01;02

Принцип Кюри и ограниченная диффузией агрегация

© Л.М. Мартюшев, Л.Г. Горбич

Институт промышленной экологии УрО РАН, Екатеринбург
E-mail: mlm@ecko.uran.ru

Поступило в Редакцию 31 января 2003 г.

С точки зрения принципа Кюри обсуждаются результаты моделирования роста снежинки методом агрегации ограниченной диффузией (DLA). Обнаружены исключения из данного принципа, которые связываются с существенной неравновесностью процесса.

В последние двадцать лет огромное внимание уделяется компьютерному моделированию необратимых процессов с помощью моделей агрегации ограниченной диффузией (DLA) (см., например, обзоры [1–3]). Было предложено много модификаций классического алгоритма Виттена–Сандера, позволяющих учитывать поверхностное натяжение, анизотропию и т.п. Помимо большого прикладного значения для электрохимии, коллоидной химии, физики кристаллизации поверхности и т. д. данные модели оказались интересны и теоретически. Здесь основными темами обсуждения и исследования являются фрактальность получающихся кластеров, скейлинг в процессе роста, а также влияние симметрии сетки, используемой при расчетах на эти свойства и симметрию возникающих в неравновесных условиях структур. В настоящем кратком сообщении будет затронут один момент, на который ранее не обращалось внимание. Этот вопрос связан с обсуждением результатов DLA моделирования с точки зрения принципа Кюри [4–6].

Принцип Кюри для рассматриваемого типа задач можно сформулировать в следующей форме: симметрия порождающей среды накладывается на симметрию тела, образующегося в этой среде, и в результате форма тела сохраняет только те элементы своей собственной симметрии, которые совпадают с наложенными на него элементами симметрии среды. Другими словами, группа симметрии тела есть общая подгруппа симметрии всех проявляющихся в этом теле взаимодействий.

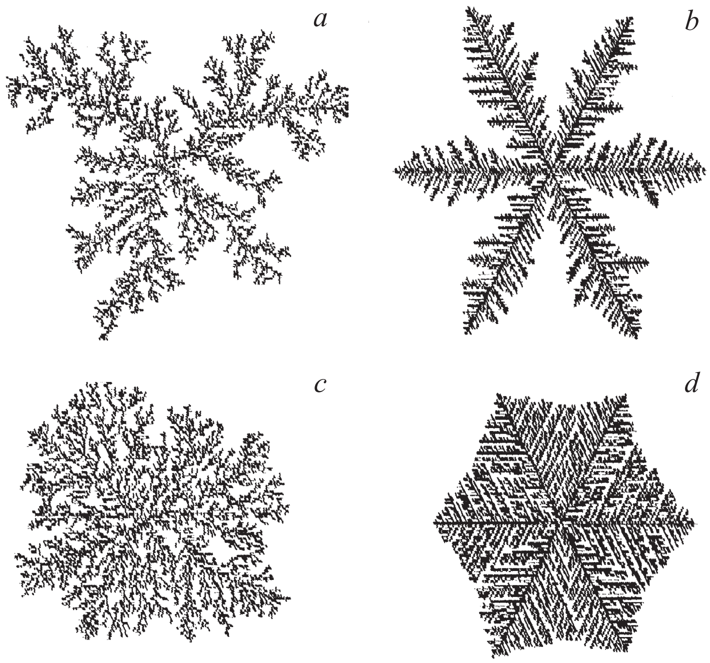

Рис. 1. Структуры, рассчитанные в DLA модели при различных значениях L и H. Сетка 301×347. Кластеры состоят из 10 000 частиц. $L = 10$, $H = 1$ (*a*); $L = 10$, $H = 50$ (*b*); $L = 500$, $H = 1$ (*c*); $L = 500$, $H = 50$ (*d*).

Данный принцип рассматривается в литературе как один из основных и важных положений физики [4–6].

На рис. 1 представлены результаты двумерного моделирования с помощью одной из стандартных двухпараметрических модификаций DLA-модели. Частицы стартуют из случайной точки на окружности, описанной вокруг сетки, и движутся по случайной ломаной линии с длиной каждого прямого отрезка L. С целью уменьшения стохастического воздействия отдельных частиц (для моделирования достаточно однородного поля диффузии) выбирается некоторый усредняющий критический порог — H (число попадания частиц в заданную граничную клетку кристалла), по достижении которого происходит ее „превращение“ из клетки окружающей среды в клетку кристалла. В результате агрегат вырастает лишь в тех клетках, где „диффундирующие“ частицы появляются наиболее часто. В начальный момент моделирования кристалл представлен единичной клеткой в центре сетки (и в центре стартовой окружности).

В представленном расчете используется гексагональная сетка, что позволяет моделировать структуры с симметрией типа $L_6 6P$. Выбор такой симметрии не является принципиальным для рассматриваемого в работе вопроса и обусловлен относительно небольшим количеством результатов по DLA моделированию для таких сеток (в основном проводятся эксперименты на сетках $L_4 4P$) и важностью данных расчетов для изучения проблемы образования снежинки в земной атмосфере. Как видно из рис. 1, параметр L ответствен за пористость (рыхлость) структуры (с его увеличением кристаллическая структура становится плотнее), тогда как параметр H влияет на симметрию получающейся структуры (с его увеличением влияние сетки, на которой происходит моделирование, возрастает).

Проанализируем получившийся результат с точки зрения принципа Кюри. Поле диффузии, очевидно, имеет симметрию $L_\infty \infty P$ (см., например, рис. 2), а сетка моделирования, ответственная за симметрию растущей структуры, симметрию $L_6 6P$. Поэтому получающиеся структуры должны иметь либо симметрию $L_6 6P$, либо, если параметры модели подобраны так, что симметрия сетки практически подавляется, симметрию поля диффузии. Результаты, представленные на рис. 1, подтверждают данные выводы. Заметим, что о симметрии кластеров, приведенных на рис. $1, a, c$, можно говорить лишь в статистическом смысле, это особенно относится к классическому агрегату Виттена–Сандера на рис. $1, a$.

Вариация параметров приведенной модели выявила интересную область вблизи малых значений L и $H \approx 50$. В этой области параметров возникают структуры (рис. 3), которые явно асимметричны (по крайней мере, они не обладают симметрией $L_6 6P$ либо $L_\infty \infty P$). Как следует из вышеизложенного, данные структуры не подчиняются принципу Кюри. Попытаемся разобраться в приведенных примерах.

Прежде всего необходимо отметить, что подобные противоречия иногда наблюдались и в других модификациях DLA, но эти результаты не привлекли себе должного внимания [7]. Это, а также многочисленные

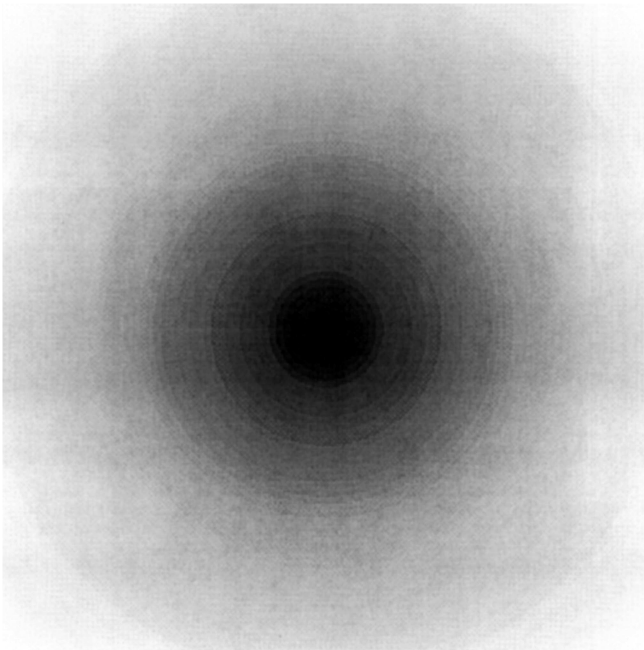

Рис. 2. Диффузионное поле, полученное в модели при многократном запускании частицы со случайного места границы системы. Чем светлее область, тем чаще частица посещает данные места (там концентрация больше). Наиболее светлые узлы соответствуют примерно 80 000 посещений, а черные — 25 000. Сетка 301×347. $L = 2$.

проверки и расчеты, проведенные в настоящей работе, исключают наличие чисто программистских ошибок в моделировании. Может также сложиться впечатление, что если продолжить моделирование дальше, то симметрия кластера все-таки установится исходя из принципа Кюри. Однако данное утверждение необходимо проверять отдельно, и оно не является спасительным: моделируется некоторый физический процесс и он может реально остановиться на приведенном этапе (рис. 3) и не продолжаться бесконечно. Наиболее ярко асимметрия результата может наблюдаться, если в модель вносится следующая модификация: параметр H обнуляется у всех клеток при каждом новом присоеди-

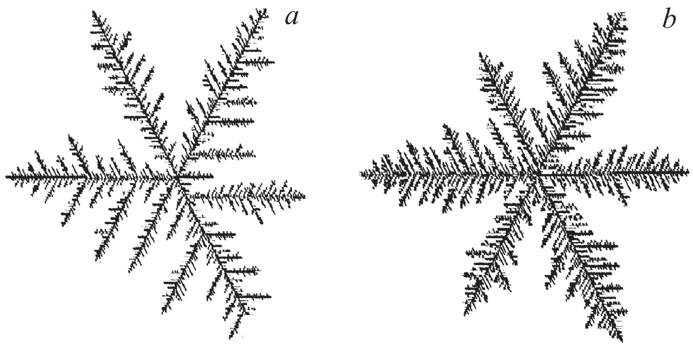

Рис. 3. „Асимметричные“ структуры, полученные в DLA модели. $L = 2$, $H = 50$ (a); $L = 7$, $H = 50$ (b).

нении частицы к кластеру (таким образом, все граничные клетки образующегося кластера оказываются после каждого присоединения в равном положении). Не представляет труда найти реальный физический процесс агрегации, соответствующий такой модели. Результат такого моделирования представлен на рис. 4 (направление агрегата меняется в каждом опыте и может быть произвольным). Очевидно, что асимметрия такого кластера будет только нарастать со временем.

Наиболее серьезным возражением может служить то, что принцип Кюри как любой феноменологический закон является макроскопическим и не применим на „микроуровне“ DLA моделирования. Действительно, если представить, что в среде расположено множество беспорядочно ориентированных структур типа представленных на рис. 3, 4, то статистически суммарная симметрия системы будет совпадать с симметрией поля диффузии. Необходимо отметить, однако, что, несмотря на появляющиеся в литературе сомнения в справедливости интерпретации DLA как макромоделирования, совпадающего с решением феноменологических уравнений [8], большинство исследователей склоняются к противоположному — результаты этих моделей справедливы как для атомного, так и для макроскопического масштаба [1–3,7,9]. Таким образом, либо результат представленного моделирования дает дополнитель-

Рис. 4. Нитеобразная структура, полученная в модифицированной DLA модели с периодическим „обнулением“ H. $L = 10$, $H = 50$.

ный довод противникам использования DLA моделирования физических процессов на произвольном пространственном масштабе, либо имеются исключения из принципа Кюри. Мы склоняемся, скорее, к последнему, тем более что и в природе обнаруживаются такие исключения. Так, например, в земной атмосфере наблюдается образование снежинок как неправильной формы [10,11], так и трехлучевых [7,10,11].

В заключение подведем итог. Любой принцип обладает областью применимости. По результатам данной работы можно прийти к следующим двум ограничениям принципа Кюри. Первое, этот принцип явно макроскопический. Второе, он справедлив лишь для равновесных и частично для неравновесных процессов. Это классический принцип „равновесной“ физики. Чем более неравновесный процесс, тем существеннее влияние на него отдельных флуктуаций и, по-видимому, тем больше исключений можно найти из принципа Кюри. Последнее ограничение подтверждают приведенные в работе результаты DLA моделирования, традиционно используемого для изучения неравновесных и сильно неравновесных процессов структурообразования.

Список литературы

[1] *Жюльен Р.* // УФН. 1989. Т. 157. В. 2. С. 339–360 (Jullien R. // Comm. Cond. Mat. Phys. B. 1987. V. 13. N 4. P. 177–205).
[2] *Смирнов Б.М.* Физика фрактальных кластеров. М.: Наука, 1991. 134 с.
[3] *Vicsek T.* Fractal Growth Phenomena. Singapore: Word Scientific, 1992. 351 p.
[4] *Кюри П.* Избранные труды. М.: Наука, 1966. С. 95.
[5] *Шубников А.В.* // УФН. 1956. Т. 59. В. 4. С. 591–602.
[6] *Шафрановский И.И.* Симметрия в природе. Л.: Недра, 1985. 168 с.
[7] *Nittmann J., Stanley H.E.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1987. V. 20. P. L1185–L1191.
[8] *Johnson B.K., Sekerka R.F.* // Phys. Rev. E. 1995. V. 52. N 6. P. 6404–6414.
[9] *Xiao R., Alexander J.I.D., Rosenberger F.* // Phys. Rev. A. 1988. V. 38. N 5. P. 2447–2456.
[10] *Заморский А.Д.* Атмосферный лед. М.: Изд. АН СССР, 1955. 365 с.
[11] *Magono C., Lee C.W.* // J. Fac. Sci. 1966. V. 2. P. 321–335.