

Расширенный семинар
«Методы численного моделирования актуальных задач»
Таруса, 11-13 февраля 2009 года

Критические явления при
росте двумерных структур.

А.Ю. Меньшутин и Л.Н. Щур

FRIDAY 13

Введение



Примеры структур роста



Структура
Лихтерберга

Медный агрегат

Колония бактерий

Общее свойство — фрактальная, сильно разветвленная структура.

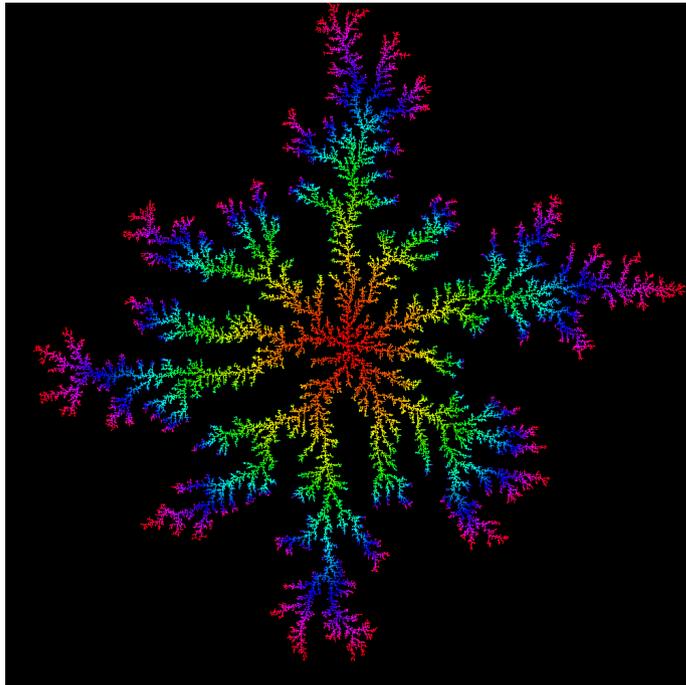
Основная геометрическая величина — фрактальная размерность D , связывающая число частиц в кластере и его характерный размер R

$$N \propto R^D$$

Введение

T.A. Witten & L.M. Sander, Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon, PRL 47 (1981) 1400.

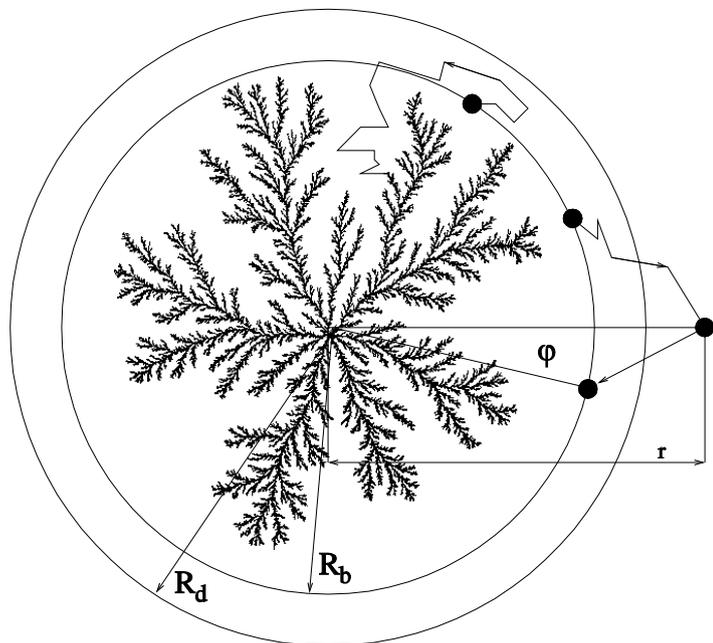
- На **квадратной решетке** имеется частица-зародыш (занятая **клетка**).
- Вдали от зародыша рождается новая частица.
- Новая частица совершает **случайное блуждание** на плоскости.
- Если новая частица подходит вплотную к занятой клетке, она прилипает (клетка становится занятой).
- Если частица уходит далеко от зародыша — она уничтожается.
- Рождение новой частицы и повтор процесса.



- 1) Какова фрактальная размерность D
- 2) Зависит ли D от способа вычисления R , от вида используемой решетки
- 3) Каковы асимптотические свойства таких объектов
- 4) Проверка аналитических предсказаний и сравнение различных моделей между собой требует вычисления фрактальной размерности с высокой точностью

Алгоритм

Наиболее эффективная реализация алгоритма — в безрешеточном случае:



- 1) **Частицы — окружности** единичного радиуса.
- 2) В начале координат находится частица-зародыш.
- 3) В случайном месте на окружности радиуса R_b рождается новая частица.
- 4) Новая частица совершает броуновское движение до тех пор, пока она не прилипнет.
- 5) Если частица выходит за окружность R_d ($R_d > R_b$) она **возвращается** на окружность R_b с вероятностью

$$W(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \frac{x^2 - 1}{x^2 - 2x \cos \varphi + 1}, \quad x = r / R_b$$

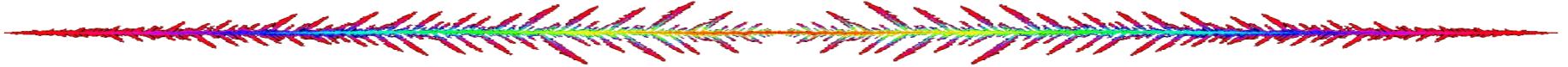
- 6) Запуск новой частицы и повтор процесса с шага 3.

Часто, $R_d \gg R_b$ и правило возврата частиц заменяется правилом уничтожения, что в итоге приводит к образованию неустойчивости в росте и необходимости использования *уменьшения шума*.

Алгоритм



Алгоритм

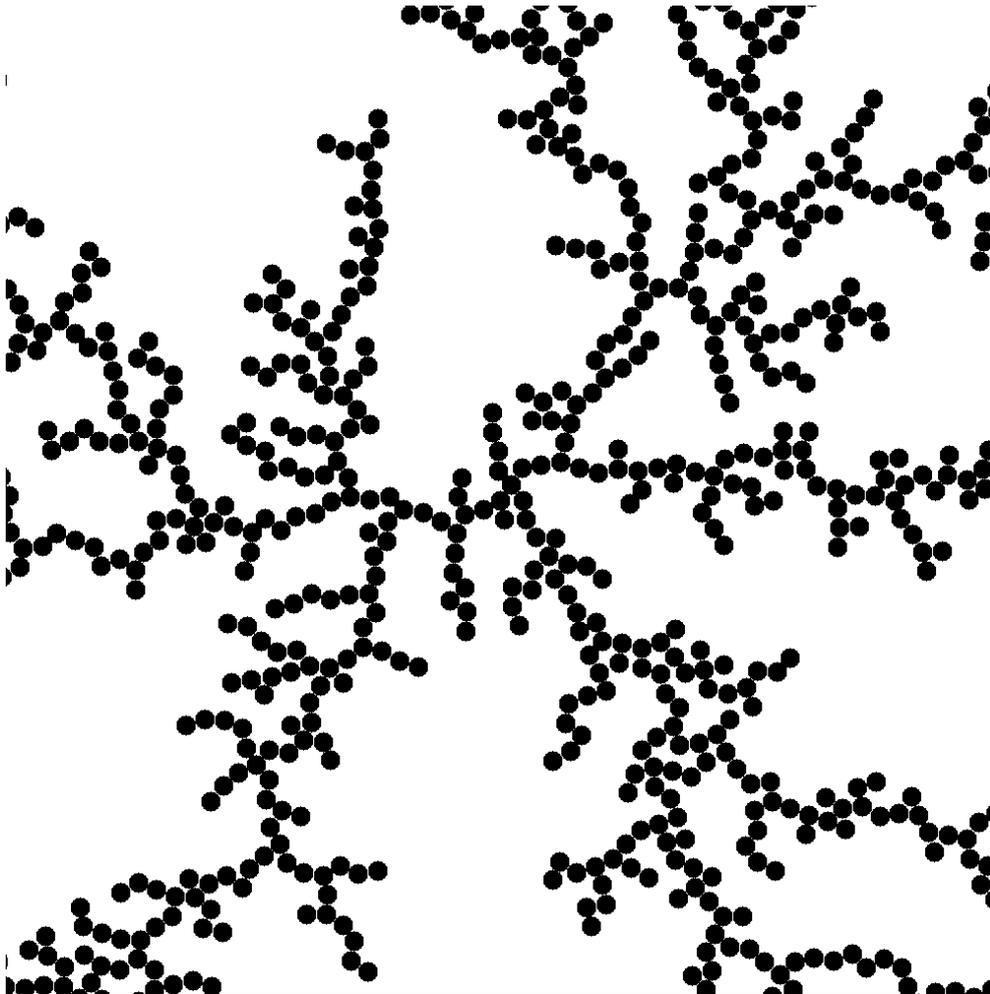


- 1) Необходима проверка столкновения с кластером на каждом шаге — надо ограничить число частиц кластера для проверки.
- 2) Частица, находящаяся вдали от кластера, может двигаться с большим шагом. Ее шаг должен быть меньше размеров свободной области.
- 3) Необходим эффективный алгоритм для поиска размеров свободной области.

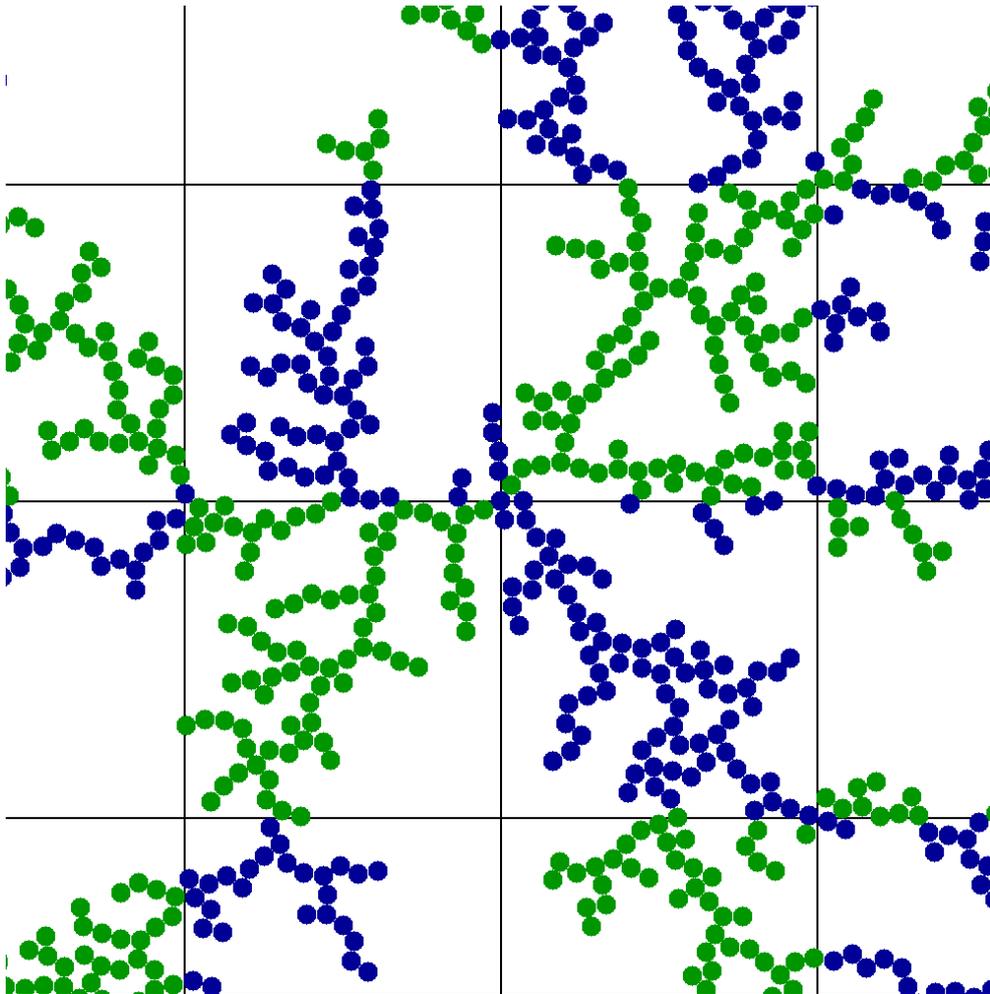
Задача проверки столкновения и поиска размеров свободной области решается одним и тем же методом.

Численный алгоритм для определения размеров свободной области, который мы используем, есть комбинация двух алгоритмов — Болла (R.C. Ball) и Микена (P. Meakin).

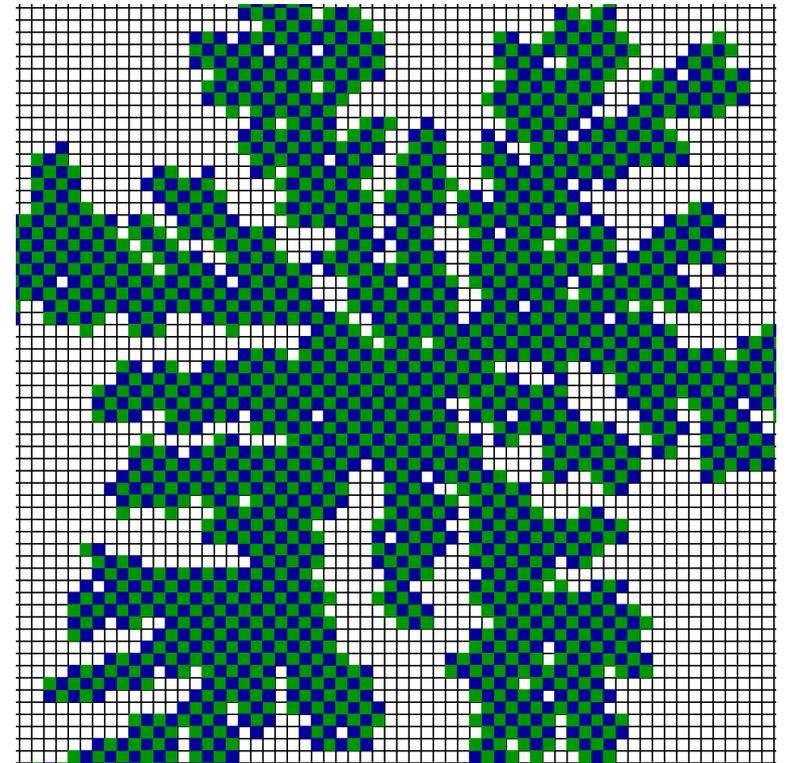
Алгоритм



Алгоритм



Вся плоскость разбита на ячейки размером 32.
Каждая ячейка хранит координаты частиц, лежащих в ней, а также размер свободной области.



Алгоритм

5	5	5	5	4	4	4	4	4	4
4	4	4	4	4	3	3	3	3	3
3	3	3	3	3	3	2	2	2	2
2	2	2	2	2	3	2	1	1	1
1	1	1	1	2	3	2	1		
1			1	2	3	2	1		1
1	1		1	2	3	2	1	1	1
1			1	2	2	2	2	2	2
		1	1	1	2	3	3	3	3
				1	2	3	4	4	4

Размеры свободной области определяются как размер вписанного квадрата с точностью до размера ячейки

При занятии новой ячейки (редкое событие) происходит пересчет размеров свободных областей во всем пространстве.

Возмущение распространяется непрерывно => перебор можно выполнять не по всему пространству

Максимальный размер отслеживаемой свободной области — 15 ячеек.

Вблизи кластера (ячейки с номером 1 на рисунке) — выполняется точное нахождение размеров свободной области.

Для больших кластеров используется две иерархических сетки.

Алгоритм



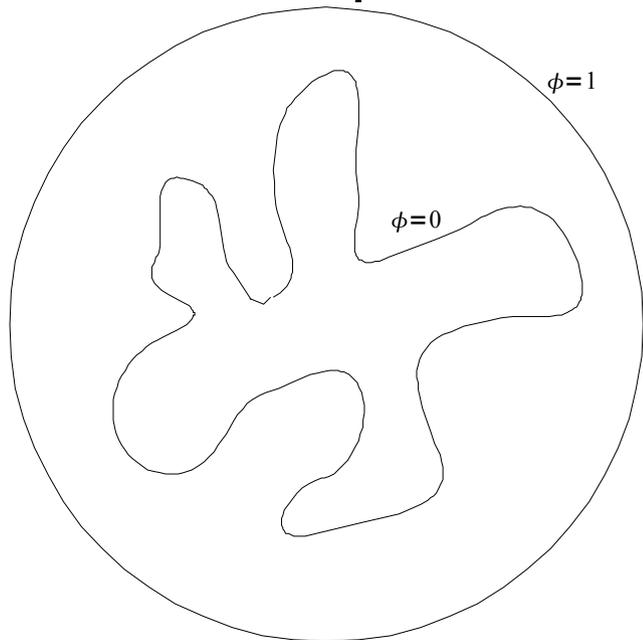
Другие численные алгоритмы.

Модель диэлектрического пробоя
— DBM — обобщение модели
DLA

Решение уравнения Лапласа с гран.
условиями и поиск вероятности роста
 $P(r)$ в каждой точке поверхности.

$$\nabla^2 \phi = 0$$

$$P(r) = |\nabla \phi(x)|^\eta$$



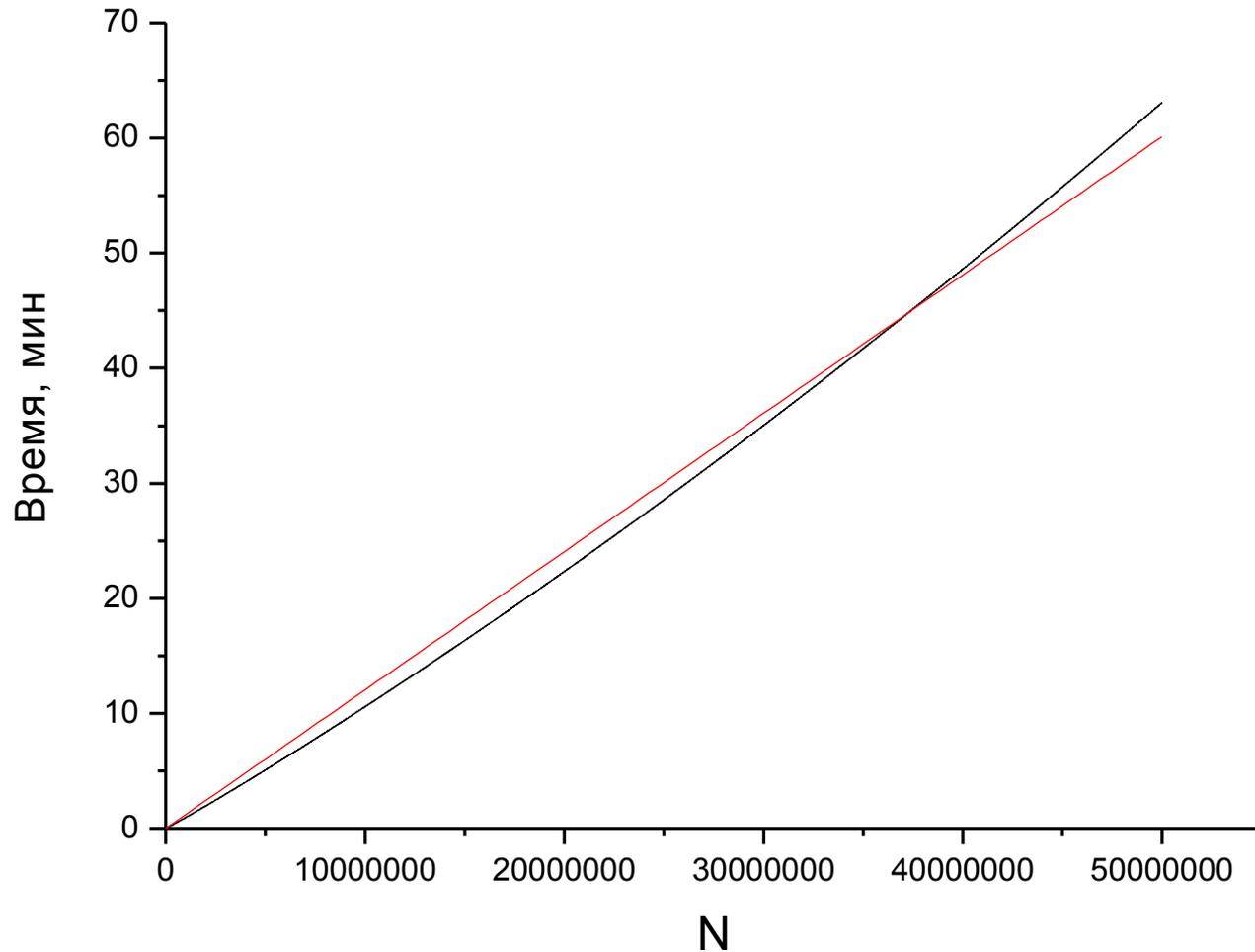
Метод конформных отображений
Хастингса и Левитова.

Решение уравнения Лапласа методом
итеративных конформных
отображений. Поиск отображения
внешности кластера из N частиц на
внешность окружности.

Алгоритм



Реализация предложенного алгоритма позволяет построить 1 кластер из 50 млн. частиц за 60 минут (в ИТФ на кластере Парма <http://parma.chant.ru/>).



Время практически линейно по N

Измерение фрактальной размерности



Скейлинговое соотношение связывает число частиц в кластере N и его линейный размер R .

$$N \propto R^D$$

R может быть средним по ансамблю, средним по гармонической мере, максимальным размером кластера, размером окружности и т.д.

Если $r_i(N)$ — координата N -ой частицы в i -ом ансамбле, то

$$\langle r \rangle = 1/K \sum_{i=1}^K r_i(N)$$

называется средним по ансамблю

Если вероятность роста в точке на поверхности кластера равна dq то

$$R_{dep}^{hm} = \int r dq$$

есть среднее по гармонической мере

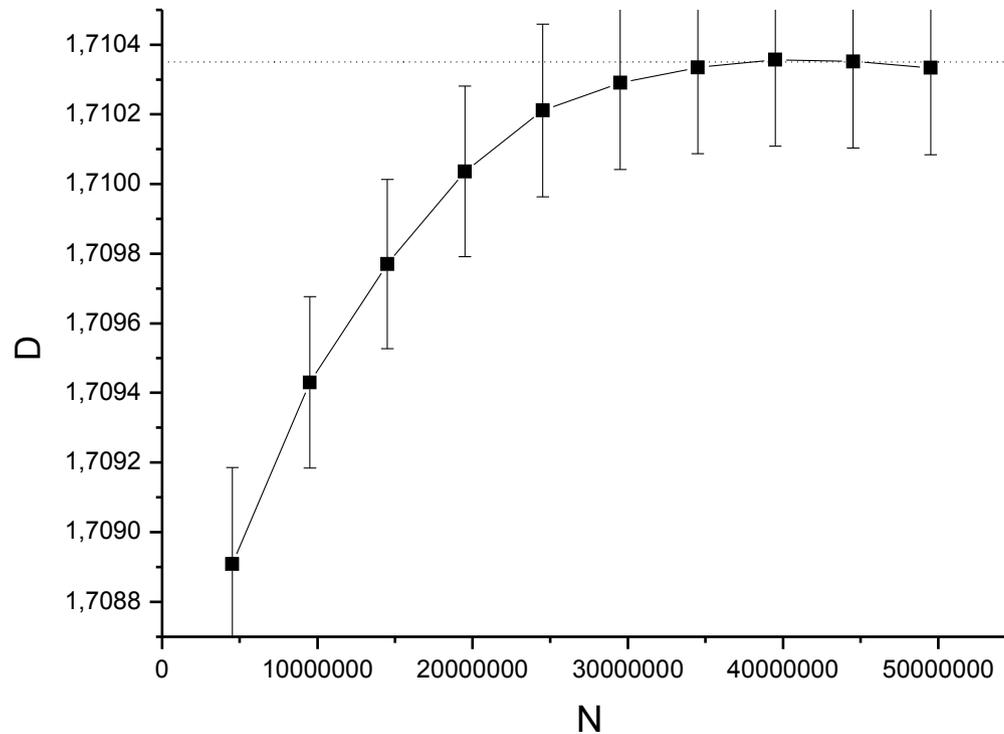
	Definition 1	D	Definition 2	D
R_{dep}	$\langle r \rangle$	1.70942(46)	$\langle \int r dq \rangle$	1.70922(97)
R_2	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}$	1.71003(45)	$\langle \sqrt{\int r^2 dq} \rangle$	1.7087(11)
R_{gyr}	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \langle r^2 \rangle_k}$	1.71008(96)	—	—
R_{eff}	—	—	$\langle \exp(\int \ln r dq) \rangle$	1.70944(87)
ξ	$\sqrt{R_2^2 - R_{dep}^2}$	1.74(3)	—	1.69(7)

Результаты получены по ансамблю из 100 кластеров, каждый по 50 млн. частиц

Измерение фрактальной размерности



Фрактальная размерность ансамбля из 1000 кластеров по 50 млн. частиц.



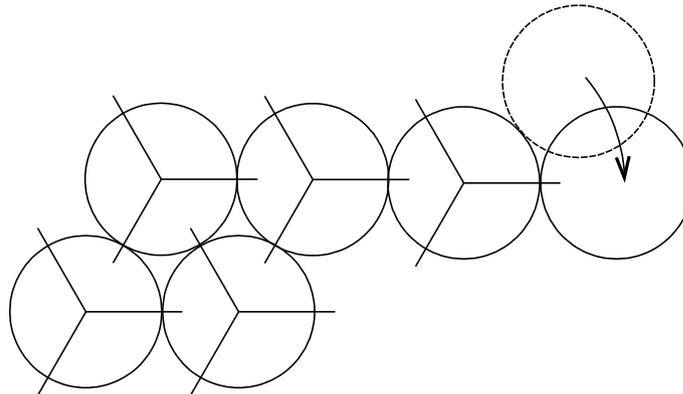
$$D=1.7104(3)$$

Анизотропные кластеры

На решетке свойства кластеров DLA отличаются от безрешеточных. Рост (например, на квадратной решетке) преимущественно происходит вдоль осей решетки. Кластеры имеют более регулярную структуру => меньше флуктуации.

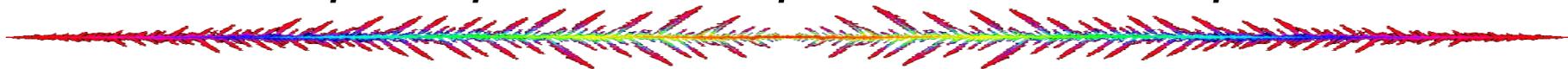
Наиболее просто реализовать решеточный алгоритм путем изменения стандартного безрешеточного следующими правилами.

- 1) Каждая частица-кластера имеет N_{fr} антенн
- 2) Соответствующие антенны на разных частицах сонаправлены
- 3) При добавлении новой частицы она смещается к ближайшей антенне.

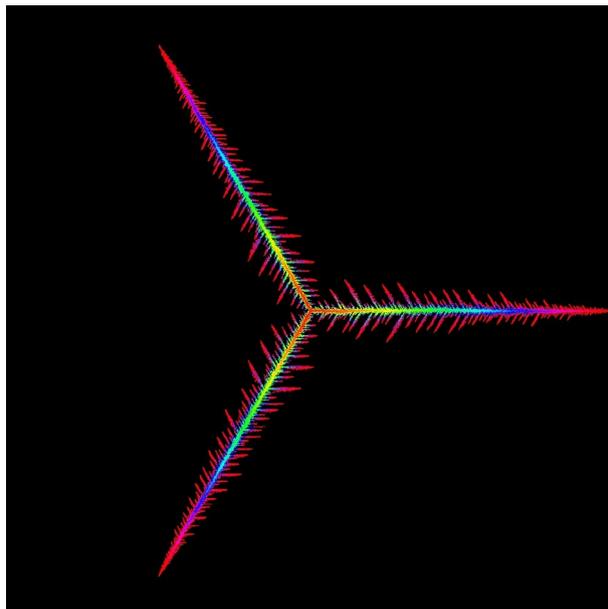


Варьируя число антенн можно перейти к безрешеточному пределу.

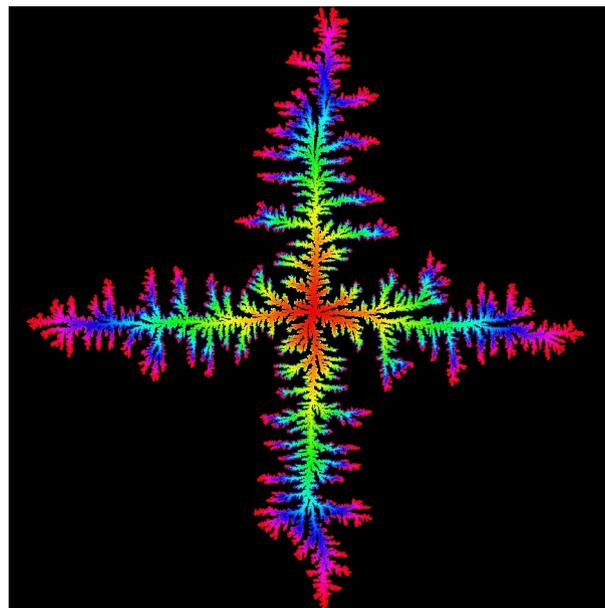
Примеры анизотропных кластеров



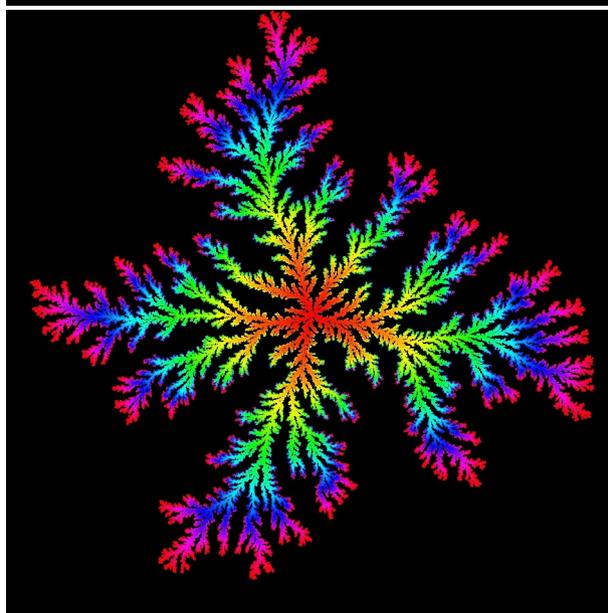
3



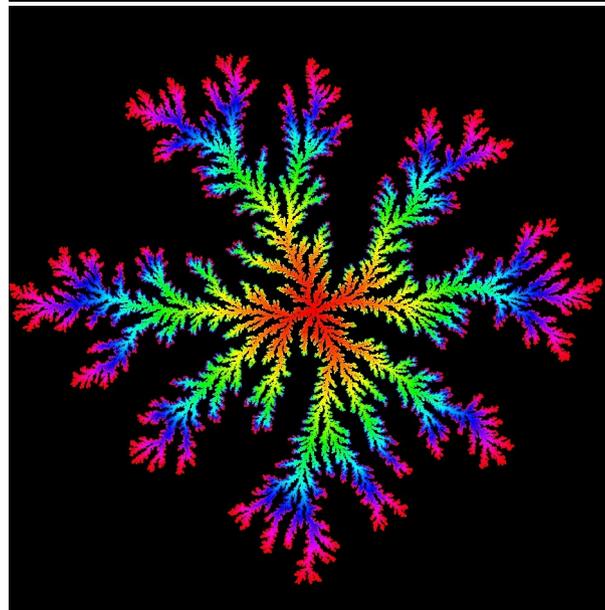
4



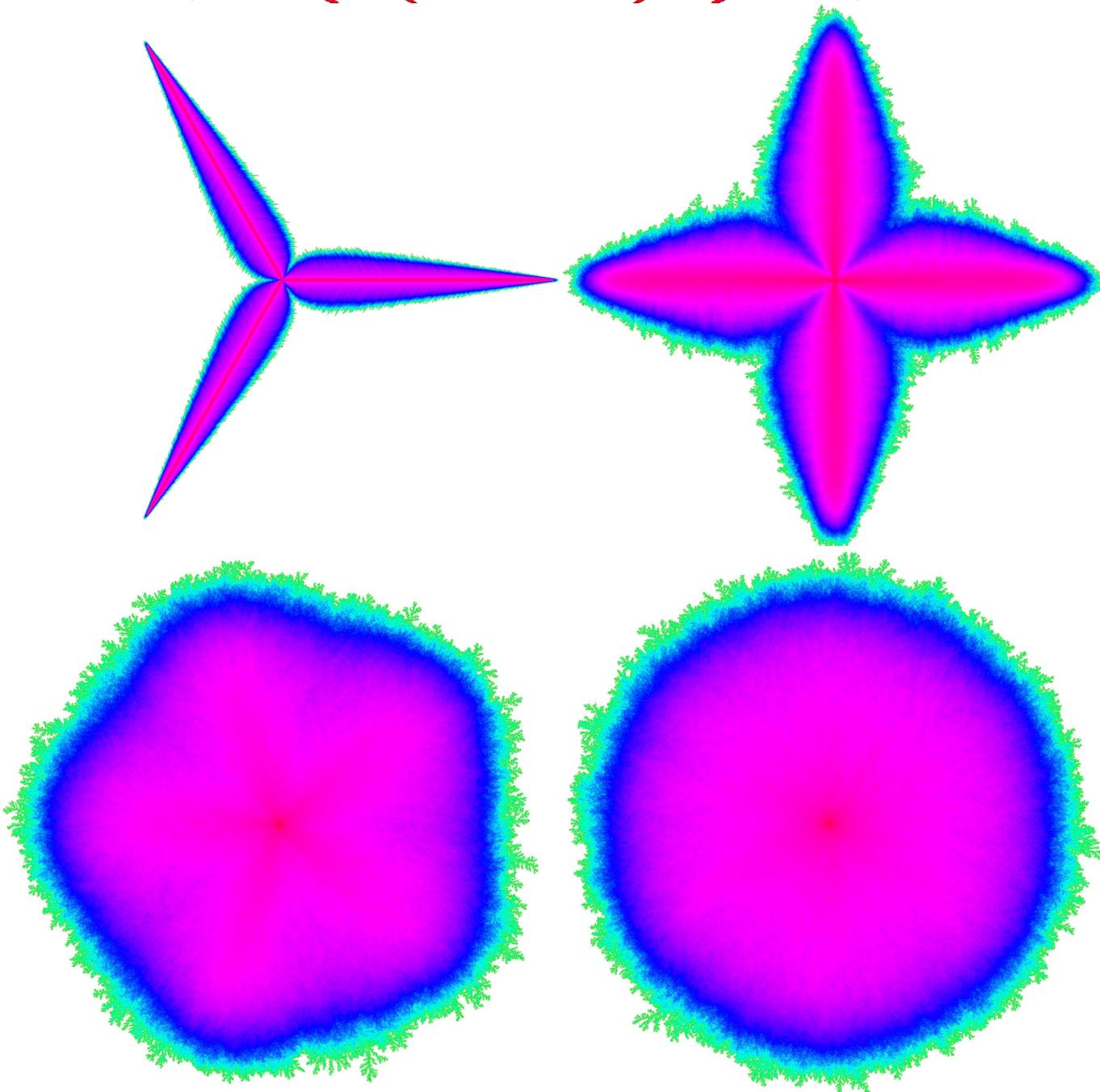
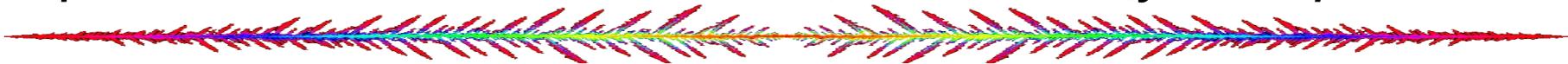
5



6



Средняя плотность частиц на единицу поверхности

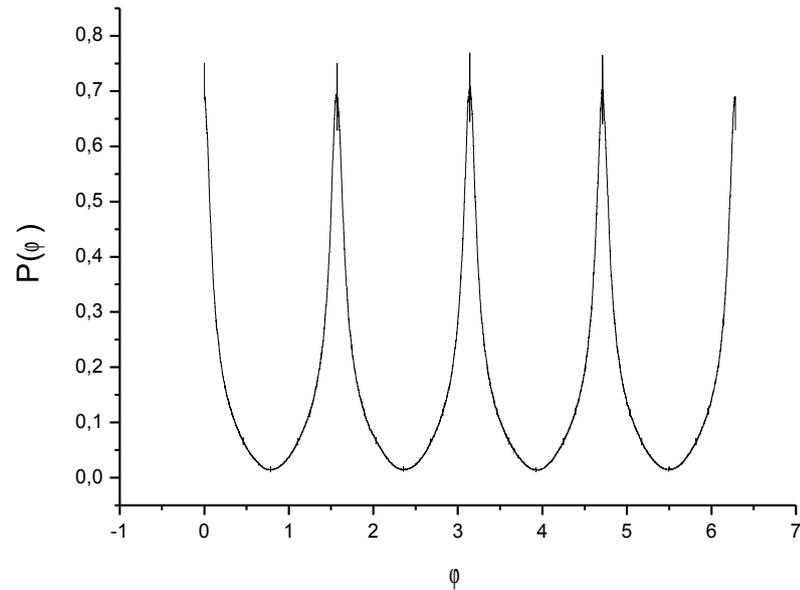
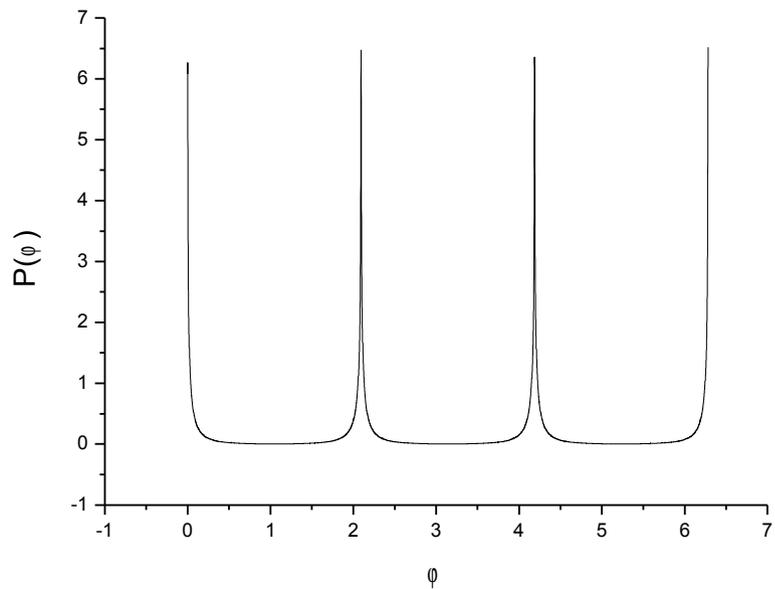


Плотность частиц по углу



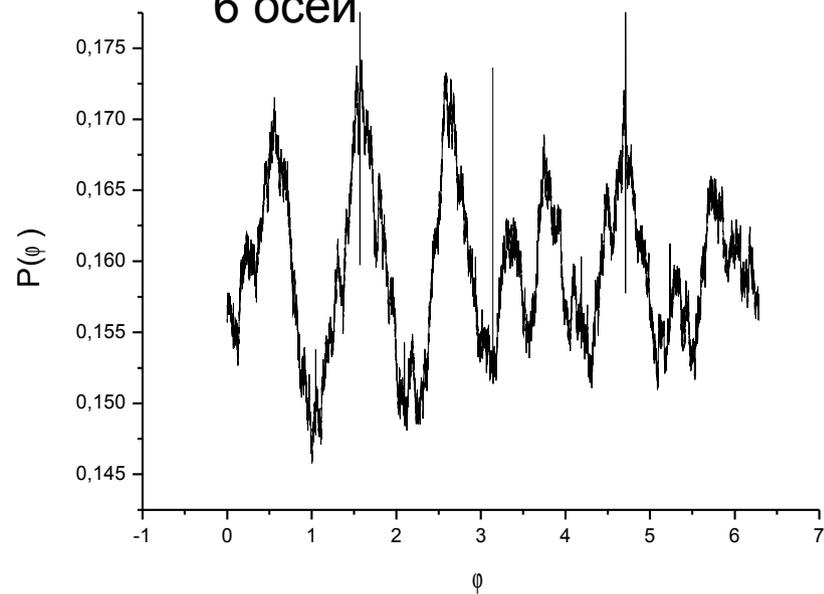
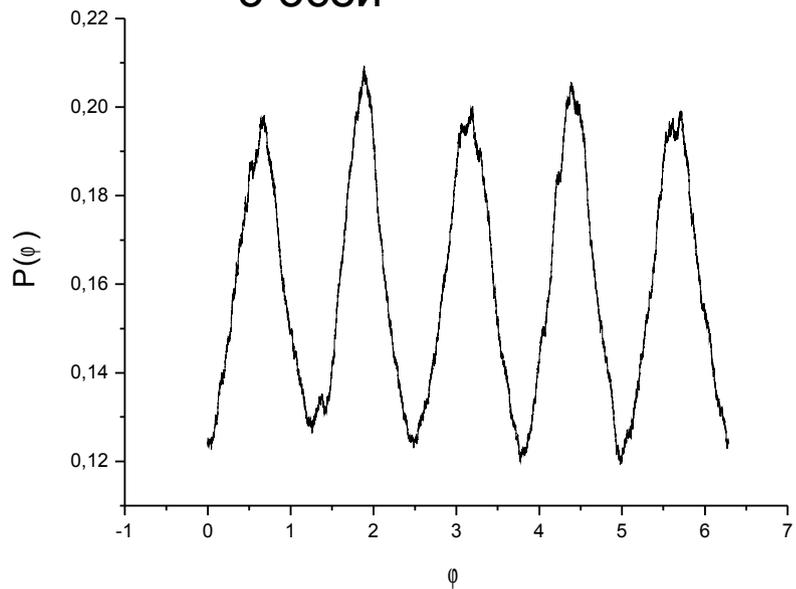
3 оси

4 оси



5 осей

6 осей



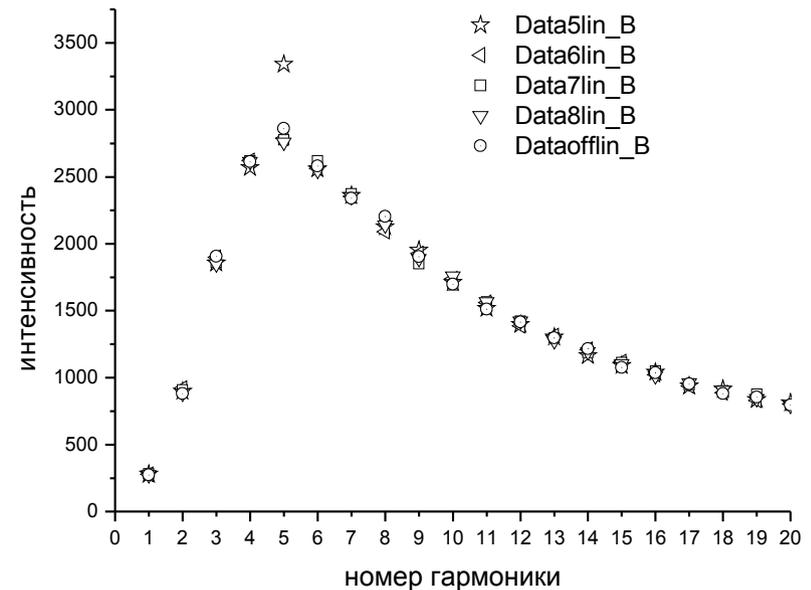
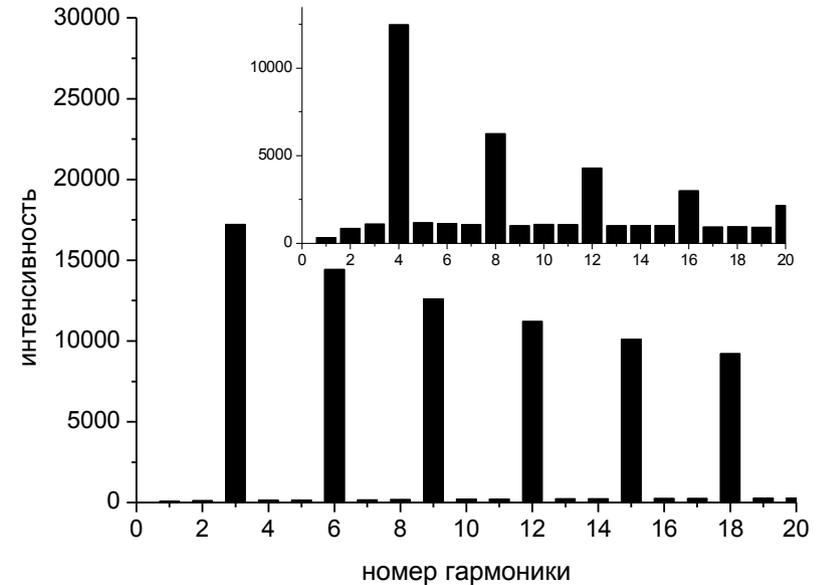
Спектр плотности частиц по углу

$$P(\phi) = a_0 + \sum a_k \sin(kx) + b_k \cos(kx).$$

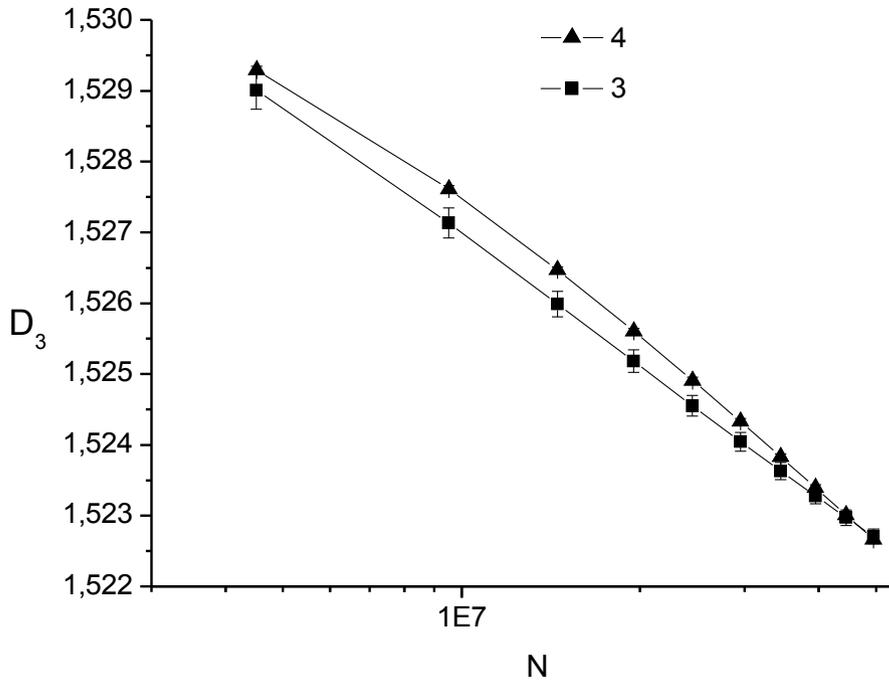
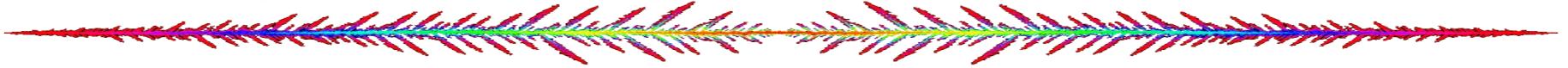
$$I_k = \sqrt{a_k^2 + b_k^2}$$

Кластеры с Nfr=3,4 имеют четко выраженную симметрию соответствующего порядка

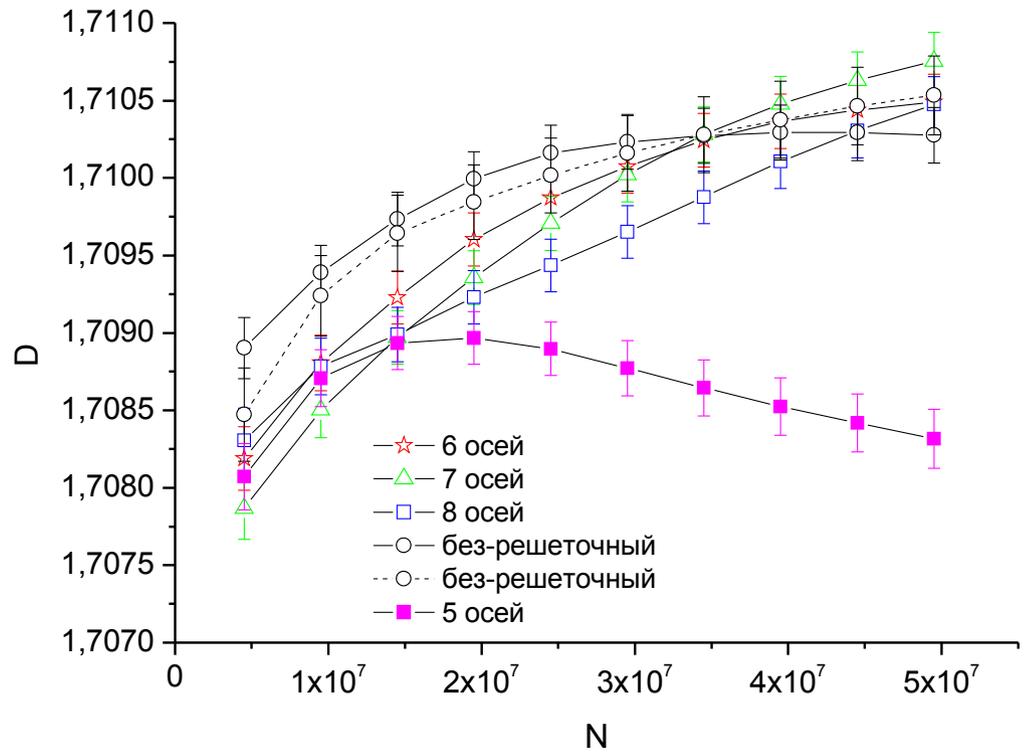
Кластеры с Nfr>5 имеют одинаковый спектр включающий в себя все гармоники.



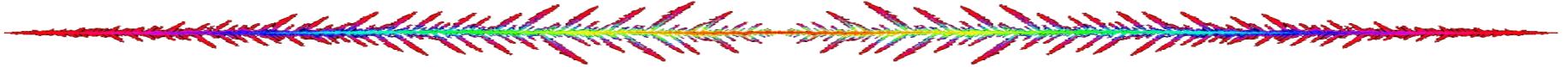
Оценка фрактальной размерности



$$D=A+B \cdot \log(N)$$



Заключение. Основные результаты



- Разработан эффективный численный алгоритм для генерации кластеров DLA.
- Изучена зависимость фрактальной размерности от размеров кластера.
- По ансамблю из 1000 кластеров по 50 млн. частиц вычислена фрактальная размерность $D=1.7104(3)$.
- Реализован алгоритм для построения псевдорешеточных кластеров с варьируемой анизотропией и обнаружен критический переход в свойствах таких кластеров.