas condições. Ou seja, um material pode romper-se mesmo sob tensões consideravelmente menores do que aquela determinada em condições estáticas (CHOPIN, 2010). Exemplos bem conhecidos desse fenômeno incluem o rompimento por: fadiga sob esforços cíclicos, temperatura elevada e tensão constante, fragilidade causada por baixa temperatura ou, fragilidade causada pela corrosão sob tensão.

A rigidez de um componente mecânico diz respeito ao quanto ele pode defletir sob uma determinada carga. Um parâmetro mecânico que proporciona uma medida de rigidez de um material sólido é o Módulo de Young. Esse módulo divide os materiais em duas grandes classes - flexíveis e rígidos - e tem sua origem na energia de ligação existente entre seus átomos; um material com um elevado valor do Módulo de Young pode ser considerado um material rígido. Os polímeros, borrachas e espumas, por exemplo, possuem módulo de elasticidade baixos enquanto que os materiais cerâmicos, conhecidos como os mais rígidos, apresentam valores elevados para esse módulo. Dessa forma, aplicando-se a mesma tensão em uma borracha e um metal, verifica-se uma deformação elástica muito maior na borracha que no metal. Isso mostra que o valor do Módulo de Young do metal é mais elevado e, portanto, é necessário aplicar uma tensão maior para que ele sofra a mesma deformação observada na borracha. Além disso, o aumento da temperatura leva a uma diminuição do módulo de elasticidade para a grande maioria dos materiais. A rigidez de um componente mecânico diz respeito não só ao valor do Módulo de Young, mas também da

tensão, tração ou compressão aplicada sobre o material. Além disso, a forma e o tamanho do componente devem ser considerados no processo de deflexão.

Já foi dito anteriormente que todos os materiais se rompem quando submetidos a uma carga superior à sua resistência mecânica. Contudo, o comportamento ao longo desse processo classifica os materiais em dois grandes grupos: os frágeis, que fraturam sem sofrer deformação e os dúcteis, que nitidamente se deformam antes de fraturar. Dessa forma, os principais mecanismos elementares de ruptura local são:

- Ruptura frágil: ocorre pela propagação rápida da trinca, acompanhada de pouca ou nenhuma deformação, podendo gerar situações catastróficas. A partir de certo ponto, esse tipo de trinca é considerada instável, visto que a propagação continua mesmo sem aumento da tensão. Esse tipo de fratura ocorre em materiais com elevada resistência mecânica e baixa tolerância à descontinuidade. Em geral, essa ruptura é perpendicular à tensão de tração aplicada e produz interfaces relativamente planas e brilhantes (ROSA, 2002).
- Ruptura dúctil: ocorre após considerável deformação plástica e se caracteriza pela propagação lenta de trincas, resultante da nucleação e crescimento de microcavidades (ROSA, 2002). Materiais dúcteis tornam-se frágeis sob baixas temperaturas, podendo gerar situações desastrosas. Exemplo: vários navios na II Guerra Mundial romperam-se ao meio – eles eram fabricados por aço com baixa concentração de carbono, tornando-se frágeis em contato com as águas frias (ROSA, 2002). Esse tipo de trinca é considerada estável, visto que a propagação é interrompida, caso não ocorra um aumento da tensão aplicada. Uma fratura completamente dúctil apresenta uma superfície irregular fosca.
- Ruptura por fadiga: é considerada o tipo de ruptura mais comum (BROBERG, 1999; ROSA, 2002; BARTHEL; HAIAT, 2002) e mais perigosa, uma vez que ocorre em condições normais de serviço e sem sobrecarga (ROSA, 2002). Esse fenômeno inicia com uma trinca mínima, sofrendo tensões repetitivas ou oscilantes com um valor menor que a resistência do material. A ruptura por fadiga é do tipo frágil com pouca deformação plástica. O estudo desse tipo de falha é muito importante na indústria, visto que uma porcentagem elevada da fratura em peças ocorre devido à fadiga.

Qualquer que seja o tipo de ruptura, pode-se sempre definir um valor limite que a amostra pode suportar antes de quebrar (CHOPIN, 2010). Para certas formas de falhas sujeitas a forças externas, é possível derivar expressões para as tensões no corpo, assumindo comportamento de material elástico linear isotrópico. Westergaard (WESTERGAARD, 1939), Irwin (IRWIN, 1957), Sneddon (SNEDDON, 1946) e Williams (WILLIAMS, 1957) foram os pioneiros a publicar tais soluções.

Em geral, conforme observado por Irwin (IRWIN, 1958), existem três formas de se aplicar

uma força e permitir que uma trinca se propague, como ilustra a Figura 25:

- Modo I ou modo de abertura, correspondente à separação de interfaces sob a ação de uma tração perpendicular ao plano da fenda. Para casos usuais, diz-se que esse modo de ruptura é o mais perigoso, podendo levar a uma ruptura frágil com pequena absorção de energia (ROSA, 2002).
- Modo II ou cisalhamento, é caracterizado pelo deslizamento, ou deslocamento tangencial, entre as interfaces e perpendicular à fissura.
- Modo III ou torção, é caracterizado pelo deslizamento tangencial entre as interfaces e paralelo à ruptura.

Esses modos de fissura são definidos localmente na ponta da trinca e quando ocorre a superposição de dois ou três deles, ele é chamado de modo misto de ruptura. A sobreposição desses três modos é suficiente para descrever a deformação de qualquer trinca. Dentro da Mecânica da Fratura, somente o modo macroscópico de crescimento de trinca é considerado, visto que em escala microscópica, a fratura é geralmente um processo muito irregular.

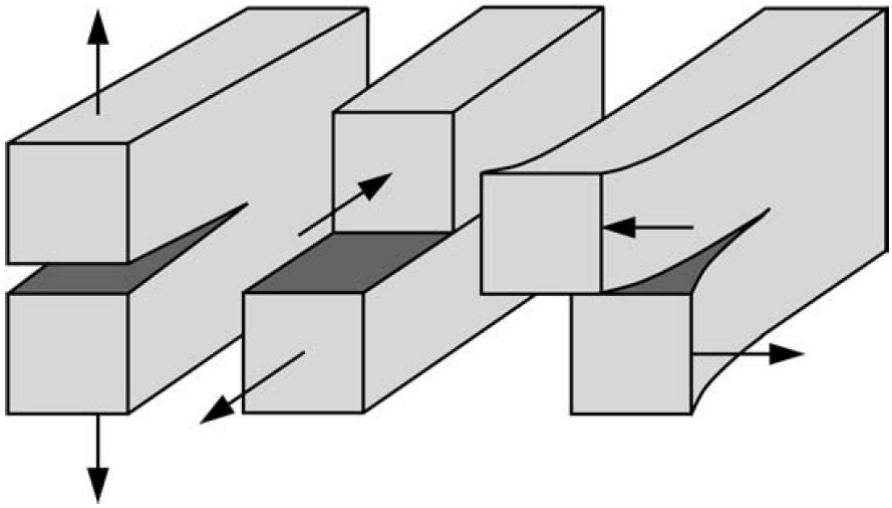


Figura 25 – *O desenho à esquerda refere-se ao modo I, o central ao modo II e o desenho à direita ao modo III. Retirada de (ANDERSON, 2005).*

4.3 Modelos da zona do processo de fratura

Entender o processo de fratura dos materiais é fundamental e por isso tem atraído a atenção de engenheiros e físicos, desde o trabalho pioneiro de Griffith (GRIFFITH, 1921). O autor afirma que, em um material elástico, a iniciação de uma trinca ocorre quando a energia mecânica liberada pelo avanço da mesma é suficiente para criar novas superfícies

(GRIFFITH, 1921). Então, uma vez que a rachadura começa a crescer, os efeitos inerciais devem ser incluídos no balanço energético (FREUND, 1990). Esta teoria do contínuo provou ser válida para descrever meios homogêneos ideais, mas não consegue captar algumas características observadas em meios heterogêneos (BONAMY, 2009).

Enquanto a energia mecânica liberada durante o crescimento da trinca é bem determinada pela teoria contínua, os processos de dissipação ocorrem dentro de uma pequena zona na ponta da rachadura, apresentando sensibilidade à distúrbios microestruturais do material. As consequências incluem flutuações importantes na força exibida por diferentes amostras do mesmo material (WEIBULL, 1939), efeitos de tamanho na força (BAZANT; PLANAS, 1998; ALAVA; NUKALA; ZAPPERI, 2009), liberação de energia antes e durante a falha (GUTENBERG; RICHTER, 1954), rugosidade do caminho da trinca (HULL, 1999), entre outros.

Enquanto os engenheiros mecânicos estudam as rachaduras com o objetivo de identificar a resistência de diversos materiais ou analisar o desvio da fenda frontal devido às diferentes intensidades de tensão (BOWER; ORTIZ, 1991; MOWER; ARGON, 1995; LAZARUS, 2011), os físicos estão interessados na sua propagação pela análise de uma interface. Alguns pesquisadores desenvolveram trabalhos voltados para a dinâmica associada à transição de desancoramento dessa interface usando-se de um meio aleatório (SCHMITTBUHL et al., 1995; DAGUIER et al., 1997; RAMANATHAN; FISHER, 1997; RAMANATHAN; ERTAS; FISHER, 1997; RAMANATHAN; FISHER, 1998; TANGUY; GOUNELLE; ROUX, 1998; SANTUCCI et al., 2007; DALMAS; LELARGE; VANDEMBROUCQ, 2008; LAURSON; SANTUCCI; ZAPPERI, 2010; BONAMY; BOUCHAUD, 2011), outros estudaram as propriedades de escala de uma fissura (BOUCHAUD, 1997; ALAVA; NUKALA; ZAPPERI, 2006).

Compreender o papel desempenhado pela microestrutura de materiais heterogêneos sobre as propriedades macroscópicas da fratura é um importante desafio na mecânica dos sólidos. Dentro dessa área, um dos estímulos atuais da Mecânica da Fratura Linear Elástica (LEFM) é levar em consideração a não linearidade induzida pela deformação na ponta da fratura (LAZARUS, 2011). Quando uma trinca se propaga em uma interface heterogênea, sua ponta é retida em regiões de *pinning* forte, sofrendo deformações. Esse tipo de *pinning* leva à não-linearidade no processo de propagação de fissuras, mesmo dentro da teoria da LEFM (PATINET et al., 2013). Para isso, uma abordagem adequada é o método de perturbação da trinca, que permite atualizar os fatores de intensidade de tensão (RICE, 1985). As aplicações relativas à deformação da ponta de uma fissura, quando se propagam em meios homogêneos ou heterogêneos[1], têm sido consideradas em todos os tipos de fratura (LAZARUS, 2011).

[1] **Sistemas homogêneos:** são aqueles que exibem uma única fase; **sistemas heterogêneos** apresentam mais de uma fase e possuem propriedades distintas em diferentes pontos do sistema.

Observações experimentais realizadas neste contexto relatam a existência de leis invariantes em escala (GUTENBERG; RICHTER, 1954; MANDELBROT; PASSOJA; PAULLAY, 1984; BOUCHAUD, 1997) e têm atraído a atenção da comunidade de física estatística nos últimos 30 anos (HERRMANN; ROUX, 1990; CHAKRABARTI; BENGUIGUI, 1997; ALAVA; NUKALA; ZAPPERI, 2006). Mais recentemente, propôs-se estender descrições de LEFM a materiais frágeis heterogêneos, levando-se em consideração a desordem microestrutural com o uso de um termo estocástico (GAO; RICE, 1989; SCHMITTBUHL et al., 1995). Como resultado, o início da propagação de fissuras é estudado a partir da analogia com uma transição de fases, entre uma fase estável e outra dinâmica. Essa nova fase exibe leis de escala universais que reproduzem as estatísticas observadas na dinâmica de fissuras (BONAMY; SANTUCCI; PONSON, 2008) e as características de escala morfológica exibidas pelas superfícies de fratura (BONAMY et al., 2006).

Os modelos clássicos de fratura têm algumas limitações principais (DAUSKARDT et al., 1998; COTTERELL, 2002):

- Modela-se apenas rachaduras pequenas e em fase inicial;
- A zona do processo de fratura (FPZ), região localizada próximo à ponta da trinca, deve ser pequena se comparada às dimensões do material e definida como o maior sistema identificável;
- O regime de propagação deve apresentar-se em estado estacionário e força dissipativa constante.

Barenblatt (BARENBLATT, 1959; BARENBLATT, 1962) foi o primeiro a formular a Mecânica da Fratura em termos da FPZ e argumentou que, se essa zona é pequena comparada com o comprimento da trinca, a abertura na ponta permanece estável durante a propagação da fissura devido a uma força constante, como em LEFM. Dugdale (1960) usou o conceito de FPZ simples para modelar a deformação plástica.

Cientistas interessados em trabalhar com concreto, um material frágil, foram os pioneiros em utilizar extensivamente o modelo FPZ (COTTERELL, 2002). As principais versões desse modelo são o modelo de fratura fictícia iniciado por Hillerbord (HILLERBORG; MODEER; PETERSSON, 1976) e o modelo de fratura proposto por Bazant (BAZANT; CEDOLIN, 1979).

Nas teorias clássicas de deformação contínua, o estresse em um ponto depende da tensão nesse ponto (COTTERELL, 2002). Fleck et al. (FLECK et al., 1994) fizeram testes de tensão e torção em fios de cobre de diferentes diâmetros e perceberam pouca deformação nos ensaios de tensão, mas um aumento significativo na resistência. Um estudo das teorias sobre o gradiente de tensão foi desenvolvido para explicar seu comportamento em um trabalho elaborado por Fleck e Hutchinson (FLECK; HUTCHINSON, 1997).

A fratura também foi estudada sob o ponto de vista da geometria fractal. Em 1984 Mandelbrot, Passoja e Paullay (1984), estudaram o caráter fractal da superfície de metais fraturados. A origem dessa nova superfície, seja por tração ou impacto, é rugosa e irregular devido às micro e macroestruturas do metal. No entanto, a observação repetida sob vários incrementos de tamanho revelaram uma variedade de estruturas adicionais que se situam entre o "micro" e o "macro" e que ainda não foram descritas satisfatoriamente de forma sistemática. Os experimentos realizados pelos autores revelaram a existência de escalas intermediárias em que a estrutura foi bem modelada por uma superfície fractal. Um novo método de análise dessas estruturas é introduzido para estimar a dimensão fractal D, e concordar com o valor obtido na análise do perfil da fratura. Para finalizar, os autores mostraram que o valor D encontrado é uma medida da tenacidade[2] em metais, ou seja, quantifica a energia que o metal pode absorver antes de fraturar.

Após a publicação do trabalho (MANDELBROT; PASSOJA; PAULLAY, 1984), inúmeros estudos seguiram-se relatando as propriedades geométricas das superfícies de uma trinca, mostrando suas características autoafins (MEAKIN, 1993; KERTESZ; HORVATH; WEBER, 1993), análise numérica de modelos discretos (TERMONIA; MEAKIN, 1986; HANSEN; HINRICHSEN; ROUX, 1991) e a universalidade do expoente de rugosidade (BOUCHAUD; LAPASSET; PLANES, 1990; MALOY et al., 1992). Além disso, outros estudos têm se concentrado em uma análise teórica do efeito de heterogeneidades no plano de fissura, na propagação dinâmica de fraturas (RICE; BEN-ZION; KLM, 1994; PERRIN; RICE, 1994).

Em 1995, um grupo de pesquisadores (SCHMITTBUHL et al., 1995) propôs uma nova abordagem para descrever a evolução de uma fenda interfacial entre dois sólidos elásticos com desordem congelada[3]. Eles analisaram numericamente superfícies autoafins e encontraram expoentes de rugosidade e dinâmico muito diferentes daqueles obtidos no trabalho desenvolvido por Gao e Rice (GAO; RICE, 1989).

Outro assunto explorado nessa área é a estabilidade de meios elásticos em um potencial de *pinning*. Esse cenário é responsável pelo comportamento complexo observado em várias situações físicas, incluindo a rugosidade das frentes de fissura na fratura (BOUCHAUD et al., 1993) e atrito sólido (CAROLI; NOZIERES, 1996). Neste último caso, o coeficiente de atrito pode variar de acordo com a aspereza da superfície do sólido (MAZUR; OPPENHEIM, 1970). Já o comportamento da interface pode ser mediado pelas interações entre a rugosidade e a tensão externa. A competição entre a força de restauração elástica e a força de *pinning* não-linear origina múltiplas posições de equilíbrio estáveis, quando as forças de *pinning* são suficientemente fortes ou o sistema é suficientemente grande (TANGUY; GOUNELLE;

[2] **Tenacidade:** é a capacidade de um material resistir á propagação de uma fratura.

[3] **Desordem congelada:** Na física estatística, diz-se que um sistema apresenta uma desordem congelada quando alguns parâmetros que definem o seu comportamento são variáveis aleatórias que não evoluem com o tempo, isto é, são extintas ou congeladas.

ROUX, 1998). No caso de espalhamento de um líquido num plano heterogêneo (JOANNY; GENNES, 1984), a evolução da interface de contato depende da competição entre uma ”força de *pinning*” devido a heterogeneidades da superfície e a força restauradora elástica resultante da tensão superficial.

O efeito das interações elásticas de longo alcance sobre a dinâmica do sistema tem sido pouco estudado, uma vez que cada evento envolve grande parte do sistema e geralmente não pode ser resolvido de forma perturbativa. No entanto, sabe-se que este efeito tem uma forte influência no comportamento do sistema, bem como nas suas propriedades de estabilidade (LEE; FUKUYAMA, 1978). Com o objetivo de ampliar os conhecimentos sobre esse assunto, alguns pesquisadores (TANGUY; GOUNELLE; ROUX, 1998) analisaram o comportamento de uma interface, em uma dimensão, com interações de longo alcance, deslocando-se em um substrato com desordem congelada e *pinning* forte. Consideraram também que a dinâmica flutuante do sistema resultou em uma propagação determinística com instabilidades locais. Eles mostraram o efeito das interações elásticas de longo alcance nas flutuações que acompanham o comportamento médio da interface (TANGUY; GOUNELLE; ROUX, 1998). No limite do ancoramento forte, a dinâmica da cadeia é controlada por instabilidades individuais de cada local. As correlações de longo alcance no campo de deslocamento e no campo de força se desenvolvem progressivamente. O sistema se auto-organiza para um estado estável, onde a propagação das instabilidades é descrita por leis de escala com expoentes característicos. Esses expoentes podem ser estimados numericamente, usando-se a análise da correlação espácio-temporal, a partir da rugosidade da superfície.

Focado também no comprimento de correlação e na intensidade do *pinning*, tem-se o trabalho de (ROUX; VANDEMBROUCQ; HILD, 2003), publicado em 2003. Os autores estudaram o fator de intensidade de tensão ao longo da ponta de uma falha rugosa. Esse estudo mostra a ocorrência de diferentes regimes que dependem do comprimento de correlação, da tenacidade local e da direção da propagação da fissura. Eles observaram que o *pinning* fraco ocorre para comprimentos de correlação longos, onde a resistência efetiva é considerada a média da resistência local. Já o *pinning* forte, aparece quando o comprimento de correlação é curto e leva a uma tenacidade eficaz mais elevada.

O estado estacionário desse tipo de sistema apresenta comportamento diferente para cada tipo de *pinning*. No caso do *pinning* forte, a interface fica retida em torno de poucos pontos, gerando uma irregularidade acentuada; em situações de *pinning* fraco, o sistema pode avançar como um todo, permitindo que a interface apresente irregularidades menores (TANGUY; VETTOREL, 2004).

O *pinning* em meio elástico pode ser usado para descrever várias situações físicas como a rugosidade na ponta de uma fissura (SCHMITTBUHL et al., 1995; BOUCHAUD, 1997), a

formação de uma interface irregular gerada a partir da imersão de uma folha de papel em um líquido, o movimento na ponta de molhamento (*wetting*) em superfícies heterogêneas (JOANNY; GENNES, 1984; GENNES, 1985; POMEAU; VANNIMENUS, 1985; MEGLIO, 1992; CRASSOUS; CHARLAIX, 1994; MOULINET; GUTHMANN; ROLLEY, 2002; RAMOS et al., 2003; GOLESTANIAN; RAPHAEL, 2003), o atrito sólido (BURRIDGE; KNOPOFF, 1967; BOCQUET; JENSEN, 1997; CAROLI; NOZIERES, 1998), entre outros. Em todos esses casos o processo pode ser descrito usando-se da propagação irregular de uma interface sobre uma superfície. Essa irregularidade deve-se ao fato da retenção da interface em alguns pontos gerar uma competição entre a força de restauração elástica e a força de *pinning*. O processo descrito acima gera uma desordem congelada, porque ela não muda com o tempo.

Em 2004, Tanguy e Vettorel (2004) analisaram a estabilidade linear de um processo *depinning*. Esse processo assemelha-se ao molhamento de superfícies heterogêneas, onde a interface é representada por uma superfície de separação entre os meios. As irregularidades dessa linha ocorrem devido às heterogeneidades químicas ou à rugosidade do substrato sólido (JOANNY; GENNES, 1984; GENNES, 1985; POMEAU; VANNIMENUS, 1985; MEGLIO, 1992; CRASSOUS; CHARLAIX, 1994). Dependendo da geometria da superfície, o avanço da interface pode ser de longo ou curto alcance (JOANNY; GENNES, 1984). Tanguy e Vettorel (2004) forneceram, pela primeira vez, a evidência de uma mudança de regime de *pinning* forte para um *pinning* fraco. Mostraram que essa mudança depende da desordem e ocorre apenas em sistemas de tamanho finito.

Em (PATINET; VANDEMBROUCQ; ROUX, 2013), os autores consideraram a propagação de uma fissura em uma interface heterogênea. Eles ajustaram a função de distribuição de resistência local e correlação espacial, para induzir uma transição entre *pinnings* forte e fraco e tenacidade macroscópica. Enquanto a tenacidade macroscópica efetiva é dada pela tenacidade local média, no caso de *pinning* fraco, observa-se um aumento da tenacidade do sistema para *pinning* forte (o ponto crítico da transição *depinning*). Esse trabalho confirmou resultados encontrados anteriormente sobre o efeito da anisotropia na tenacidade (ROUX; VANDEMBROUCQ; HILD, 2003; ROUX; HILD, 2008). Os autores também apresentaram as flutuações de velocidade ao longo da ponta da trinca, para caracterizar os regimes de *pinning* fraco ou forte.

Pesquisadores investigaram teoricamente os parâmetros relevantes na escala de microestrutura que governam a tenacidade macroscópica de materiais frágeis desordenados (DEMERY; ROSSO; PONSON, 2014). Eles se concentraram na movimentação da interface durante a propagação de trincas em um plano com distribuição aleatória de tenacidade. Os resultados revelaram dois regimes: no regime de *pinning* coletivo, quando o nível de desordem é menor, a tenacidade foi expressa em função da média e do desvio padrão da

distribuição de tenacidade local e dos comprimentos de correlação do campo de tenacidade heterogênea; no regime de *pinning* individual e desordem elevado, a passagem de micro para macro escala é mais sutil e a distribuição completa de tenacidade local torna-se necessária para ser preditiva. Materiais fortemente desordenados estão no regime de *pinning* individual e seu comportamento depende de muitos parâmetros microscópicos.

Em outro trabalho, os autores abordaram o efeito da dependência da força crítica na geometria da desordem, que é representada pela função de correlação entre dois pontos em sistemas elásticos desordenados (DEMERY; LECOMTE; ROSSO, 2014). Eles se concentraram em um modelo de interface com acoplamento de longo alcance conduzida em uma paisagem aleatória. No regime de *pinning* coletivo, quando a amplitude da desordem é pequena, calcula-se a força crítica. Simulações numéricas forneceram uma verificação bem-sucedida do resultado analítico e mostraram que dois sistemas com a mesma amplitude de desordem e comprimento de correlação podem ter forças críticas diferentes, se suas funções de correlação entre dois pontos de desordem forem diferentes.

Considerando que o objeto de trabalho desse doutoramento é o estudo do crescimento de superfícies, tomamos os trabalhos descritos como motivação para ampliar os estudos sobre o problema de propagação de interfaces em um meio heterogêneo. O modelo de interface descrito nesse trabalho será representado por uma linha elástica que irá deslizar pelo plano, à medida que consideramos a separação de duas placas, no sentido vertical, apresentando uma transição *depinning*. Iremos também analisar o comportamento da interface quando deslocamos os pontos de *pinning* diagonalmente. Para tratar esse problema, optamos pela simulação computacional ao invés da experimental. Uma importante razão se deve à capacidade de controle que podemos ter sobre as variáveis do sistema, contribuindo para uma melhor compreensão da formação de superfícies rugosas. Outro importante fator, refere-se ao fato das simulações computacionais serem menos dispendiosas, além de requerem um menor tempo de experimentação, quando são consideradas em grande quantidade. Na sessão 4.4, iremos descrever o processo de uma transição *depinning* com maior propriedade.

4.4 Transição *Depinning*

Considere o Modo I de fratura (ver sessão 4.2) que corresponde à separação das interfaces sob a ação de uma força externa perpendicular ao plano da fenda. A fissura interfacial se propaga entre dois sólidos com as mesmas propriedades elásticas, sobre o plano $z = 0$, como pode ser observado na Figura 26.

À medida que os dois sólidos se separam, forma-se uma interface que se propaga sobre a superfície. Se assumirmos que a superfície é heterogênea, a propagação dessa linha irá

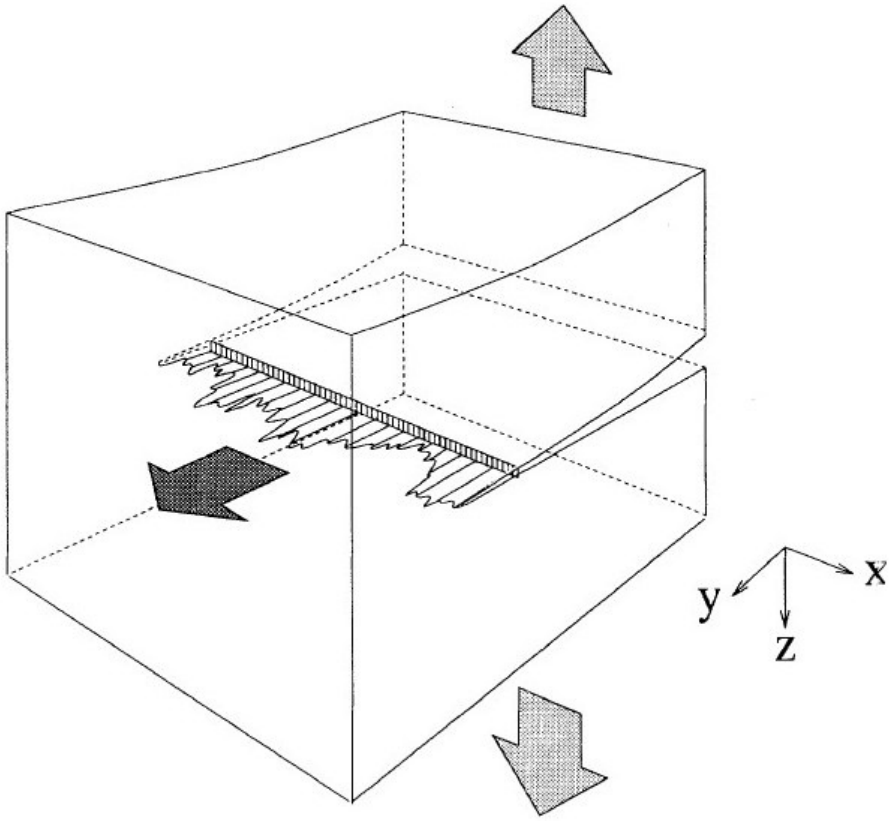


Figura 26 – *A interface se propaga sobre o plano $z = 0$, ao longo de y. Uma tensão é aplicada no sentido vertical, de maneira que a fenda se abra como no Modo I. Retirada de (SCHMITTBUHL et al., 1995).*

ocorrer de forma irregular, devido aos diferentes pontos de tensão, ficando retida em alguns pontos. Esse comportamento distingue as interfaces que se movem em um meio aleatório e é caracterizado como uma transição *depinning*. O *depinning* é um fenômeno crítico fora do equilíbrio que envolve uma força externa e um potencial de *pinning*. Quando a força é fraca, o sistema é estacionário, preso num estado metaestável[4]. Se aplicarmos uma força maior que um valor crítico, o sistema sai do estado metaestável e começa a se mover (KARDAR; ERTAS, 1994). A velocidade no ponto máximo do limiar comporta-se como $v \propto (F - F_c)$, sendo F a força externa e F_c a força limite crítica ou força de atrito estático. Na vizinhança da transição *depinning*, a velocidade média tem a forma

$$v \sim f^{\theta}, \tag{17}$$

onde θ é o expoente de velocidade. Observando a relação de proporcionalidade na Equação 17, se $v \propto f$ então $\theta \propto 1$.

A Figura 27 representa esquematicamente a interface em um meio aleatório, com uma força

[4] **Estado metaestável:** capaz de perder a estabilidade por meio de pequenas perturbações.

F atuando sobre ela na direção vertical. Como a superfície é heterogênea, apresentando diferentes pontos de ancoramento, a linha se propaga fixando-se em alguns pontos e avançando em outros.

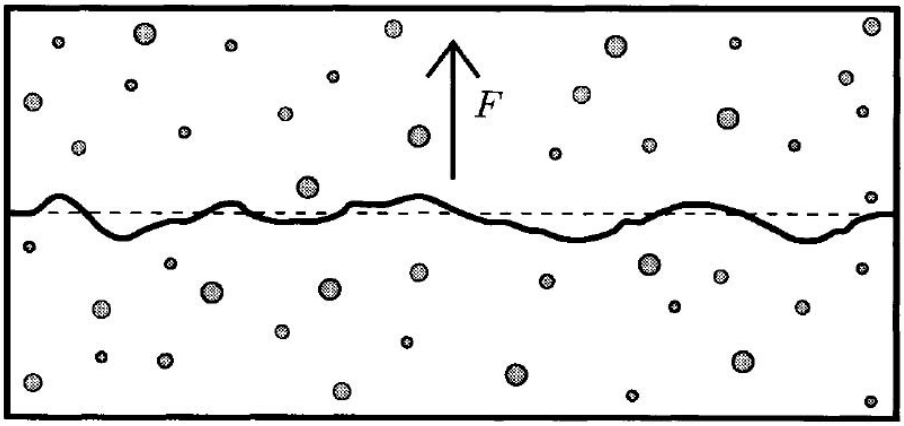


Figura 27 – *Representação esquemática de uma interface em um meio aleatório. As bolinhas representam pontos de pinning distribuídos aleatoriamente. Retirada de (BARABASI; STANLEY, 1995).*

No caso típico, uma interface com altura $h(x,t)$ move-se num meio desordenado com ruído congelado $\eta(x,h)$. Aplicando uma força externa F, a equação de crescimento mais simples que descreve a dinâmica da interface é (NATTERMANN et al., 1992; NARAYAN; FISHER, 1993)

$$\partial_t h = F + \nu\nabla^2 h + \eta(x,h). \tag{18}$$

O termo $\nu\nabla^2 h$ simula uma tensão superficial e atua para suavizar a interface, enquanto o ruído congelado trabalha para tornar a interface mais rugosa. Supõe-se geralmente que o ruído congelado tem média zero $\langle\eta(x,t)\rangle = 0$ (seguindo o mesmo raciocínio do ruído branco - ver seção 3.2), não apresenta correlação temporal, ou seja, suas correlações são da forma (BARABASI; STANLEY, 1995).

$$\langle\eta(x,h)\eta(x',h')\rangle = \delta^d(x-x')\Delta(h-h'). \tag{19}$$

Uma interface caracterizada pela Equação 18 move-se com uma velocidade finita v_0, se a força motriz F excede um valor crítico F_c, enquanto que para $F < F_c$ ela é ancorada pela desordem. Quando $F \to F_c$, encontramos a Equação 17, onde $f \equiv \dfrac{(F-F_c)}{F_c}$ é a força reduzida.

Após Kessler (KESSLER; LEVINE; TU, 1991) ter estudado a Equação EW com ruído congelado (QEW) (18), Parisi (PARISI, 1992) introduziu um algoritmo simples para o movimento da

interface em um campo aleatório congelado. Ambos descobriram que existe um fenômeno de *crossover* em que as interfaces são caracterizadas por expoentes de escala (BOHR et al., 2009).

A equação que melhor generaliza este movimento é a Equação QKPZ (*Quenched* KPZ) 20, onde o termo de ruído branco $\eta(x,t)$ da Equação KPZ 16 é substituído por um termo de ruído congelado $\eta(x,h)$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F + \nu\nabla^2 h + \frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2 + \eta(x,h). \tag{20}$$

Se fixarmos a aleatoriedade congelada $\eta(x,h)$ para um dado sistema, a evolução da interface é determinística, isto é, sempre será obtida a mesma interface final iniciando-se a simulação com mesmas condições iniciais. Em contraste, a Equação KPZ é estocástica e reiniciar a interface a partir das mesmas condições iniciais resultará em uma configuração final diferente (BARABASI; STANLEY, 1995).

Dessa forma, a Equação de crescimento (20) gera três regimes diferentes na evolução da interface:

- Fase fixa: se adicionarmos uma pequena força motriz, a interface tende a se mover na direção de F, mas ficará presa em pontos de maior tensão.
- Fase de movimento crítico: se aumentarmos a força motriz, a linha elástica irá superar a força de ancoramento (*pinning*) e começará a se mover com velocidade finita. Nas proximidades do local onde a força crítica (F_c) atua, a velocidade segue a Equação 17. Entretanto o movimento da linha será irregular, devido às diferentes intensidades nos pontos de ancoramento. Ou seja, o movimento é lento e suave, intercalado com saltos. Quando $F \to F_c$, o domínio do *pinning* diverge com a Equação 21, onde ν é o expoente do comprimento de correlação.

$$\xi \sim (F - F_c)^{-\nu} \tag{21}$$

- Fase de movimento acelerado: quando $F \gg F_c$, a velocidade aumenta linearmente com F e o movimento pode ser descrito pela Equação QKPZ.

Existem quatro expoentes críticos que caracterizam a interface na transição *depinning*: o expoente de velocidade θ, o expoente de correlação ν, o expoente de rugosidade α e o expoente dinâmico z. O movimento da interface próximo ao limiar é composto de saltos de tamanho ξ, conhecido como comprimento de correlação. Esse salto move a interface para frente por uma distância ξ^α ao longo de um período de tempo ξ^z. Assim, a velocidade da

interface é dada por

$$v \sim \frac{\xi^{\alpha}}{\xi^{z}} \sim (F - F_c)^{\nu(z-\alpha)}. \tag{22}$$

Comparando as equações 22 e 17, obtemos a seguinte relação para o expoente de velocidade

$$\theta \sim (z - \alpha)\nu. \tag{23}$$

Os valores dos expoentes devem ser bem determinados para fornecer uma descrição completa do sistema.

O ruído congelado tem um efeito não trivial sobre o movimento e a morfologia da interface e tem motivado um grande número de pesquisas na área. Vários modelos foram desenvolvidos considerando a morfologia: interfaces auto similares (MARTYS; CIEPLAK; ROBBINS, 1991; MARTYS; ROBBINS; CIEPLAK, 1991; NOLLE et al., 1993; NOLLE et al., 1994) e interfaces autoafins (JENSEN; PROCACCIA, 1991; BARABASI et al., 1992; PARISI, 1992; SNEPPEN, 1992; VICSEK, 1992b; LESCHHORN, 1993). Além disso, os modelos que conduzem às interfaces autoafins também podem ser classificados em duas classes de universalidade principais, que possuem diferentes expoentes de escala.

4.5 Classes de Universalidade

A origem de diferentes classes de universalidade é bem compreendida para processos de crescimento que não apresentam correlação espacial ou temporal. No entanto, somente na década de 1990 alguns estudos observaram que o ruído congelado (que depende apenas da posição da interface) pode determinar uma classe de universalidade, gerando interfaces com expoentes de rugosidade anormalmente grandes (KESSLER; LEVINE; TU, 1991; VICSEK, 1992a; NATTERMANN et al., 1992; TANG; LESCHHORN, 1992; PARISI, 1992; BULDYREV et al., 1992; BARABASI et al., 1992; NARAYAN; FISHER, 1993; NOLLE et al., 1993; KOILLER et al., 1993; ROBBINS et al., 1993; BULDYREV; HAVLIN; STANLEY, 1993; MEAKIN, 1993; LESCHHORN, 1993; CSAHOK et al., 1993; AMARAL et al., 1994).

Nessa mesma década, vários estudos analíticos (NATTERMANN et al., 1992; NARAYAN; FISHER, 1993) e numéricos (PARISI, 1992; TANG; LESCHHORN, 1992; BULDYREV et al., 1992; BARABASI et al., 1992; NOLLE et al., 1993; KOILLER et al., 1993; ROBBINS et al., 1993; BULDYREV; HAVLIN; STANLEY, 1993; LESCHHORN, 1993) estavam focados em compreender a natureza da transição *depinning* e obter estimativas precisas para os expoentes críticos. Valores diferentes foram encontrados, por exemplo, em modelos do tipo

sólido-sobre-sólido que geravam valores para $\alpha \simeq 0.63$ em $(1+1)$ dimensão e $\alpha \simeq 0.48$ em $(2+1)$ dimensões (TANG; LESCHHORN, 1992; BULDYREV et al., 1992; BARABASI et al., 1992; BULDYREV; HAVLIN; STANLEY, 1993). No entanto, o modelo discretizado sólido-sobre-sólido da Equação 18 gerava $\alpha \simeq 1.25$ para $(1+1)$ dimensão e $\alpha \simeq 0.75$ para $(2+1)$ dimensões (LESCHHORN, 1993).

No trabalho, (AMARAL; BARABASI; STANLEY, 1994), os autores apresentaram alguns modelos para investigar o movimento de interfaces na presença do ruído congelado. Eles sugeriram a existência de duas classes de universalidade diferentes, sendo a primeira descrita pela Equação de crescimento não-linear (20).

A segunda classe de universalidade é descrita pela Equação 18. (AMARAL; BARABASI; STANLEY, 1994) acreditavam que a existência de duas classes de universalidade seja a justificativa para os diferentes expoentes encontrados em trabalhos anteriores. Eles descobriram que o valor de λ pode determinar a classe de universalidade à qual pertence um determinado processo de crescimento. Os autores calcularam λ seguindo (KRUG; SPOHN, 1990) e impuseram uma inclinação m na interface. Para um modelo descrito pela Equação 18, a velocidade local v é independente da inclinação. No entanto, se um termo não-linear estiver presente além do termo linear, então a Equação 18 se torna (KRUG; SPOHN, 1990)

$$v = v_0 + \lambda m^2. \tag{24}$$

Assim, variando-se a inclinação m, é possível testar a presença de termos não-lineares na equação de crescimento e calcular o coeficiente λ.

Os resultados mostraram, em $(1+1)$ dimensões, uma separação em dois grupos nos valores dos expoentes críticos para os modelos estudados (TANG; LESCHHORN, 1992; BULDYREV et al., 1992; BARABASI et al., 1992; BULDYREV; HAVLIN; STANLEY, 1993). Essa separação reflete a existência de duas classes de universalidade distintas, descritas pelas equações contínuas de crescimento 18 e 20. No caso em que $\lambda = 0$ ou $\lambda \to 0$ na transição *depinning*, o comportamento de escala desses modelos deve ser corretamente descrito pela Equação 18. Para os modelos em que λ diverge, indicando que as não-linearidades são relevantes perto da transição *depinning*, é necessário estudar a Equação 20, uma vez que a Equação 18 não inclui o termo não-linear $\lambda(\nabla h)^2$. Outra evidência da existência das duas classes de universalidade é dada pelos valores dos expoentes de rugosidade. Os modelos para os quais λ diverge na transição *depinning*, predizem $\alpha \simeq 0.63$ (TANG; LESCHHORN, 1992; BULDYREV et al., 1992; BARABASI et al., 1992; PARISI, 1992; BULDYREV; HAVLIN; STANLEY, 1993). Por outro lado, modelos na classe de universalidade da Equação 18 (NOLLE et al., 1993; KOILLER et al., 1993; ROBBINS

et al., 1993; TANG; LESCHHORN, 1992; BULDYREV et al., 1992; BARABASI et al., 1992; BULDYREV; HAVLIN; STANLEY, 1993; PARISI, 1992; LESCHHORN, 1993), encontraram exponentes de rugosidade tipicamente maiores, em melhor acordo com as previsões de Nattermann et al. (1992), Narayan e Fisher (1993).

Alguns autores acreditam que a origem das duas classes de universalidade observadas é devido à anisotropia do meio desordenado (TANG; KARDAR; DHAR, 1995).

A não-linearidade pode ter duas origens diferentes: no primeiro caso, o termo não linear $(\nabla h)^2$ é obtido com um coeficiente λ proporcional à velocidade $v = \frac{\partial h}{\partial t}$. Esse termo tem origem cinemática e desaparece quando $v \to 0$. No entanto, em um segundo caso, sistemas anisotrópicos, onde o ruído congelado tem correlações distintas em diferentes direções de crescimento, um termo não linear será gerado pela desordem. Porém, em sistemas isotrópicos, onde a variação da altura e posição da interface coincidem ($\triangle h = \triangle x$), o termo não linear será gerado apenas cinematicamente e desaparecerá na transição *depinning* (BARABASI; STANLEY, 1995).

4.6 *Pinning* via Percolação direcionada

O modelo *depinning* por percolação direcionada (DPD) possui um termo não linear divergente. A ligação entre o crescimento de interfaces com desordem congelada e percolação direcionada foi proposta originalmente por dois estudos independentes (BULDYREV et al., 1992; TANG; KARDAR; DHAR, 1995).

Buldyrev et al. (1992) definiram um modelo em uma malha quadrada com borda L e condição periódica de contorno. Uma fração p de sítios é bloqueada para indicar a desordem congelada e a natureza heterogênea da superfície. Os sítios bloqueados tentarão parar o crescimento; entretanto, a interface é livre para avançar em sítios desbloqueados. Em $t = 0$, a interface é a linha horizontal em negrito, na parte inferior da Figura 28(a). Em $t = 1$, escolhe-se aleatoriamente um sítio (rótulo X na Fig. 28(b)) entre os sítios desbloqueados que são vizinhos mais próximos da interface. O sítio X é ocupado e todos os outros abaixo dele na mesma coluna. Em $t = 2$, na Fig. 28(c) escolhe-se um segundo sítio desbloqueado, Y, para invadir, enquanto que na Fig. 28(d) mostra-se que em $t = 3$ ocupa-se os sítios Z e Z' abaixo dele (CIEPLAK; ROBBINS, 1990).

Para um valor de p abaixo de um limiar crítico p_c (STAUFFER; AHARONY, 2003), a interface se propaga indefinidamente. Enquanto que, para p acima de p_c, a interface não propaga. A Figura 29 é uma representação típica de uma interface impossibilitada de se propagar. Isso ocorre quando a interface alcança uma posição onde todos os vizinhos mais próximos das células estão bloqueados.

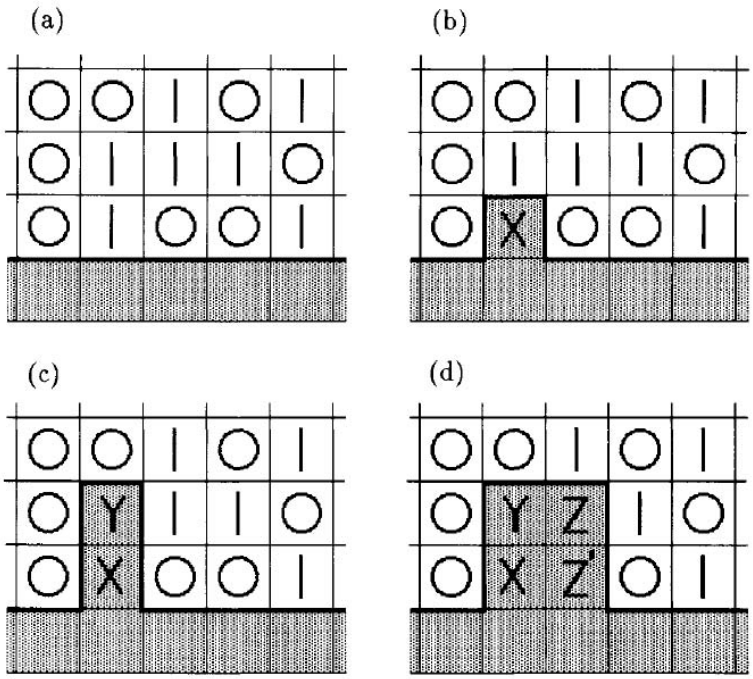


Figura 28 – *Modelo DPD para o crescimento da interface. As células são bloqueadas aleatoriamente com probabilidade* p *(indicada por* O*) ou desbloqueadas com probabilidade* $(1-p)$ *(indicada por* $|$*). A interface entre células invadidas ou não é mostrada por uma linha em negrito. Em (a) temos* $t=0$*, (b)* $t=1$*, (c)* $t=2$ *e (d)* $t=3$*. Retirada de (BULDYREV et al., 1992).*

Estudos numéricos da dinâmica de movimentação da interface, baseado na rugosidade, apresentam os seguintes valores para os expoentes críticos: $\alpha = 0.70 \pm 0.05$, $\beta = 0.70 \pm 0.05$ (BULDYREV et al., 1992) e $z = \dfrac{\alpha}{\beta} = 1$ (AMARAL et al., 1995a; HAVLIN et al., 1995).

Na década de 1990, foi introduzida uma variante do modelo DPD com atualização global, denominada modelo *depinning* auto organizado (SOD) - especificamente, a interface cresce no local em que a força de *pinning* é menor (HAVLIN et al., 1991; SNEPPEN, 1992; SNEPPEN; JENSEN, 1993). Embora se possa esperar que o caráter não-local da regra de atualização possa introduzir uma nova classe de universalidade, argumentou-se que o mesmo expoente de rugosidade é obtido para o modelo DPD.

A principal diferença entre o modelo DPD e SOD é que neste último a regra de crescimento auto ajusta a interface de tal forma que ela está sempre no ponto crítico F_c, dando a ideia de criticalidade auto-organizada. As propriedades de escala dos modelos SOD e DPD coincidem em $F = F_c$ (HAVLIN et al., 1991; LESCHHORN; TANG, 1994; OLAMI; PROCACCIA; ZEITAK, 1994).

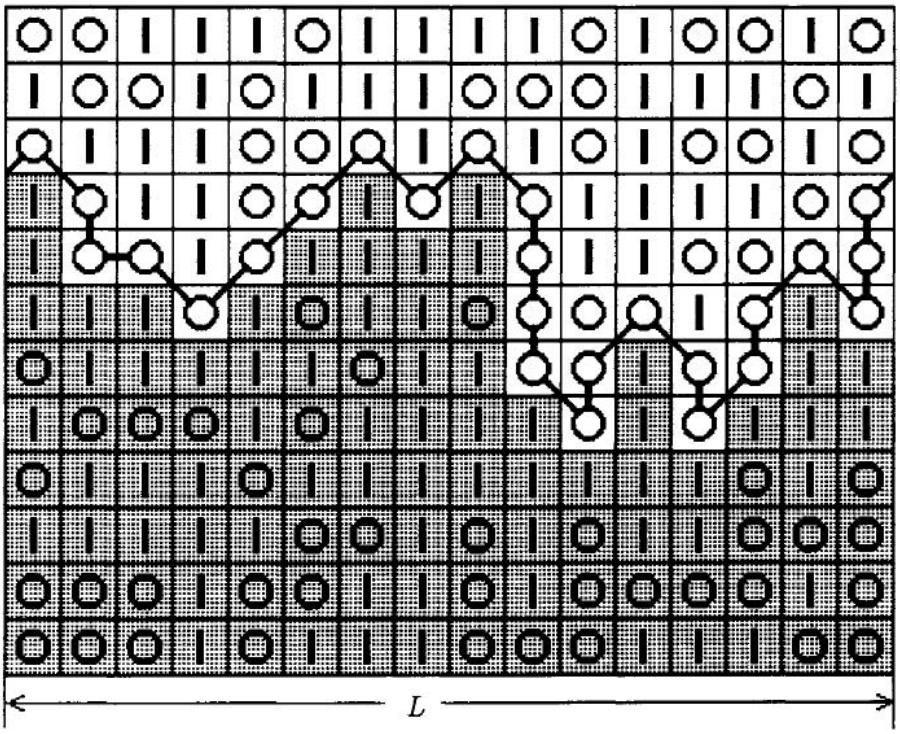


Figura 29 – *Representação esquemática da interface bloqueada no modelo DPD. Isso ocorre quando a mesma atinge, pela primeira vez, uma posição em que todos os vizinhos impossibilitam sua propagação. Retirada de (BULDYREV et al., 1992).*

4.7 Modelo da Propagação de Fratura

A qualidade dos projetos voltados para modelagem de estruturas duráveis está diretamente ligada à previsão do surgimento e propagação das fraturas (ANDERSON, 2005). Desde o início da década de 1990, pesquisadores na área de física estatística, dentre outras, têm se dedicado ao estudo de modelos que descrevem fraturas em materiais heterogêneos (LAZARUS, 2011). A propagação dessa fratura é modelada por intermédio da dinâmica de uma interface em um meio aleatório. Essa aleatoriedade é devido às heterogeneidades químicas ou estruturais do material, que levam a uma variação da tenacidade local, provocando ancoramento em algumas áreas.

Pensando em descrever o comportamento universal da propagação de fraturas, alguns autores focaram em estudar a invariância de leis de escala, ao descrever a dinâmica da fratura na vizinhança da sua ponta (BONAMY; SANTUCCI; PONSON, 2008; LAURSON; SANTUCCI; ZAPPERI, 2010). Esses estudos têm se dedicado em analisar detalhes do sistema microscópico, considerando modelos macroscópicos reais (ROUX; VANDEMBROUCQ; HILD, 2003).

Algumas dessas pesquisas motivaram nosso trabalho. Sendo assim, modelamos a propagação de uma interface, para testar os modelos de fratura convencionais, utilizando

parâmetros de controle. Para isso, consideramos um material que sofre uma fratura frágil devida à ação de uma força externa perpendicular ao plano da fratura (observe a Figura 26). À medida que as partes do sólido se separam, uma interface se propaga sobre o plano (x, y), ao longo de y. Essa propagação acontece de forma semelhante ao processo *depinning* de percolação direcionada apresentado na seção 4.6. A heterogeneidade da resistência microscópica é representada por um panorama aleatório sobre o plano (x, y). Esse panorama de desordem induz à rugosidade da interface por meio de uma força de restauração elástica. Desprezamos também os efeitos inerciais, considerando uma dinâmica superamortecida, ou seja, o sistema retorna para o estado estável lentamente e sem oscilar.

O plano (x, y) foi construído considerando-se o comprimento na direção perpendicular à propagação da interface $L_x = 1024$, e na direção paralela à propagação $L_y = 10000$. A distribuição dos pontos de *pinning* sobre essa rede é aleatória, seguindo uma distribuição uniforme. Eles foram identificados por Nd_x e Nd_y e determinados a partir da relação $Nd_x = \frac{L_x}{\xi_x} \times Nd_y = \frac{L_y}{\xi_y}$. O sistema de desordem modelado apresenta condição periódica de contorno na direção x, média 1 e desvio padrão 10^{-2}. Os seguimentos que determinam a distância entre dois pontos consecutivos na direção x e y foram identificados por Ld_x ou Ld_y, respectivamente. Os comprimentos de correlação na direção x e y foram identificados por ξ_x e ξ_y. A curva em preto representa a interface. Observe a Figura 30.

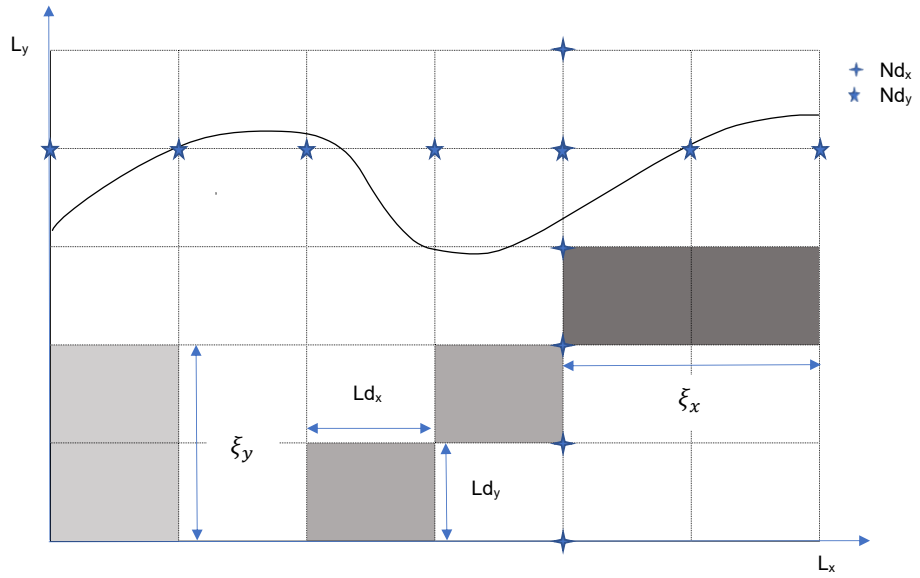


Figura 30 – *Representação esquemática da modelagem elaborada para o estudo do processo de transição depinning.*

O estudo do comportamento da rugosidade foi realizado a partir da variação de alguns parâmetros isoladamente. Para cada medida, repetimos a simulação 3 vezes alterando a semente inicial do gerador de números aleatórios. Iniciamos com a variação angular dentro do sistema e em seguida alteramos os comprimentos de correlação nas direções x e y,

finalizando com a modificação do tamanho do plano (x, y). Definimos também o valor da velocidade pequeno o suficiente para não influenciar significativamente os resultados.

Capítulo 5

Análise da propagação de interfaces

Em capítulos anteriores foram apresentados os autômatos celulares com suas principais características e foi possível observar que, na maioria das vezes, esses modelos computacionais, mesmo utilizando regras simples e locais, são capazes de descrever matematicamente sistemas complexos, capturando comportamentos universais.

Nesta tese, nós inicialmente exploramos o potencial dos autômatos como ferramenta matemática para modelagem de estruturas complexas, como interfaces rugosas. Sendo assim, a versatilidade dos CAs foi utilizada na construção de um modelo de autômato celular probabilístico capaz de reproduzir a evolução dessas estruturas. As superfícies de crescimento foram geradas a partir da representação de interfaces do autômato e estudadas por meio do comportamento temporal da rugosidade. A análise dessa grandeza durante o processo de crescimento, levou à identificação de expoentes críticos que, quando agrupados, permitem uma identificação das classes de universalidade. Dessa forma, uma interface que possui um determinado conjunto de expoentes pode ser associada a uma classe de universalidade e descrita por uma equação de crescimento, uma vez que cada classe tem uma equação geral que descreve o processo de crescimento dos modelos associado a ela.

As equações de crescimento, citadas neste trabalho, possuem diferentes ruídos que refletem uma aleatoriedade durante o crescimento. Esses ruídos são chamados de branco, quando não apresentam correlação temporal e espacial, ou congelado, se dependem apenas da posição da interface.

Nesse capítulo, exibiremos mais resultados do estudo de propagação de interfaces usando-se a análise comportamental da rugosidade. Iniciaremos com a classificação das estruturas geradas pelo crescimento das superfícies por intermédio do mapeamento das classes de universalidade. Posteriormente, faremos uma análise das interfaces, durante sua propagação no processo de transição *depinning*.

5.1 Mapeamento das classes de universalidades

Nessa seção serão apresentados o método utilizado a partir do modelo de PCA apresentado na seção 2.5 e os resultados para o mapeamento das classes de universalidade.

A atualização do sistema é baseada em regras de transição probabilísticas, que são construídas a partir do perfil da vizinhança no passo de tempo anterior. Essas regras, que já foram caracterizadas anteriormente, serão parcialmente reproduzidas na Figura 31 para facilitar a observação de algumas peculiaridades interessantes.

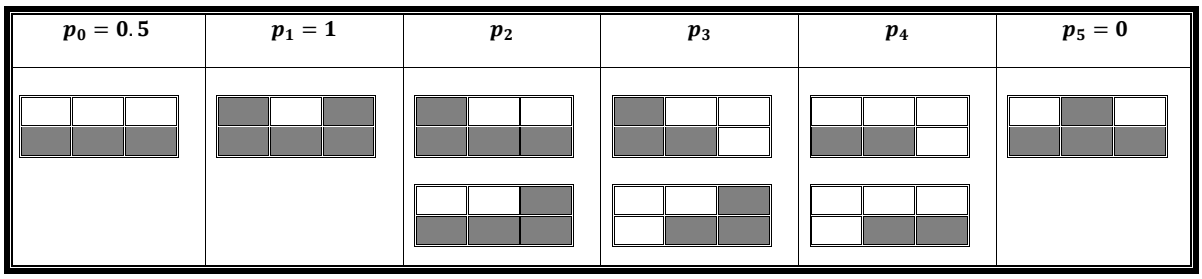


Figura 31 – *Representação dos parâmetros de transição apresentados no capítulo 2. Eles foram construídos considerando-se o perfil de alturas dos primeiros vizinhos no passo de tempo anterior:* $r_i(t) = h_i(t) - h_{i+1}(t)$ *e* $l_i(t) = h_i(t) - h_{i-1}(t)$

Inicialmente, ao percebermos que p_2 e p_4 eram perfis antissimétricos, optamos por um corte bidimensional e criamos um vínculo entre eles $p_4 = 1 - p_2$. Essa estratégia permitiu uma análise mais simplificada do diagrama de fases. Outra característica importante está presente em p_0. Se $r_i = l_i = 0$ o parâmetro representa um perfil completamente liso, semelhante ao substrato no início da simulação. No começo desse tipo de processo, o sistema não apresenta correlações ou interdependência com a vizinhança, permitindo que a partícula seja depositada aleatoriamente. Tal comportamento pode ser observado na regra $p_0 = 0.5$, pois, na média, espera-se que as partículas sejam depositadas em sítios alternados. Caso r_i e l_i apresentem ambos valores negativos, observamos a formação de um vale. O parâmetro associado a esse tipo de construção é definido por $p_1 = 1$, uma vez que, existe a preferência por deposição em mínimos locais. Essa regra de transição pode ser comparada a um importante modelo de crescimento - DARS, quando uma partícula que é depositada aleatoriamente busca um mínimo local. Caso contrário, quando r_i e l_i apresentam ambos valores positivos, ocorre a formação de um pico que é definido por $p_5 = 0$. Esse tipo de perfil, contrariamente a p_1, é caracterizado pela recusa da deposição de partículas em máximo local. O comportamento apresentado por esse parâmetro assemelha-se àquele exibido pelos modelos discretos DAR/KK.

Esses parâmetros foram utilizados no estudo do crescimento de interfaces rugosas descritos no capítulo 3. Nesse capítulo, foi apresentada, inicialmente, uma análise da geometria das

superfícies rugosas geradas a partir da deposição de partículas, já sem o vínculo p_2 e p_4. Essa deposição gera uma interface que apresenta propriedades morfológicas e expoentes críticos que podem estar associados a diferentes classes de universalidade. A formação das diferentes morfologias ocorre devido às regras de deposição impostas por cada modelo discreto de crescimento. Utilizamos uma representação de interface dos autômatos para analisar o comportamento dessas estruturas.

Além disso, a variação dos parâmetros de controle permitiu a construção de diferentes perfis e a elaboração de diagramas de fases, respectivamente. Sendo assim, a construção desses diagramas foi realizada quebrando-se o vínculo existente entre os parâmetros p_2 e p_4 (RICHELE, 2009), permitindo a análise de um diagrama tridimensional. Os processos foram iniciados com um valor fixo para os parâmetros de controle, p_2, p_3 e p_4, e variação no tamanho do sistema. Em seguida, o tamanho da rede foi fixado e os valores dos parâmetros variados. Em todas as simulações, a rugosidade foi medida em função do tempo com o objetivo de se encontrar os expoentes críticos.

Uma interface unidimensional completamente lisa, com L sítios, foi imposta como condição inicial. À medida que o sistema é atualizado de acordo com regras pré-determinadas, ocorre a formação de superfícies rugosas sobre o substrato cujas representações foram exibidas na subseção 3.2. Os valores da rugosidade foram também medidos ao longo do tempo, a fim de se determinar a sua evolução.

No início do processo, as correlações são pequenas fazendo com que $w(L,t) \sim t^{\frac{1}{2}}$. Isso acontece devido à baixa densidade de sítios ocupados após a atualização. Ou seja, se compararmos o regime de atualização do autômato a um processo de deposição de partículas, podemos entendê-lo da seguinte forma: a partícula recém-chegada ao substrato adere ao sítio vizinho mais próximo e sua altura será igual ou maior que a dos seus vizinhos. Embora o processo de crescimento seja local, a flutuação da altura se espalhará lateralmente, uma vez que a próxima partícula irá seguir o mesmo procedimento. A cada passo de tempo, considerado como a atualização dos L sítios, as correlações começam a aparecer diminuindo a taxa de crescimento de $w \sim t^{\beta_w}$, até o momento em que as correlações atingem o tamanho do sistema e alcancem o valor de $w(L,t) \sim w_{sat}$. A determinação do valor de w_{sat} é feita a partir da inclinação do gráfico $w(L,t) \times t$, que consiste basicamente do método do expoente de crescimento (ATMAN; MOREIRA, 2000).

O tamanho do sistema foi variado entre $L = 50$ e $L = 10000$. Quando fixamos o conjunto de parâmetros e aumentamos o tamanho do sistema, a rugosidade de saturação α e o tempo de *crossover* t_x também aumentam. Uma forma de se retirar a dependência da rugosidade de saturação em relação ao tamanho do sistema é fazer $w(L,t)/w_{sat}(L) \times t$, permitindo que as curvas passe a saturar no mesmo valor. Para garantir esta saturação no mesmo momento t_x, basta impor t/t_x na relação anterior, ou seja, $w(L,t)/w_{sat}(L) \times t/t_x$ (ALVES,

2006). Assim, as curvas de diversos tamanhos irão se colapsar de modo que a rugosidade não dependa do tempo ou tamanho do sistema.

O procedimento descrito anteriormente é denominado análise da escala de Family e Vicsek (FAMILY; VICSEK, 1985) e foi detalhadamente explicado na seção 3.2. Ele relaciona os três expoentes críticos e foi utilizado, nesse trabalho, para estimar o valor de $\beta \rightarrow (\infty)$. Esses expoentes, associados a um determinado processo de crescimento, definem uma classe de universalidade. Dessa forma, para diferentes conjuntos de parâmetros, encontramos um conjunto de expoentes críticos que foram utilizados na construção do diagrama de fases. Em todas as simulações, obtivemos a rugosidade média em função do tempo e medimos os expoentes usando-se um ajuste de lei de potência utilizando o aplicativo RESDIM (MOREIRA, 1994), que calcula a inclinação do gráfico em função da escala de medida. Associamos os valores obtidos às classes de universalidade conhecidas - EW, KPZ, DA, DAD, DP e CDP - e construímos um mapeamento para análises geométricas.

Observando a Figura 32, nota-se que o diagrama de fases possui linhas de transição separando as diferentes UCs existentes. Quando escolhe-se $p_4 \rightarrow 0$, as classes que predominam nos gráficos são aquelas que possuem expoentes de crescimento com valor baixo. Por exemplo, a Figura 32(a) apresenta, em sua maior parte, as classes EW (azul escuro) com $\beta \sim 0.25$ e KPZ (azul claro) com $\beta \sim 0.33$ evidenciando uma predominância do crescimento correlacionado. Também é possível observar a presença da classe DA (verde) com $\beta \sim 0.5$. A Figura 32(b), representada por um plano intermediário ($p_4 = 0.5$), apresenta a classe KPZ em sua maior parte e uma evolução da classe DP (amarelo) com $\beta \sim 0.85$. O terceiro gráfico (Figura 32(c)) mostra uma predominância das classes DP e CDP (laranja) com $\beta \sim 1$.

A Figura 33 é formada pela construção de cinco diagramas para diferentes valores de p_4. Esse tipo de gráfico possibilita uma melhor visualização e análise, uma vez que ele permite perceber a presença ou ausência de certas classes de universalidade, e também observar a transição entre elas. Além disso, é possível notar que os valores do expoente de crescimento estão ligados aos valores assumidos pelo parâmetro p_4, como foi dito anteriormente.

A Figura 33(a) apresenta uma pequena presença da classe EW (azul escuro) e uma predominância da classe KPZ (azul claro) no platô inferior. Temos uma transição entre as classes, representada pela cor ciano, onde não é possível afirmar a presença de uma UC. No platô superior temos a classe DA (verde).

Na Figura 33(b), com o valor de $p_4 = 0.4$, a classe EW já está ausente, mas a classe KPZ continua predominando no platô inferior. A classe de percolação direcionada (amarelo) aparece pela primeira vez, ocupando o platô superior. A classe de universalidade DA aparece somente no platô intermediário.

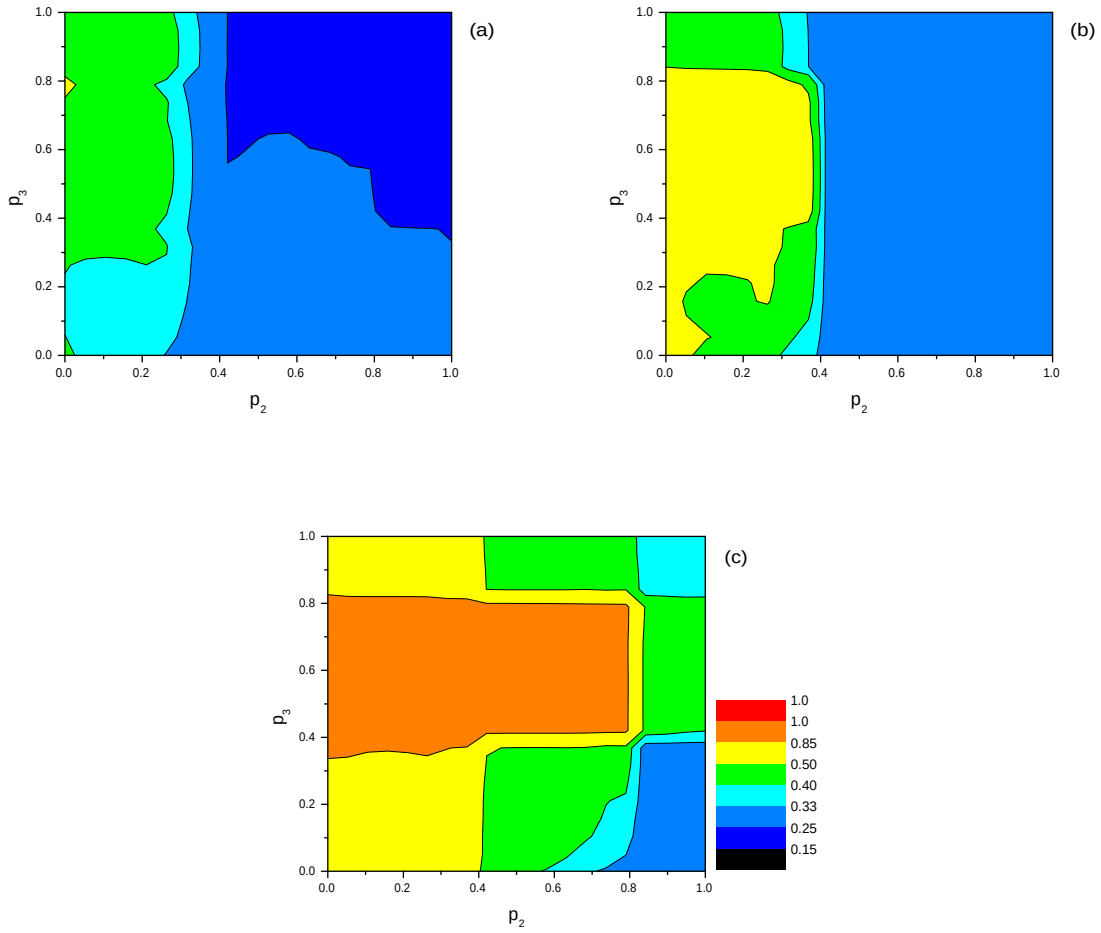


Figura 32 – *Mapeamento das classes de universalidade: o gráfico (a) refere-se ao plano* $p_4 = 0.0$*, o (b) refere-se ao plano* $p_4 = 0.5$ *e o (c) refere-se ao plano* $p_4 = 0.9$*. Construímos os diagramas aproximando os valores de* β_w *já existentes para cada UC.*

Os gráficos das Figuras 33(c) e 33(b) são bastante semelhantes. Porém, na Figura 33(c), a UC percolação direcionada compacta (laranja) começa a surgir no platô superior e a classe DP se expande para o platô intermediário. Devido a essa expansão, não podemos confirmar a presença da classe DA, em verde.

A Figura 33(d) com $p_4 = 0.8$, pode ser considerada a mais completa, uma vez que apresenta a maior parte das UCs estudadas nesse trabalho, ficando ausente apenas a classe EW. O platô inferior ainda identifica-se uma presença forte da classe KPZ. A parte superior é dominada pela UC percolação direcionada compacta. Nos dois platôs intermediários notamos a presença das classes DA e DP.

Na Figura 33(e), observamos uma acentuada elevação do diagrama com os valores de $\beta \to 1$. Como consequência desse comportamento, obtivemos um diagrama com uma

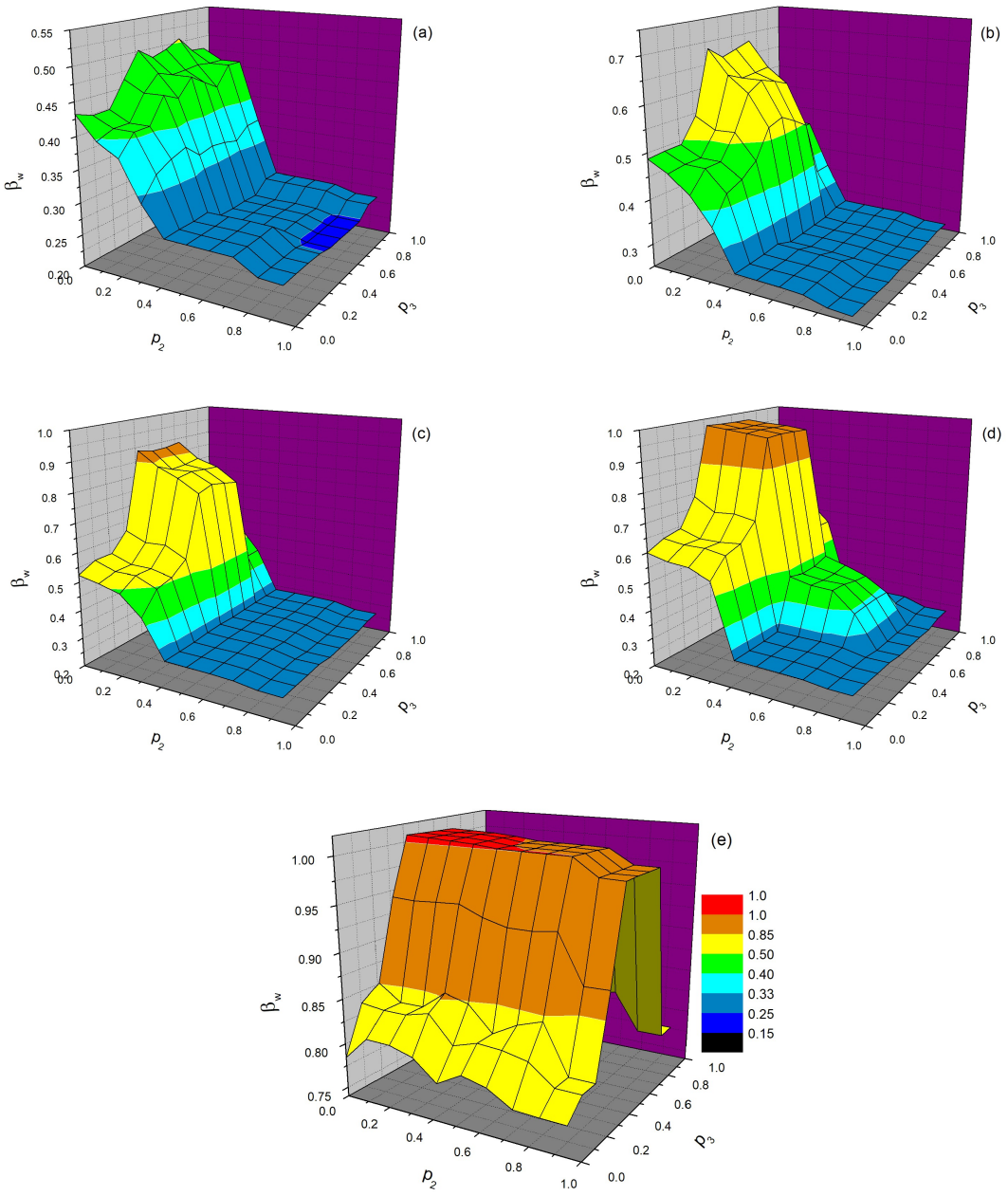


Figura 33 – *Diagrama de fases em 3D: os gráficos acima referem-se aos planos (a)* $p_4 = 0.1$*, (b)* $p_4 = 0.4$*, (c)* $p_4 = 0.7$*, (d)* $p_4 = 0.8$*, (e)* $p_4 = 0.99$*.*

pequena presença de classe DP e rápida transição para a UC percolação direcionada compacta, que aparece no platô superior.

Um diagrama de fases completo pode ser observado na Figura 34. A construção de cada gráfico foi realizada pela sobreposição das camadas representativas dos diferentes níveis de p_4. Essa estruturação permite uma melhor visualização da evolução do sistema em um mesmo nível, bem como entre eles. Além disso, cada nível foi criado a partir de uma matriz de interpolação dos valores encontrados para β_w e a escala de cores, em contraste com as figuras anteriores, não foi definida de acordo com as UCs trabalhadas. Essa nova

construção eliminou as linhas de separação entre as classes possibilitando observar que a transição entre as mesmas não ocorre bruscamente.

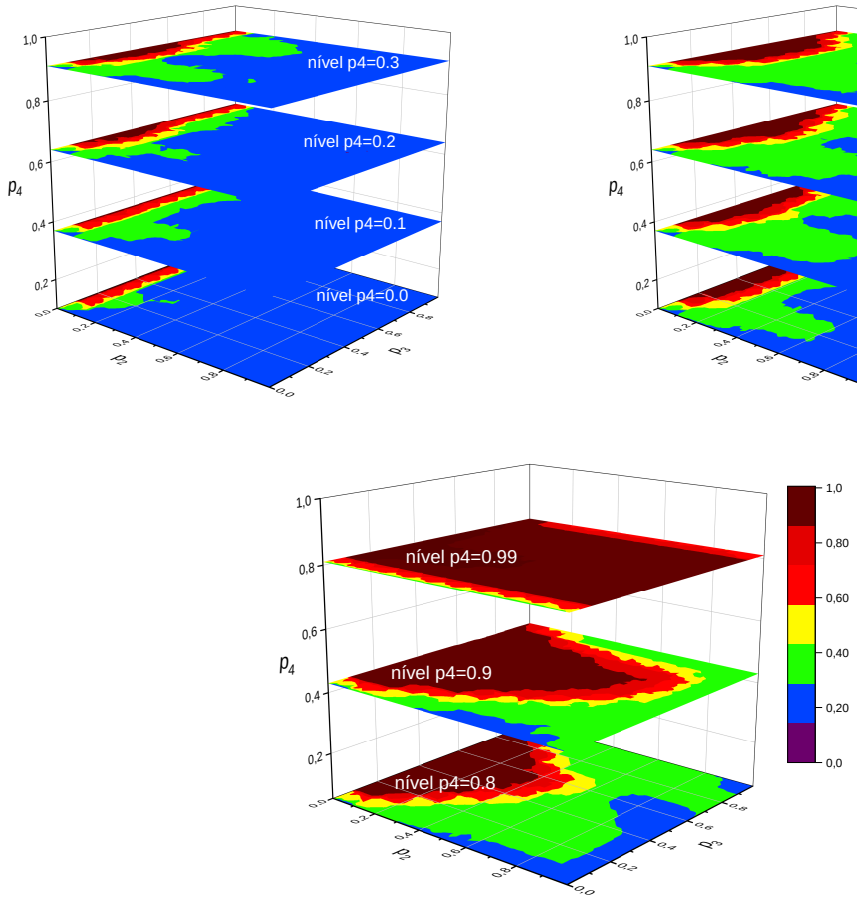


Figura 34 – *Diagrama de fases completo em $3D$ - mapeamento dos valores encontrados para β_w representado em um digrama tridimensional através de camadas.*

Cada camada representa um nível diferente de p_4. O primeiro gráfico da Figura 34 corresponde aos níveis $p_4 = 0.0$, $p_2 = 0.1$, $p_4 = 0.2$ e $p_4 = 0.3$. Em todos os platôs, para valores elevados de p_2 e reduzidos de p_3, observamos uma transição da classe de universalidade KPZ para EW. Externa a essa transição temos um crescimento camada por camada. Para $p_4 \to 0.3$, ocorre uma expansão das cores associadas à classe EW, acompanhada do crescimento camada por camada. Nos quatro níveis é possível observar a presença de outras classes, quando os valores de p_2 e p_4 são próximos de zero. No segundo gráfico, observamos as mesmas características citadas acima, quando consideramos a camada $p_4 = 0.4$. Porém, nos níveis referentes a $p_4 = 0.5$ e $p_4 = 0.6$, percebe-se uma expansão brusca da classe EW e uma pequena evolução das classes associadas aos valores de β_w maiores que 0.7. Considerando os níveis $p_4 = 0.7$ $p_4 = 0.8$ e $p_4 = 0.9$, percebe-se uma diminuição brusca nos valores β_w. No nível $p_4 = 0.99$ temos claramente a presença da classe CDP.

Informações complementares podem ser extraídas dos dados obtidos, quando utilizamos a distribuição de momentos estatísticos para retomar o diagrama de fases. Esses momentos são centrados em algum valor pré-determinado de acordo com cada problema e são importantes para caracterizar a distribuição de probabilidades. Nesse trabalho, escolhemos duas medidas relevantes no estudo de uma distribuição não-normal: *skewness* e curtose. Existem poucos trabalhos que abordaram o problema das distribuições de momentos nos modelos sólido-sobre-sólido (HALPIN-HEALY, 2013; ATMAN; DICKMAN, 2002; HALPIN-HEALY; LIN, 2014). Portanto, os resultados aqui apresentados contribuem para um enriquecimento na compreensão das características estatísticas das flutuações do sistema. Para isso, o plano referente a $p_4 = 0.8$ (Figura 33(d)) foi escolhido por apresentar a maior variedade de classes de universalidade em um mesmo nível.

Em estatística, *skewness* é uma medida usada para descrever a assimetria a partir da distribuição normal. Uma distribuição simétrica, possui valor da grandeza igual a zero. Se a distribuição for assimétrica e possuir um valor de *skewness* negativo, o gráfico irá apresentar uma longa calda para a esquerda, caso contrário, *skewness* é positivo e terá uma longa calda para a direita.

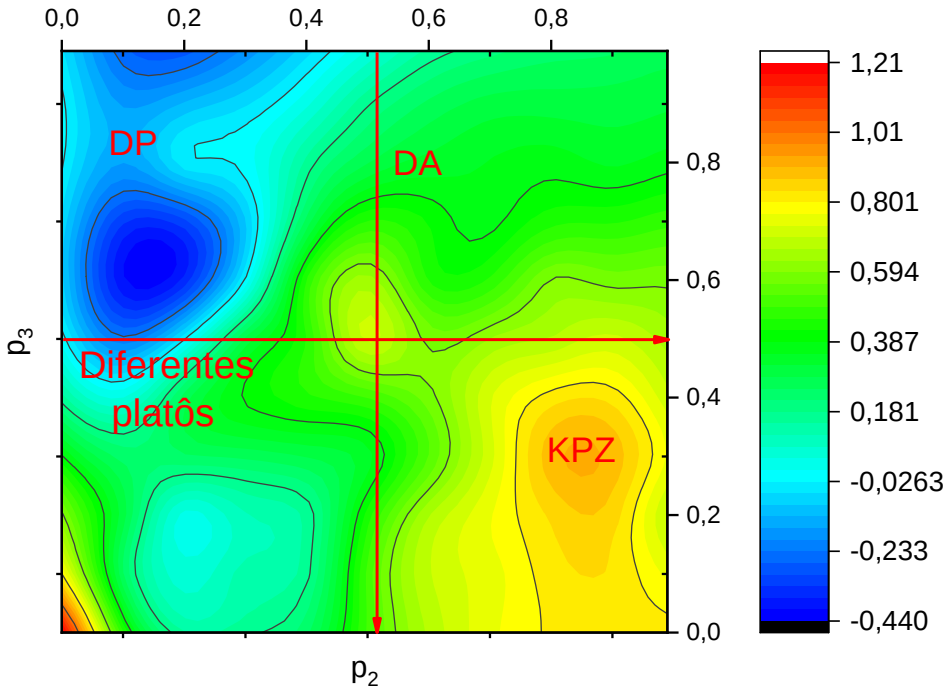


Figura 35 – *Observamos que o diagrama de fases do skewness, referente ao plano* $p_4 = 0.8$*, apresenta uma distribuição assimétrica positiva com algumas transições abruptas.*

Observando a Figura 35 é possível confirmar as mudanças abruptas nos valores dos

expoentes da Figura 33(d). Considere $p_3 = 0.5$ para toda a extensão de p_2, a variação dos *skewness* representa os diferentes platôs apresentados na Figura 33(d). Já o platô superior, que representa a UC percolação direcionada, é claramente indicado pela cor azul quando $p_2 \to 0$. Para p_2 próximo de 0.8 e $p_3 = 0.3$ identificamos o platô inferior que representa a classe de universalidade KPZ. Considerando p_2 entre 0.45 e 0.65 em toda a extensão de p_3 observamos uma pequena oscilação no valor do *skewness* que indica o platô referente a classe de universalidade DA.

Já a curtose quantifica se a forma da disposição dos dados corresponde a uma distribuição normal. Esse tipo de distribuição possui um valor de curtose igual a 3. Para valores menores do que 3, a curva é mais plana; de outro modo, uma curva que apresenta um pico mais acentuado, tem o valor da curtose maior do que 3.

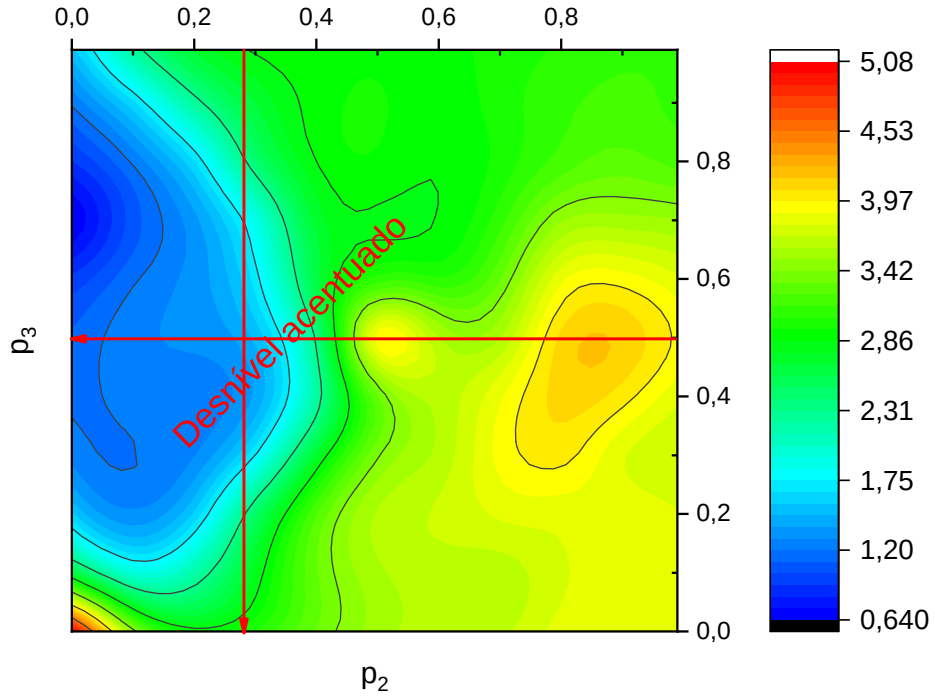


Figura 36 – *No diagrama de fases da curtose, referente ao plano $p_4 = 0.8$, é possível observar que o sistema apresenta transições abruptas com picos de diferentes alturas.*

Novamente é possível confirmar desvios significativos observando-se a Figura 36 em toda a extensão de p_2 quando p_3 é aproximadamente 0.5. Para p_2 entre 0.2 e 0.3, o gráfico mais uma vez comprova a existência de um desnível acentuado no intervalo de p_3 entre 0.4 e 0.6. Todas essas variações podem ser uma indicação de não linearidade nos perfis da região, validando nossas análises a respeito do diagrama de fases, uma vez que, na Figura 33(d), as UCs encontradas estão associadas à modelos discretos não lineares.

5.2 Rugosidade no processo *depinning*

Desde o início desse trabalho, nossas pesquisas estiveram focadas no estudo de interfaces rugosas. As diversas formas de evolução dessas estruturas possibilitaram diferentes análises interessantes durante seu processo de crescimento. Compreender os processos físicos que controlam as morfologias geradas representa um grande desafio, com importantes implicações em diversos fenômenos físicos, como por exemplo, os aspectos cinéticos do crescimento superficial (MEAKIN, 1993). Constatou-se, durante muito tempo, que alguns processos de considerável relevância prática ocorrem em interfaces desordenadas ou próximas a elas e não podem ser adequadamente descritos em termos de formas euclidianas simples. Assim, o surgimento da geometria fractal (MANDELBROT, 1982) ampliou os conhecimentos a respeito dessas estruturas. No entanto, alguns estudos experimentais, apesar de serem referência para a elaboração dos modelos computacionais, ainda se encontram em desvantagem visual por serem incapazes de descrever detalhadamente superfícies irregulares em termos quantitativos.

Com a ampla disseminação dos conceitos de geometria fractal e outros temas da física estatística moderna, aliados à simulação computacional, a compreensão sistemática da formação de interfaces rugosas foi altamente expandida. As simulações, nesse caso, fornecem um meio melhor para testar ideias teóricas. Modelos matemáticos computacionais permitem o controle do sistema com precisão, além de propiciar a exploração de situações que não são fisicamente acessíveis, mas podem ser de considerável interesse teórico.

No capítulo 4, fizemos um breve estudo sobre a propagação de fraturas, expondo alguns dos principais trabalhos desenvolvidos na área. Descrevemos o processo de acoplamento e apresentamos um modelo que descreve essa transição. O protótipo citado foi idealizado inicialmente por um grupo de pesquisadores do PMMH/ESPCI e enriquecido por nós com o objetivo de ampliar a análise do comportamento da interface durante a propagação de uma fratura.

Nessa seção, apresentamos os resultados das simulações realizadas. Para isso, trabalhamos em um modelo que considera a separação de dois sólidos (ver a seção 4.2 – Modo I) sob a ação de uma força externa. A separação dessas estruturas conduz a formação de superfícies irregulares. Na região em que essas estruturas estão se separando, podemos observar a formação de uma linha elástica que se propaga de forma irregular, devido aos diferentes pontos de tensão gerados pelas superfícies de separação. Essa irregularidade permite que a linha citada seja analisada do ponto de vista da propagação de uma interface rugosa.

O processo descrito é caracterizado como uma transição *depinning*, é um fenômeno crítico fora do equilíbrio que envolve uma força externa. Quando a força é fraca, o sistema é

estacionário; porém, quando a força aplicada é maior que um valor crítico, o sistema começa a se mover.

Para tanto, construímos diferentes paisagens de energia, que mostram como elas afetam a propagação da linha elástica. Essas diferentes construções são obtidas com a variação de alguns parâmetros de controle. O efeito dessa heterogeneidade determina a resistência macroscópica efetiva em meios aleatórios.

Observe as construções na Figura 37. Elas foram sistematizadas com o objetivo de facilitar a compreensão da evolução do estudo sobre propagação de fratura.

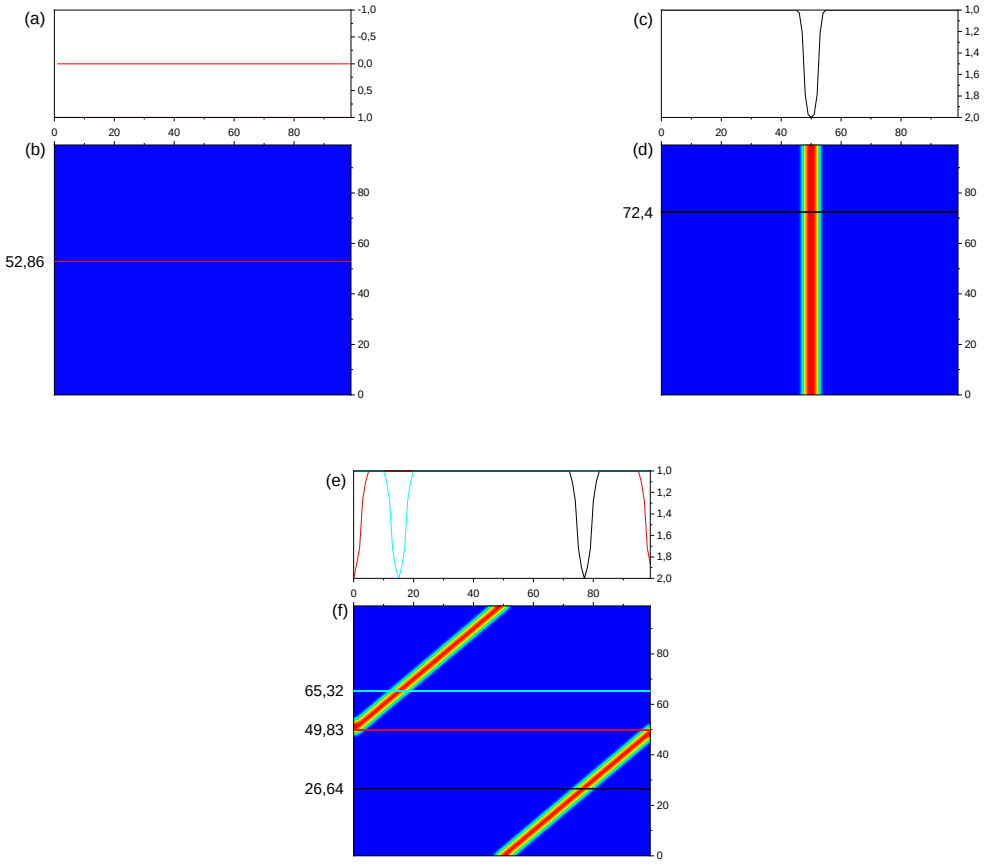


Figura 37 – *A Figura apresenta o comportamento da interface, que se propaga na direção vertical, em três diferentes paisagens determinísticas. Os gráficos* (b), (d) *e* (f) *representam as superfícies onde a interface irá se propagar. Os gráficos* (a), (c) *e* (e) *representam o comportamento da interface durante sua propagação. A faixa do gráfico* (d) *e* (f) *indicam um valor de tensão mais elevado na região.*

Na Figura 37(b), observamos uma paisagem de energia totalmente homogênea, onde todos os pontos apresentam o mesmo valor de tensão superficial. Esse tipo de panorama permite que a interface, representada pela linha vermelha, se propague uniformemente sobre a superfície sem ficar retida em nenhum ponto. O gráfico 37(a) corresponde ao comportamento dessa interface. Na Figura 37(d), inserimos uma coluna com o valor de tensão superficial

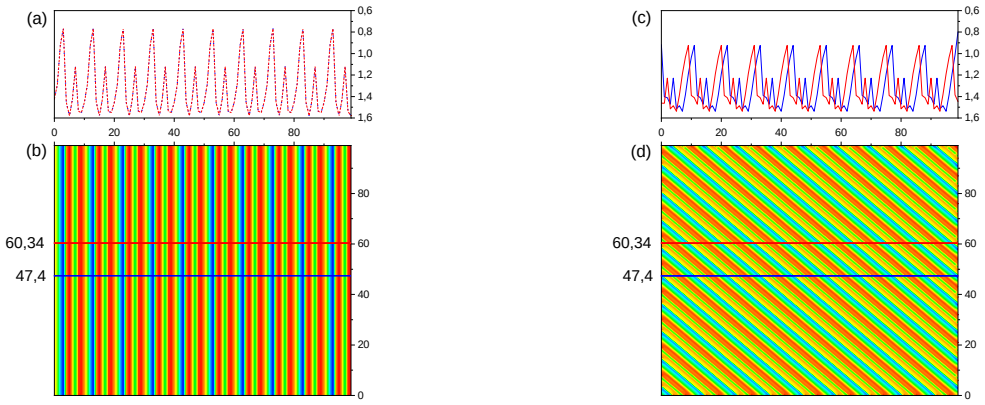


Figura 38 – *Os gráficos acima representam paisagens determinísticas com variação da tenacidade. Em (b), cada coluna representa um valor diferente para a tensão superficial. Essa paisagem faz com que a interface fique retida em alturas diferentes de acordo com a tensão local como pode ser observado em (a). Em (d), impusemos uma inclinação nas colunas do gráfico (b), para salientar mais uma vez que a propagação da interface depende da tensão superficial e o comportamento da propagação da interface sobre essa superfície é representado em (c).*

mais elevado que os demais pontos. Nesse caso, observe que a interface fica retida nessa faixa (gráfico 37(c)), levando a uma propagação mais lenta no local. Comportamento semelhante também pode ser observado na Figura 37(f), quando impusemos uma inclinação na coluna apresentada no gráfico 37(d). Essa alteração faz com que a parte retida da interface realize um movimento oblíquo acompanhando a inclinação da faixa com diferença de potencial. Esse conjunto de gráficos mostra que a velocidade de propagação da interface depende, entre outros parâmetros, do valor da tensão superficial.

A observação acima pode ser melhor verificada na Figura 38. Em (b), dividimos a paisagem de energia em faixas que foram definidas de acordo com o valor da tensão superficial em cada uma delas. Sendo assim, cada coluna apresenta um valor de tenacidade que difere do valor das colunas vizinhas. O procedimento faz com que a propagação da interface ocorra de forma irregular, avançando mais rapidamente sobre aquelas colunas que apresentam menor valor de tenacidade, caracterizando uma menor resistência do meio. Observe o comportamento de propagação da interface no gráfico 38(a). Porém, como cada coluna possui o mesmo valor em toda a sua extensão, a propagação da linha elástica acontece de forma proporcional, ou seja, podemos dizer que, se tivermos interfaces em diferentes posições, elas apresentarão o mesmo comportamento ponto a ponto, como pode ser observado no gráfico 38(a) pontilhado de vermelho e azul.

A Figura 38(d) foi construída a partir da alteração angular das faixas criadas no gráfico (b).

Essa modificação altera o comportamento da interface ao longo de sua propagação. A representação do comportamento dessas linhas está indicada no gráfico 38(c). Considerando-se que as duas interfaces estão em posições diferentes, a representação do comportamento de ambas é semelhante, mas não coincidente como ocorreu na Figura 38(a).

Os gráficos anteriores foram construídos a partir da criação de um sistema de tamanhos $L_x = 100$, que indica seu comprimento na direção perpendicular à propagação da interface, e $L_y = 100$, que aponta sua extensão na direção paralela à propagação. A divisão em faixas foi criada a partir da variação do comprimento de correlação na direção perpendicular à propagação da interface (ξ_x). Outra possibilidade seria variar simultaneamente o comprimento de correlação na direção paralela à propagação (ξ_y). Esse tipo de organização transforma nossa paisagem homogênea em heterogênea. O novo panorama permite uma maior aproximação entre as simulações computacionais e os materiais encontrados na natureza, uma vez que a maioria dessas espécies são heterogêneas.

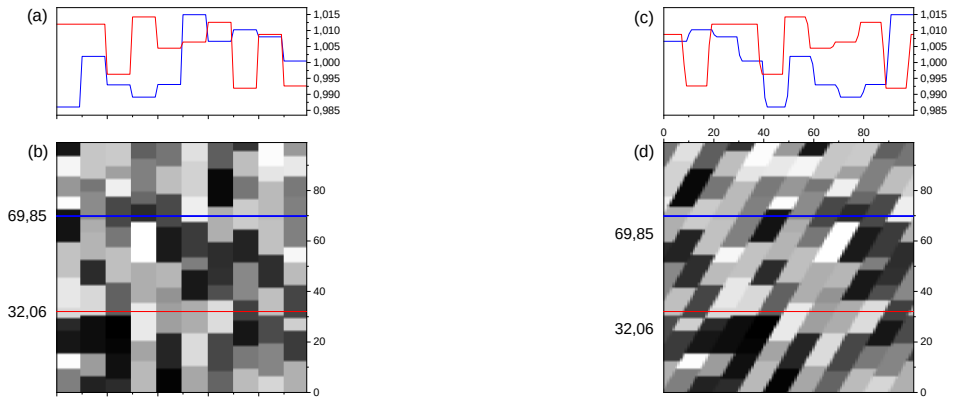


Figura 39 – *(a) e (c) Representação do comportamento da linha elástica durante a propagação nas superfícies heterogêneas (b) e (d), respectivamente. (b) Superfície heterogênea construída a partir da variação dos comprimentos de correlação ξ_x e ξ_y. (d) Paisagem heterogênea gerada a partir da variação angular do gráfico (b).*

Exemplo desse tipo de estrutura pode ser observado na Figura 39. Para a construção do gráfico, realizamos simulações a partir de um campo aleatório considerando $L_x = L_y = 100$ e variamos os comprimentos de correlação ξ_x e ξ_y. Observe a Figura 39(b). Assim como nas construções anteriores, a mudança de cor indica os diferentes valores para a tensão superficial. Nesse novo tipo de construção, as interfaces em diferentes posições não se apresentam mais como curvas sincronizadas, como pode ser observado na Figura 39(a), uma vez que os pontos de retenção possuem dimensões e tenacidade distintas. Essa variação fará com que a curva avance mais rapidamente sobre aqueles pontos que apresentarem tensão superficial baixa e ficará retida naqueles que têm tenacidade elevada,

gerando uma micro instabilidade localizada. A flutuação gerada exibe um comportamento não trivial que não depende exclusivamente da força externa, mas entre outros parâmetros, do valor de tensão superficial.

A evolução desse estudo levou-nos à análise de um comportamento ainda mais curioso e que acreditamos ser inovador. Na Figura 39(d) construímos a mesma paisagem de energia heterogênea e impusemos uma alteração angular de 30° ao sistema. Além disso, as interfaces, representadas pelas linhas azul e vermelha, foram inseridas na mesma altura do gráfico (b). O comportamento dessas linhas, exibido no gráfico (c), é diferente daquele exposto em (a), apesar de apresentarem variações semelhantes entre os pontos de máximo e de mínimo das curvas.

Nesse momento optamos por fazer uma análise mais criteriosa das diferentes interfaces geradas a partir de pequenas modificações da paisagem de energia, ou seja, plano (x, y). Essas alterações foram realizadas variando alguns parâmetros de controle do modelo considerado: angulação do sistema, ξ_x, ξ_y, L_y e L_x. As alterações nos comprimentos do sistema e de correlação foram realizadas separadamente para permitir uma melhor interpretação. Além disso, cada parâmetro citado foi considerado nos dois casos, com e sem alteração angular. As análises foram realizadas a partir do comportamento temporal da rugosidade.

A construção do sistema inicial baseou-se nas seguintes dimensões: $L_x = 256$, $L_y = 1000$, $Ld_x = 0.0625$, $Ld_y = 0.0625$, $\xi_x = 1$ e $\xi_y = 1$. Em todos os casos, variamos a semente inicial do gerador de números aleatórios três vezes e repetimos as simulações para um melhor ajuste dos resultados.

Em um primeiro estudo, analisamos o comportamento da interface mediante a variação angular do sistema. Na Figura 40(a), alteramos apenas a disposição angular dos pontos de tensão, considerando todos os demais parâmetros fixos, e observamos que as curvas são praticamente coincidentes. Existe uma coerência nesse gráfico quando pensamos na rugosidade, que pode ser calculada a partir da altura média da interface, e o comparamos com a Figura 39. Observe que nessa figura o formato das interfaces modifica sem alterar significativamente sua altura média. Na Figura 40(b), além da alteração angular, consideramos o comprimento de correlação $\xi_y = 0.125$ e, mais uma vez, as curvas são praticamente coincidentes, com uma leve queda no valor da rugosidade de saturação (w_{sat}). Esse comportamento deve-se ao fato de que, quando alteramos ξ_y, é como se estivéssemos aumentando a região na direção y que apresenta um mesmo valor de tenacidade, isso faz com que diminua a diferença entre os pontos de máximo e mínimo da interface, levando a uma ligeira queda no valor de w_{sat}. Na Figura 40(c) consideramos $\xi_y = 1$ e $\xi_x = 0.125$. Nesse caso temos uma interface mais suave, que pode ser comparada a uma senoide com seu período aumentado. Quando associamos essa curvatura a uma alteração angular, mais

uma vez a diferença entre os pontos de máximo e de mínimo diminui, levando a uma queda no valor de w_{sat}. Quanto maior o valor do ângulo, menor a diferença entre os pontos, menor será o valor da rugosidade de saturação.

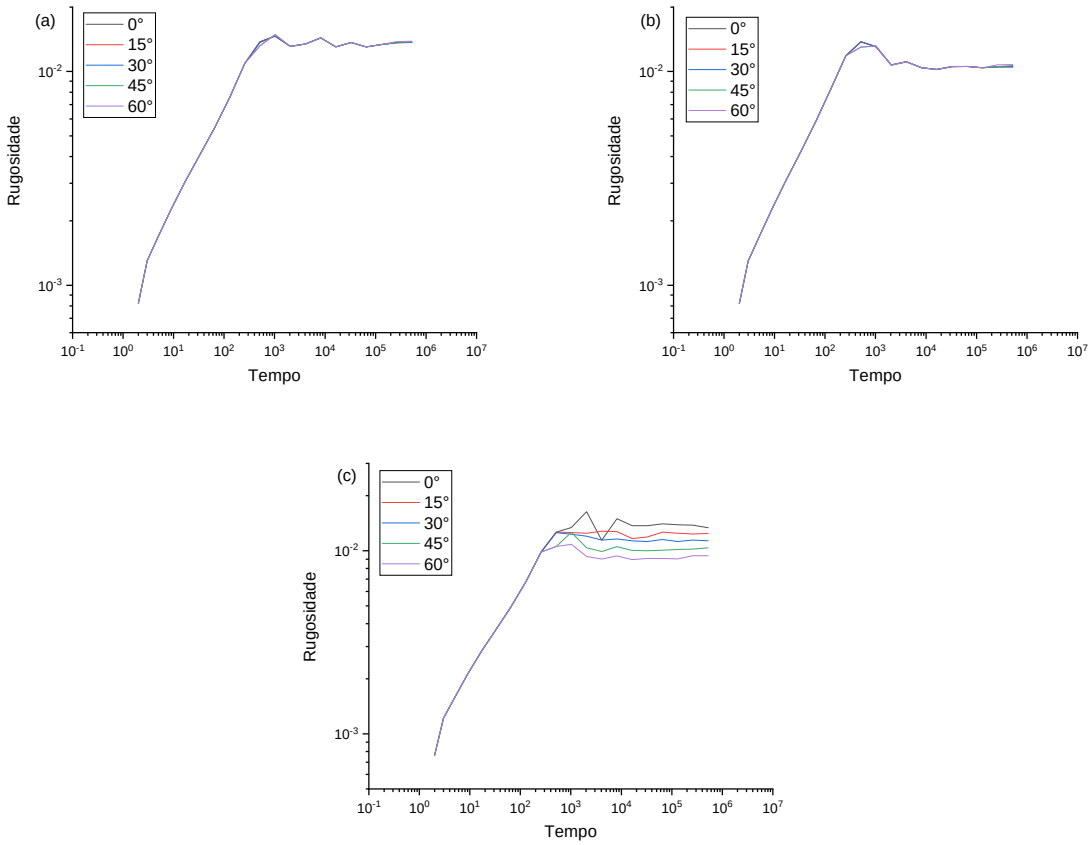


Figura 40 – *Comportamento temporal da rugosidade associado à variação angular. Em (a) a angulação do sistema variou entre* $0°$ *e* $60°$*. Em (b) a variação angular do sistema foi associada à alteração de* $\xi_y = 0.125$*. (c) A variação angular do sistema foi associada a* $\xi_x = 0.125$*.*

Em uma segunda análise, variamos apenas o comprimento de correlação na direção de propagação entre 2^0 e 2^{-4}. Observando a Figura 41, percebemos que, quanto maior o valor de ξ_y, maior o valor da rugosidade de saturação. Isso acontece em função do aumento nas diferenças de altura entre os pontos de máximo e de mínimo da interface, correspondentes ao alongamento dos retângulos na direção y. É necessário lembrar que nesse caso não ocorre uma minimização dessa diferença, devido à não alteração angular do sistema.

Em uma terceira, análise variamos o comprimento de correlação na direção perpendicular à propagação da interface seguindo o mesmo raciocínio anterior, ou seja, os valores de ξ_x estão compreendidos entre 2^0 e 2^{-4}, como pode ser observado na Figura 42. O valor de w_{sat} nesse caso não é alterado consideravelmente em função da variação de ξ_x. A alteração do comprimento de correlação em questão implica no aumento na direção x da região

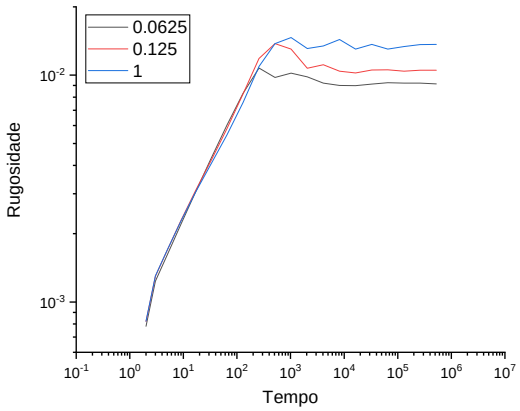


Figura 41 – *Comportamento temporal da rugosidade associado à variação do comprimento de correlação na direção paralela à propagação. O aumento do valor de w_{sat} ocorre em função do aumento de ξ_y.*

que apresenta o mesmo valor para a tenacidade, fazendo com que as curvas fiquem mais suaves sem alterar as ordenadas de seus picos e vales.

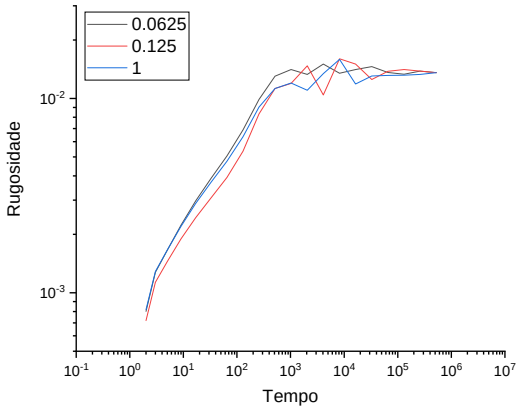


Figura 42 – *Comportamento temporal da rugosidade associado à variação do comprimento de correlação na direção perpendicular à propagação. O aumento do valor de ξ_x não implica em crescimento dos valores encontrados para w_{sat}.*

Em uma próxima análise, Figura 43, variamos entre 500 e 5000 o tamanho do sistema na direção paralela à propagação da interface. Observamos que a rugosidade apresentou um comportamento típico durante sua evolução, sem grandes variações em relação ao valor w_{sat}. Uma variação em L_y significa estender as dimensões do substrato na direção paralela à propagação. Porém, depois que o sistema já entrou no estado estacionário e não houve nenhuma perturbação adicional, ele não modifica seu comportamento.

Nesse momento variamos o tamanho do sistema entre 2^7 e 2^{10}, na direção perpendicular

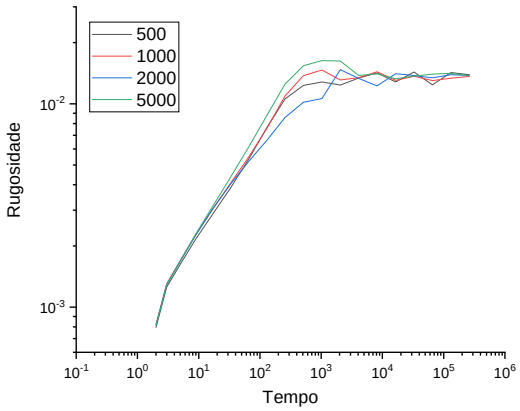


Figura 43 – *Comportamento temporal da rugosidade associado a variação do tamanho do sistema na direção paralela à propagação - a variação do valor de L_y não implica em grandes alterações em w_{sat}.*

à propagação da interface. Observe que a rugosidade apresenta uma dependência em relação a essa variável. À medida que L_x cresce, o tempo de saturação e a rugosidade de saturação também aumentam, como pode ser observado na Figura 44.

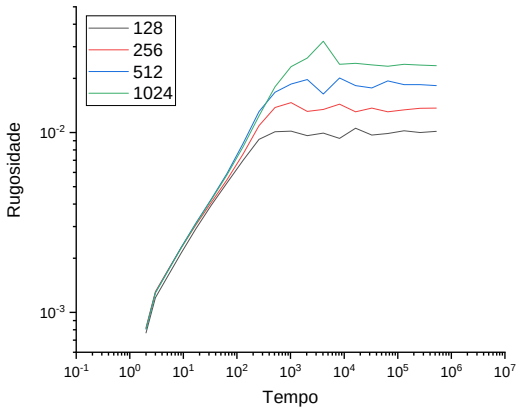


Figura 44 – *Comportamento temporal da rugosidade associado à variação do tamanho do sistema na direção perpendicular à propagação da interface - a variação de L_x implica em alterações no valor da rugosidade e tempo de saturação.*

O crescimento do valor da rugosidade de saturação, como foi falado na seção 3.2 e representado na Figura 44, depende do tamanho do sistema na direção x e seu comportamento é sintetizado usando-se os três expoentes de enrugamento: expoente de rugosidade - α, expoente de crescimento - β e expoente dinâmico - z. A identificação desses expoentes é simples e podem ser sumarizados nos gráficos da Figura 45. O expoente $\alpha = 0.424 \pm 0.01$ foi determinado a partir de um ajuste linear dos valores encontrados para w_{sat} variando L na Figura 44, ou seja, o valor de α é dado pela inclinação de um novo gráfico $w_{sat} \times L_x$;

o valor de $z = 0.580 \pm 0.11$ foi calculado de forma semelhante usando-se a inclinação do gráfico $t_x \times L_x$, onde t_x representa o tempo de saturação, que também foi identificado na Figura 44. E finalmente, o expoente $\beta = 0.51 \pm 0.01$ foi determinado por intermédio do gráfico $\beta_L \times 1/L$

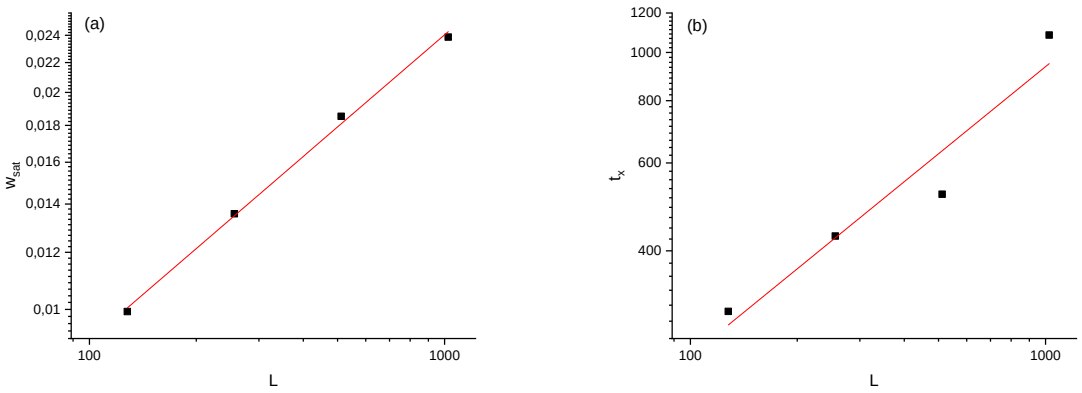


Figura 45 – *(a) O expoente de rugosidade α é determinado a partir da inclinação da reta que ajusta para $w_{sat} \times L_x$ e (b) o expoente dinâmico z é dado pela inclinação da reta que ajusta para $t_x \times L_x$.*

Analisando todos os gráficos acima, percebemos que a alteração dos parâmetros estudados interfere no comportamento temporal da rugosidade. Porém, em uma análise mais minuciosa, observamos que essa variação, muitas vezes, não gera grandes mudanças sobre o valor médio encontrado para w_{sat}. O crescimento do valor da rugosidade de saturação, como foi falado na seção 3.2, depende do tamanho do sistema na direção perpendicular à propagação da interface, como pode ser observado na Figura 44. Além disso, a alteração angular associada a ξ_x também interfere nesse valor, uma vez que, a suavidade gerada pela ampliação dos intervalos, na direção x, é a associada a uma inclinação. Em contraste à variação de ξ_y associada à angulação, nesse caso, a perturbação imposta pela variação de ξ_y é suavizada pela inclinação angular.

O modelo utilizado para a realização dessas análises é bem rico e permite uma ampliação dos estudos relacionados à propagação da interface sob a alteração de diversos parâmetros. Nesse momento, como o trabalho foi realizado em conjunto com o PMMH, as investigações restringiram-se à possíveis modificações no substrato onde a interface iria se propagar. Essa escolha deve-se à limitação relacionada ao tempo disponível para a finalização do mesmo.

Porém, analisando o gráfico gerado a partir da variação de L_x, é impossível não observar uma forte ligação entre essa parte do trabalho e a parte inicial do capítulo. Vimos que a variação do tamanho do sistema na direção x permitia determinar os expoentes críticos α, β e z. A cada conjunto de expoentes encontrado era possível associá-los a uma determinada

classe de universalidade. Dessa forma, observe que, quando utilizamos o modelo para alterar apenas o valor de L_x, estamos criando um sistema que pode também ser reproduzido a partir do nosso modelo de PCA. Assim, encontrando os valores dos expoentes associados a essa variação, podemos identificar o conjunto de parâmetros p_2, p_3 e p_4 que apresentam os mesmos expoentes. Ou seja, encontrar a classe de universalidade *depinning* no nosso modelo de PCA.

Considerando o valor de $\beta = 0.511 \pm 0.01$ encontrado no processo de transição *depinning*, identificamos 3 conjuntos de parâmetros no modelo PCA com valores de β próximos: para $p_2 = 0.2$, $p_3 = 0.2$ e $p_4 = 0.5$ tem-se $\beta = 0.510$; para $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.5$ e $p_4 = 0.8$ tem-se $\beta = 0.511$; para $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.99$ e $p_4 = 0.99$ tem-se $\beta = 0.513$. Dentre eles, apenas o conjunto $p_2 = 0.2$, $p_3 = 0.2$ e $p_4 = 0.5$ apresentou uma superfície saturada. A representação de interface desse autômato foi exibida na Figura 46 e comparada com a representação gerada no processo *depinning*. Um mapeamento mais minucioso para a identificação da classe de universalidade *depinning* exige novas simulações utilizando parâmetros no PCA próximos àqueles já identificados. Porém, como esse não era o foco inicial do trabalho não tivemos tempo hábil para a realização do mesmo.

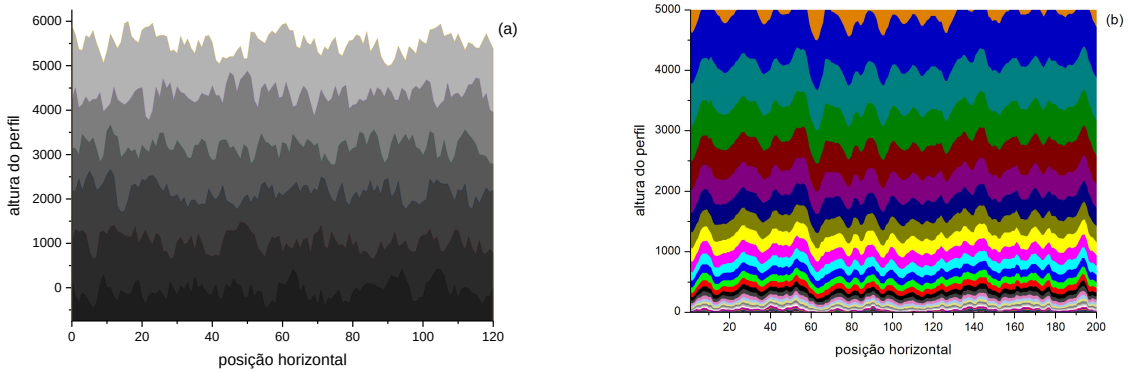


Figura 46 – *(a) Representação de interfaces no processo depinning. (b) Representação de interfaces do PCA construído usando-se os parâmetros $p_2 = 0.2$, $p_3 = 0.2$ e $p_4 = 0.5$ que apresenta o valor do expoente de crescimento β próximo ao valor encontrado no processo depinning.*

Diante desses resultados exibimos, mais uma vez, a versatilidade do nosso modelo de PCA, mostrando que ele é capaz de reproduzir diversos sistemas e deixamos a ideia do mapeamento como proposta de um trabalho futuro.

Capítulo 6

Perspectivas de trabalhos futuros

Acreditamos que o presente trabalho contribuiu para ampliar os conhecimentos em propagação de interfaces por meio da análise de superfícies rugosas. Esse estudo foi dividido em duas partes: inicialmente criamos um modelo de autômato celular probabilístico para generalizar os modelos crescimento do tipo sólido-sobre-sólido e associá-los às diferentes classes de universalidade. Em seguida, geramos uma paisagem de energia aleatória e estudamos o comportamento da propagação da linha elástica após a variação de alguns componentes do sistema.

Como perspectivas de trabalhos futuros relacionados aos estudos aqui realizados, propõe-se inicialmente a realização de um estudo mais verossímil do crescimento de interfaces rugosas, considerando um autômato celular probabilístico em $(2 + 1)$ dimensões.

Para a elaboração deste novo modelo, é necessário definir o substrato para um autômato celular probabilístico com condições periódicas de contorno. A partir desse substrato, a interface será representada por um vetor de altura $h(i; t)$ que será atualizado pelo estado do CA a cada passo de tempo, gerando um perfil rugoso.

O modelo é elaborado a partir de uma matriz 3×3 nas quais as probabilidades de transição serão definidas para cada sítio de acordo com o número de ligações existentes entre o sítio central, onde a partícula será depositada, e seus primeiros vizinhos no passo de tempo anterior. A partir desse modelo, será possível observar a existência de diferentes possibilidades de investigação:

- A análise do número de ligações considerando a vizinhança de Moore;
- A análise do número de ligações considerando a vizinhança de von Neumann;
- A análise do número de ligações considerando a existência de um paraboloide que pode ser construído a partir do espaço gerado pela vizinhança, a determinação de sua concavidade ou a existência de uma superfície lisa.

Porém, devido à grande extensão de cada tópico, fez-se necessário a escolha por apenas um deles. Considerando a vizinhança de Neumann, citada na sessão 2.1, o número de ligações é usado para construir os parâmetros de simulação, de modo a suavizar o perfil gerado. Três desses parâmetros são mantidos fixos – p_0, p_4 e p_5: se o sítio central e os seus primeiros vizinhos estão desocupados, a altura i será incrementada com probabilidade $p_0 = 0.5$; se o sítio central estiver vazio e seus quatro primeiros vizinhos estiverem ocupados, $p_4 = 1$ e a partícula será depositada em um vale passando a ter 4 ligações; se o sítio central estiver ocupado e os seus quatro primeiros vizinhos estiverem vazios, impossibilitando ligações laterais, teríamos $p_5 = 0$, pois não desejamos que uma partícula seja depositada em um pico. As outras possibilidades, p_1, p_2 e p_3 são utilizadas como parâmetros de controle: se o sítio central possibilita a ligação com apenas um vizinho, usamos p_1; se o sítio central possibilita a ligação com dois vizinhos, temos p_2; se o sítio central possibilita a ligação com três vizinhos, usamos p_3. Dependendo dos valores das probabilidades, obtemos morfologias diferentes e expoentes críticos que determinam as várias UCs. Estes parâmetros são resumidos na Figura 47.

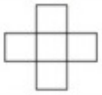
p_i	*Número de ligações*	*Perfil*
$p_0 = 0{,}5$	*Não possui primeiros vizinhos (sem ligações)*	
p_1	*Possui 1 primeiro vizinho (Parâmetro de controle)*	
p_2	*Possui 2 primeiros vizinhos (Parâmetro de controle)*	
p_3	*Possui 3 primeiros vizinhos (Parâmetro de controle)*	
$p_4 = 1$	*Possui 4 primeiros vizinhos (4 ligações)*	
$p_5 = 0$	*Não existem primeiros vizinhos (sem ligações e formação de pico central)*	

Figura 47 – *Considerando a deposição da partícula no sítio central, temos o modelo de PCA, onde as probabilidades de transição dependem do número de ligações existentes entre o sítio central e seus primeiros vizinhos. A partícula será depositada sempre no sítio central*

Nosso principal interesse residirá no comportamento temporal da rugosidade, a partir da qual obteremos os expoentes de enrugamento necessários para o mapeamento das diferentes classes de universalidades.

Outra proposta é baseada nos autômatos celulares de Wolfram. Em (WOLFRAM, 1983) o

autor classifica os CAs determinísticos em periódicos, homogêneos, complexos e caóticos. Uma reclassificação pode ser observada em (SALES; MARTINS; MOREIRA, 1997), onde os autores utilizaram os Expoente de Hurst e de rugosidade para mapear as superfícies geradas. Os resultados encontrados sugeriram que o expoente de Hurst pode, em contraste com a função de correlação entre dois pontos, detectar a existência de correlações de longo alcance nos padrões de evolução gerados por alguns CAs. Esse expoente pode ser útil para melhorar a classificação qualitativa de Wolfram. Além disso, os expoentes de rugosidade distinguem uma subclasse de regras de CA das demais classes. Diante dos trabalhos citados, interessamos pela possibilidade de um reagrupamento dos autômatos celulares determinísticos a partir dos expoentes críticos. Esses expoentes são universais e invariantes sob mudança de escala e podem ser determinados a partir da análise do comportamento temporal da rugosidade. Esse estudo possibilitaria uma reclassificação mais completa dos DCAs.

Quanto à propagação de interfaces em meios aleatórios, inúmeras análises podem ser realizadas utilizando o modelo já desenvolvido até o momento. É possível investigar a propagação da linha elástica antes de entrar no estado de equilíbrio. Além disso, o protótipo permite também a alteração de diversos parâmetros que influenciam nessa propagação, possibilitando ampliar os conhecimentos sobre o assunto. Como exemplo, podemos citar a variação da velocidade, uma vez que nessa tese, consideramos o valor da grandeza pequeno o suficiente para não influenciar nos resultados. Mais um parâmetro a ser considerado é a força externa. Até que ponto a alteração dessa força pode modificar os níveis de deformação da interface? Outra possibilidade seria uma modificação na superfície de propagação. Na seção 4.7, vimos que a distribuição dos pontos de *pinning* sobre o pano (x, y) segue uma distribuição uniforme. O que aconteceria com a interface se a distribuição fosse normal ou uma lei de potência?

Capítulo 7

Conclusão

Apresentamos nessa tese um estudo teórico e numérico da propagação de interfaces rugosas, usando-se equações estocásticas contínuas e simulações computacionais. Essas simulações foram realizadas a partir da elaboração de modelos matemáticos capazes de reproduzir a propagação de interfaces sob duas circunstâncias distintas. Em um primeiro momento, utilizamos a representação de interfaces de um autômato celular para criar estruturas análogas aos modelos discretos de crescimento por deposição de partículas. Consideramos um perfil inicialmente liso e usamos seis regras de transição diferentes que dependiam do perfil local de alturas. Dado um conjunto de parâmetros, encontramos morfologias distintas e expoentes de escala associados a diferentes classes de universalidade em uma dimensão. Com os dados obtidos, foi possível fazer um mapeamento das principais classes de universalidade encontradas na literatura – EW, KPZ, DA, DP e CDP. Os diagramas construídos permitiram observar como ocorre a transição entre as classes. Em um segundo momento, avaliamos o comportamento temporal da rugosidade das interfaces geradas, a partir da propagação de fraturas. A dinâmica do sistema consistia em aplicar uma força perpendicular ao plano da fenda de modo a separar duas placas. À medida que as partes se separavam, era possível observar a formação de uma linha elástica que se movia sobre o plano (x, y). A fim de analisar a propagação dessa linha, implementamos um modelo matemático computacional capaz de gerar meios aleatórios sobre os quais a interface iria se propagar. Dessa forma, verificamos uma mudança no comportamento de propagação da linha elástica para cada tipo de superfície gerada. Observamos que a movimentação da interface ocorria de forma irregular e ficava retida em pontos de maior tensão. Esse processo é caracterizado como transição *depinning*. Dentre os parâmetros de controle utilizados no modelo para a construção do plano (x, y), um se destaca por tornar o estudo inovador – a angulação. O comportamento temporal da rugosidade apresentou alterações mediante a variação angular e essa variação se mostrou mais acentuada quando associada à variação de algum outro parâmetro. Para finalizar, observamos que a variação de L_x no modelo de propagação de fratura permitia-nos determinar os expoentes críticos α,

β e z, possibilitando a associação desses valores a uma classe de universalidade *depinning*. Identificamos, dentre os conjuntos de parâmetros p_2, p_3 e p_4 associados ao modelo de Autômato Celular Probabilístico, aqueles que apresentavam os mesmos valores para esses expoentes. E obtivemos sucesso ao evidenciar, mais uma vez, que nosso modelo de PCA é capaz de reproduzir qualquer estrutura de crescimento.

Referências

ALAVA, M. J.; NUKALA, P. K. V. V.; ZAPPERI, S. Statistical models of fracture. **Adv. Phys.**, v. 55, p. 349, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 1, 49 e 50.

ALAVA, M. J.; NUKALA, P. K. V. V.; ZAPPERI, S. Size effects in statistical fracture. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 42, n. 21, p. 214012, October 2009. Citado na página 49.

ALMEIDA, R. A. L. et al. Universal fluctuations in the growth of semiconductor thin films. **Phys. Rev. B**, v. 89, n. 045309, 2014. Citado 4 vezes nas páginas 18, 19, 22 e 33.

ALVES, S. G. **Leis de Escala e Crossovers em Modelos de Crescimento**. Tese (Doutorado) — UFMG, 2006. Citado na página 68.

AMAR, J. G.; FAMILY, F. Numerical solution of a continuun equation for interface growth in 2+1 dimensions. **Phys. Rev. Lett.**, v. 41, p. 3399, 1990. Citado na página 2.

AMAR, J. G.; FAMILY, F. Deterministic and stochastic growth with generalized nonlinearity. **Phys. Rev. E**, v. 47, p. 1595, 1993. Citado na página 2.

AMARAL, L. A. N. et al. Avalanches and the directed percolation depinning model: Experiments, simulations and theory. **Phys. Rev. E**, v. 51, p. 4655, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 61.

AMARAL, L. A. N. et al. Scaling properties of driven interfaces in disordered media. **Phys. Rev. E**, v. 52, n. 4, p. 4087, 1995. Citado na página 4.

AMARAL, L. A. N.; BARABASI, A. L.; STANLEY, H. E. Universality classes for interface growth with quenched disorder. **Phys. Rev. Lett.**, v. 73, p. 62 – 65, 1994. Citado na página 59.

AMARAL, L. A. N. et al. New exponent characterizing the effect of evaporation on imbibition experiments. **Phys. Rev. Lett.**, v. 72, p. 641, January 1994. Citado na página 58.

ANDERSON, T. L. **Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications**. Third ed. [S.l.]: CRC Press, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 45, 46, 48 e 62.

ATMAN, A. P. F. **Crescimento de Interfaces em Meio Poroso**. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — UFMG, 1998. Citado na página 1.

ATMAN, A. P. F. **Aspectos Fractais em Sistemas Complexos**. Tese (Doutorado) — UFMG, 2002. Citado 5 vezes nas páginas 9, 10, 15, 17 e 44.

ATMAN, A. P. F.; DICKMAN, R. Quasistationary distributions for the Domany-Kinzel stochastic cellular automaton. **Phys. Rev. E**, v. 66, p. 046135, 2002. Citado na página 72.

ATMAN, A. P. F.; MOREIRA, J. G. Growth exponent in the Domany-Kinzel cellular automaton. **The European Physical Journal B**, v. 16, p. 501, 2000. Citado 4 vezes nas páginas 16, 18, 19 e 67.

BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-organized criticality: An explanation of the 1/f noise. **Phys. Rev. Lett.**, v. 59, n. 4, p. 381, July 1987. Citado na página 3.

BAK, P.; TANG, C.; WIESENFELD, K. Self-organized criticality. **Phys. Rev. A**, v. 38, n. 1, p. 364, July 1988. Citado na página 3.

BAKER, R. E.; SIMPSON, M. J. Models of collective cell motion for cell populations with different aspect ratio: Diffusion, proliferation and travelling waves. **Physica A**, v. 391, p. 3729, 2012. Citado na página 7.

BAR-YAM, Y. **Dynamics of Complex Systems**. [S.l.]: Addison-Wesley, 1997. (Studies in Nonlinearity). Citado 2 vezes nas páginas 2 e 6.

BARABASI, A.; STANLEY, H. **Fractal Concepts in Surface Growth**. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995. Citado 17 vezes nas páginas 17, 18, 19, 22, 24, 30, 32, 33, 34, 36, 37, 38, 39, 40, 56, 57 e 60.

BARABASI, A. L. et al. **Imbibition in porous media: Experiment and theory**. [S.l.]: Nova Science, New York, 1992. (Surface disordering: Growth, roughening and phase transitions, 193-204). Citado 4 vezes nas páginas 1, 58, 59 e 60.

BARENBLATT, G. I. On the equilibrium cracks due to brittle fracture. **Dokaldy (in Russian)**, v. 127, p. 47, 1959. Citado na página 50.

BARENBLATT, G. I. The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle materials. **Adv. Appl. Mech.**, v. 7, p. 55, 1962. Citado na página 50.

BARRER, R. M. Fluid flow in porous media. **Discuss. Faraday Soc.**, v. 3, p. 61, 1948. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1039/DF9480300061>. Citado na página 1.

BARTHEL, E.; HAIAT, G. Approximate model for the adhesive contact of viscoelastic spheres. **American Chemical Society**, v. 18, n. 24, p. 9362, 2002. Citado na página 47.

BAUER, E. Phäenomenologische theorie der kristallabscheidung an oberfläechen i. **Z. Krisallogr.**, v. 110, p. 372, 1958. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 22.

BAZANT, Z. P.; CEDOLIN, L. Blunt crack band propagation in finite element analysis. **J. Eng. Mech. Div. ASCE**, v. 105, p. 297, 1979. Citado na página 50.

BAZANT, Z. P.; PLANAS, J. **Fracture and Size Effect in Concrete and Other Quasibrittle Materials**. [S.l.]: Boca Raton, FL: CRC press, 1998. Citado na página 49.

BEAR, J. **Dynamics of Fluids in Porous Media**. [S.l.]: Elsevier Publishing Company, 1988. Citado na página 1.

BERESTYCKI, H.; HAMEL, F. Front propagation in periodic excitable media. **Pure and Applied Mathematics**, v. 55, n. 8, p. 949, August 2002. Citado na página 2.

BERTO, F.; TAGLIABUE, J. Cellular automata. In: ZALTA, E. N. (Ed.). **The Stanford Encyclopedia of Philosophy**. Metaphysics Research Lab, Stanford University, 2017. Disponível em: <https://plato.stanford.edu/archives/spr2017/entries/cellular-automata/>. Citado na página 7.

BLEASE, J. Series expansions for the directed-bond percolation problem. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, v. 10, n. 7, p. 917, 1977. Disponível em: <http://stacks.iop.org/0022-3719/10/i=7/a=003>. Citado na página 43.

BOCCARA, N. **Modeling Complex Systems**. Kluwer Academic Publishers, 2004. Disponível em: <http://books.google.com.br/books?id=dUxnlP7KYQ4C>. Citado na página 18.

BOCQUET, L.; JENSEN, H. J. Phenomenological study of hysteresis in quasistatic friction. **J. Phys. I France**, v. 7, n. 12, p. 1603, December 1997. Citado na página 53.

BOHR, T. et al. **Dynamical Systems approach to Turbulence**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009. Citado na página 57.

BONAMY, D. Intermittency and roughening in the failure of brittle heterogeneous materials. **J. Phys. D: Appl. Phys**, v. 42, p. 214014, 2009. Citado na página 49.

BONAMY, D.; BOUCHAUD, E. Failure of heterogeneous materials: A dynamic phase transition? **Phys. Rep.**, v. 489, p. 1, 2011. Citado na página 49.

BONAMY, D. et al. Scaling exponents for fracture surfaces in homogeneous glass and glassy ceramics. **Phys. Rev. Lett.**, v. 97, p. 135504, 2006. Citado na página 50.

BONAMY, D.; SANTUCCI, S.; PONSON, L. Crackling dynamics in material failure as the signature of a self-organized dynamic phase transition. **Phys. Rev. Lett.**, v. 101, p. 045501, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 62.

BOUCHAUD, E. Scaling properties of cracks. **J. Phys. Condens. Matter**, v. 9, p. 4319, 1997. Citado 3 vezes nas páginas 49, 50 e 52.

BOUCHAUD, E.; LAPASSET, G.; PLANES, J. Fractal dimension of fractured surfaces: A universal value? **EPL (Europhysics Letters)**, v. 13, n. 1, p. 73, 1990. Citado na página 51.

BOUCHAUD, J. P. et al. Models of fractal cracks. **Phys. Rev. Lett.**, v. 71, n. 14, p. 2240, October 1993. Citado na página 51.

BOWER, A.; ORTIZ, M. A three-dimensional analysis of crack trapping and bridging by tough particles. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 39, n. 6, p. 815, 1991. Citado na página 49.

BROADBENT, S. R.; HAMMERSLEY, J. M. Percolation processes. **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v. 53, n. 03, p. 629, July 1957. Disponível em: <http://journals.cambridge.org/abstract_S0305004100032680>. Citado 3 vezes nas páginas 41, 42 e 43.

BROBERG, B. **Crack and Fracture**. [S.l.]: Academic Press, 1999. Citado na página 47.

BULDYREV, S. V. et al. Anomalous interface roughening in porous media: Experiment and model. **Phys. Rev. A**, v. 45, n. 12, p. R8313, June 1992. Citado 5 vezes nas páginas 58, 59, 60, 61 e 62.

BULDYREV, S. V.; HAVLIN, S.; STANLEY, H. Anisotropic percolation and the d-dimensional surface roughening problem. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 200, n. 1 - 4, p. 200, November 1993. Citado 3 vezes nas páginas 58, 59 e 60.

BURRIDGE, R.; KNOPOFF, L. Model and theoretical seismicity. **Bulletin of the Seismological Society of America**, v. 57, n. 3, p. 341, June 1967. Citado na página 53.

CAROLI, C.; NOZIERES, P. Dry friction as a hysteretic elastic response. **The Physics of Sliding Friction of NATO Advanced Study Institute Series B: Physics**, v. 311, p. 27, 1996. Citado na página 51.

CAROLI, C.; NOZIERES, P. Hysteresis and elastic interactions of microasperities in dry friction. **The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems**, v. 4, n. 2, p. 233, July 1998. Citado na página 53.

CARRASCO, I. S. S.; OLIVEIRA, T. J. Universality and dependence on initial conditions in the class of the nonlinear molecular beam epitaxy equation. **Phys. Rev. E**, v. 94, p. 050801(R), 2016. Citado na página 25.

CHAKRABARTI, B. K.; BENGUIGUI, L. G. **Statistical Physics of Fracture and Breakdown in Disordered Systems**. Oxford, NJ: Oxford Science Publications, 1997. Citado na página 50.

CHOPIN, J. **Statique et dynamique d'un front de fissure en milieu hétérogène**. Tese (Doutorado) — Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 45, 46 e 47.

CHUI, S.; WEEKS, J. Dynamics of the roughening transition. **Phys. Rev. Lett.**, v. 40, p. 733, 1978. Citado na página 35.

CIEPLAK, M.; ROBBINS, M. O. Influence of contact angle on quasistatic fluid invasion of porous media. **Phys. Rev. B**, v. 41, p. 11508, June 1990. Citado na página 60.

COTTERELL, B. The past, present and future of fracture mechanics. **Engineering Fracture Mechanics**, v. 69, p. 533, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 50.

CRASSOUS, J.; CHARLAIX, E. Contact angle hysteresis on a heterogeneous surface: Solution in the limit of a weakly distorted contact line. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 28, n. 6, 1994. Citado na página 53.

CSAHOK, Z. et al. Dynamics of surface roughening in disordered media. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 200, n. 1 - 4, p. 136, November 1993. Citado na página 58.

DAGUIER, P. et al. Pinning and depinning of crack fronts in heterogeneous materials. **Phys. Rev. Lett.**, v. 78, n. 6, p. 1062, February 1997. Citado na página 49.

DALMAS, D.; LELARGE, A.; VANDEMBROUCQ, D. Crack propagation through phase-separated glasses: Effect of the characteristic size of disorder. **Phys. Rev. Lett.**, v. 101, p. 255501, December 2008. Citado na página 49.

DANTAS, W. G. **Estudo de propriedades críticas para modelos de rede com estados absorventes**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal Fluminense, Instituto de Física, Abril 2006. Citado 3 vezes nas páginas 41, 42 e 44.

DAUSKARDT, R. H. et al. Adhesion and debonding of multi-layer thin structures. **Eng Fract Mech**, v. 61, p. 141 – 162, 1998. Citado na página 50.

DEMERY, V.; LECOMTE, V.; ROSSO, A. The effect of disorder geometry on the critical force in disordered elastic systems. **Journal of Statistic Mechanics - Theory and Experiment**, v. 2014, n. 3, p. 3009, March 2014. Citado na página 54.

DEMERY, V.; ROSSO, A.; PONSON, L. From microstructural features to effective toughness in disordered brittle solids. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 105, p. 34003, 2014. Citado na página 53.

DEUTSCH, A.; DORMANN, S. **Cellular Automaton Modeling of Biological Pattern Formation**. [S.l.]: Birkhauser Boston, 2005. Citado na página 7.

DISRATTAKIT, P.; CHANPHANA, R.; CHATRAPHORN, P. Roughness distribution of multiple hit and long surface diffusion length noise reduced discrete growth models. **Physica A**, v. 462, p. 619, 2016. Citado na página 25.

DOMANY, E.; KINZEL, W. Equivalence of cellular automata to ising models and directed percolation. **Phys. Rev. Lett.**, v. 53 (4), p. 311, 1984. Citado 3 vezes nas páginas 15, 16 e 17.

DUGDALE, D. S. Yielding of sheets containing slits. **J. Mech. Phys. Solids**, v. 8, p. 100, 1960. Citado na página 50.

DURRETT, R. The importance of being spatial (and discrete) 46:363-394, 1994. **Theoretical Population Biology**, v. 46, p. 363, 1994. Citado na página 7.

EDEN, M. **A two dimensional growth process**. [S.l.]: University of California Press, Berkeley, 1961. 223 p. Citado 3 vezes nas páginas 2, 24 e 39.

EDWARDS, S. F.; WILKINSON, D. R. The surface statistics of a granular aggregate. **Proceedings of The Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, v. 381 (1780), p. 17, 1982. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 35.

ERDOGAN, F. Fracture mechanics. **International Journal of Solids and Structures**, v. 37(1), p. 131, 2000. Citado na página 46.

ERMENTROUT, G. B.; EDELSTEIN-KESHET, L. Cellular automata approaches to biological modeling. **J. Theor. Biol.**, v. 160, n. 160(1), p. 97, Jan 1993. Citado na página 7.

ESSAM, J. W. Directed compact percolation: cluster size and hyperscaling. **Journal of Physics A**, v. 22, p. 4927, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 44.

FAMILY, F. Scaling of rough surfaces: effects of surface diffusion. **Journal of Physics A**, v. 19 (8), p. L441, 1986. Citado 3 vezes nas páginas 24, 32 e 35.

FAMILY, F. Dynamic scaling and phase transitions in interface growth. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 168, n. 1, p. 561, September 1990. Citado na página 2.

FAMILY, F.; VICSEK, T. Scaling of active zone in the eden process on percolation networks and ballistic deposition. **Journal of Physics A**, v. 18, p. L75 – L81, 1985. Citado 3 vezes nas páginas 32, 41 e 68.

FARRELL, F. D. C. et al. Mechanically driven growth of quasi-two-dimensional microbial colonies. **Phys. Rev. Lett.**, v. 111, p. 168101, October 2013. Citado na página 2.

FENG, S.; SEN, P. N. Percolation on elastic networks: New exponent and threshold. **Phys. Rev. Lett.**, v. 52, n. 3, p. 216, Jan 1984. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.52.216>. Citado na página 43.

FEYNMAN, R. P. There's plenty of room at the bottom. **Caltech Engineering and Science**, v. 23, n. 5, p. 22, February 1960. Disponível em: <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>. Citado na página 22.

FIORENTINI, G. A. **Construção de um sistema de epitaxia por feixe molecular**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas, 2008. Citado na página 23.

FLECK, N. A.; HUTCHINSON, J. W. Strain gradient plasticity. **Adv. Appl. Mech.**, v. 33, p. 295, 1997. Citado na página 50.

FLECK, N. A. et al. Strain gradient plasticity: theory and experiment. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 42, n. 2, p. 475, 1994. Citado na página 50.

FLORY, P. J. Thermodynamics of high polymer solutions. **The Journal of Chemical Physics**, v. 9, p. 660, 1941. Citado na página 41.

FRANK, F. C.; MERWE, J. H. van der. One-dimensional dislocations i: Static theory. **Proc. of The Royal Soc. of London. Series A, Math. and Phys. Sci.**, v. 198, p. 205, 1949. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 22.

FREUND, L. B. **Dynamic fracture mechanics**. [S.l.]: Cambridge Univ. Press, 1990. (Cambridge Monographs on Mechanics). Citado na página 49.

GAO, H.; RICE, J. R. A first-order perturbation analysis of crack trapping by arrays of obstacles. **Journal of Applied Mechanics**, v. 56, p. 828, Dec 1989. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 51.

GARDNER, M. Mathematical games: The fantastic combiniations of John Conway's new solitaire game "life". **Scientific American**, v. 223, p. 120, 1970. Citado na página 10.

GENNES, P. G. de. Wetting: statics and dynamics. **Rev. Mod. Phys.**, v. 57, p. 827, July 1985. Citado na página 53.

GLERIA, I.; MATSUSHITA, R.; SILVA, S. Sistemas complexos, criticalidade e leis de potência. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 26, n. 2, p. 99 – 108, 2004. Citado na página 3.

GOLESTANIAN, R.; RAPHAEL, E. Roughening transition in a moving contact line. **Phys. Rev. E**, v. 67, p. 031603, March 2003. Citado na página 53.

GOLINELLI, O.; MALLICK, K. The asymmetric simple exclusion process: An integrable model for non-equilibrium statistical mechanics. **Journal of Physics A**, v. 39, p. 12679, 2006. Citado na página 7.

GRIFFITH, A. A. The phenomenon of rupture and flow in solids. **Phil. Trans. Roy. Soc. London A**, v. 221, p. 98, 1921. Citado 3 vezes nas páginas 45, 48 e 49.

GRIFFITH, A. A. The theory of rupture. **Proc. First Int. Congr. Appl. Mech.**, p. 55, 1924. Citado na página 45.

GUTENBERG, B.; RICHTER, C. F. **Seismicity of the earth and associated phenomena**. [S.l.]: Princeton, NJ: Princeton University Press, 1954. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 50.

HAHN, S. Os papéis da ciência dos materiais e da engenharia para uma sociedade sustentável. **Scielo**, v. 8, n. 20, p. 36, 1994. Citado na página 22.

HALPIN-HEALY, T. (2+1)-dimensional directed polymer in a random medium: Scaling phenomena and universal distributions. **Phys. Rev. Lett.**, v. 109 (17), p. 170602, 2012. Citado na página 19.

HALPIN-HEALY, T. Extremal paths, the stochastic heat equation, and the three-dimensional Kardar-Parisi-Zhang universality class. **Phys. Rev. E**, v. 88(4), p. 042118, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 72.

HALPIN-HEALY, T.; LIN, Y. Universal aspects of curved, flat and stationary-state Kardar-Parisi-Zhang statistics. **Phys. Rev . E**, v. 89(1), p. 010103, 2014. Citado na página 72.

HALPIN-HEALY, T.; PALASANTZAS, G. Universal correlators and distributions as experimental signatures of (2 + 1)-dimensional Kardar-Parisi-Zhang growth. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 105(5), p. 50001, 2014. Citado 4 vezes nas páginas 18, 19, 22 e 33.

HANSEN, A.; HINRICHSEN, E. L.; ROUX, S. Roughness of crack interfaces. **Phys. Rev. Lett.**, v. 66, p. 2476, May 1991. Citado na página 51.

HAVLIN, S. et al. Dynamics of surface roughening with quenched disorder. **Phys. Rev. Lett.**, v. 74, p. 4205, May 1995. Citado na página 61.

HAVLIN, S. et al. **Anomalous interface roughening: Experiment and models**. [S.l.]: Plenum, New York, 1991. (Growth Patterns in Physical Sciences and Biology). Citado na página 61.

HERMAN, M. A.; SITTER, H. **Molecular Beam Epitaxy: Fundamentals and Current Status**. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996. (Springer Series in Materials Science, 2). Citado na página 23.

HERRMANN, H. Geometrical cluster growth models and kinetic gelation. **Physics Reports**, v. 136 (3), p. 153, April 1986. Citado na página 2.

HERRMANN, H. J.; ROUX, S. **Statistical model for the fracture of disordered media**. Amsterdam: North Holland, 1990. Citado na página 50.

HILLERBORG, A.; MODEER, M.; PETERSSON, P. E. Analysis of crack formation in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. **Cement and Concrete Research**, v. 6, p. 773, 1976. Citado na página 50.

HULL, D. **Fractography: Observing, Measuring and Interpreting Fracture Surface Topography**. [S.l.]: Cambridge: Cambridge University Press, 1999. Citado na página 49.

ILACHISNKI, A. **Cellular Automata: A Discrete Universe**. Singapore: World Scientific, 2001. Citado na página 9.

IRWIN, G. R. Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate . **J. Appl. Mech.**, v. 24, p. 361, 1957. Citado na página 47.

IRWIN, G. R. Fracture. **Springer: Encylopedia of physics - elasticity and plasticity**, v. 6, p. 551, 1958. Citado na página 47.

JENSEN, M. H.; PROCACCIA, I. Unusual exponents in interface roughening: The effect of pinning. **J. de Physique II**, v. 1, p. 1139, 1991. Citado na página 58.

JOANNY, J. F.; GENNES, P. G. de. A model for contact angle hysteresis. **The Journal of Chemical Physics**, v. 81, n. 1, p. 552, March 1984. Citado 2 vezes nas páginas 52 e 53.

JULLIEN, R.; BOTET, R. Surface thickness in the eden model. **Phys. Rev. Lett.**, v. 54, p. 2055, May 1985. Citado na página 39.

JULLIEN, R.; BOTET, R. Aggregation and fractal aggregates. **World Scientific**, v. 41, p. 343, 1986. Citado na página 2.

KARDAR, M.; ERTAS, D. (Ed.). **Nonequilibrium dynamics of fluctuating lines**, (Scale Invariance, Interfaces and Non-Equilibrium Dynamics). Newton Institute, Cambridge (UK): NATO Adv. Study Inst, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 55.

KARDAR, M.; PARISI, G.; ZHANG, Y. C. Dynamic scaling of growing interfaces. **Phys. Rev. Lett.**, v. 56 (9), p. 889, 1986. Citado na página 38.

KASAP, S.; CAPPER, P. **Handbook of Eletronic and Photonic Materials**. [S.l.]: Springer, 2006. Citado na página 23.

KERTESZ, J.; HORVATH, V. K.; WEBER, F. Self-affine rupture lines in paper sheets. **Fractals**, v. 1, p. 67, 1993. Citado na página 51.

KESSLER, D. A.; LEVINE, H.; TU, Y. Interface fluctuations in random media. **Phys. Rev. A**, v. 43, p. 4551, April 1991. Citado 3 vezes nas páginas 1, 56 e 58.

KIM, J. M. Phase transition on a modified ballistic deposition model in (2+1) dimensions. **Phys. Rev. Lett.**, v. 68 (8), p. 1248, FEBRUARY 1992. Citado na página 26.

KIM, J. M.; KOSTERLITZ, J. M. Growth in a restricted solid-on-solid model. **Phys. Rev. Lett.**, v. 62 (19), p. 2289, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 40.

KIMY, Y.; YOOK, S. H. Phase transition in restricted solid-on-solid models with finite-distance hoppings. **Journal of Physics A**, v. 30, p. L449, 1997. Citado na página 26.

KINZEL, W. Phase transitions of cellular automata. **Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter**, v. 58, p. 229, 1985. Citado na página 17.

KOILLER, B. et al. **Morphology and dynamics of domain-wall motion in disordered two-dimensional magnets**. [S.l.]: Plenum, New York, 1993. (New Trends in Magnetic Materials and their Applications). Citado 3 vezes nas páginas 58, 59 e 60.

KOTRLA, M. Growth of rough surface. **Czechoslovak Journal of Physics**, v. 42 (5), p. 449, 1992. Citado na página 1.

KOUTSOUMANIS, K. P.; LIANOU, A. Stochasticity in colonial growth dynamics of individual bacterial cells. **Applied and Enviromental Microbiology**, v. 79 (7), p. 2294, January 2013. Citado na página 2.

KRUG, J. Origins of scale invariance in growth processes. **Advances in Physics**, p. 139, 1997. Citado na página 38.

KRUG, J.; MEAKIN, P.; HALPIN-HEALY, T. Amplitude universality for driven interfaces and directed polymers in random media. **Phys. Rev. A**, v. 45, p. 638, January 1992. Citado na página 38.

KRUG, J.; SPOHN, H. Mechanism for rough-to-rough transitions in surface growth. **Phys. Rev. Lett.**, v. 64, p. 2332, May 1990. Citado na página 59.

LANGER, J. S. Instabilities and pattern formation in crystal growth. **Rev. Mod. Phys.**, v. 52 (1), p. 1, January 1980. Citado na página 2.

LAURSON, L.; SANTUCCI, S.; ZAPPERI, S. Avalanches and clusters in planar crack front propagation. **Phys. Rev. E**, v. 81, p. 046116, April 2010. Citado 3 vezes nas páginas 1, 49 e 62.

LAZARUS, V. Perturbation approaches of a planar crack in linear elastic fracture mechanics: A review. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 59, p. 121, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 62.

LEE, P. A.; FUKUYAMA, H. Dynamics of the charge-density wave. ii. long-range coulomb effects in an array of chains. **Phys. Rev. B.**, v. 17, p. 542, January 1978. Citado na página 52.

LEE, Y. et al. A cellular automaton model for the proliferation of migrating contact-inhibited cells. **Biophysical Journal**, v. 69, p. 1284, 1995. Citado na página 7.

LESCHHORN, H. Interface depinning in a disordered medium: Numerical results. **Physica A**, v. 195, p. 324, 1993. Citado 3 vezes nas páginas 58, 59 e 60.

LESCHHORN, H.; TANG, L. H. Avalanches and correlations in driven interface depinning. **Phys. Rev. E**, v. 49, p. 1238, 1994. Citado na página 61.

LIANG, Z. X.; ZHAO, T. S. (Ed.). **Catalysts for Alcohol-Fuelled Direct Oxidation Fuel Cells**. [S.l.]: Royal Society of Chemistry, 2012. Citado na página 1.

MAKSE, H. A. et al. Dynamics of granular stratification. **Phys. Rev. E**, v. 58 (3), p. 3357, Sep 1998. Citado na página 43.

MALOY, K. J. et al. Experimental measurements of the roughness of brittle cracks. **Phys. Rev. Lett.**, v. 68, p. 213, January 1992. Citado na página 51.

MANDELBROT, B. **The Fractal Geometry of Nature**. San Francisco: W. H. Freeman & Co., 1982. Citado 3 vezes nas páginas 2, 3 e 74.

MANDELBROT, B. B.; PASSOJA, D. E.; PAULLAY, A. J. Fractal character of fracture surfaces of metals. **Nature**, v. 308, p. 721, 1984. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 51.

MARTINS, M. L. et al. Evidence for a new phase in the Domany-Kinzel cellular automaton. **Phys. Rev. Lett.**, v. 66, n. 15, p. 2045, 1991. Citado 3 vezes nas páginas 15, 16 e 17.

MARTYS, N.; CIEPLAK, M.; ROBBINS, M. O. Critical phenomena in fluid invasion of porous media. **Phys. Rev. Lett.**, v. 66, p. 1058, 1991. Citado na página 58.

MARTYS, N.; ROBBINS, M. O.; CIEPLAK, M. Scaling relations for interface motion through disordered media: Application to fluid invasion. **Phys. Rev. B**, v. 44, p. 12294, 1991. Citado na página 58.

MATTOS, T.; ATMAN, A.; MOREIRA, J. A new method to study stochastic growth equations: application to the edwards-wilkinson equation. **Brazilian Journal of Physics**, v. 36, p. 746, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 18, 24 e 34.

MATTOS, T.; ATMAN, A.; MOREIRA, J. G. J. A discrete method to study stochastic growth equations: a cellular automata perspective. **Journal of Physics. A, Mathematical and Theoretical**, v. 40, p. 13245, 2007. Citado na página 18.

MATTOS, T. G. **Autômatos Celulares e Crescimento de Interfaces Rugosas**. Dissertação (Mestrado) — UFMG, 2005. Citado na página 35.

MAZUR, P.; OPPENHEIM, I. Molecular theory of Brownian motion. **Physica**, v. 50 (2), p. 241, November 1970. Citado na página 51.

MEAKIN, P. The growth of rough surfaces and interfaces. **Physics Reports**, v. 235 (4), p. 189, December 1993. Citado 5 vezes nas páginas 1, 2, 51, 58 e 74.

MEAKIN, P.; RAMANLAL, P. **Scaling and Growth far from Equilibrium**. Cambridge U.K.: Cambridge University Press, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 18.

MEAKIN, P. et al. Ballistic deposition on surfaces. **Phys. Rev. A.**, v. 34(6), p. 5091, Dec 1986. Citado na página 1.

MEGLIO, J.-M. D. Contact angle hysteresis and interacting surface defects. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 17 (7), p. 607, 1992. Citado na página 53.

MELOTTI, G. **Aplicação de Autômatos Celulares em Sistemas Complexos: Um Estudo de Caso em Espalhamento de Epidemias**. Dissertação (Mestrado) — UFMG, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 11.

MERKH, T.; SPIVEY, R.; LU, T. M. Time invariant surface roughness evolution during atmospheric pressure thin film depositions. **Scientific Reports**, v. 6, 2016. Citado na página 26.

MOOKERJEE, A.; DASGUPTA, I.; SAHA, T. Quantum percolation. **International Journal of Modern Physics B**, v. 9 (23), p. 2989, 1995. Citado na página 43.

MORAES, A. L. S. de. **Um Estudo sobre a Aplicação de Autômatos Celulares na Simulação de Fenômenos Ambientais e Aspectos Dinâmicos**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Católica de Pelotas, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 8.

MOREIRA, J. G. On the fractal dimension of self-affine profiles. **Journal of Physics A**, v. 27 (4), p. 8079, 1994. Citado na página 68.

MOUKARZEL, C.; DUXBURY, P. M. Comparison of rigidity and connectivity percolation in two dimensions. **Phys. Rev. E**, v. 59 (3), p. 2614, Mar 1999. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.59.2614>. Citado na página 43.

MOULINET, S.; GUTHMANN, C.; ROLLEY, E. Roughness and dynamics of a contact line of a viscous fluid on a disordered substrate. **The European Physical Journal E**, v. 8 (4), p. 437, July 2002. Citado na página 53.

MOWER, T. M.; ARGON, A. S. Experimental investigations of crack trapping in brittle heterogeneous solids. **Mechanics of Materials**, v. 19, p. 343, February 1995. Citado na página 49.

NARAYAN, O.; FISHER, D. S. Threshold critical dynamics of driven interfaces in random media. **Phys. Rev. B**, v. 48, p. 7030, September 1993. Citado 3 vezes nas páginas 56, 58 e 60.

NATTERMANN, T. et al. Dynamics of interface depinning in a disordered medium. **J. Phys. II France 2**, v. 2 (8), p. 1483, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 56, 58 e 60.

NEUMANN, J. V. **Theory of self-reproducing automata**. [S.l.]: University of Illinois Press, 1966. 388 p. Citado 3 vezes nas páginas 3, 6 e 18.

NOLLE, C. S. et al. Morphology and dynamics of interfaces in random two-dimensional media. **Phys. Rev. Lett.**, v. 71, p. 2074, 1993. Citado 3 vezes nas páginas 58, 59 e 60.

NOLLE, C. S. et al. Effect of quenched disorder on moving interfaces in two dimensions. **Physica A**, v. 205, p. 342, 1994. Citado na página 58.

OHRING, M. **Materials Science of Thin Films: Deposition and Structure**. [S.l.]: Academic Press, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 22.

OLAMI, Z.; PROCACCIA, I.; ZEITAK, R. Theory of self-organized interface depinning. **Phys. Rev. E**, v. 49, p. 1232, 1994. Citado na página 61.

OLIVEIRA, T. J.; ALVES, S. G.; FERREIRA, S. C. Kardar-parisi-zhang universality class in (2 + 1) dimensions: Universal geometry-dependent distributions and finite-time corrections. **Phys. Rev. E**, v. 87, p. 040102, 2013. Citado na página 26.

OPPENHEIM, I. C. et al. In situ scanning tunneling microscopy of corrosion of silver-gold alloys. **Science**, v. 254, p. 687, 1991. Citado na página 1.

OSHER, S. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. **Journal of Computational Physics**, v. 79 (1), p. 12, November 1988. Citado na página 2.

OURA, J. et al. **Surface Science**. [S.l.]: Springer, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 29.

PANCOTTI, A. **Propriedades Estruturais e Eletronicas de Filmes Ultra Finos de In, Sn e Sb, Crescidos sobre Pd(111), Estudados por PED e XPS**. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas, Agosto 2005. Citado na página 22.

PARISI, G. On surface growth in random media. **EPL (Europhysics Letter)**, v. 17, p. 673, 1992. Citado 5 vezes nas páginas 1, 56, 58, 59 e 60.

PARK, J.-H.; SUDARSHAN, T. (Ed.). **Chemical Vapor Deposition**. [S.l.]: AMS International, 2001. Citado na página 1.

PATINET, S. et al. Finite size effects on crack front pinning at heterogeneous planar interfaces: Experimental, finite elements and perturbation approaches. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 61, p. 311, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 49.

PATINET, S. et al. Propagation des fronts de fissure plane dans les matériaux fragiles hétérogènes de dimensions finies. **AFM, EDP Sciences: Mécanique et Industries**, v. 12, p. 199, 2011. Citado na página 4.

PATINET, S.; VANDEMBROUCQ, D.; ROUX, S. Quantitative prediction of effective toughness at random heterogeneous interfaces. **Phys. Rev. Lett.**, v. 110 (16), p. 165507, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 53.

PEARCE, N.; MERLETTI, F. Complexity, simplicity, and epidemiology. **International Journal of Epidemiology**, v. 35, p. 515, 2006. Citado na página 6.

PEITGEN, H. O.; JURGUENS, H.; SAUPE, D. Chaos and fractals: new frontiers of science. **Springer-Verlag**, 1992. Citado na página 10.

PERRIN, G.; RICE, J. R. Disordering of a dynamic planar crack front in a model elastic medium of randomly variable toughness. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 42 (6), p. 1047, June 1994. Citado na página 51.

PESAVENTO, U. An implementation of von neumann's self-reproducing machine. **Artificial Life**, p. 337–354, 1995. Citado na página 10.

PFEIFER, R. et al. **Artificial Life**. Institut für Informatik der Universität Zürich, 2001. Disponível em: <http://www.ais.uni-bonn.de/SS09/skript_artif_life_pfeifer_unizh.pdf>. Citado na página 8.

PHYSICS, D. of. **Surfaces, Growth and Strain Relaxation**. 2017. Disponível em: <https://www2.warwick.ac.uk/fac/sci/physics/current/postgraduate/regs/mpags/ex5/strainedlayer/surfgrwth/>. Citado na página 29.

PICKOVER, C. A. **The Math Book: From Pythagoras to the 57th Dimension, 250 Milestones in the History of Mathematics**. [S.l.]: Sterling Publishing Co Inc, 2009. Citado na página 10.

PIMPINELLI, A.; VILLAIN, J. **Physics of Crystal Growth**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999. Citado na página 29.

POMEAU, Y.; VANNIMENUS, J. Contact angle on heterogeneous surfaces: Weak heterogeneities. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 104 (2), p. 477, April 1985. Citado na página 53.

RAMANATHAN, S.; ERTAS, D.; FISHER, D. S. Quasistatic crack propagation in heterogeneous media. **Phys. Rev. Lett.**, v. 79, p. 873, August 1997. Citado na página 49.

RAMANATHAN, S.; FISHER, D. S. Dynamics and instabilities of planar tensile cracks in heterogeneous media. **Phys. Rev. Lett.**, v. 79, p. 877, August 1997. Citado na página 49.

RAMANATHAN, S.; FISHER, D. S. Onset of propagation of planar cracks in heterogeneous media. **Phys. Rev. B**, v. 58, p. 6026, September 1998. Citado na página 49.

RAMOS, S. M. M. et al. Wetting on nanorough surfaces. **Phys. Rev. E**, v. 67, p. 031604, March 2003. Citado na página 53.

REINA, A. et al. Large area, few-layer graphene films on arbitrary substrates by chemical vapor deposition. **Nano Letters**, v. 9, p. 30, 2008. Citado na página 1.

RICE, J. R. First-order variation in elastic fields due to variation in location of a planar crack front. **Journal of Applied Mechanics**, v. 52 (3), p. 571, 1985. Citado na página 49.

RICE, J. R.; BEN-ZION, Y.; KLM, K. Three-dimensional perturbation solution for a dynamic planar crack moving unsteadily in a model elastic solid. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 42 (5), p. 813, 1994. Citado na página 51.

RICHELE, M. F. **Autômato Celular com probabilidades de transição dependentes da altura para o estudo do crescimento de superfícies rugosas**. Dissertação (Mestrado) — CEFET-MG, Dezembro 2009. Citado 5 vezes nas páginas 3, 12, 13, 19 e 67.

RICHELE, M. F.; ATMAN, A. P. F. Generalized model for solid-on-solid interface growth. **Phys. Rev. E**, v. 91 (5), p. 052407, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 3, 19, 20 e 25.

ROBBINS, M. O. et al. Growth in systems with quenched disorder. **Growth Patterns in Physical Sciences and Biology - NATO ASI Series**, v. 304, p. 65, 1993. Citado 3 vezes nas páginas 58, 59 e 60.

ROSA, E. da. **Análise da Resistência Mecânica**. [S.l.]: Grante, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 45, 46, 47 e 48.

ROUX, S.; HILD, F. Self-consistent scheme for toughness homogenization. **International Journal of Fracture**, v. 154 (1), p. 159, 2008. Citado na página 53.

ROUX, S.; VANDEMBROUCQ, D.; HILD, F. Effective toughness of heterogeneous brittle materials. **European Journal of Mechanics A - Solids**, v. 22, p. 743, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 52, 53 e 62.

SAHIMI, M. Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing. **Rev. Mod. Phys.**, v. 65 (4), p. 1393, Oct 1993. Citado na página 43.

SAHINI, M. **Applications Of Percolation Theory**. [S.l.]: Taylor & Francis, 1994. Citado na página 41.

SALDANA, R.; TABARES, W.; YU, W. Parallel implementations of cellular automata algorithms on the agila high performance computing system. **Parallel Architectures, Algorithms and Networks. Proceedings: International Symposium on**, p. 110, 2002. Citado na página 11.

SALES, J. A. de; MARTINS, M. L.; MOREIRA, J. G. One-dimensional cellular automata characterization by the roughness exponent. **Physica A**, v. 245, p. 461, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 86.

SANTOS, F. A. S. dos. **Estudo de modelos de conservação de paridade por crescimento de superfícies**. Dissertação (Mestrado) — UFOP, Março 2015. Citado na página 43.

SANTUCCI, S. et al. Statistics of fracture surfaces. **Phys. Rev. E**, v. 75, p. 016104, January 2007. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 49.

SARMA, S. D.; TAMBORENEA, P. A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular-beam epitaxy. **Phys. Rev. Lett.**, v. 66 (3), p. 325, 1991. Citado 5 vezes nas páginas 24, 25, 26, 34 e 40.

SAYAMA, H. **Introduction to the Modeling and Analysis of Complex Systems**. [S.l.]: Open SUNY Texbooks, 2015. Citado na página 15.

SCHMITTBUHL, J. et al. Interfacial crack pinning: Effect of nonlocal interactions. **Phys. Rev. Lett.**, v. 74, p. 1787, March 1995. Citado 5 vezes nas páginas 49, 50, 51, 52 e 55.

SCHULMAN, L. S.; SEIDEN, P. E. Statistical mechanics of a dynamical system based on conway's game of life. **Journal of Statistical Physics**, v. 19 (3), p. 293, 1978. Citado na página 7.

SCHULMAN, L. S.; SEIDEN, P. E. Percolation analysis of stochastic models of galactic evolution. **Journal of Statistical Physics**, v. 27 (1), p. 83, 1982. Citado na página 43.

SIMPSON, M. et al. Simulating invasion with cellular automata: Connecting cell-scale and population-scale properties. **Phys. Rev. E**, v. 76, p. 021918, 2007. Citado na página 7.

SIMPSON, M. J.; LANDMAN, K. A.; HUGHES, B. D. Cell invasion with proliferation mechanisms motivated by time-lapse data. **Physica A**, v. 389, p. 3779, 2010. Citado na página 7.

SNEDDON, I. N. The distribution of stress in the neighbourhood of a crack in an elastic solid." proceedings, , vol. a-187, 1946, pp. 229–260. In: **Royal Society of London**. [S.l.: s.n.], 1946. A, n. 187, p. 229 – 260. Citado na página 47.

SNEPPEN, K. Self-organized pinning and interface growth in a random medium. **Phys. Rev. Lett.**, v. 69, p. 3539, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 58 e 61.

SNEPPEN, K.; JENSEN, M. H. Colored activity in self-organized critical interface dynamics. **Phys. Rev. Lett.**, v. 71, p. 101, 1993. Citado na página 61.

SPRINGEL, V. et al. Simulations of the formation, evolution and clustering of galaxies and quasars. **Nature**, n. 435, p. 629, 2005. Citado na página 18.

STANLEY, H. E. **Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena**. [S.l.]: Oxford Science Publications, 1988. Citado na página 41.

STAUFFER, D.; AHARONY, A. **Introduction to Percolation Theory**. 2. ed. [S.l.]: Taylor & Francis, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 41, 42 e 60.

STEVIKA, T. K. et al. Retention and removal of pathogenic bacteria in wastewater percolating through porous media: a review. **Water Research**, v. 38, p. 1355, 2004. Citado na página 41.

STOCKMAYER, W. H. Theory of molecular size distribution and gel formation in branched-chain polymers. **The Journal of Chemical Physics**, v. 11, p. 45, 1943. Citado na página 41.

STRANSKI, I. N.; KRASTANOV, L. Zur theorie der orientierten ausscheidung von ionenkristallen aufeinander. **Sitzungsber. Akad. Wiss. Wien. Math.-Naturwiss**, v. 146, p. 797, 1938. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 22.

TANG, L. H.; KARDAR, M.; DHAR, D. Driven depinning in anisotropic media. **Phys. Rev. Lett.**, v. 74 (6), p. 920, 1995. Citado na página 60.

TANG, L. H.; LESCHHORN, H. Pinning by directed percolation. **Phys. Rev. A**, v. 45, p. R8309, 1992. Citado 4 vezes nas páginas 41, 58, 59 e 60.

TANGUY, A.; GOUNELLE, M.; ROUX, S. From individual to collective pinning: Effect of long-range elastic interactions. **Phys. Rev. E.**, v. 58 (2), p. 1577, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 52.

TANGUY, A.; VETTOREL, T. From weak to strong pinning i: A finite size study. **Eur. Phys. J. B**, v. 38, p. 71, March 2004. Citado 2 vezes nas páginas 52 e 53.

TERMONIA, Y.; MEAKIN, P. Formation of fractal cracks in a kinetic fracture model. **Nature**, v. 320, p. 429 – 431, April 1986. Citado na página 51.

TIJMS, H. C. **A First Course in Stochastic Models**. [S.l.]: Wiley, 2003. Citado na página 17.

TOME, T.; OLIVEIRA, M. J. de. **Dinâmica estocástica e irreversibilidade**. São Paulo: Edusp, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 44.

VENABLES, J. A. **Introduction to Surface and Thin Film Processes**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 2, 24 e 29.

VICSEK, T. **Fractal Growth Phenomena**. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 1992. 488 p. Citado 3 vezes nas páginas 2, 18 e 58.

VICSEK, T. **Kinetic roughening with multiplicative noise**. [S.l.]: Nova Science, New York, 1992. (Surface Disordering: Growth, Roughening and Phase Transitions, 155 - 162). Citado na página 58.

VILLAIN, J. Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without desorption. **J. Phys. I France**, v. 1 (1), p. 19, 1991. Citado na página 2.

VINCI, L. da. **Codex Atlanticus 1504 Milano**. Pinati, Biblioteca Ambrosiana: [s.n.], 1894. Citado na página 45.

VOLD, M. J. A numerical approach to the problem of sediment volume. **J. COLL. SCI.**, v. 14, p. 168, 1959. Citado 3 vezes nas páginas 2, 24 e 38.

VOLMER, M.; WEBER, A. Keimbildung in übersättigten gebilden. **Z. Phys. Chem**, v. 119, p. 277, 1926. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 22.

WANGEMANN, S. G.; KOHL, R. A.; MOLUMELI, P. A. Infiltration and percolation influenced by antecedent soil water content and air entrapment. **American Society of Agricultural and Biological Engineers**, v. 43 (6), p. 1517, 2000. Citado na página 41.

WEEKS, J. D.; GILMER, G. H. Dynamics of crystal growth. **Adv. Chem. Phys.**, v. 40, p. 157, 1979. Citado na página 2.

WEIBULL, W. **A Statistical Theory of the Strength of Materials**. [S.l.]: Stockholm: Generalstabens Litografiska Anstalts Forlag, 1939. Citado na página 49.

WESTERGAARD, H. M. Bearing pressures and cracks. **Journal of Applied Mechanics**, v. 6, p. 49, 1939. Citado na página 47.

WILLIAMS, M. L. On the stress distribution at the base of a stationary crack. **Journal of Applied Mechanics**, v. 24, p. 109, 1957. Citado na página 47.

WOLF, D. E.; KERTESZ, J. Noise reduction in Eden models i. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 20 (4), p. L257, 1987. Citado na página 40.

WOLF, D. E.; VILLAIN, J. Growth with surface diffusion. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 13(5), p. 389, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 40.

WOLFRAM, S. Cellular automata as simple self-organizing systems. **Publications by Stephen Wolfram**, 1982. Citado na página 15.

WOLFRAM, S. Statistical mechanics of cellular automata. **Rev. Mod. Phys.**, v. 55 (3), p. 601, Jully 1983. Citado 7 vezes nas páginas 6, 7, 11, 12, 13, 14 e 85.

WOLFRAM, S. Universality and complexity in cellular automata. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 10, p. 1, January 1984. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 14.

WOLFRAM, S. Theory and applications of cellular automata. **World Scientific**, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 18.

WOLFRAM, S. **Cellular Automata and Complexity: Collected Paper**. [S.l.]: Addison-Wesley, 1994. Citado na página 6.

WOLFRAM, S. **A new kind of science**. [S.l.]: Wolfram Media, Inc., 2002. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 12.

YAN, H.; KESSLER, D.; SANDER, L. M. Roughening phase transition in surface growth. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, v. 64 (8), p. 926, FEBRUARY 1990. Citado na página 26.

ZARA, R. A. **Novas formas de Percolação**. Tese (Doutorado) — USP, junho 2000. Citado na página 43.

ZEHNDER, A. T. **Fracture Mechanics**. [S.l.]: Springer, 2012. v. 62. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 46.