

Nuevos avances en la formulación variacional de la ecuación KPZ

New advances in the variational formulation of the KPZ equation

E. Korutcheva ^a, C. Escudero ^b, H.S. Wio ^c
A. Alés ^d, G.G. Izús ^d, R.R. Deza ^{d,*}, J.A. Revelli ^e

^a Departamento de Física Fundamental (UNED), E-28040 Madrid, España
^b G. Nadjakov Inst. of Solid State Physics (Bulgarian Acad. Sci.), 1784 Sofia, Bulgaria
^c Depto. Matemáticas & ICMAT (CSIC-UAM-UC3M-UCM), Cantoblanco, E-28049 Madrid, España
^d Instituto de Física de Cantabria (IFCA, UC-CSIC) 39005 Santander, España
^e IFIMAR (UNMDP-CONICET), Deán Funes 3350, B7602AYL Mar del Plata, Argentina
^e Instituto de Física "Enrique Gaviola" (UNC-CONICET), 5000 Córdoba, Argentina

Recibido:11/11/2014;Aceptado:22/04/2015

La ecuación Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) representa uno de los ejemplos más prominentes para la escala invariante genérica en sistemas de no-equilibrio, con la adición de mostrar una transición de fase dinámica entre dos regímenes de escala diferentes. Se han utilizado métodos variacionales para obtener un NEP que permite pensar a esta ecuación como un flujo gradiente y se han realizado cálculos analíticos e implementado algoritmos inspirados en dicho potencial. Los resultados obtenidos detallan zonas de preponderancia de los distintos términos de la ecuación KPZ para tiempos cortos y largos.

Palabras clave: ecuación KPZ, potencial de no equilibrio, formulación variacional.

The Kardar-Parisi-Zhang equation (KPZ) represents one of most prominent examples for generic scale invariant non-equilibrium systems, with the addition of showing a dynamic phase transition between two different regimes of scale. They have used variational methods to obtain NEP suggests that this equation as a gradient flow and analytical calculations have been performed and implemented algorithms inspired by this potential. The results outlined areas preponderance of the various terms of the KPZ equation for short and long times.

Keywords: KPZ equation, non-equilibrium potential, variational formulation.

I. INTRODUCCIÓN

En los últimos años, se han logrado avances fructíferos en la comprensión de los fenómenos de no-equilibrio en la física estadística. Esto se ha logrado a partir de nuevas técnicas, como el grupo de renormalización aplicado a teoría de campos, o bien, por medio de la implementación de algoritmos computacionales que han permitido obtener resultados que permitan la interpretación del comportamiento de las soluciones; en particular, de los exponentes críticos.

La ecuación KPZ, formulada inicialmente en 1985, ha resultado un caso particular de esta corriente y ha permitido modelizar una vasta cantidad de fenómenos de no-equilibrio provenientes de campos estocásticos ¹. El campo $h(x,t)$, cuya evolución se encuentra gobernada por una ecuación en derivadas parciales estocásticas, describe la altura de una interfaz fluctuante en el concepto de proceso de crecimiento de superficies al cual fue originariamente formulada. Desde un punto de vista teórico, la ecuación KPZ presenta interesantes propiedades, como una relación

cercana a la ecuación de Burgers ² o a una ecuación de difusión con un ruido multiplicativo, donde el campo puede ser interpretado, entre otros casos, como la función partición restringida de un problema de polímeros dirigidos.

Una gran cantidad de esfuerzos se han realizado en el estudio del comportamiento de las soluciones, de los exponentes críticos en una o más dimensiones espaciales, el estudio del reescalamiento de la parte singular de la energía libre e incluyendo el desarrollo de algoritmos para realizar integraciones numéricas ³⁻⁵. Sin embargo, las soluciones encontradas se referían a una determinada dimensionalidad y no han sido soluciones generales para la ecuación KPZ.

Además de los caminos clásicos de la teoría en lo que respecta a este tipo de problemas, dos nuevas vías han llamado nuestra atención. Una es la relación de escaleo $\alpha + z = 2$, que se espera que sea exacta para la ecuación KPZ en cualquier dimensionalidad. La exactitud de esta relación está, tradicionalmente, atribuida a la invariancia de Galileo para la ecuación KPZ.

Una segunda cuestión que nos ha resultado interesante es la falta de un funcional que permita observar la ecuación KPZ como un flujo gradiente. De hecho, varios trabajos han construido dicho funcional a partir de consideraciones geométricas o a través de un funcional de Lyapunov, partiendo de la ecuación KPZ determinística. También ha sido posible hallar un potencial de no-equilibrio (NEP, por sus siglas en inglés), que ha permitido escribir a la ecuación KPZ como un flujo gradiente forzado por un término estocástico. Esta nueva técnica permite observar muchas de las propiedades de la ecuación KPZ.

La expansión en serie de Taylor del NEP, en términos de las fluctuaciones de la interfaz, conduce a una ecuación de movimiento con una estructura exacta de flujo gradiente, pero que difiere ligeramente de la ecuación KPZ. Pero este desarrollo posee un grado de simetría menor: no es invariante frente a una transformación de Galileo. Sin embargo, mediante el uso de esta metodología junto con la implementación de técnicas de grupo de renormalización dinámico, han permitido conocer propiedades de escalo para cortos y largos tiempos, como el tiempo de crossover del régimen de EW al de KPZ.

En 2009, Wio et al. han encontrado un potencial de no-equilibrio (NEP, por sus siglas en inglés) que permite describir a la ecuación KPZ determinista como un flujo gradiente exacto, que admite un funcional de Lyapunov ⁶. Este NEP, desarrollado en serie de Taylor presenta un corte natural en el tercer orden, lo cual permite una expansión exacta para realizar una integración más sencilla.

Con este método se llega a una ecuación no lineal en derivadas parciales y con un término estocástico que da cuenta de las fluctuaciones de altura de la interfaz. Los análisis a un loop del grupo de renormalización dinámico muestran también una relación entre los exponentes críticos de $\alpha + z = 2$, junto con una cancelación exacta para la renormalización de los vértices.

La ecuación KPZ 1 describe el crecimiento de una interfaz con tensión superficial, dada por el coeficiente ν y la pendiente de la superficie, descrita por el parámetro λ es proporcional a la velocidad media de crecimiento.

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(x,t) + \frac{\lambda}{2} [\nabla h(x,t)]^2 + \eta(x,t) \quad (1)$$

donde el término estocástico cumple con las condiciones de ruido blanco:

$$\langle \eta(x,t) \rangle = 0$$

$$\langle \eta(x,t) \eta(x',t') \rangle = 2D \delta(x-x') \delta(t-t')$$

La interfaz generada a partir de la ecuación KPZ desarrolla una estructura fractal del tipo autoafín, con un exponente de Hurst α (exponente de rugosidad).

El ancho global sigue una ley de escala dinámica que involucra a α y al exponente crítico z . La expresión

matemática del ancho global es

$$W(L,t) = \langle |h(x,t) - \langle h(x,t) \rangle|^2 \rangle^{1/2} \quad (2)$$

donde L es la longitud del sistema estudiado.

II. ESTUDIO VARIACIONAL

El estudio variacional se ha desarrollado de la siguiente manera ⁷: la ecuación KPZ determinista, obtenida considerando $D = 0$, es exactamente resoluble a través de la transformación de Hopf-Cole, que convierte la no-linearidad de la ecuación en una ecuación lineal de difusión. Además también admite un funcional de Lyapunov que puede ser usado para estudiar la estabilidad global de las soluciones constantes. De hecho, el funcional puede escribirse como

$$F[h] = \int e^{\frac{\lambda}{2\nu} h(x,t)} \frac{\lambda}{2\nu} \left(-K_0 + \frac{\lambda}{4} [\nabla h(x,t)]^2 \right) dx \quad (3)$$

que nos permite escribir la ecuación KPZ de la siguiente manera

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = -\Gamma[h] \frac{\delta F[h]}{\delta h(x,t)} + \eta(x,t) \quad (4)$$

donde la movilidad está dada por

$$\Gamma[h] = \left(\frac{2\nu}{\lambda} \right)^2 e^{-\frac{\lambda}{2\nu} h(x,t)} \quad (5)$$

La derivada temporal del funcional de Lyapunov cumple con las condiciones de ser no positiva y ser mínima para funciones constantes.

También, de forma alternativa, es posible encontrar un funcional que describa a la ecuación KPZ como flujo gradiente, como se observa en la siguiente expresión

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = -\frac{\delta \Phi[h]}{\delta h(x,t)} + \eta(x,t) \quad (6)$$

donde el flujo queda expresado de la siguiente manera

$$\Phi[h] = \frac{\nu}{2} \int dx (\nabla h)^2 - \frac{\lambda}{2} \int dx \int_{h_{ref}}^{h(x,t)} D\Psi(\nabla\Psi)^2 \quad (7)$$

La integral resultante es tridiagonal. Cuando se realiza una expansión en serie de Taylor de este funcional, en términos del campo perturbado, se obtiene

$$\partial_t u = \nu \nabla^2 u - \frac{\lambda}{6} (\nabla u)^2 - \frac{\lambda}{3} u \nabla^2 u + \eta(x,t) \quad (8)$$

En la cual u representa las fluctuaciones del campo

$$u(x,t) = h(x,t) - h_{ref}$$

Partiendo del flujo gradiente de la ecuación (7), que nos permite escribir la ecuación KPZ como una derivada funcional más un término adicional de ruido como fuente externa y efectuando un análisis del grupo de renormalización dinámico, como el realizado en ^{2,8},

expandido a un solo loop, nos ha permitido obtener las siguientes ecuaciones de flujo

$$\frac{d\lambda}{dl} = \lambda(\alpha + z - 2) \quad (9)$$

$$\frac{d\nu}{dl} = \nu \left(z - 2 - \frac{1}{36} \frac{\lambda^2 D}{\nu} K_d \frac{1-d}{d} \right) \quad (10)$$

$$\frac{d\gamma}{dl} = \gamma \left(z - d - 2\alpha + \frac{K_d \lambda^2 \gamma}{72 \nu^3} \right) \quad (11)$$

donde $K_d = S_d/(2\pi)^d$ y $S_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(n/2)$ es la superficie de la esfera unidad d-dimensional y Γ es la función gamma. Es posible encontrar una constante de acoplamiento $\bar{g} := K_d \lambda^2 \gamma / \nu^3$ que obedece a la ecuación diferencial, luego de aplicado un loop

$$\frac{d\bar{g}}{dl} = (2-d)\bar{g} - \frac{6-5d}{72d} \bar{g}^2 \quad (12)$$

revelando que existe una dimensión crítica para este modelo en $d_c = 2$ como también se puede anticipar utilizando el recuento de las potencias. Para $d > 2$ la constante de acoplamiento se aproxima a cero de manera exponencial en la escala l , para $d = 2$ esta aproximación es algebraica.

Los valores de los exponentes críticos de rugosidad y crecimiento son:

$$\alpha = \frac{2(2-d)(1-d)}{6-5d} \quad (13)$$

$$z = \frac{12-10d-2(2-d)(1-d)}{6-5d} \quad (14)$$

que, como se ha anticipado en la introducción, obedecen la relación $\alpha + z = 2$ para cualquier dimensionalidad. Sin embargo, la ecuación (8) no muestra invarianza frente a una transformación de Galileo.

La estabilidad del NEP puede ser estudiada suponiendo una constante como solución de la ecuación KPZ y se observa que esas constantes son también solución de la ecuación KPZW ⁷.

III. CROSSOVER: UN PUNTO DE VISTA A PARTIR DE LAS INTEGRALES DE CAMINO

Otros resultados han sido obtenidos utilizando el método de Monte Carlo aplicado a las integrales de camino, con el fin de obtener un promedio de la rugosidad del sistema y otros valores promedio de interés, para el caso del funcional de Lyapunov, ecuación (3). Para obtener dichos valores se ha utilizado la acción estocástica, con una discretización temporal, que llamaremos μ y espacial, denominada j

$$\begin{aligned} S[h] = & \frac{1}{2\tau} \sum_{j,\mu} (h_{j,\mu+1} - h_{j,\mu} - \\ & \tau[\alpha L_{j,\mu+1} + (1-\alpha)L_{j,\mu}])^2 - \\ & 2\nu\alpha Nt - \tau\alpha \frac{\lambda}{2} \sum_{j,\mu} [h_{j+1,\mu} - \\ & 2h_{j,\mu} + h_{j-1,\mu}] \end{aligned} \quad (15)$$

donde τ es el paso temporal y el factor α representa el parámetro fijo, entre 0 y 1, para realizar la discretización. La Lagrangiana estocástica es

$$L_{j,\mu} = \nu(h_{j+1,\mu} - 2h_{j,\mu} + h_{j-1,\mu}) + \frac{\lambda}{4} [(h_{j+1,\mu} - h_{j,\mu})^2 + (h_{j-1,\mu} - h_{j,\mu})^2] \quad (16)$$

En la figura 1 se muestra el comportamiento

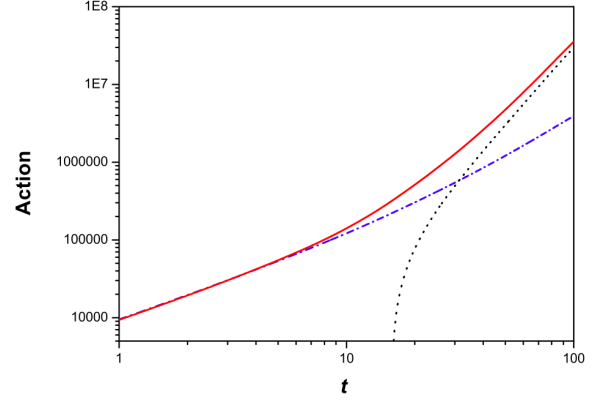


Figura 1: Cambio de régimen, de EW (azul) a KPZ (rojo). La diferencia entre ambos regímenes se muestra en negro

del tiempo de cruce entre el régimen de Edwards-Wilkinson (EW) y el propio de KPZ. Hemos tomado como estimador del tiempo de transición la diferencia (línea punteada negra) entre la acción de KPZ (línea roja continua) y la acción de EW (línea azul punteada). Se puede observar que hay una coincidencia asintótica. Este estimador numérico no está de acuerdo con resultados obtenidos en otros trabajos ^{9,10}, donde se han utilizado otras técnicas. En la figura 2 se puede observar la dependencia del

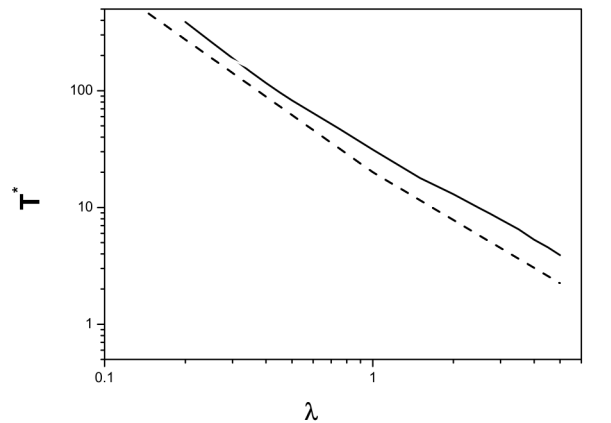


Figura 2: Dependencia en lambda del tiempo de transición de régimen (línea continua). La línea punteada representa un valor de referencia $\lambda^{-1.35}$.

estimador con λ . Los resultados preliminares nos permiten contemplar que para $\lambda > 7$ hay un marcado

cambio en el valor de Φ , entrando en una región de acoplamiento fuerte. La línea punteada, que sirve de referencia, representa a $\lambda^{-1,35}$.

IV. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha estudiado el NEP, obtenido con una formulación variacional, de la ecuación de KPZ mediante técnicas numéricas. Se ha podido determinar las regiones donde, principalmente, se rige el crecimiento lateral (similar al de la ecuación EW) con el de crecimiento lateral, dado por la relajación determinada por el término de gradiente elevado al cuadrado.

Para la integración mediante integrales de camino del NEP, se ha utilizado el método de Monte Carlo con el fin de minimizar la acción estocástica. Se ha encontrado que la dependencia del NEP a tiempos largos es proporcional al término de relajación superficial, y que existen regiones donde el predominio de la ecuación KPZ está regido por los distintos términos que la componen, existiendo una región de crossover hacia la ecuación EW, a tiempos cortos. La región de cruce depende del parámetro λ .

Los resultados mostrados en este trabajo son solo preliminares y requieren de mucho más trabajo para ser conclusivos. En este momento, se están reescribiendo los códigos en CUDA para ejecutarlos en una placa gráfica. La existencia de un NEP y la posibilidad de interpretar la transición del régimen EW al KPZ como un fenómeno de escape son alentadoras y pueden obtenerse muchos más resultados, como ser, leyes de escala para ser comparadas con técnicas que incluyan matrices aleatorias.

V. REFERENCIAS

- 1 - Kardar, M., G. Parisi and Y-C. Zhang. Phys. Rev. Lett., **56**, 889 (1986).
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.889>
- 2 - Medina, E. *et al.* Phys. Rev. A, **39**, 3053 (1989).
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.39.3053>
- 3 - Wiese, K.J. J. Stat. Phys., **93**, 143-154 (1998).
<http://dx.doi.org/10.1023/B:J0SS.0000026730.76868.c4>
- 4 - Lässig, M. Nucl. Phys. B, **448**, 559-574 (1995).
[http://dx.doi.org/10.1016/0550-3213\(95\)00268-W](http://dx.doi.org/10.1016/0550-3213(95)00268-W)
- 5 - Frey, E., U.C. Täuber and T. Hwa. Phys. Rev. E, **53**, 4424 (1996).
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.53.4424>
- 6 - Wio, H.S. Int. J. Bif. Chaos, **19**, 2813-2821 (2009).
<http://dx.doi.org/10.1142/S0218127409024505>
- 7 - Wio, H.S. *et al.* Papers in Physics, **5**, 050010 (2014).
<http://dx.doi.org/10.4279/PIP.050010>
- 8 - Forster, D., D.R. Nelson and M.J. Stephen. Phys. Rev. A, **16**, 732 (1977).
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.16.732>
- 9 - Forrest, B.M. and R. Toral. J. Stat. Phys., **70**, 703-720 (1993).
<http://dx.doi.org/10.1007/BF01053591>
- 10 - Guo, H., B. Grossmann and M. Grant. Phys. Rev. A, **41**, 7082 (1990).
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.41.7082>