

Bruno Lucian Gonçalves da Costa

**Estudo de modelos de crescimento de
cristais**

Niterói - RJ, Brasil

10 de janeiro de 2014

Bruno Lucian Gonçalves da Costa

**Estudo de modelos de crescimento de
cristais**

Trabalho de Conclusão de Curso

Monografia apresentada para obtenção do grau de Bacharel em Estatística pela Universidade Federal Fluminense.

Orientador: Prof. Dr. Valentin Sisko

Niterói - RJ, Brasil

10 de janeiro de 2014

Bruno Lucian Gonçalves da Costa

Estudo de modelos de crescimento de cristais

Monografia de Projeto Final de Graduação sob o título “*Estudo de modelos de crescimento de cristais*”, defendida por Bruno Lucian Gonçalves da Costa e aprovada em 10 de janeiro de 2014, na cidade de Niterói, no Estado do Rio de Janeiro, pela banca examinadora constituída pelos professores:

Prof. Dr. Valentin Sisko

Orientador

Departamento de Estatística – UFF

Profa. Dra. Jessica Kubrusly

Departamento de Estatística – UFF

Prof. Dr. Victor Hugo Gouvêa

Departamento de Estatística – UFF

Niterói, 10 de janeiro de 2014

Costa, Bruno Lucian Gonçalves da
Estudo de modelos de crescimento de cristais / Bruno Lucian
Gonçalves da Costa; Valentin Sisko, orientador. Niterói,
2013.

28 f. : il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em
Estatística) - Universidade Federal Fluminense,
Instituto de Matemática e Estatística, Niterói, 2013.

1. Cadeias de Markov em tempo contínuo. 2. Ergodicidade. 3.
Crescimento de cristais. I. Sisko, Valentin, orientador. II.
Universidade Federal Fluminense. Instituto de Matemática e
Estatística. III. Título.

CDD -

Sumário

Lista de Figuras

Resumo

Agradecimentos	p. 7
1 Introdução	p. 8
1.1 Objetivos	p. 8
1.2 Motivação	p. 9
1.3 Estrutura do texto	p. 9
2 Teoria	p. 11
2.1 Caso discreto	p. 11
2.1.1 Modelo de crescimento de cristal em tempo discreto	p. 12
2.2 Caso contínuo	p. 14
2.2.1 Modelo de crescimento de cristal em tempo contínuo	p. 16
2.3 Cadeias de Markov ergódicas	p. 17
2.3.1 Processo de forma para o modelo de crescimento de cristal em tempo contínuo	p. 18
3 Aplicação pratica	p. 20
Caso de item (i) do Teorema 2.2.1.	p. 20
Caso de item (ii) do Teorema 2.2.1.	p. 20
Caso de item (iii) do Teorema 2.2.1.	p. 20

Caso do Teorema 2.3.1.	p. 20
Caso do Teorema 2.3.2.	p. 20
Caso do item (a) Teorema 2.3.3.	p. 23
Caso do item (b) Teorema 2.3.3.	p. 23
Caso do item (c) Teorema 2.3.3.	p. 23
4 Conclusão	p. 26
Referências	p. 27

Lista de Figuras

1	Estado $x \in \mathbb{N}^8$	p. 12
2	Estado $x \in \mathbb{N}^8$ com probabilidades de transição	p. 13
3	Estado $x \in \mathbb{N}^8$ com taxas de transição	p. 17
4	Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 2, \beta_1 = 3, \beta_2 = 1$	p. 21
5	Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 3, \beta_1 = 2, \beta_2 = 1$	p. 21
6	Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 3, \beta_1 = 1, \beta_2 = 2$	p. 22
7	Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 1, \beta_1 = 2, \beta_2 = 3$	p. 22
8	Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 1, \beta_1 = 2, \beta_2 = 1.5$	p. 24
9	Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 1, \beta_1 = 1.5, \beta_2 = 2$	p. 24
10	Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 0.5, \beta_1 = 1, \beta_2 = 0.95$	p. 25
11	Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 0.2, \beta_1 = 25, \beta_2 = 13$	p. 25

Resumo

Os cristais são utilizados em varias áreas do conhecimento, por isso entender e modelar suas características, tais como forma e velocidade de crescimento, são muito importante. Utilizamos cadeias de Markov em tempo contínuo para modelar crescimento de cristais. Para os modelos, estudos sobre forma foram feitos na literatura de jeito teórico. O presente trabalho busca replicar os estudos por método de simulação. Estudos sobre velocidade de crescimento não foram feitos na literatura de jeito teórico. Estudamos por método de simulação esta característica.

Palavras-chaves: cadeias de Markov em tempo contínuo, ergodicidade, crescimento de cristais.

Agradecimentos

Primeiro não poderia deixar de começar estes agradecimentos lembrando da pessoa que mais me incentivou a seguir nessa árdua jornada, então agradeço a minha avó Maria de Lourdes que sempre foi mais que uma avó. Por ser um anjo sempre zelando por mim.

Aos meus pais, Jorge da Costa e Solange Gonçalves, por todo suporte que foi a mim dedicado.

Ao meu tio Carlos Henrique e meu avô Cristalino Siqueira por todos os conselhos.

Aos meus amigos que estiveram comigo nessa caminhada: Bruna, Carol, Cissa Cardoso, Natália Paiva, Larissa, Pablo, Thiago Riba, Victor Santos, Thiago Clark, Natan Borges, Juliana Freitas, Keilane, Viviane, Pedro Vaz, Guilherme Paulista, Everson, Seu Valério e Chimbinha.

Aos Professores que contribuíram para o meu crescimento intelectual. Núbia Karla, Luz Amanda, Ludmilla Viana, Joel Rosa, Victor Gouvêa, Jessica Kubrusly e Ana Maria.

A Danielle Freitas por tudo que representa na minha vida e por ser em muitas vezes meu porto seguro.

A Clarissa Gonçalves por suportar meus momentos e estar ao meu lado.

A Alci Jorge por abrir muitas portas.

Aos meus amigos Fábio e Evandro por tornarem a minha mais prazerosa e sempre aceitarem ou propor ideias de fazer algo novo.

Ao DCE por me fazer gostar da Universidade, por me dar histórias para a vida toda, me fazer conhecer pessoas extraordinárias e enxergar a beleza onde ninguém vê.

Aos meus amigos da Ampla por sua compreensão e me ajudar no processo de amadurecimento, principalmente Andréa Câmara, Jorge Cabral e Leonardo Valente.

Ao meu professor orientador Valentin Sisko por ter aceitado o desafio de me orientar, por fazer o difícil parecer fácil e por me ensinar maneiras de realmente aprender.

A todos vocês meu muito obrigado.

1 Introdução

O que são cristais? Segundo [1], um arranjo de átomos ordenados em uma configuração geométrica específica é considerado cristal. Ou seja, basta imaginar um cubo grande feito a partir de pequenos cubos – como o brinquedo chamado de cubo mágico. A característica de repetição de uma mesma unidade básica (por exemplo, o cubo menor) que é a responsável pelo aparecimento do cristal (o cubo maior).

Esses cristais são encontrados em diversos materiais. Os principais exemplos dos materiais são: Silício, Polietileno, Náilon, Celulose, Proteína, DNA e Borracha.

Utilizamos cadeias de Markov em tempo contínuo para modelar crescimento de cristais. Para os modelos, estudos sobre forma foram feitos na literatura de jeito teórico. Temos duas situações, uma situação é ergódica, isto é, quando todo o cristal cresce com a mesma velocidade, e tem a situação não ergódica, isto é, diferentes partes do cristal crescem com velocidades diferentes. Segundo [2] partes das situações não ergódicas apresentam padrões, um deles é conhecido como “pente”. Para casos ergódicos temos velocidade comum e estudos sobre essa velocidade comum na literatura não foram feitos do jeito teórico.

1.1 Objetivos

O presente trabalho busca replicar os estudos teóricos de [2] por método de simulação. Para isso simularemos cadeias de Markov em tempo contínuo que modelam crescimento de cristais, onde necessitamos primeiro saber simular cadeias de Markov em tempo discreto. Além disso vamos calcular por simulação velocidade comum nos casos ergódicos.

Para facilitar o uso de terceiros ao nosso modelo de simulação vamos desenvolver um programa de interface gráfica com base no software R e utilizando o pacote `tcltk2`.

1.2 Motivação

A utilização dos cristais são as mais diversas, porém no mundo atual, acredito que a mais acessível a toda a população é a utilização do silício que é encontrado em grande parte dos aparelhos eletrônicos.

Segundo [3], o processo de crescimento deste cristal usa como base areia (SiO_2). O método de crescimento foi proposto por Jan Czochralski e começa em aquecer e limpar o composto de areia gerando apenas o Si em fase líquida. Após essa etapa começa a etapa que propriamente envolve o crescimento do cristal, na qual é usado uma semente do cristal de silício para iniciar o crescimento. A semente junto com nova formação é puxada para cima gradualmente. A etapa envolve deixar cristal aquecido e em constante movimento rotacional. A velocidade da rotação e a temperatura escolhidas adequadamente facilitam o crescimento do cristal e tornam ele mais homogêneo, ou seja, com menos impurezas. A taxa de puxar e a temperatura determinam o diâmetro do cristal. O processo de crescimento de cristal é também processo de purificação, logo a formação estará mais limpo que o Si em fase líquida utilizada. Por outro lado a distribuição das impurezas que ainda restam no cristal mudam ao longo de comprimento. Conseguir um cristal com baixa taxa de impureza e homogêneo ao longo do seu comprimento é muito difícil.

A primeira etapa de produção de processadores termina aqui.

Próximas etapas são: corte de excessos, corte de cristal para produzir wafers de silício, polimento dos wafers de silício e a fase principal que é a criação dos cricuitos na base dos wafers. A qualidade dos wafers é de extrema importância nessa fase. E essa qualidade dos wafers é principalmente medida de acordo com a distribuição das impurezas, o que torna importante o processo de crescimento de cristal.

Após a produção dos circuitos, cada wafer de silício é cortado em chips. Cada chip é colocado em suporte adequado para virar processador que está pronto para ser colocado na placa-mãe.

1.3 Estrutura do texto

No Capítulo 2 temos definições e algoritmo de simulação para cadeias de Markov em tempo discreto e contínuo. Além disso, modelos de crescimento de cristais são definidos como cadeias de Markov. Finalmente, é descrito comportamento teórico dessas cadeias de Markov em tempo contínuo, seguindo [2].

No Capítulo 3 ficam resultados de replicação por método de simulação dos estudos de [2]. Usamos modelos com alguns parâmetros particulares que correspondem a várias situações estudadas no [2].

2 Teoria

Segundo [4], um processo estocástico é uma família $(X_t)_{t \in \mathbb{T}}$ de variáveis aleatórias, onde o índice t representa o tempo. Informalmente falando, um processo estocástico descreve uma história que se desenvolve de uma forma aleatória ao longo de um período de tempo representado por \mathbb{T} . O \mathbb{T} pode ser igual ao conjunto de números naturais $\mathbb{N} = \{0, 1, \dots\}$, ao conjunto de números inteiros \mathbb{Z} , ao conjunto de números reais positivos $[0, +\infty)$ ou ao conjunto de números reais \mathbb{R} . Nos dois primeiros casos o processo será dito em tempo discreto e nos dois últimos casos ele será dito em tempo contínuo. Nos casos de processos em tempo discreto há uma preferência pela letra n para indicar o instante de tempo, deixando a letra t para os casos de processos em tempo contínuo. Suponhamos que as variáveis X_n ou X_t assumam valores no conjunto E . Esse conjunto será chamado de espaço de estados.

Abaixo vamos considerar um caso particular de processo estocástico: cadeia de Markov.

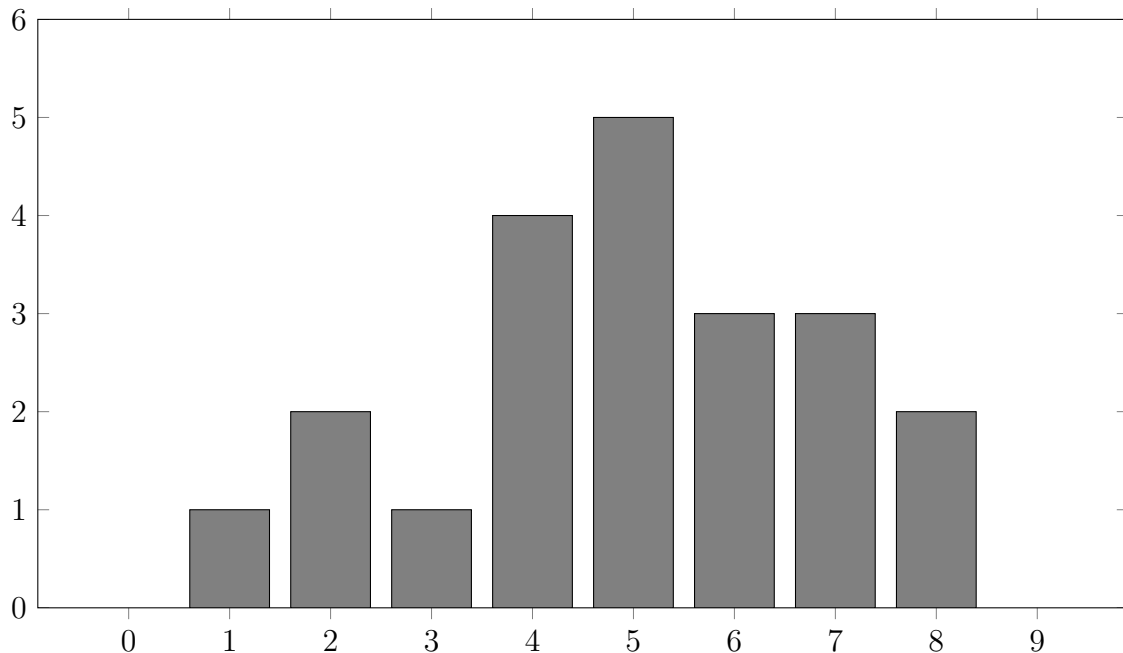
2.1 Caso discreto

As duas seguintes definições podem ser encontradas em [5] e [4] correspondentemente. Além disso em [4] é demonstrado que elas são equivalentes.

Definição 2.1.1. Um processo estocástico $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$, tendo como espaço de estados um conjunto enumerável E , é dito uma cadeia de Markov com matriz de transição $\mathbf{P} = (p_{xy})_{x,y \in E}$ se para todos os estados $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, x, y$ e todos $n \geq 0$, temos

$$P\{X_{n+1} = y | X_n = x, X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_1 = x_1, X_0 = x_0\} = P\{X_{n+1} = y | X_n = x\} = p_{xy}. \quad (2.1)$$

Definição 2.1.2. Um processo estocástico $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$, tendo como espaço de estados um conjunto enumerável E , é dito uma cadeia de Markov com função F se $F : E \times [0, 1] \rightarrow E$

Figura 1: Estado $x \in \mathbb{N}^8$ 

e para todo $n \geq 1$ temos que

$$X_n = F(X_{n-1}, U_n),$$

onde U_1, U_2, \dots é uma sequência de variáveis aleatórias independentes e distribuídas uniformemente no intervalo $[0, 1]$.

2.1.1 Modelo de crescimento de cristal em tempo discreto

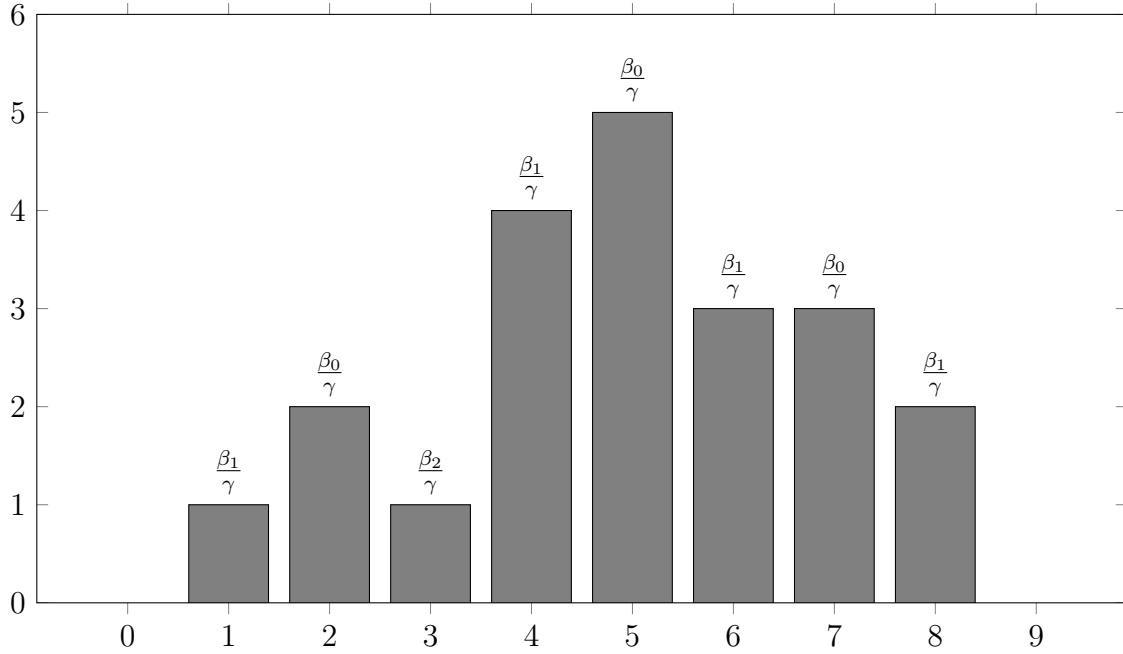
Vamos modelar o crescimento de cristal com n sítios, $n \geq 2$. O jeito como acontece crescimento em cada sítio depende de quantidade de elementos no sítio e nos seus vizinhos mais próximos. O espaço de estados E é \mathbb{N}^n , onde \mathbb{N} é o conjunto de números naturais incluindo 0. Veja um exemplo de estado na Figura 1.

Para descrever a matriz de transição Q e a função F vamos precisar de definições adicionais.

Seja $V_i(x)$ o número de sítios mais próximos do sítio i que tem mais elementos que o sítio i no estado $x \in E$, isto é,

$$V_i(x) = \mathbf{1}_{\{x_{(i-1)} > x_{(i)}\}} + \mathbf{1}_{\{x_{(i+1)} > x_{(i)}\}} \in \{0, 1, 2\},$$

para $x = (x(1), \dots, x(n)) \in \mathbb{N}^n$ e $1 \leq i \leq n$. Além disso, seja $\gamma(x) = \sum_{i=1}^n \beta_{V_i(x)}$. Aqui vamos supor que temos dois “sítios virtuais”: o “vizinho” anterior ao primeiro sítio e o

Figura 2: Estado $x \in \mathbb{N}^8$ com probabilidades de transição

posterior ao ultimo; eles não mudam com tempo e ficam constantes com 0 elementos.

Seja $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2) \in (0, +\infty)^3$.

Para $1 \leq i \leq n$, e_i é um vetor unitário: $e_i(j) = \delta_{ij}$, $j = 1, \dots, n$ e

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$$

Para entender como a matriz de transição Q é definida, veja a Figura 2, onde no cada sítio é marcado a probabilidade com qual ele quer aumentar sua altura por um. Mais precisamente, usando a Definição 2.1.1, consideramos uma cadeia de Markov com espaço de estados \mathbb{N}^n , e matriz de transição Q , tal que

$$Q(x, y) = \begin{cases} \frac{\beta_{V_i(x)}}{\gamma(x)} & \text{se } y = x + e_i, i = 1, \dots, n, \\ 0 & \text{se } y \notin \{x + e_1, \dots, x + e_n\}, \end{cases} \quad (2.2)$$

Usando a Definição 2.1.2, o mesmo objeto é uma cadeia de Markov com espaços de estados \mathbb{N}^n , e uma função

$$F(x, u) = x + e_i \text{ se } u \in \left(\sum_{j=1}^i \frac{\beta_{V_j(x)}}{\gamma(x)}, \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\beta_{V_j(x)}}{\gamma(x)} \right). \quad (2.3)$$

Baseado nesta ultima definição, podemos construir algoritmo de simulação desta cadeia (veja Algoritmos 1, 2, 3).

Algoritmo 1: Simulação da cadeia de Markov em tempo discreto

Dados: $t, \beta_0, \beta_1, \beta_2, n$

Resultado: Estado de cadeia depois de n passos

$x \leftarrow \text{rep}(0, n + 2)$

$\beta \leftarrow c(0, \text{rep}(\beta_0, n), 0)$

para $j \leftarrow 1$ **até** n **faça**

```

  |  $i \leftarrow \text{gerai}(\beta/\text{soma}(\beta))$ 
  |  $x_i \leftarrow x_i + 1$ 
  | se  $i=2$  então
  | |  $ind \leftarrow c(i, i + 1)$ 
  | |  $\beta \leftarrow \text{atualiza}(\beta, ind, x, \beta_0, \beta_1, \beta_2)$ 
  | senão
  | | se  $i=n+1$  então
  | | |  $ind \leftarrow c(i - 1, i)$ 
  | | |  $\beta \leftarrow \text{atualiza}(\beta, ind, x, \beta_0, \beta_1, \beta_2)$ 
  | | senão
  | | |  $ind \leftarrow c(i - 1, i, i + 1)$ 
  | | |  $\beta \leftarrow \text{atualiza}(\beta, ind, x, \beta_0, \beta_1, \beta_2)$ 

```

Retorne x

Algoritmo 2: atualiza

Dados: $\beta, ind, x, \beta_0, \beta_1, \beta_2$

Resultado: β atualizado

para k **em** ind **faça**

```

  | se  $x_{k-1} > x_k$  e  $x_{k+1} > x_k$  então
  | |  $\beta[k] \leftarrow \beta_2$ 
  | senão
  | | se  $x_{k-1} > x_k$  ou  $x_{k+1} > x_k$  então
  | | |  $\beta[k] \leftarrow \beta_1$ 
  | | senão
  | | |  $\beta[k] \leftarrow \beta_0$ 

```

Retorne β

2.2 Caso contínuo

Definição 2.2.1. Um processo estocástico $(X_t)_{t \in [0, +\infty)}$, tendo como espaço de estados um conjunto enumerável E , é dito uma *cadeia de Markov em tempo contínuo* se para todos

Algoritmo 3: gerai**Dados:** p um vetor de probabilidade**Resultado:** Valor de variável aleatória com distribuição p $F \leftarrow 0$ $i \leftarrow 1$ $u \leftarrow \text{Uniforme}(0, 1)$ **enquanto** $u \geq F$ **faça**

$F \leftarrow F + p[i]$
$i \leftarrow i + 1$

Retorne $(i - 1)$

$s, t \in [0, +\infty)$ e para todos estados $x, y, z(u) \in E, 0 \leq u < s$, temos

$$P\{X(t+s) = y | X(s) = x, X(u) = z(u), 0 \leq u < s\} = P\{X(t+s) = y | X(s) = x\}. \quad (2.4)$$

Definição 2.2.2. Um processo estocástico $(X_t)_{t \in [0, +\infty)}$, tendo como espaço de estados um conjunto enumerável E , é dito uma *cadeia de Markov em tempo contínuo* se cada instante do tempo que ele entra em qualquer estado $x \in E$

- i. a quantidade de tempo que ele passa neste estado antes de fazer transição para outro estado tem distribuição exponencial com algum parâmetro que vamos denotar por v_x .
- ii. quando o processo sai do estado x ele entra em estado y com alguma probabilidade que vamos denotar por p_{xy} que claramente satisfaz

$$p_{xx} = 0 \text{ e } \sum_{y \in E} p_{xy} = 1.$$

De acordo com a Seção 6.4 de [5] temos,

$$P_{xy}(t) = P\{X(t+s) = y | X(s) = x\} \quad (2.5)$$

indica que a probabilidade de um processo que está no estado x vai passar para o estado y com tempo t . Essa quantidade é comumente chamada de probabilidade de transição de uma cadeia de markov em tempo contínuo.

Observação 2.2.1. Para qualquer par de estados x e y , seja

$$q_{xy} = v_x p_{xy}$$

Desde que v_x seja uma taxa que marca a transição do estado x e p_{xy} a probabilidade que essa transição é feita para o estado y , isso segue que q_{xy} é a taxa de transição do estado

x para o estado y . As quantidades q_{xy} são chamadas de taxa de transição instantânea. Desde que,

$$v_x = \sum_j v_x p_{xy} = \sum_j q_{xy} \quad (2.6)$$

e

$$p_{xy} = \frac{q_{xy}}{v_x} = \frac{q_{xy}}{\sum_j q_{xy}} \quad (2.7)$$

O Lema 6.2 de [5] nos diz que

a)

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1 - P_{xx}(h)}{h} = v_x$$

b)

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1 - P_{xy}(h)}{h} = q_{xy} \quad \text{quando } x \neq y$$

2.2.1 Modelo de crescimento de cristal em tempo contínuo

Usando a Definição 2.2.2 junto com a Observação 2.2.1, definimos X_t^n como uma cadeia de Markov em tempo contínuo com espaço de estados \mathbb{N}^n , e taxa de transição instantânea

$$q_{xy} = \begin{cases} \beta_{V_i}(x) & \text{se } y = x + e_i, i = 1, \dots, n, \\ 0 & \text{se } y \notin \{x + e_1, \dots, x + e_n\}, \end{cases} \quad (2.8)$$

Veja um exemplo de configuração junto com as taxas na Figura 3. Note que a cadeia de Markov em tempo discreto que corresponde a esta cadeia de Markov em tempo contínuo é aquela definida na Seção 2.1.1. Logo, o jeito de simular X_t^n é usando uma variação do Algoritmo 1 (veja Algoritmos 4, 2, 3).

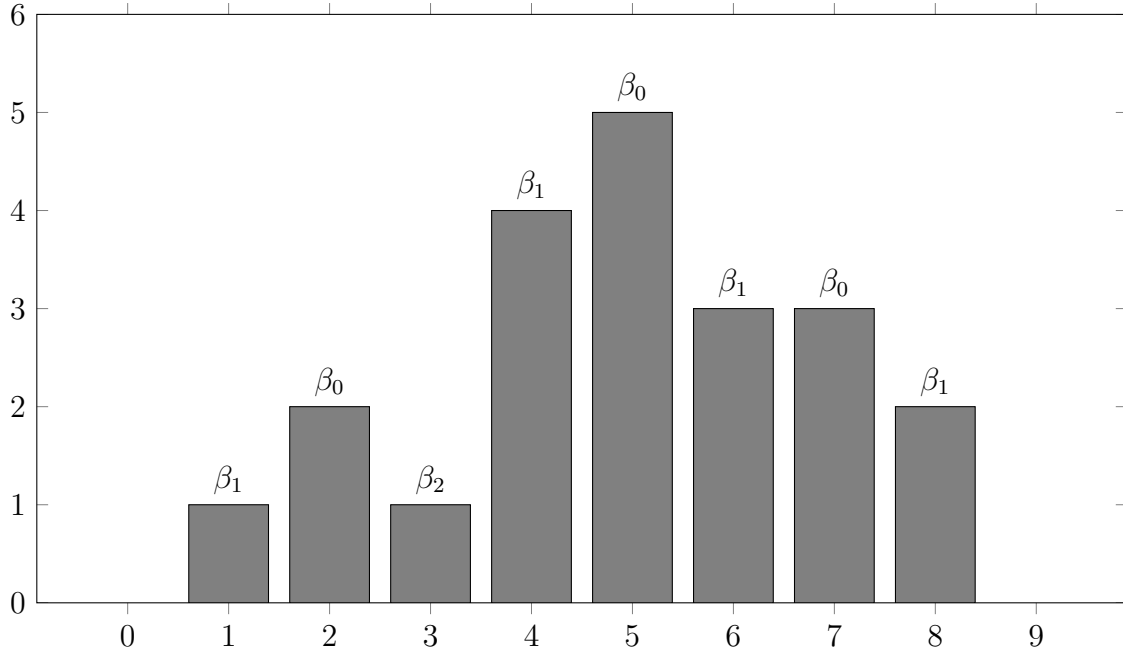
O seguinte teorema é o Teorema 2 de [2]. Ele mostra que a forma resultante é de “pente”.

Teorema 2.2.1. (i) Vamos supor que $\beta_2 < \beta_0 \leq \beta_1$ e sejam \mathcal{E}_1 o conjunto de

$$(a_1, \beta_2, a_2, \dots, a_{k-1}, \beta_2, a_k)$$

onde, $k \in \mathbb{N}$ e $a_i = \beta_0$ ou (v^2, v^2) para $1 \leq i < k$, e $v^2 = \frac{2(\beta_0\beta_1)}{\beta_0 + \beta_1}$. Então $t^{-1}X_t^n$ converge $\mathbb{P}_x - q.c.$ e

$$\mathbb{P}_x \left(\lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1}X_t^n \in \mathcal{E}_1 \right) = 1$$

Figura 3: Estado $x \in \mathbb{N}^8$ com taxas de transição

(ii) Vamos supor que $\beta_2 < \beta_1 \leq \beta_0$ e seja \mathcal{E}_2 conjunto de

$$(\beta_{i_1}, \dots, \beta_{i_n})$$

onde, $i_j \in \{0, 1, 2\}$, $i_j \neq i_{j+1}$ para $1 \leq j \leq n-1$ e $i_1, i_n \neq 2$. Então $t^{-1}X_t^n$ converge $\mathbb{P}_x - q.c.$ e

$$\mathbb{P}_x \left(\lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1}X_t^n \in \mathcal{E}_2 \right) = 1$$

(iii) Vamos supor que $\beta_1 < \beta_2 \leq \beta_0$ e sejam \mathcal{E}_3 o conjunto de

$$(e_L, \beta_0, a_1, \beta_0, a_2, \dots, a_{k-1}, \beta_0, a_k, \beta_0, e_R)$$

onde, $k \in \mathbb{N}$, $a_i = (\beta_2)$ ou $(v^{2,\infty}, v^{2,\infty})$ para $1 \leq i \leq k$, $e_L, e_R = (\beta_1)$ ou $(-)$, e $v^{2,\infty} = \frac{2(\beta_1\beta_2)}{\beta_1+\beta_2}$. Então $t^{-1}X_t^n$ converge $\mathbb{P}_x - q.c.$ e

$$\mathbb{P}_x \left(\lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1}X_t^n \in \mathcal{E}_3 \right) = 1$$

2.3 Cadeias de Markov ergódicas

Cadeia de Markov é *ergódica*, se existir probabilidade $p(y)$, isto é, se existir limites

$$P(y) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P_{xy}(t) \tag{2.9}$$

Algoritmo 4: Simulação da cadeia de Markov em tempo contínuo**Dados:** $\beta_0, \beta_1, \beta_2, n$ **Resultado:** Estado de cadeia depois de n passos (dividido por tempo gasto para fazer os passos) $x \leftarrow \text{rep}(0, n + 2)$ $\beta \leftarrow \text{c}(0, \text{rep}(\beta_0, n), 0)$ **para** $j \leftarrow 1$ **até** n **faça** $i \leftarrow \text{gerai}(\beta/\text{soma}(\beta))$ $x_i \leftarrow x_i + 1$ $\text{tempo}_i \leftarrow \text{tempo}_i + \text{rexp}(\beta[i])$ **se** $i=2$ **então** $\text{ind} \leftarrow \text{c}(i, i + 1)$ $\beta \leftarrow \text{atualiza}(\beta, \text{ind}, x, \beta_0, \beta_1, \beta_2)$ **senão** **se** $i=n+1$ **então** $\text{ind} \leftarrow \text{c}(i - 1, i)$ $\beta \leftarrow \text{atualiza}(\beta, \text{ind}, x, \beta_0, \beta_1, \beta_2)$ **senão** $\text{ind} \leftarrow \text{c}(i - 1, i, i + 1)$ $\beta \leftarrow \text{atualiza}(\beta, \text{ind}, x, \beta_0, \beta_1, \beta_2)$ **Retorne** x/tempo

e que

$$\sum_y P(y) = 1. \quad (2.10)$$

As probabilidades $P(y)$ formam distribuição invariante.**2.3.1 Processo de forma para o modelo de crescimento de cristal em tempo contínuo**Para uma configuração de x , nós definimos a forma h de x do seguinte modo

$$h = (\Delta_1 x, \dots, \Delta_{n-1} x),$$

onde,

$$\Delta_j x = x(j) - x(j + 1), \quad j = 1, \dots, n - 1.$$

Note que x e y tem a mesma forma h se e somente se x é translação vertical de y . Também podemos perceber que $V_j(x)$ depende de x através de h , e abusando a notação, $V_j(h)$ irá denotar o valor de $V_j(x)$ para qualquer x do qual faz parte da forma h . Definimos, para

$j = 1, \dots, n$, o vetor

$$f_j = \begin{cases} e'_1, & \text{se } j = 1, \\ e'_j - e'_{j-1}, & \text{se } 1 < j < n, \\ -e'_{n-1}, & \text{se } j = n. \end{cases}$$

Onde para $1 \leq i \leq n-1$, e'_i é um vetor unitário: $e'_i(j) = \delta_{ij}$, $j = 1, \dots, n-1$.

Definição 2.3.1. Um processo de forma com n sítios e parâmetro β é definido por

$$H_t^n = (\Delta_1 X_t^n, \dots, \Delta_{n-1} X_t^n)$$

Note que H_t^n é uma cadeia de Markov em tempo contínuo com espaço de estados \mathbb{Z}^{n-1} com taxa de transição instantanea

$$\begin{cases} q(h, h + f_j) = \beta_{V_j(h)}, & j = 1, \dots, n, \\ q(h, h') = 0 & \text{se } h' \notin \{h + f_1, \dots, h + f_n\}. \end{cases}$$

Quando H_t^n é ergódica e π^n é sua distribuição invariante podemos concluir, pela Proposição 1 de [2], que existe $v^n > 0$ tal que para $j = 1, \dots, n$, quase certamente

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{X_t^n(j)}{t} = v^n.$$

E além disso, que para qualquer $j = 1, \dots, n$, temos que $v^n = \sum_{h \in \mathbb{Z}^{n-1}} \beta_{V_j(h)} \pi^n(h)$.

A seguir vamos elucidar algumas situações quando H_t^n é ergódica.

Teorema 2.3.1. *Se $n > 2$ e $\beta_0 < \beta_1 \leq \beta_2$ então H^n é ergódico.*

Observação 2.3.1. Este teorema é corolário do Teorema 1 de [2] que por sua vez segue dos teoremas 1.2 e 3.1 de [6].

Teorema 2.3.2. *Se $\beta_1, \beta_2 > \beta_0$ então H^3 é ergódico, como é visto no corolário 1 de [2].*

Teorema 2.3.3. *Seja $n \geq 2$ e $\beta \in \beta_0 < \beta_2 < \beta_1$. O processo H^k é ergódico para $2 \leq k \leq n+2$ se β satisfaz uma das condições abaixo.*

a) $\beta_2 > n\beta_0$

b) $\beta_2 > ((n-1)\beta_1 + \beta_0)/n$

Mais ainda H^k é ergódico para qualquer $k \geq 2$ se β satisfaz

c) $\beta_2 > 4\sqrt{2}\sqrt{\beta_0\beta_1}$

3 Aplicação prática

Comparar resultados de simulações com resultados teóricos apresentados em [2], os quais já mencionamos. Para isso nós usamos alguns valores particulares de β_0 , β_1 e β_2 que satisfazem condições de alguns teoremas correspondentes. Para todos os casos o valor do parâmetro n é 8 e o número de iterações m é igual a 90000.

Caso de item (i) do Teorema 2.2.1. Escolhemos $\beta_0 = 2$, $\beta_1 = 3$, $\beta_2 = 1$. Observe que a condição $\beta_0 < \beta_1 \leq \beta_2$ do teorema é válida e que $v^2 = \frac{2(\beta_0\beta_1)}{\beta_0+\beta_1} = \frac{2(2 \times 3)}{2+3} = 2.4$ e que a configuração simulada (veja Figura 4) pertence a \mathcal{E}_1 .

Caso de item (ii) do Teorema 2.2.1. Escolhemos $\beta_0 = 3$, $\beta_1 = 2$, $\beta_2 = 1$. Observe que a condição $\beta_2 < \beta_1 \leq \beta_0$ do teorema é válida e que $v^2 = \frac{2(\beta_0\beta_1)}{\beta_0+\beta_1} = \frac{2(3 \times 2)}{3+2} = 2.4$ e que a configuração simulada (veja Figura 5) pertence a \mathcal{E}_2 .

Caso de item (iii) do Teorema 2.2.1. Escolhemos $\beta_0 = 3$, $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$. Observe que a condição $\beta_1 < \beta_2 \leq \beta_0$ do teorema é válida e que $v^{2\infty} = \frac{2(\beta_1\beta_2)}{\beta_1+\beta_2} = \frac{2(1 \times 2)}{1+2} = 1.3333$ e que a configuração simulada (veja Figura 5) pertence a \mathcal{E}_3 .

Casos ergódicos:

Caso do Teorema 2.3.1. Escolhemos $\beta_0 = 1$, $\beta_1 = 2$, $\beta_2 = 3$. Observe que a condição $\beta_0 < \beta_1 \leq \beta_2$ do teorema é válida e que a configuração é tal que número de cristais nos todos sítios é aproximadamente o mesmo, o que está em acordo com o resultado teórico que a cadeia é ergódico em forma, isto é, que H^n é ergódico (veja na Figura 7). Velocidade simulada é $v = 1.6575$.

Caso do Teorema 2.3.2. Escolhemos $\beta_0 = 1$, $\beta_1 = 2$, $\beta_2 = 1.5$. Observe que a condição $\beta_1, \beta_2 > \beta_0$ do teorema é válida e que a configuração é tal que número de cristais

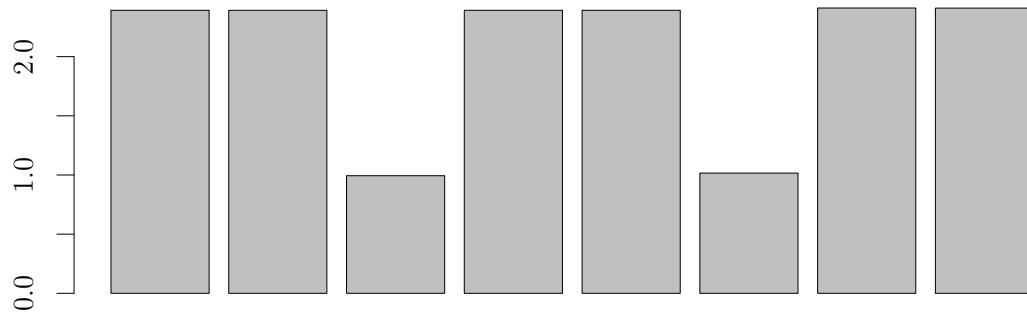
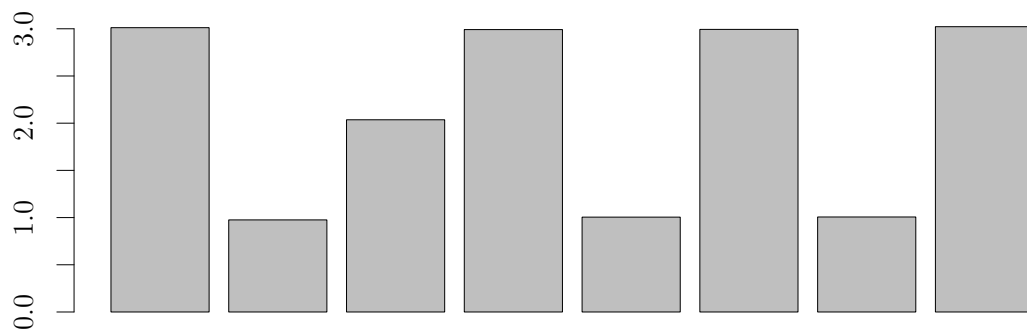
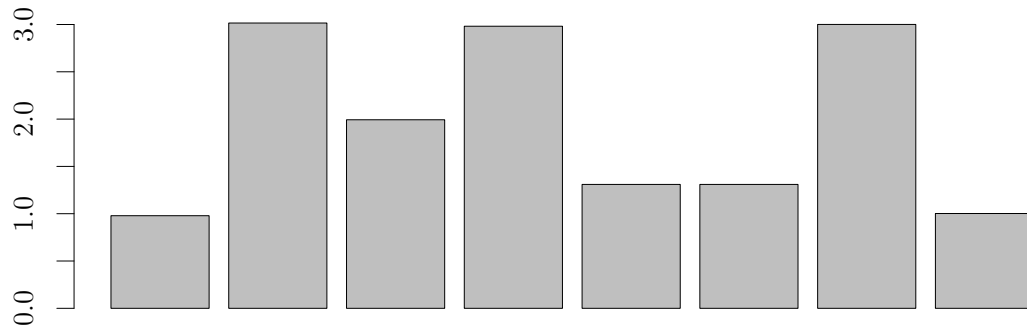
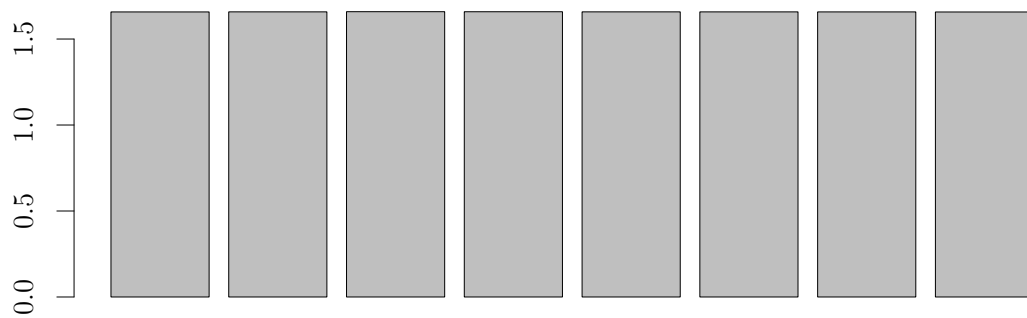
Figura 4: Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 2$, $\beta_1 = 3$, $\beta_2 = 1$ Figura 5: Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 3$, $\beta_1 = 2$, $\beta_2 = 1$ 

Figura 6: Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 3$, $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$ Figura 7: Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 1$, $\beta_1 = 2$, $\beta_2 = 3$ 

nos todos sítios é aproximadamente o mesmo, o que está em acordo com o resultado teórico que a cadeia é ergódico em forma, isto é, que H^n é ergódico (veja na Figura 8). Velocidade simulada é $v = 1.4872$.

Caso do item (a) Teorema 2.3.3. Escolhemos $\beta_0 = 1$, $\beta_1 = 10$, $\beta_2 = 8$. Observe que a condição $\beta_0 < \beta_2 < \beta_1$ e $\beta_2 > n\beta_0$ do teorema são válida e que a configuração é tal que número de cristais nos todos sítios é aproximadamente o mesmo, o que está em acordo com o resultado teórico que a cadeia é ergódico em forma, isto é, que H^n é ergódico (veja na Figura 9). Velocidade simulada é $v = 3.4588$.

Caso do item (b) Teorema 2.3.3. Escolhemos $\beta_0 = 0.5$, $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 0.95$. Observe que a condição $\beta_0 < \beta_2 < \beta_1$ e $\beta_2 > ((n-1)\beta_1 + \beta_0)/n$ do teorema são válida e que a configuração é tal que número de cristais nos todos sítios é aproximadamente o mesmo, o que está em acordo com o resultado teórico que a cadeia é ergódico em forma, isto é, que H^n é ergódico (veja na Figura 10). Velocidade simulada é $v = 0.7856$.

Caso do item (c) Teorema 2.3.3. Escolhemos $\beta_0 = 0.2$, $\beta_1 = 25$, $\beta_2 = 13$. Observe que a condição $\beta_0 < \beta_2 < \beta_1$ e $\beta_2 > 4\sqrt{2}\sqrt{\beta_0\beta_1}$ do teorema são válida e que a configuração é tal que número de cristais nos todos sítios é aproximadamente o mesmo, o que está em acordo com o resultado teórico que a cadeia é ergódico em forma, isto é, que H^n é ergódico (veja na Figura 11). Velocidade simulada é $v = 1.6351$.

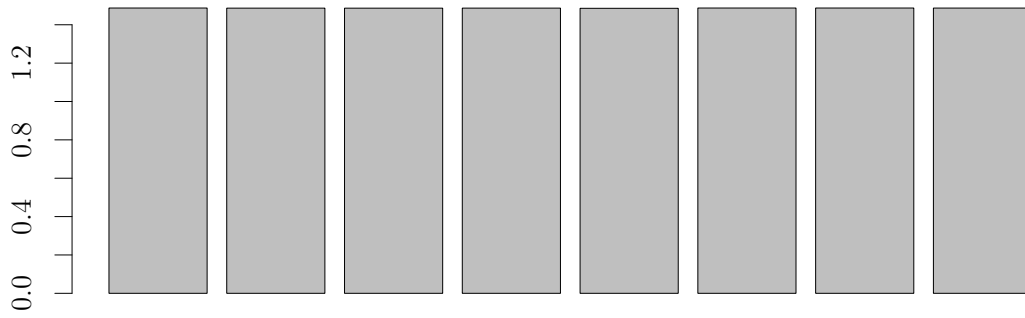
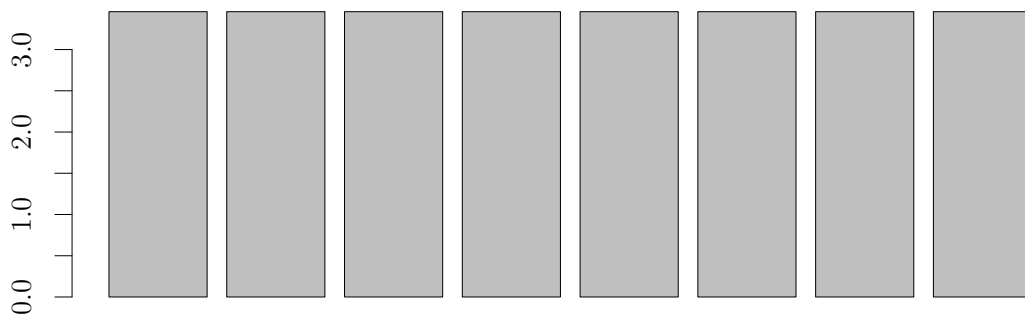
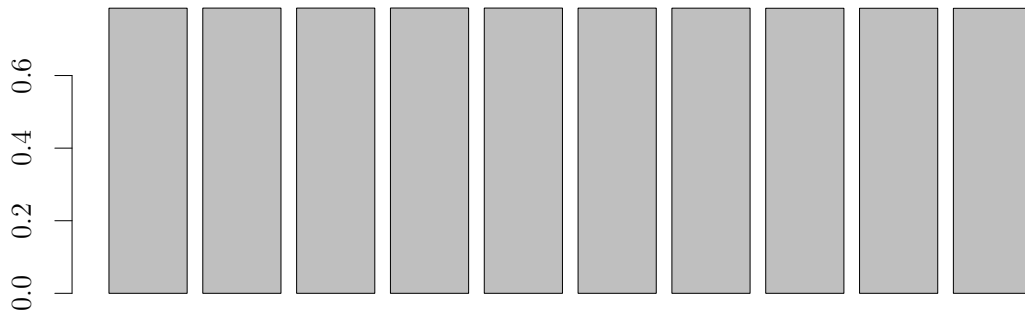
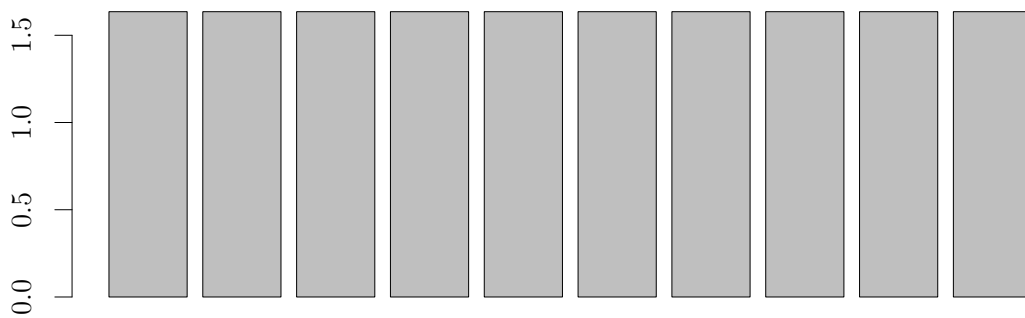
Figura 8: Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 1$, $\beta_1 = 2$, $\beta_2 = 1.5$ Figura 9: Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 1$, $\beta_1 = 1.5$, $\beta_2 = 2$ 

Figura 10: Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 0.5$, $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 0.95$ Figura 11: Simulação do crescimento de cristais com $\beta_0 = 0.2$, $\beta_1 = 25$, $\beta_2 = 13$ 

4 Conclusão

Neste trabalho usando modelo de simulação verificamos os resultados teóricos do artigo [2]. É interessante salientar que para situações ergódicas as simulações são de extrema importância já que não é possível calcular a velocidade de crescimento de cristal de forma analítica. Para facilitar o uso de terceiros ao nosso modelo de simulação foi desenvolvido um programa de interface gráfica com base no software R e utilizando o pacote tcltk2.

Uma sugestão para trabalhos futuros seria estudar esse comportamento em dimensão maior, o que vai melhor corresponder a situação do mundo real.

Referências

- [1] HERNANDES, A. C. *O verdadeiro poder dos cristais*. 2013. Disponível em: <http://www.ccmc.if.sc.usp.br/docs/artigos_divulg/201007120447.pdf>.
- [2] EZANNO, F. Some results about ergodicity in shape for a crystal growth model. *Electron. J. Probab.*, v. 18, p. no. 33, 20, 2013. ISSN 1083-6489. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1214/EJP.v18-2177>>.
- [3] VAN-ZANT, P. *Microchip Fabrication 5th Ed.* [S.l.: s.n.], 2004.
- [4] FERRARI, P. A.; GALVES, A. *Acoplamento em processos estocásticos*. First. [s.n.], 1997. Hardcover. Disponível em: <<http://www.ime.usp.br/~pablo/papers/libro.pdf>>.
- [5] ROSS, S. M. *Introduction to probability models*. Ninth. [S.l.]: Harcourt/Academic Press, Burlington, MA, 2007.
- [6] ANDJEL, E. D.; MENSNIKOV, M. V.; SSKO, V. V. Positive recurrence of processes associated to crystal growth models. *Ann. Appl. Probab.*, v. 16, n. 3, p. 1059–1085, 2006. ISSN 1050-5164. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1214/105051606000000079>>.