

HW6 第 11 题 DLA 与 DBM 模拟

王启骅 PB20020580

2022 年 11 月 6 日

1 题目

模拟 2 维 DLA 以及介电击穿 (DBM) 图案并讨论

2 算法原理

2.1 DLA

运用 2 维 DLA 模型, 首先生成一个二维 $L \times L = 1001 \times 1001$ 的 mesh 网格, 用 1 作为生长点, 0 作为未生长的点。在网格中心 $(\frac{L+1}{2}, \frac{L+1}{2})$ 放置结晶核设置为 1。

通过模拟发现可以使用 $start = a\sqrt{n}$ 作为生成粒子的半径位置。n 为已产生的粒子数。则在这里在半径为 $start = 1.2\sqrt{n}$ 的圆上, 通过生成 $[0, 2\pi]$ 均匀分布的随机数生成在圆上均匀产生的粒子。设定在粒子游走到 $edge = 2.4\sqrt{n}$ 的圆外时认为消失, 进行下一次模拟。当 edge 达到 mesh 网格的边界处时, 即 $2.4\sqrt{n} > \frac{L-1}{2} - 1$ 时, 直接设定 $edge = \frac{L-1}{2} - 1, start = edge - \frac{L}{100}$ 。如果游走到周围有格点为 1 时, 则将该粒子所在的格点设为 1, 认为生长, 并进行下一次模拟。

2.2 DBM

根据 DBM 模型, 设定同上的网格, 在中心设置结晶核 1。根据边界条件, 在这里设定已生长的格点 $\phi_0 = 1$, 远处的格点 $\phi = 0$ 。每次选取 $edge = 3\sqrt{t}$ 作为边界无穷远半径, 同样对于达到格点边界的情况有 $edge = \frac{L-1}{2} - 1$ 。t 为已经生长的次数

首先从以中心为心的边长 $2edge$ 的正方形内筛选出周围存在 1 格点的 0 格点, 即为接下来生长的候选边界格点。接下来求解这些格点的拉普拉斯方程得到电势 $\phi_{i,j}$ 。再次利用 Monte Carlo 模拟的方法。用 n 个粒子在 (i,j) 为出发点进行随机游走, 到达 edge 处记 $\phi = 0$, 到达 1 格点处即为 $\phi = 1$ 。为了程序运行速度, 设定 $n=100$ 。

$$\langle \phi_{i,j} \rangle = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \Phi(s^{(k)}) \quad (1)$$

接下来计算格点扩散生长速率

$$v_{i,j} = (t+1)|\phi_0 - \phi_{i,j}|^\eta \quad (2)$$

其中 η 为生长速率参数。

环绕一周格点占据几率

$$p_{i,j} = \frac{v_{i,j}}{\sum v_{i,j}} \quad (3)$$

利用生成 $[0,1]$ 均匀分布的随机数选择出生长的点。

3 结果

在模拟中,为了程序简洁明了,这里分别分开用两个程序进行模拟 DLA 和 DBM 模型,分别为 *HW6_11_DLA.f90* 和 *HW6_11_DBM.f90*。

将计算出的生长格点 mesh 导入到 txt 文件中,读入 python 画图,以下模拟了粒子生长从 100 个粒子到 10^5 个粒子的情况

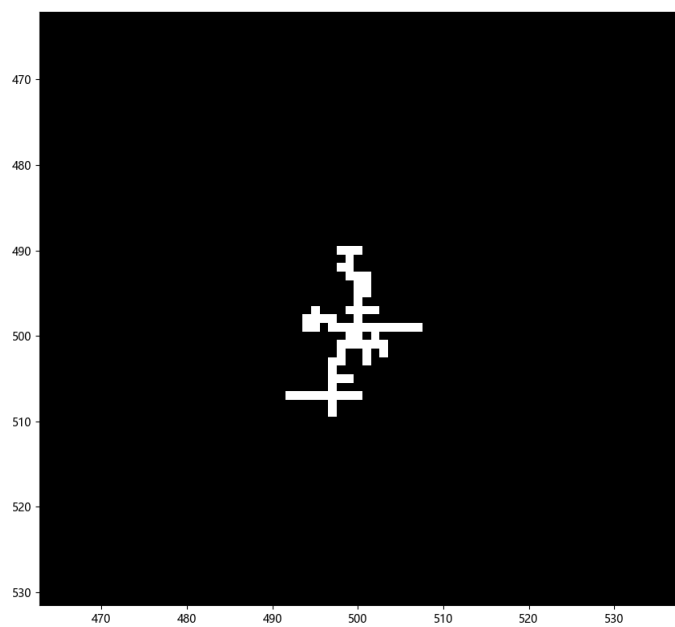
由图1分析可见,晶体生长的速率,即半径随粒子数的规律大致满足 $r \sim \sqrt{n}$ 的规律。并且晶体的结构从一开始较为不规则随着粒子数增加,逐渐更多的沿树枝增长,明显可见沿着尖端生长的趋势较强,整体趋于圆形向外扩散。

接下来分别用 $\eta = 1, 3, 5, 10$, 模拟了 DBM 生长,考虑到计算量较大,程序运算速度的问题,采用了 501×501 大小的网格进行模拟。图2模拟了 $\eta = 3$ 下生长次数 $t=100, 300, 700, 1000, 1500, 2000$ 下的生长图,由图可见 DBM 生长具有明显的方向性,沿着某一特定方向生长,并且有着较强的尖端生长趋势,到生长的末端由于逐渐靠近边界会逐渐扩散开。

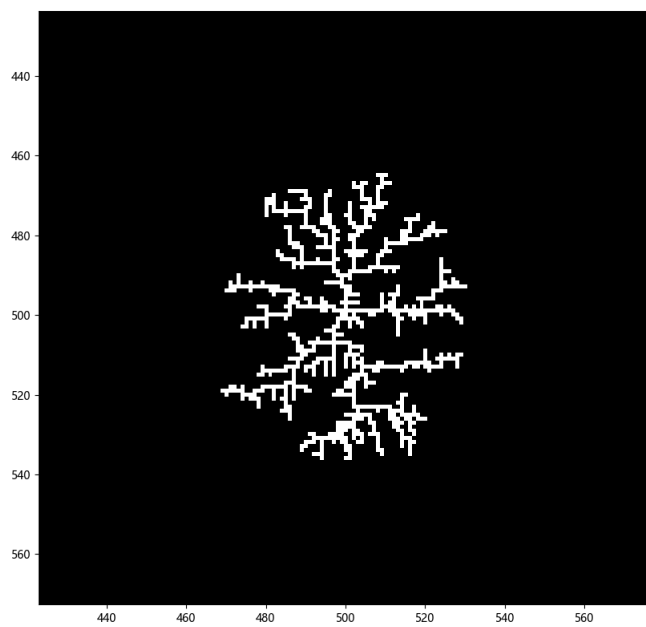
接下来图3, 4, 5分别计算了 $\eta = 1, 5, 10$ 下 DBM 生长情况。考虑到计算速度,取了生长次数 $t=100, 300, 700, 1000$ 由图对比可见,当 η 较小时, DBM 生长接近于较为均匀的生长,而随着 η 增大, DBM 生长明显方向性增强,沿着尖端处生长趋势增强。对于该规律的解释为当 η 作为电势梯度的幂次不断增大时,会导致电势梯度较大的点生长概率被放大,电势梯度小的点生长概率相对变小,导致沿尖端生长的趋势明显加强,生长的速度也会相应的加快。

4 结论

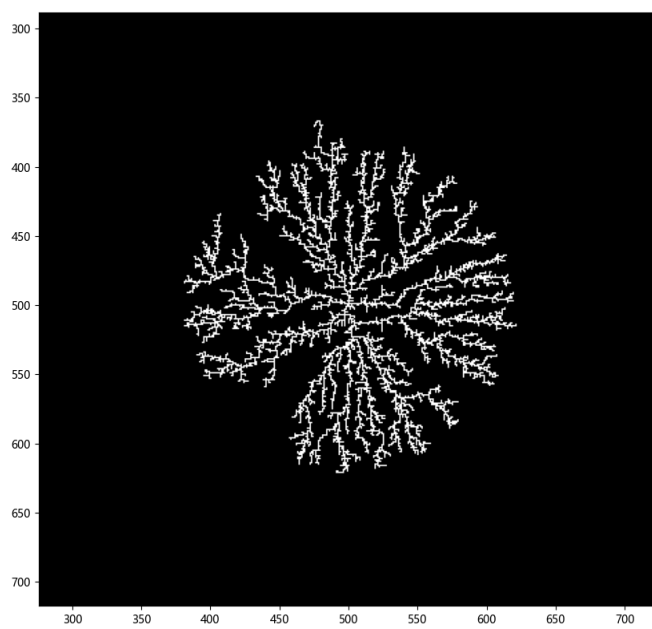
本次实验模拟了 DLA 生长与 DBM 生长的图样,对比可得 DBM 生长明显具有更强的方向性,而 DLA 生长则相对更加均匀的在网格上铺开。同时由于 DBM 生长具有偏压特性,其生长速率较 DLA 更快,在相同时间内生长延伸的较远。而且 DBM 生长方向明显具有较强的随机性,主要取决于初始时刻生长的方向,会导致之后整体生长的方向会不稳定地倒向初始生长方向。相比之下 DLA 生长的均匀性较为稳定。



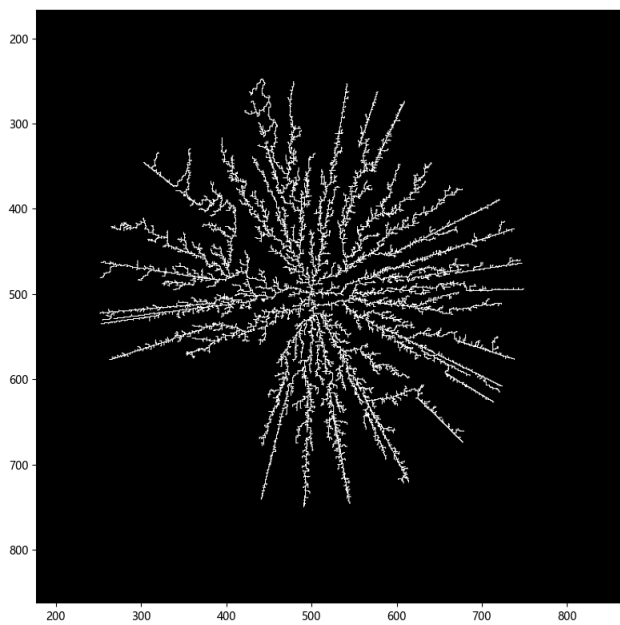
(a) 100 个粒子



(b) 1000 个粒子



(c) 10000 个粒子



(d) 100000 个粒子

图 1: DLA 模拟

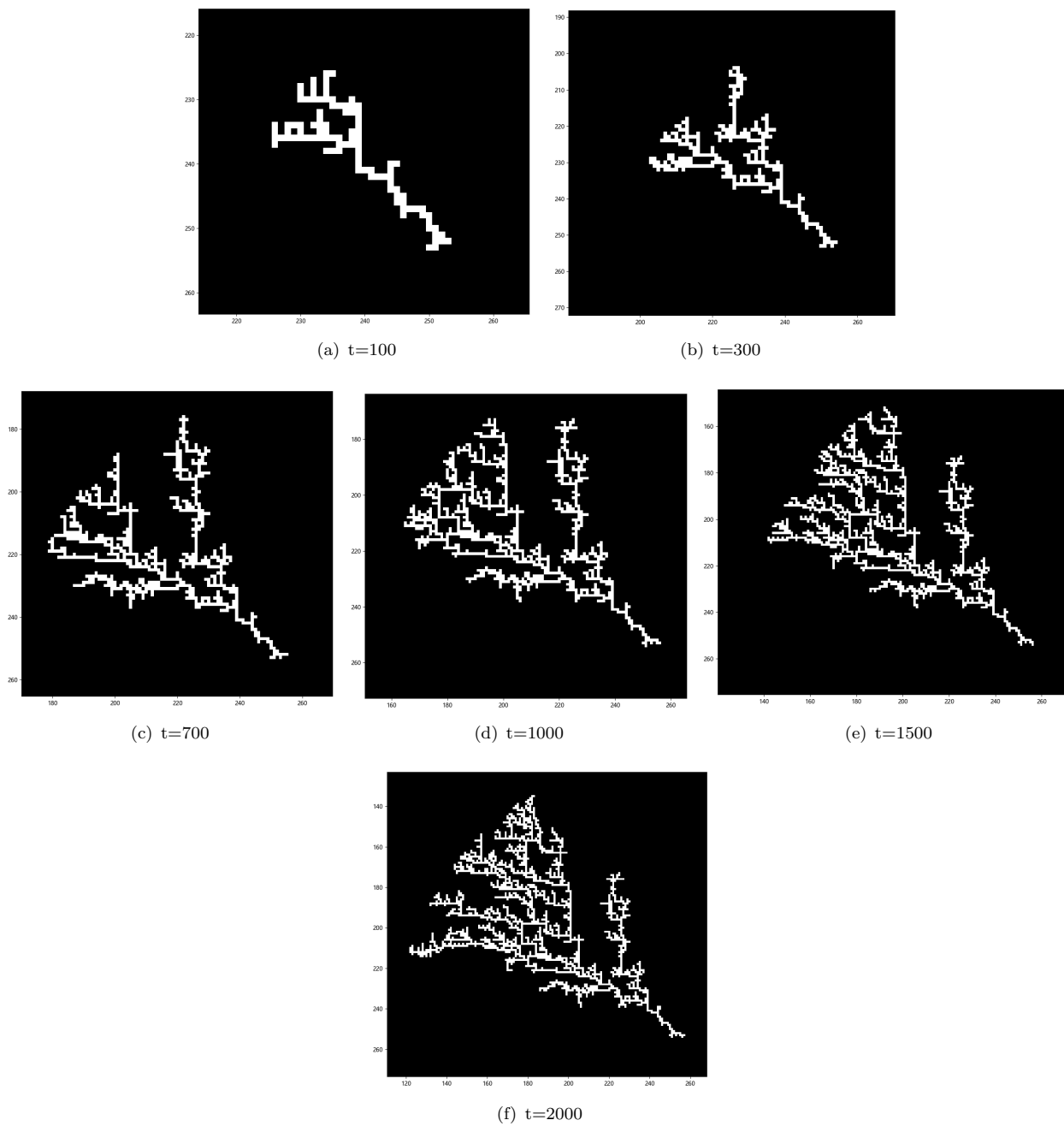


图 2: DBM 生长 ($\eta = 3$)

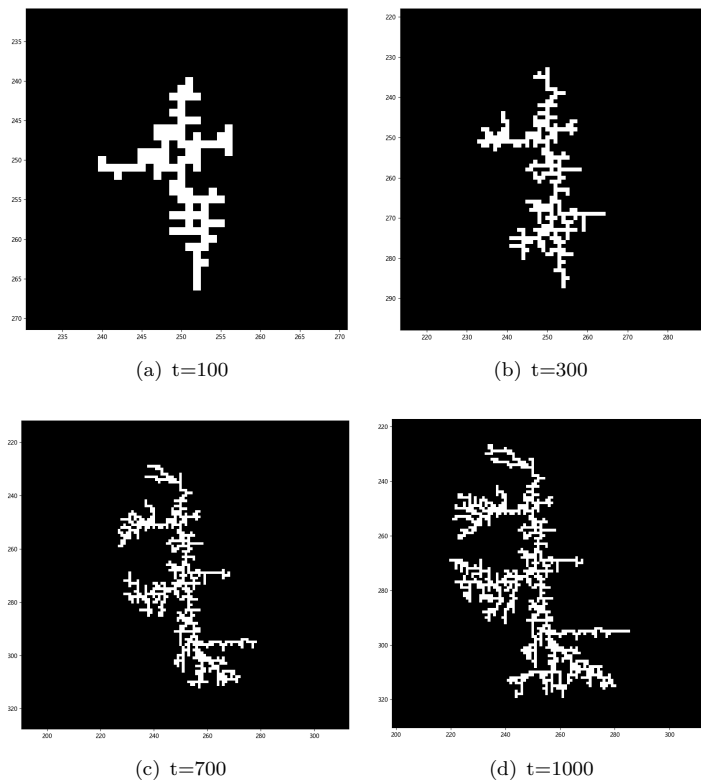


图 3: DBM 生长 ($\eta = 1$)

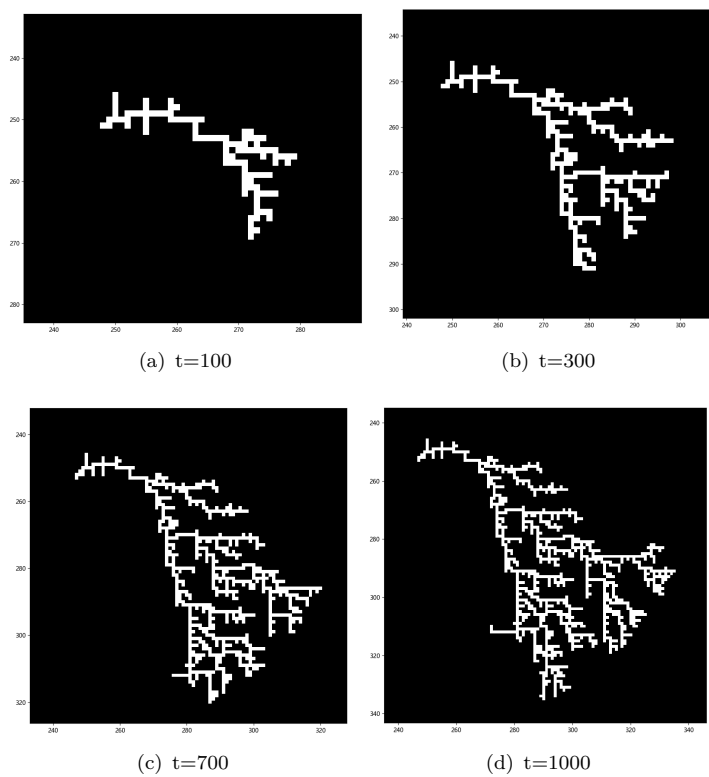


图 4: DBM 生长 ($\eta = 5$)

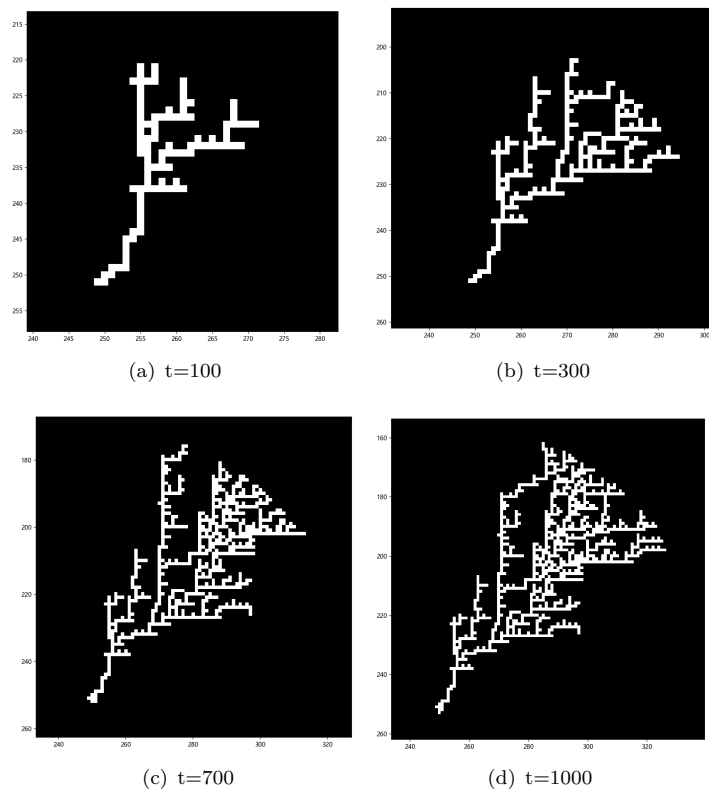


图 5: DBM 生长 ($\eta = 10$)