

Previsão da Rugosidade Global do Modelo de Deposição Balística Usando Redes Neurais

Bassem Y. Makhoul Jr, Eduardo F. Simas Filho
Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica
Universidade Federal da Bahia
Salvador, Bahia, Brasil
bassemmakhoul@ufba.br
eduardo.simas@ufba.br

Thiago A. de Assis
Instituto de Física
Universidade Federal da Bahia
Universidade Federal Fluminense
Salvador, Bahia, Brasil
Niterói, Rio de Janeiro, Brasil
thiagooa@ufba.br

Resumo—Por conta do aumento da quantidade de dados disponíveis em modo global e da constante evolução dos modelos e algoritmos de treinamento, redes neurais vêm se tornando cada vez mais populares, isto, seja na indústria como na academia. Na área de ciência dos materiais, modelos que envolvem simulação computacional do crescimento de superfícies em situações fora do equilíbrio termodinâmico ajudam a entender e melhorar a produção de novos materiais. A partir destas premissas, este trabalho tem como principal objetivo empregar modelos de redes neurais do tipo perceptron multicamadas para realizar a previsão da evolução temporal da rugosidade global, considerando o modelo de deposição balística unidimensional. Um treinamento supervisionado é realizado a partir dos dados obtidos via simulação fenomenológica, de forma a efetuar uma extrapolação da rugosidade global até o seu regime estacionário para sistemas com comprimentos laterais que inviabilizam a obtenção via simulação computacional. Foi utilizado como parâmetro de validação a raiz do erro quadrático médio percentual, de forma a avaliar o quão bem sucedido o aprendizado foi realizado pelo algoritmo. É possível destacar como resultados a evolução temporal da rugosidade global até o seu estado estacionário para comprimentos que ainda não foram observados na literatura, e a partir destes, foram gerados resultados consistentes para os expoentes de rugosidade previstos no limite de grandes comprimentos.

Index Terms—Redes Neurais, Processos de Deposição, Deposição Balística

I. INTRODUÇÃO

O crescimento de superfícies e interfaces é encontrado em diversas aplicações nas áreas de ciência e tecnologia, incluindo à física, engenharia, química, biologia e ciência de materiais [1, 2]. Inúmeras propriedades mecânicas, ópticas e eletrônicas de materiais são devidos a imperfeições em suas superfícies, sendo estas originadas por deslocamentos ou defeitos topológicos [3, 4]. Aplicações incluem a formação de pedras sedimentares, na fabricação de nanomateriais, na manufatura de revestimentos ópticos, na fabricação de dispositivos eletrônicos, e no revestimento de instrumentos [2, 5].

O processo de deposição pode ser classificado em dois tipos distintos, a deposição a vapor física (PVD) e a deposição a vapor química (CVD) [6]. Técnicas de PVD são comumente usadas em laboratórios, pois proveem a possibilidade de preparar uma variedade de filmes finos com diversos materiais,

que consequentemente, implicaram em diversos parâmetros de deposição, permitindo a síntese de filmes para diversas aplicações [7, 8, 9].

Uma das principais quantidades de interesse em processos de deposição é a rugosidade, sendo que o controle desta possibilita a geração de filmes com maior qualidade de composição, uniformidade e microestrutura [10, 11, 12], acarretando em diferentes propriedades como adesão [13], propriedades magnética [14], ópticas [15], entre outros. Na literatura, já existe uma variedade de trabalhos que empregam técnicas de aprendizado de máquina para a previsão da rugosidade, no qual o principal foco destas é realizar uma análise de dados experimentais de rugosidade para diferentes tipos de compostos [16, 17, 18]. Contudo, Este trabalho tem uma abordagem distinta ao que já foi feito na literatura, neste, é realizado a continuação do trabalho apresentado no Encontro de Outono de Física, que tem como foco, aplicar técnicas de aprendizado de máquina em dados obtidos via simulação fenomenológica tradicional, para o modelo de deposição balística.

A deposição balística é um modelo que foi originalmente proposto para descrever agregação e sedimentos em colóides [19, 20]. Por conta dos avanços em suas simulações computacionais, e das diversas formas que o modelo pode se apresentar, o interesse pelo mesmo vêm aumentando por conseguir gerar estruturas porosas complexas úteis, as quais permitem estudar a formação de estruturas de rochas sedimentares e aglomerados de poeira [4, 21, 20, 22]. Em sua forma mais simples, a cada unidade de tempo, serão depositadas L^d partículas, de forma que as mesmas seguiram uma trajetória perpendicular ao substrato, e se grudaram ao vizinho mais próximo da sua trajetória [23]. Para o caso unidimensional, $d = 1$, já existem diversos trabalhos que preveem o valor teórico dos expoentes dinâmicos, sendo estes de acordo com a classe de universalidade de Kardar-Parsi-Zhang (KPZ) [10, 24].

Contudo, por ser um problema que evolui com complexidade $\Theta(n^3)$ para o caso unidimensional, não há simulações computacionais do modelo de deposição balística para substrato que tendem ao limite de grande comprimentos (limite hidrodinâmico). Portanto, tendo em vista os avanços feitos na área de inteligência artificial, e a alta complexidade computaci-

onal do modelo de deposição, este trabalho tem como proposta ser uma forma alternativa de gerar a evolução da rugosidade global para comprimentos que ainda não são viáveis computacionalmente, empregando redes neurais, isto para o caso unidimensional. Ademais, a partir dos resultados encontrados, será possível calcular os expoentes de crescimento para o limite hidrodinâmico, e verificar as correções do expoente α propostas na literatura.

II. REVISÃO TEÓRICA

No estudo de propriedades de superfícies, uma das principais quantidades de interesse é a rugosidade [10]. O sistema é composto por um hipercubo d -dimensional de largura L , em que se define $a = 1$ como unidade de comprimento. A cada unidade de tempo t , serão depositados aleatoriamente uma quantidade de partículas, proporcional ao tamanho lateral do sistema, L^d , fazendo com que o substrato cresça verticalmente. A partir da altura de cada sítio é possível calcular a rugosidade instantânea $w(L, t)$ usando

$$w(L, t) = \left\langle \left[\frac{1}{L^d} \sum_i (h_i(t) - \bar{h}(t))^2 \right]^{1/2} \right\rangle, \quad (1)$$

em que h_i é a altura da coluna na posição i , e \bar{h} é a altura média do substrato. Por se tratar de um processo aleatório, o operador $\langle \cdot \rangle$ simboliza uma média configuracional sobre realizações independentes do sistema. Para a deposição balística, a Figura 1 expõe o crescimento do modelo ao longo do tempo, em que cada transição de cor representa uma unidade de tempo.

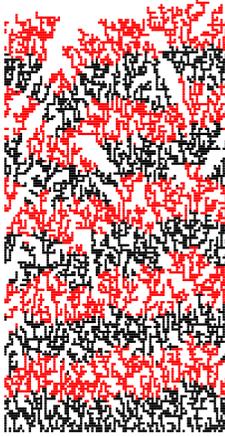


Figura 1: Evolução temporal do substrato ao longo do tempo no modelo de deposição balística unidimensional.

A descrição matemática da evolução temporal da rugosidade é definida como

$$w \sim \begin{cases} t^\beta, & t \ll t_x, \\ L^\alpha, & t \gg t_x, \end{cases} \quad (2)$$

em que, $t_x \sim L^z$ é dito tempo *crossover*. O crescimento da rugosidade por unidade de tempo para a deposição balística pode ser observado nas Figuras 2 e 3.

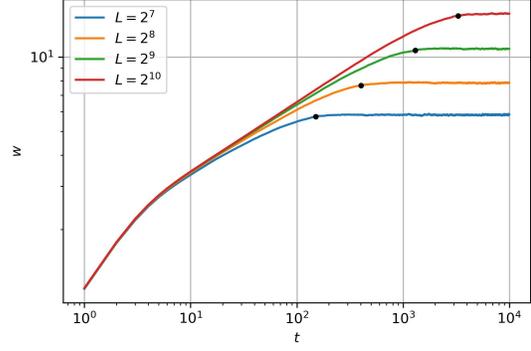


Figura 2: Evolução temporal da rugosidade global para pequenas larguras de substrato no modelo de deposição balística unidimensional em que "•" representa o tempo de *crossover*.

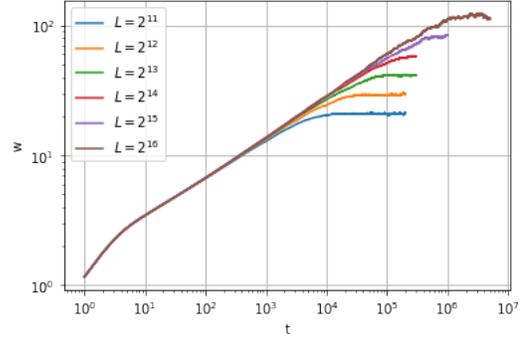


Figura 3: Evolução temporal da rugosidade global para grandes larguras de substrato no modelo de deposição balística unidimensional.

Inicialmente, as partículas estão ocupando os sítios vazios do substrato, de forma a seguir um crescimento similar a de uma deposição aleatória. Após ocupar a maioria dos sítios, em $t \sim 7$, o modelo cresce segundo a equação 2 e satura após atingir o tempo de *crossover*. É possível notar que as duas últimas curvas da Figura 3 possuem uma quantidade superior de ruído quando comparado com as demais, isto está atrelado ao fato destas possuírem um custo computacional elevado, portanto, para mitigar este, foi realizado uma quantidade inferior de realizações independentes.

Os expoentes β , α e z são de extrema importância, já que estes descrevem a dinâmica de crescimento de cada modelo [23]. Acredita-se que a deposição balística pertença à classe de universalidade KPZ, que possui para o caso unidimensional valores teóricos bem definidos para tais expoentes, auxiliados por valores computacionais convergentes aos teóricos, sendo estes $\beta = 1/3$, $\alpha = 1/2$ e $z = 3/2$ [10, 25, 24], que estão relacionados por $z = \alpha/\beta$. A principal forma de gerar tais expoentes e validar a classe de universalidade é realizando simulações computacionais para comprimentos grandes o suficiente, de modo que efeitos de pequenos comprimentos sejam desprezados.

Estes três expoentes estão relacionados de acordo com o *scaling* de Family-Vicsek, que propõe uma forma de normalizar as curvas das Figuras 2 e 3, de modo que as mesmas se sobreponham [26]. O *scaling* da rugosidade e do tempo pode ser observado nas Figuras 4 e 5, e possui a seguinte forma,

$$w'(L, t) = \log\left(\frac{w}{L^\alpha}\right), \quad (3)$$

$$t'(L, t) = \log\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (4)$$

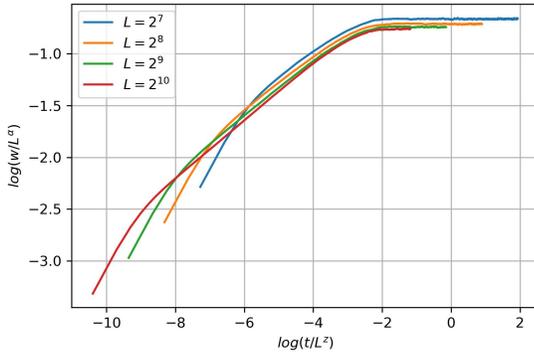


Figura 4: Curvas normalizadas segundo o *scaling* de Family-Vicsek com os expoentes teóricos da classe KPZ para as curvas da deposição balística de pequenos comprimentos.

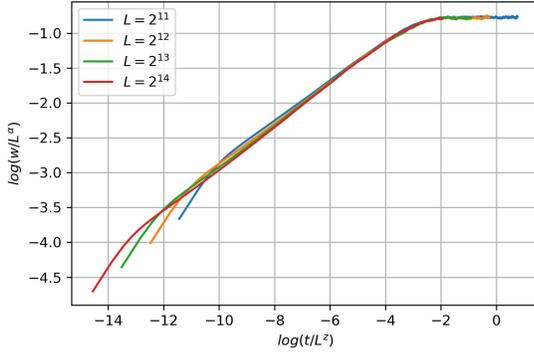


Figura 5: Curvas normalizadas segundo o *scaling* de Family-Vicsek com os expoentes teóricos da classe KPZ para as curvas da deposição balística de grandes comprimentos.

A partir da Figura 4 observa-se que as curvas submetidas ao *scaling* com os possíveis expoentes $\alpha = 0,5$ e $z = 1,5$ não colapsam totalmente, em contraste às curvas da Figura 5, isto se deve por conta das simulações estarem em um regime de pequenos comprimentos. Estes efeitos afetam os valores dos expoentes, de modo a ser necessário realizar simulações de comprimentos superiores para gerar resultados mais conclusivos. Por conta de tal comportamento, um fator

de correção para o expoente α é proposto por [10], em que o expoente crescerá segundo as seguintes equações,

$$\alpha_L = \frac{\log(w(L, \infty)/w(L/2, \infty))}{\log 2}, \quad (5)$$

$$\alpha_L = \alpha + BL^{-\Delta}, \quad (6)$$

sendo B uma constante, $w(L, \infty)$ a rugosidade na saturação para um substrato de largura L e Δ um expoente de correção de escala. A medida que novas curvas serão geradas a partir das redes neurais, será possível realizar o cálculo do expoente de correção α_L e comparar os resultados com o modelo proposto por [10], de forma a prever o crescimento do expoente para comprimentos que ainda não foram reportados.

III. METODOLOGIA

Nesta secção serão expostas as formas com as quais as redes neurais foram empregadas para realizar a previsão da rugosidade global para a deposição balística. Foram geradas duas metodologias distintas para realizar a regressão da rugosidade, portanto, esta secção será dividida em duas partes, em que a primeira realiza um aprendizado das curvas de rugosidade sob o *scaling* de Family-Vicsek, enquanto que a segunda realiza um aprendizado diretamente dos dados de tempo e comprimento. Ademais, serão apresentados os passos de cada metodologia, as arquiteturas das redes e os hiperparâmetros adotados.

A. Metodologia 1

Esta metodologia tem como propósito realizar um aprendizado supervisionado das curvas de rugosidade sob o *Scaling* de Family-Vicsek, Equações 3 e 4, para o comprimento lateral de $L = 2^{11}$, de forma a extrapolar os demais comprimentos. O principal motivo de usar este comprimento, é que a partir deste, é possível usar as demais curvas simuladas $L = [2^{12}, 2^{13}, 2^{14}, 2^{15}, 2^{16}]$ para testar o desempenho da rede.

Uma parte importante antes de começar a realizar o aprendizado foi inferir quais valores de α e z seriam empregados para normalizar os dados simulados. Pressupõe-se que o modelo de deposição balística pertença a classe KPZ, que possui valores convergentes para o modelo unidimensional. Contudo, um dos objetivos deste trabalho consiste em encontrar tais valores quando se é tomado o limite hidrodinâmico. Portanto, ao invés de empregar os possíveis valores teóricos, foi realizado um processo de busca para encontrar o melhor valor de α que minimizasse a distância entre as curvas de comprimento $L = 2^{13}$ e $L = 2^{14}$. Para este fim, foi gerado um algoritmo de busca por força bruta para buscar o melhor valor de α dentro de seu domínio. O valor encontrado foi de $\alpha = 0,5$ e segundo a relação $z = 2 - \alpha$, é possível adotar $z = 1,5$.



Figura 6: Diagrama da metodologia 1.

O processo de regressão é descrito por diferentes etapas, as quais estão expostas na Figura 6. O primeiro passo consiste em realizar a simulação fenomenológica do modelo de deposição balística para diferentes comprimentos. Tais curvas estão expostas na Figura 3. Em seguida, os dados são divididos em dois subconjuntos: o primeiro consiste nos dados de crescimento até $t = 7$, e o segundo consiste nos demais dados. Esta primeira parte será armazenada para reaproveitamento, e a segunda será processada para ser empregada no modelo de aprendizado de máquina.

É possível notar pela Figura 5, que as curvas de rugosidade sob o *scaling* de Family-Vicsek começam a colapsar para valores de tempo normalizado acima de -5 . Portanto, o bloco de pré-processamento consiste em selecionar os dados de rugosidade e tempo e descartar valores que sejam menores que os do intervalo de interesse. Após o treinamento, o modelo de aprendizado de máquina irá gerar a curva de rugosidade normalizada, a qual será submetida à transformação reversa do *scaling*, a fim de obter o crescimento esperado.

Contudo, este processo nos fornece apenas o crescimento final, uma vez que o crescimento inicial foi separado no início desta metodologia. Portanto, é necessário apenas o crescimento “linear” intermediário, descrito pela equação 2 para $t \ll t_x$. Para este fim, é realizada uma regressão linear entre os pontos armazenados inicialmente, e os gerados pelo modelo de aprendizado de máquina. Após estes processos, é realizada uma concatenação de todas as partes armazenadas e geradas, de forma a obter a curva de crescimento de rugosidade final.

Além de gerar curvas para comprimentos superiores, um dos objetivos deste trabalho consiste em calcular o valor de α para comprimentos que são inviáveis via simulação computacional, assim, após realizar a extrapolação, foi calculado a rugosidade de saturação tomando a média em cima da região de saturação, e a partir da Equação 7, é possível encontrar o valor de α para o limite hidrodinâmico.

$$\log(w_{sat}) = \alpha \log(L) + C. \quad (7)$$

A medida que novos pontos serão obtidos a partir do aprendizado, será possível, a partir das Equações 5 e 6, calcular as correções de α , de forma a observar o modelo proposto pela literatura para grandes comprimentos.

Por se tratar de um problema de regressão relativamente simples, não foi necessário empregar modelos de rede demasiadamente complexos, ademais que os dados de treino apresentavam ruído por terem sido gerados de um processo aleatório, portanto, um modelo, como por exemplo, uma rede neural com muitos neurônios, poderia absorver o ruído dos dados.

Para esta metodologia foi gerado duas arquiteturas de perceptron multicamadas, em que ambas possuem como função de ativação sigmoide em suas camadas ocultas, e uma saída linear. Os demais hiperparâmetros de ambas redes podem ser observadas nas Tabelas I e II, em que CO indica a quantidade de neurônios em cada camada oculta.

Tabela I: Hiperparâmetros Perceptron Multicamadas 1 (PMC1)

Batch	Erro	Otimizador	1° CO
3000	MSE	Adam	17

Tabela II: Hiperparâmetros Perceptron Multicamadas 2 (PMC2)

Batch	Erro	Otimizador	1° CO	2° CO
3000	MSE	Adam	10	3

B. Metodologia 2

Como as redes neurais são considerados aproximadores universais, a metodologia 2 tem como propósito empregar os dados de tempo e comprimento, de forma a aproximar a Equação 2, descrevendo o crescimento da rugosidade $w(L, t)$. Para tal, foram empregadas as curvas de rugosidade com comprimento $L = [2^{11}, 3000, 2^{12}, 5000, 6000, 7000, 2^{13}, 9000, 10000, 2^{14}]$ como treino, $L = 2^{15}$ validação e $L = 2^{16}$ teste.

A Figura 7 expõe o diagrama para esta metodologia. O bloco de pré-processamento consiste em aplicar a função logarítmica em todas as variáveis, tempo, comprimento e rugosidade, de forma a reduzir a escala das variáveis. Além disto, todas as variáveis são divididas por uma constante ($c = 20$), de modo que os dados estivessem contidos entre 0 e 1.

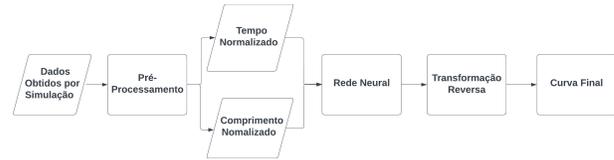


Figura 7: Diagrama de blocos para a metodologia 2.

A rede neural utilizada foi uma Perceptron Multicamadas [27], com arquitetura determinada empiricamente, onde esta possui duas camadas ocultas com função de ativação ReLU e uma saída linear. Os demais hiperparâmetros estão exposto na tabela III, em que CO indica a quantidade de neurônios na camada oculta. Após o treinamento da rede é realizado a transformação reversa, que consiste em multiplicar pela constante c , e aplicar a função exponencial.

Tabela III: Hiperparâmetros da rede neural

Batch	Erro	Otimizador	1° CO	2° CO
64	MSE	Adam	80	80

Um ponto importante desta metodologia é que ao invés de prever a rugosidade diretamente, foi modelada a saída da rede neural, de forma que esta contivesse as informações do crescimento da rugosidade do modelo de deposição balística. A saída para este modelo possui a seguinte forma

$$\hat{y} = \beta \log(t)/c + \alpha \log(L)/c - \text{NN} \quad (8)$$

sendo β e α os expoentes teóricos do modelo de interesse e NN a saída do neurônio final da rede neural.

Para a deposição balística, a Equação 2 descreve como a rugosidade cresce proporcionalmente em relação as suas variáveis, tempo e comprimento, ou seja, não nós oferece uma descrição completa de sua evolução. Assim, além de servir de referência para comparação com a metodologia 1, esta pode nos indica que existe a possibilidade de um modelo de rede neural ser capaz aprender o crescimento da rugosidade $w(L, t)$ para diferentes modelos de deposição.

Foi empregado como métrica de avaliação das metodologias o $RMSE\%$, Equação 9, entre as curvas geradas pelas redes neurais e as curvas simuladas computacionalmente.

$$RMSE\%(y, \hat{y}) = \sqrt{\sum_i \left(\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right)^2} \times 100\%, \quad (9)$$

Para comparar o desempenho de ambas as redes, foi empregado as curvas com comprimentos $L = [3500, 7500, 20000, 25000]$ para verificar qual modelo possui melhor desempenho. É importante mencionar que quando tomado o limite hidrodinâmico, as curvas de rugosidade crescem com unidades de tempo que vão de $t \sim 10^{10}$ em diante, sendo que para armazenar e gerar esta quantidade de pontos, seria necessário um hardware que esta além do disponível pelo grupo de pesquisa. Portanto, ao invés de produzir todos pontos, foi-se fixado uma quantidade igual a 10^5 para ser gerado pelas redes neurais, de forma a ficarem igualmente espaçadas em relação ao tempo de crescimento desejado.

IV. RESULTADOS

Primeiro, será analisado como a primeira metodologia reproduz os resultados simulados, para em seguida realizar extrapolações para comprimentos superiores. As Figura 8 e 9 expõe as curvas geradas pelas redes neurais propostas.

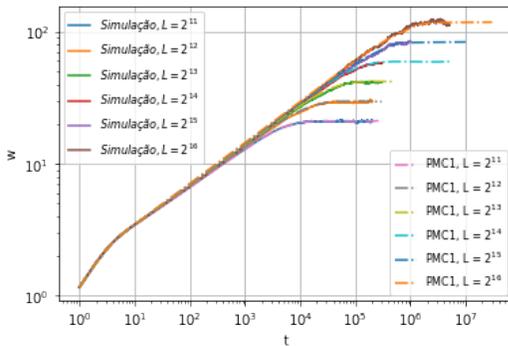


Figura 8: Extrapolação da rugosidade para os comprimentos previamente simulados com a arquitetura PMC1.

A Tabela IV expõe os valores de erro percentual das curvas geradas a partir das redes da metodologia 1, nesta é possível observar que ambas as redes propostas conseguiram obter resultados próximos e satisfatórios nas suas previsões, os erros foram menores que 2% para os comprimentos entre

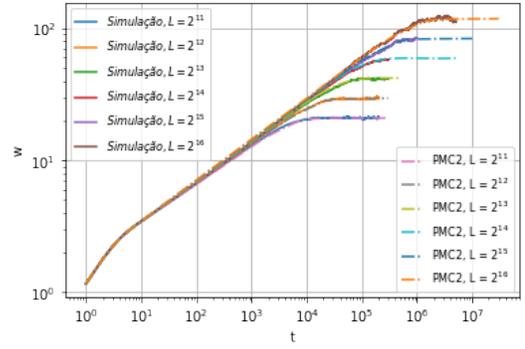


Figura 9: Extrapolação da rugosidade para os comprimentos previamente simulados com a arquitetura PMC2.

$L = [2^{11}, 2^{12}, 2^{13}, 2^{14}]$, algo esperado, já que as curvas via simulação computacional apresentam ruído aleatório e as curvas geradas apresentam uma curva média. Por possuir uma quantidade inferior de médias configuracionais, os dois últimos comprimentos, $L = 2^{15}$ e $L = 2^{16}$, tais apresentam uma quantidade maior de ruído, que conseqüentemente gerou um valor de erro maior quando comparado com as demais curvas.

Tabela IV: $RMSE\%$ entre os resultados das redes neurais e as simulações computacionais para os comprimentos simulados, para treino e teste.

$L/\%$	PMC1	PMC2
2^{11}	0,6020	0,8803
2^{12}	1,5203	0,9755
2^{13}	1,5743	1,2383
2^{14}	1,3984	0,8795
2^{15}	2,8817	1,6718
2^{16}	2,7541	2,7763

Como os resultados para os comprimentos conhecidos foram satisfatórios, foi realizado extrapolações para comprimentos superiores aos simulados, a Figura 8 expõem extrapolações de ambas as redes para os comprimentos entre $L = [2^{20}, 2^{25}, 2^{30}, 2^{35}]$.

As curvas da Figura 10 são curvas que ainda não foram registradas na literatura, sendo isto decorrente ao elevado custo computacional necessário para a sua obtenção por simulação fenomenológica tradicional. É possível notar que ambas crescem de forma similar e possuem valores de saturação próximos, tais expostos na Tabela V.

Tabela V: Valores de rugosidade de saturação para cada modelo e tamanho.

L/w_{sat}	PMC1	PMC2
2^{15}	83,879	83,637
2^{16}	118,564	117,744
2^{20}	474,734	470,620
2^{25}	2796,475	2676,330
2^{30}	15291,225	15127,173
2^{35}	85493,208	85479,984

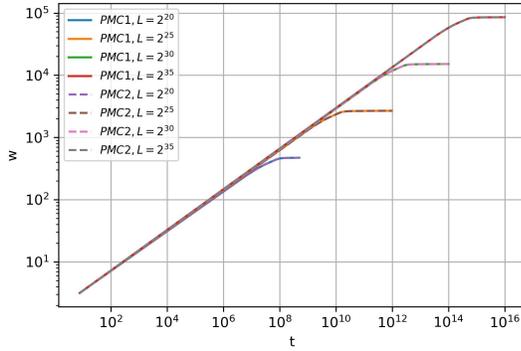


Figura 10: Extrapolação da rugosidade para os comprimentos que não possuem simulações computacionais reportadas para a metodologia 1.

A Figura 11 apresenta os resultados da metodologia 2 em comparação com a metodologia 1 para os comprimentos de $L = [2^{15}, 2^{16}, 2^{17}, 2^{18}, 2^{19}, 2^{20}, 2^{21}, 2^{22}, 2^{23}, 2^{24}, 2^{25}, 2^{30}]$, sendo as curvas contínuas da metodologia 2 e as curvas tracejadas da metodologia 1.

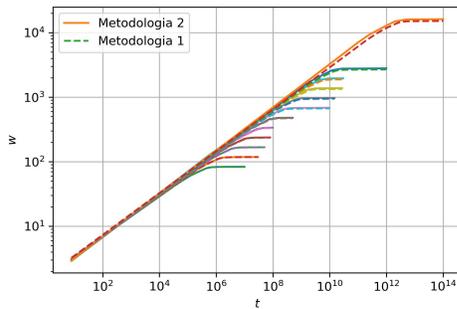


Figura 11: Curvas geradas pela segunda metodologia em comparação com a primeira metodologia para os comprimentos $L = [2^{15}, 2^{16}, 2^{17}, 2^{18}, 2^{19}, 2^{20}, 2^{21}, 2^{22}, 2^{23}, 2^{24}, 2^{25}, 2^{30}]$.

A partir da Figura 11 é possível notar que ambas metodologias geram curvas de crescimento próximas. A Tabela VI expõe a rugosidade de saturação estimada pra ambas metodologias. Além disto, foi empregado a raiz do erro quadrático médio percentual para medir a distância entre as curvas geradas por ambas metodologias.

Para comparar o desempenho de ambas as redes, foi simulado computacionalmente as curvas de evolução de rugosidade para os comprimentos $L = [3500, 7500, 20000, 25000]$. A Tabela VII expõe a raiz do erro quadrático médio percentual de todas as curvas, neste é possível notar que ambas as metodologias conseguem gerar curvas próximas as simuladas computacionalmente, em que a diferença de erro entre cada metodologia é baixa.

A partir das curvas geradas, é possível extrair a rugosidade na região estacionária para cada metodologia, e a partir desta,

Tabela VI: Rugosidade de saturação em ambas metodologias.

L	Met. 1 (PMC2)	Met. 2	RMSE%
2^{15}	83,497	83,069	0,336
2^{16}	118,096	117,861	0,199
2^{17}	166,821	167,297	0,508
2^{18}	235,531	237,274	0,966
2^{19}	331,868	336,391	1,552
2^{20}	470,638	478,774	1,955
2^{21}	668,734	684,646	2,441
2^{22}	944,730	970,161	2,701
2^{23}	1334,804	1376,267	3,243
2^{24}	1882,068	1951,773	4,055
2^{25}	2676,497	2795,742	4,148
2^{30}	15128,397	16151,518	6,349

Tabela VII: Tabela com a raiz do erro quadrático médio percentual entre as duas metodologias para as curvas de teste.

L	3500	7500	20000	25000
Error Met. 1 (PMC2)	1,305	0,872	1,477	1,737
Error Met. 2	1,340	0,865	1,588	1,739

calcular o valor do expoente α . Para a metodologia 1, foi encontrado o valor de $\alpha = 0,4991$ para o PMC1 e $\alpha = 0,5001$ para o PMC2. Na metodologia 2, foi encontrado $\alpha = 0,5072$. Como a rede perceptron multicamadas 2 teve melhor desempenho na metodologia 1, foi empregado este para calcular as correções de α , sendo estas expostas nas Figuras 12 e 13.

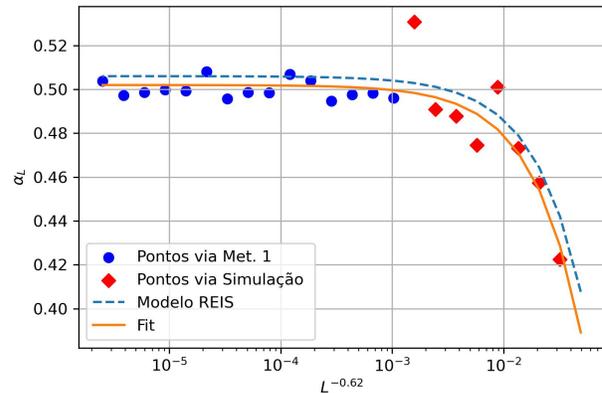


Figura 12: Correções de α_L em comparação ao registrado pela literatura para a metodologia 1.

é possível notar que ambas as metodologias incorporam as correções de escala como previsto por [10]. Contudo, as mesmas possuem uma flutuação estatística, sendo tal relacionada a sensibilidade do valor de α_L . Observa-se que a metodologia 1 gerou resultados mais satisfatórios que a metodologia 2, isto pode estar atrelado ao fato de que nesta tenta-se aproximar uma função bidimensional, $w(L, t)$, com uma pequena quantidade de curvas de crescimento, fazendo com que a rede neural perca generalidade para maiores valores de L . Uma quantidade maior de curvas para maiores comprimentos poderia produzir

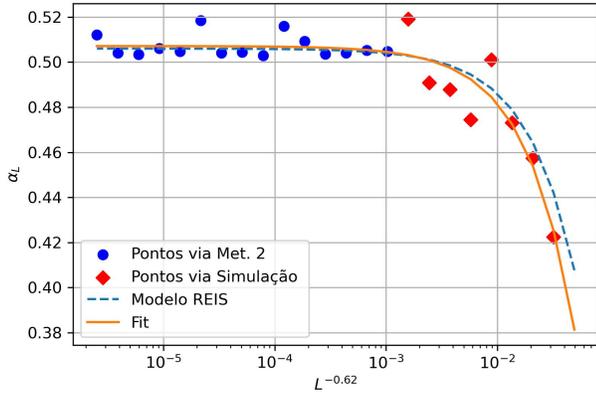


Figura 13: Correções de α_L em comparação ao registrado pela literatura para a metodologia 2.

um aprendizado mais generalizado.

Em termos de tempo computacional, a Tabela VIII expõe os principais parâmetros da simulação computacional. O termo (RI) se refere ao número de realizações independentes da simulação, o termo "Simulação" é o tempo para gerar a curva de rugosidade a partir da Equação 1 e o termo "Rede Neural" é o tempo para que a rede neural gere a mesma quantidade de pontos após treinamento. O sistema utilizado consiste de um Intel i7 9th gen. com 32gb de RAM.

Tabela VIII: Tabela com as Características do crescimento das curvas do modelo de deposição balística unidimensional.

L	RI	Unidades de Tempo	Simulação	Rede Neural
2^7	10^3	10^4	< 1 hora	–
2^8	10^3	10^4	< 1 hora	–
2^9	10^3	10^4	< 1 hora	–
2^{10}	10^3	10^4	< 1 hora	–
2^{11}	10^3	2×10^5	~ 1 hora	~ 20 segundos
2^{12}	10^3	2×10^5	~ 2 horas	~ 20 segundos
2^{13}	10^3	3×10^5	~ 5 horas	~ 30 segundos
2^{14}	10^3	3×10^5	~ 10 horas	~ 30 segundos
2^{15}	200	10^6	~ 24 horas	~ 1 minuto
2^{16}	50	5×10^6	~ 24 horas	~ 3 minutos

A partir da Tabela VIII é possível notar que quanto maior o comprimento do sistema, maior será o tempo de execução da simulação computacional. Vale ressaltar que o desejado é gerar uma curva que passe do tempo de *crossover* e chegue na região de saturação, isto pelo fato de que para adquirir o coeficiente α é necessário o valor da rugosidade na saturação. Diferentemente dos modelos fenomenológicos, os modelos de redes neurais propostos crescem com a quantidade de pontos a serem extrapolados, e não com o comprimento do sistema, assim, definindo-se uma quantidade de pontos de interesse, a regressão da curva de rugosidade desejada terá tempo constante independente do tamanho do sistema. Vale ressaltar que a Tabela VIII não considera o tempo de treinamento, em que para a metodologia 1, o tempo de treinamento

foi de aproximadamente 20 minutos, enquanto que para a metodologia 2, que possui uma quantidade superior de dados, o tempo de treinamento foi de aproximadamente 2 horas.

V. CONCLUSÕES

Neste trabalho expôs como as redes neurais podem ser empregadas para realizar a previsão da curva de crescimento da rugosidade para o modelo balístico unidimensional. Um aspecto importante dos modelos propostos é que todos estes conseguiram resultados em pequenas quantidades de tempo, enquanto via simulação computacional levaria um tempo computacional consideravelmente maior. A simulação do modelo balístico unidimensional para o comprimento de $L = 2^{16}$ durou cerca de 24 horas para 50 realizações independentes, enquanto que a rede neural gerou a mesma quantidade de pontos com curva mais suavizada, em cerca de aproximadamente 3 minutos.

A partir das curvas geradas, foi possível calcular o valor do expoente α e suas correções para o limite hidrodinâmico. É possível observar que para a metodologia 1 todos os modelos de rede conseguiram chegar a resultados muito próximos do valor esperado teoricamente, o mesmo vale para a segunda metodologia, o que indica que o modelo balístico de fato possui um valor de expoente de rugosidade igual a 0,5 para o caso unidimensional. Além disto, nossas metodologias conseguem incorporar as correções propostas por [10] de modo a evidenciar o comportamento de α ao longo dos comprimentos.

As perspectivas deste trabalho são aprofundar cada vez mais o uso de redes neurais para a previsão do crescimento do padrão da rugosidade. Empregar técnicas como *transfer learning* de forma a transferir o aprendizado de uma rede neural com ótimos resultados para outra que tente prever outro modelo de deposição. Tal abordagem pode ser efetiva para os modelos bidimensionais, tais como o modelo balístico bidimensional que possuem complexidade $\Theta(n^5)$, e modelos com difusão que possuem complexidade computacional elevada quando é tomado altas temperaturas.

VI. AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Bolsas nº 310311/2020-9 e 309561/2022-1, e pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ), Grant No. E-26/203.860/2022. Este estudo foi parcialmente financiado pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

REFERENCIAS

- [1] Paul Meakin. "The growth of rough surfaces and interfaces". Em: *Physics Reports* 235.4-5 (1993), pp. 189–289.
- [2] Subhankar Ray, Baisakhi Mal e J Shamanna. "Generalized ballistic deposition in 2 dimensions: scaling of surface width, porosity and conductivity". Em: *arXiv preprint arXiv:1503.01047* (2015).
- [3] Joachim Krug. "Origins of scale invariance in growth processes". Em: *Advances in Physics* 46.2 (1997), pp. 139–282.

- [4] Baisakhi Mal, Subhankar Ray e J Shamanna. “Surface properties and scaling behavior of a generalized ballistic deposition model”. Em: *Physical Review E* 93.2 (2016), p. 022121.
- [5] Russell Messier. “Thin film deposition processes”. Em: *MRS Bulletin* 13.11 (1988), pp. 18–21.
- [6] Sayan Bhowmik e Ananth Govind Rajan. “Chemical vapor deposition of 2D materials: A review of modeling, simulation, and machine learning studies”. Em: *Iscience* (2022), p. 103832.
- [7] Christoph Grüner et al. “Avoiding anisotropies in on-lattice simulations of ballistic deposition”. Em: *physica status solidi (b)* 258.3 (2021), p. 2000036.
- [8] Jyothi Gutpa et al. “PVD techniques proffering avenues for fabrication of porous tungsten oxide (WO₃) thin films: A review”. Em: *Materials Science in Semiconductor Processing* 143 (2022), p. 106534.
- [9] T Gehling, K Treutler e V Wesling. “Wire electrode of 5754 aluminum modified by PVD-thin film depositions”. Em: *Welding in the World* (2023), pp. 1–9.
- [10] F.D. Aarao Reis. “Universality and corrections to scaling in the ballistic deposition model”. Em: *Physical Review E* 63.5 (2001), p. 056116.
- [11] Yiming Lou e Panagiotis D Christofides. “Estimation and control of surface roughness in thin film growth using kinetic Monte-Carlo models”. Em: *Chemical Engineering Science* 58.14 (2003), pp. 3115–3129.
- [12] Guanghui Song, Yaojin Wang e Daniel Q Tan. *A review of surface roughness impact on dielectric film properties*. 2022.
- [13] TVSMR Bhushan et al. “Effect of substrate surface roughness on adhesion of titanium nitride coatings deposited by physical vapour deposition technique”. Em: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. Vol. 981. 4. IOP Publishing. 2020, p. 042022.
- [14] Johannes Rittinger et al. “Impact of different polyimide-based substrates on the soft magnetic properties of NiFe thin films”. Em: *Smart Sensors, Actuators, and MEMS VII; and Cyber Physical Systems*. Vol. 9517. SPIE. 2015, pp. 442–450.
- [15] Alicia Larena et al. “Effect of surface roughness on the optical properties of multilayer polymer films”. Em: *Applied Surface Science* 187.3 (2002), pp. 339–346. ISSN: 0169-4332. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0169-4332\(01\)01044-3](https://doi.org/10.1016/S0169-4332(01)01044-3). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433201010443>.
- [16] Tobias Steege et al. “Prediction of Surface Roughness in Functional Laser Surface Texturing Utilizing Machine Learning”. Em: *Photonics*. Vol. 10. 4. MDPI. 2023, p. 361.
- [17] Niranjan Sitapure e Joseph Sang-Il Kwon. “Neural network-based model predictive control for thin-film chemical deposition of quantum dots using data from a multiscale simulation”. Em: *Chemical Engineering Research and Design* 183 (2022), pp. 595–607.
- [18] Chunyang Xia et al. “Modelling and prediction of surface roughness in wire arc additive manufacturing using machine learning”. Em: *Journal of Intelligent Manufacturing* (2022), pp. 1–16.
- [19] Paul Meakin et al. “Ballistic deposition on surfaces”. Em: *Physical Review A* 34.6 (1986), p. 5091.
- [20] Kasturi Banerjee, J Shamanna e Subhankar Ray. “Surface morphology of a modified ballistic deposition model”. Em: *Physical Review E* 90.2 (2014), p. 022111.
- [21] Ahmed Roman, Ruomin Zhu e Ilya Nemenman. “Ballistic deposition with memory: a new universality class of surface growth with a new scaling law”. Em: *arXiv preprint arXiv:2202.11224* (2022).
- [22] Jürgen Blum e Rainer Schräpler. “Structure and mechanical properties of high-porosity macroscopic agglomerates formed by random ballistic deposition”. Em: *Physical review letters* 93.11 (2004), p. 115503.
- [23] A-L Barabási, Harry Eugene Stanley et al. *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge university press, 1995.
- [24] Bahman Farnudi e Dimitri D Vvedensky. “Large-scale simulations of ballistic deposition: The approach to asymptotic scaling”. Em: *Physical Review E* 83.2 (2011), p. 020103.
- [25] F.D. Aarao Reis. “Roughness fluctuations, roughness exponents and the universality class of ballistic deposition”. Em: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 364 (2006), pp. 190–196.
- [26] Fereydoon Family e Tamas Vicsek. “Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 18.2 (1985), p. L75.
- [27] Ivan Nunes Da Silva, Danilo Hernane Spatti e Rogério Andrade Flauzino. “Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas-curso prático”. Em: *São Paulo: Artliber* (2010).