生长问题:

- 自然界有很多物质形态,象Gold Black, coagulated aerosols等等都是颗粒聚集呈现非常纤细的形态。
- 这些聚集体的空间相关函数与尺度都呈幂指数关系,其形成过程具有强烈的动力学特征。
- 与此类似的平衡结构有Eden growth model生长模型,random animals随机动物,self-avoiding walk自规避行走和percolating clusters渗流集团。
- 前者是动力学结构,后者是平衡结构。



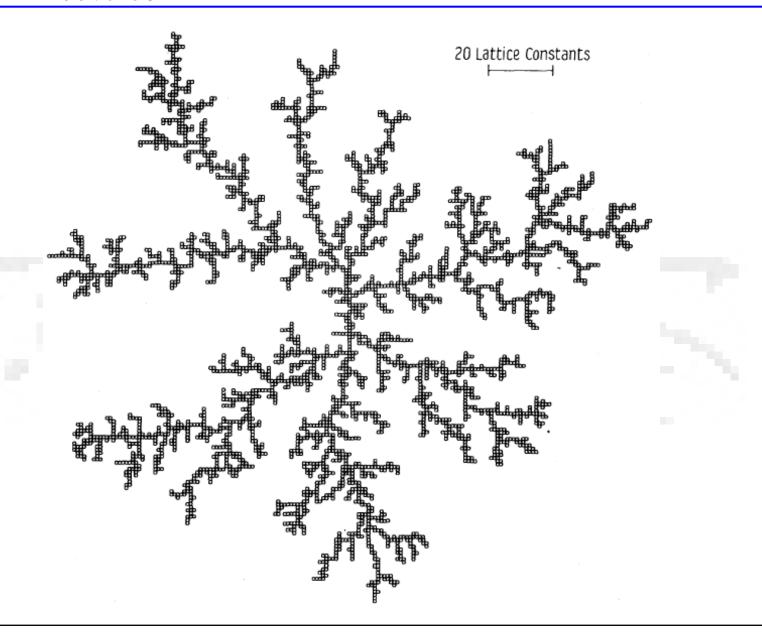
DLA模型:

- DLA模型是Eden模型的另一个变种,其主要差别是加进了动力学效应:颗粒不是随机加在已存在颗粒周围,而是通过从远处随机扩散来实现sticking,进而生长。
- 具有随机扩散的动力学会变得十分不同!扩散拉普拉斯方程!
- (1) 加入了动力学行为后形成的结构有什么特征?
- (2) 宏观描述背后的微观机理是什么?
- (3) 如何与非线性动力学联系起来?



- DLA模型基本步骤如下:
- (1)点阵原点存在一个颗粒;
- (2)第二个粒子从远处某个随机位置发出,空间进行随机行走,直
 到碰上一个已存在的颗粒,则此颗粒固定下来。
- (3)重复过程(1)和(2)。
- (4)如果颗粒碰上边界,此颗粒被舍弃。
- 这种生长一个突出的特点是越是向外伸展的聚集体枝叉生长得越快,即所谓"shadowed"效应,因此聚集体比Eden模型要开放。







- 相关性分析:上图是一个典型的正方点阵模拟的DLA cluster,在
 三角点阵或者无规点阵里面一样。
- 结构分析手段之一是空间相关函数。聚集体密度的定义是:

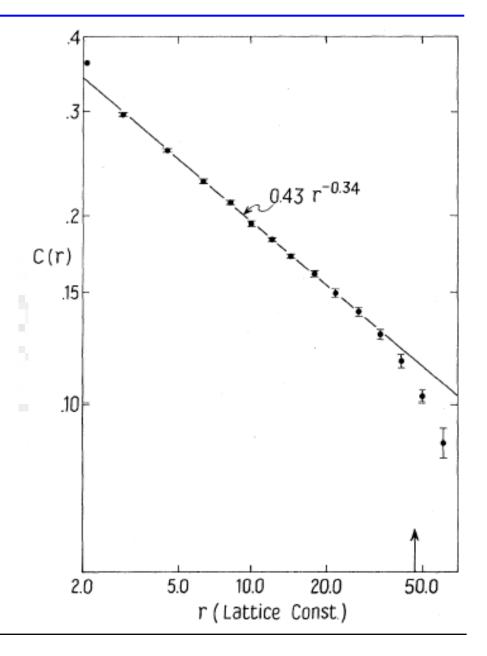
$$\begin{cases} \rho(\vec{r}) = 1 & \text{if occupied} \\ \rho(\vec{r}) = 0 & \text{if not yet} \end{cases}$$

• 一个含N个颗粒的聚集体相关函数定义如下,这个定义只是对系 综平均相关函数的近似表达

$$C(r) \equiv N^{-1} \sum_{r'} \rho(r') \rho(r'+r), \qquad \langle \rho(\vec{\mathbf{r}}') \rho(\vec{\mathbf{r}}'+\vec{\mathbf{r}}) \rangle / \langle \rho(\vec{\mathbf{r}}') \rangle$$



- 只要r远小于聚集体尺度,上述相关函数应该只与距离r相关。
- 对上图DLA聚集体的分析计算 得到相关函数如右图所示,数 据是对六个3000颗粒的
 aggregates沿各个方向统计平均的结果。





• 重要的是幂指数 相关性。

• 对三角点阵有类似的幂指数结果

0

其它结果总结在表 *I* 中。

 $C(\gamma) \sim \gamma^{-0.343\pm0.004}$

TABLE I. Values of the correlation exponent A for diffusion-limited aggregation model and other systems.

	A	
	Two dimensions	Three dimensions
Diffusion-limited aggregation:		
Square lattice, average of six clusters of		
2079-3609 particles in size (Fig. 2).	0.343 ± 0.004^{a}	
Triangular lattice, average of three	0.007 + 0.018	
clusters of 1500–2997 particles. Radius of gyration, weighted average of A	0.327 ± 0.01^{a}	
values inferred for six clusters of 999-3000		
particles, Eq. (5).	0.299 ± 0.02^a	
Koch curve with $A = 2D = 0.416$, measured average correlation function of seven curves, translated and rotated at random.	0,42	
Metal-particle aggregates, correlations of particle density from micrographs, Ref. 3.	0.32±0.01 ^b	· 1.32 ± 0.01°
Self-avoiding walk (flight), correlations of step density, Ref. 6. Percolation, from radius of gyration of	0.667	1.33
clusters at threshold, Eq. (5), Refs. 5 and 7.	~0.2	0.9
Random animals from radius of gyration, Eq. (5), Ref. 5.	0.46	1.18



- 分形分析: DLA所给予我们直观的分形特征指导我们进行分形分析。先从数学上和Koch结构开始。
- 利用上面的空间相关函数方法进行分析得出幂指数为-0.42,而 Koch结构的分形维严格上是*D=ln3/ln2*=1.585=2.0-0.42。
- 在 Hausdorff 集合中密度相关具有如下形式:

$$\langle \rho(\vec{\mathbf{r}}')\rho(\vec{\mathbf{r}}'+\vec{\mathbf{r}})\rangle \sim \gamma^{D-d} \equiv \gamma^{-A}$$
.

可以理解,一个开放的体系空间相关性总是随着距离而衰减的。我们来看看如何推出这一关系。



- 所谓 Hausdorff 集是指这样一个空间,它可以被半径为 a 的物体填充,但拓扑学上看并没有填满。而半径为 a 的物体个数 K(a) 按照 a^{-D} 变化。这是我们前面讲分形维定义时已经讲到。
- 这样空间体积为 $V=\Sigma K(a)a^d\sim\Sigma a^{d-D}$ 。而每一个物体的平均体积 $N(a)\sim 1/K(a)\sim a^D$ 。按照空间相关函数的定义,我们有:

$$a^{D} \sim N(a) = \int_{0}^{a} d^{d} \gamma \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle_{\text{origin occupied}}$$

$$= \int_{0}^{a} d^{d} \gamma \langle \rho(\mathbf{r}) \rho(0) \rangle / \langle \rho(0) \rangle,$$

$$\langle \rho(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}' + \mathbf{r}) \rangle \sim \gamma^{D-d} \equiv \gamma^{-A}.$$



- 这里d是空间维数。可以看出,要满足上式,相关函数必须是第二行的形式,因为将相关函数表达式代入上式就得到 $N(a)\sim a^D$ 。
- 记住:不要管系数的变化,只管幂指数的变化。
- 在r很大或者很小时,相关函数对幂指数律的偏离是因为存在一个下限尺度和上限尺度。
- 当然,更为直接的是颗粒数目N对聚集体回转尺寸R的幂指数律关系:

$$N(a) \sim a^D$$
 for $a \leq R$, $N \sim R^D = R^{d-A}$.



- 相关函数对尺度的幂指数关系说明了DLA聚集体具有标度不变性 ,这与平衡统计力学中的自回避行走,渗流集团和相变过程的临 界现象相似。
- 但是一个很大的不同是DLA模型的标度不变性是因为不可逆的动力学生长过程,而上述那些行为则是源自平衡态系综。



- 微观输运过程分析一为什么是非线性问题?
- 从输运动力学角度分析, **DLA**模型与枝晶生长模型可以类比。既 然加入了扩散动力学, 那么可以从微观扩散角度分析问题。

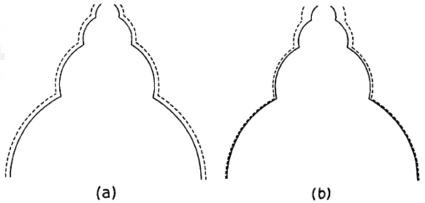


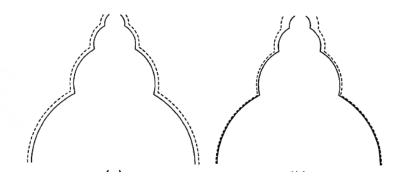
FIG. 2. Growth of a tower of spheres according to (a) the Eden model and (b) DLA.



 聚集体周边某一位置r在随机行走的第n步俘获一个颗粒的概率 应该与此处此时的浓度梯度 u(r,n) 成正比,而 u(r,n) 应该与第 n步访问过位置r的随机行走数目成比例,虽然在这个第n步以 前此位置仍然不是聚集体周边位置,因为聚集体一直在生长。

• 假定这个数目是 $Z_n(r)$, 那么应该有:

$$Z_{n+1}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^{c} Z_n(\mathbf{r} + \vec{\alpha}),$$



• 这里 α 是对 c 个最近临位置求和。浓度梯度 $u(r,n)=Z_n(r)/c_n$ 。由此可以得出如下微观方程:



$$u(\mathbf{r}, n+1) - u(\mathbf{r}, n)$$

$$= c^{-1} \sum_{\alpha=1}^{c} \left[u((\mathbf{r} + \boldsymbol{\alpha}), n) - u(\mathbf{r}, n) \right],$$

• 在聚集体边界处有u=0,所以在边界处u也就是浓度,所以上式左边:

$$u(\vec{r}, n+1) - u(\vec{r}, n) = \frac{\partial C(\vec{r}, n+1)}{\partial x} - \frac{\partial C(\vec{r}, n)}{\partial x}$$

: at growing surface: $\partial x = 1$, $\partial C = C - 0 = C$

$$\therefore u(\vec{r}, n+1) - u(\vec{r}, n) = \frac{\partial C(\vec{r})}{\partial t}$$



 而右边则是标准的Laplace算符(Laplacian operator)。所以上式正 是含时的Laplace方程。

$$\sum_{\alpha=1}^{c} \left[u((\vec{r} + \vec{\alpha}), n) - u(\vec{r}, n) \right] = \sum_{\alpha=1}^{c} \left[\frac{\partial C((\vec{r} + \vec{\alpha}), n)}{\partial r} - \frac{\partial C(\vec{r}, n)}{\partial r} \right]$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{c} \left[\frac{\partial^{2} C((\vec{r}), n)}{\partial r^{2}} \right] = \nabla^{2} C(r, t)$$

- DLA的微观过程不过就是满足含时Laplace方程随机扩散而已。
- 事实上, DLA过程的核心是在随机扩散而不是在沉积机理上, 因为沉积过程中粘附几率=1.0, 没什么更多物理。



本章节作业:

• 模拟一个N>3000的MDLA,利用下面的哈密顿:

$$\beta E = -\frac{\beta J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \beta H \sum_i \sigma_i,$$

- 利用相关函数和质量回转法求取分形维!
- 研究其临界相变行为与二维体系有何不同?
- 如果J是随机场,研究其分形行为和临界相变行为!(选作)
- 分析MDLA与 βJ、随机场强度的依赖关系。





