

Kuramoto-Sivashinsky 与 Kardar-Parisi-Zhang 模型中生长界面分形特性研究

齐红基[†] 黄立华 邵建达 范正修

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

(2002 年 12 月 26 日收到 2003 年 2 月 25 日收到修改稿)

在 $(2+1)$ 维情况下, 利用数值模拟研究了 Kuramoto-Sivashinsky (K-S) 与 Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) 模型所决定的非平衡态界面生长演化过程. 结果表明, KPZ 与 K-S 模型都表现出明显的时间和空间标度特性. 相对于 KPZ 模型而言, K-S 模型所对应的表面具有更明显的颗粒特征, 当生长时间较长时, 生长界面呈现蜂窝状结构. 通过数值相关分析得到了生长界面的粗糙度指数、生长指数和动态标度指数等参数. 从两种模型对应的表面形貌特征和表面参数来看, 在 $(2+1)$ 维情况下, KPZ 与 K-S 模型所决定的表面具有完全不同的动态标度行为, 属于不同的两类物理模型.

关键词: Kuramoto-Sivashinsky (K-S) 模型, Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) 模型, 分形, 数值模拟

PACC: 0545, 0555, 7115Q

1. 引言

Kuramoto-Sivashinsky (K-S) 模型可以描述化学湍流^[1]、火焰锋蔓延^[2]、液态膜在重力作用下的动力学行为^[3]、离子溅射表面的演化等复杂的非平衡态物理过程而倍受关注^[4-6], 对 K-S 模型特性研究一直没有停止过. Yakhof^[7]和 Zaleski^[8]分别对 K-S 模型研究后发现, 就长波特性而言, 至少在 $(1+1)$ 维情况下, K-S 模型可以用另一个随机模型——Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) 模型来描述, 但是许多离子溅射实验表明界面的特性与 KPZ 模型所对应的表面相差较大. K-S 与 KPZ 模型是否具有类似的动力学特性长期以来一直是讨论的热点. Cuerno 等人利用分离的随机模型研究了离子溅射表面的演化过程, 结果表明在 $(1+1)$ 维情况下, 带有随机项的 K-S 与 KPZ 模型属于同一类^[9]. 另外, 通过数值方法, Sneppen 等人^[10]认为在 $(1+1)$ 维情况下 K-S 与 KPZ 模型具有类似的动力学行为. 但是, 在 $(2+1)$ 维情况下, Procaccia 等人^[6]用数值模拟和分析方法证明, K-S 与 KPZ 模型具有完全不同的动态标度行为. 本文通过数值模拟方法, 研究了 KPZ 与 K-S 模型所决定的非平衡态界面的生长演化过程. 模拟结果表明, KPZ 与 K-S 模型所决定的表面都具有自仿射分形结构特

征. 相对于 KPZ 模型而言, K-S 模型所对应的表面具有更加明显的颗粒特征, 当生长时间较长时, 生长界面呈现蜂窝状结构. 通过数值相关分析, 在 K-S 与 KPZ 模型中明显观察到生长界面时间和空间的标度特性, 而且得到了表面粗糙度指数 (roughness exponent)、生长指数 (growth exponent) 和动态标度指数 (dynamic exponent) 等描述表面演化的参数. 从两个模型对应的表面形貌特征及表面参数来看, 在 $(2+1)$ 维情况下, K-S 模型中的扩散项对非平衡态界面影响很大, KPZ 与 K-S 模型所决定的表面具有完全不同的动态标度行为, 属于不同的两类物理模型.

2. 生长界面演化的数值模拟

KPZ 模型的数学表达形式为

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 + \eta,$$

其中 h 为空间位置 r 和生长时间 t 的函数, 表示生长界面的高度. η 表示非平衡态界面演化时的随机起伏项, 满足 $\langle \eta(r, t) \rangle = 0$, $\langle \eta(r, t) \eta(r', t') \rangle = 2D \delta(r - r') \delta(t - t')$, 其中 $2D$ 正比于随机项的变化幅度. $\nu \nabla^2 h$ 表示表面张力对界面演化的影响, 其中 ν 正比于表面的张力系数. $(\lambda/2) |\nabla h|^2$ ($\lambda > 0$) 表示高度变化速度对表面倾斜度的影响.

[†]E-mail: qhj@mail.siom.ac.cn

解 KPZ 模型的方法为数值积分, 首先把模型写成下面的分离形式:

$$\Delta h = \nu \nabla^2 h \Delta t + \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 \Delta t + \sigma \sqrt{12 \Delta t} R(r, t),$$

其中 $\sigma^2 = 2D/\Delta x^2$, $R(r, t)$ 为介于 -0.5 和 0.5 之间时间和空间无关的均匀分布的随机数. Δx 表示生长平面上相邻数据点的间隔, Δt 表示数值积分的时间间隔. 在数值积分时, Δt 的取值要足够小, 以至于 Δt 的变化对界面的影响不大. $R(r, t)$ 前的系数可以保证噪声在时间间隔 Δt 内数值积分有相同的二阶矩. 利用关系 $h' = h/h_0$, $t' = t/t_0$, $x' = x/x_0$ 对 KPZ 模型进行变换, 令 $h_0 = \frac{\nu}{\lambda}$, $t_0 = \frac{\nu^2}{\sigma^2 \lambda^2}$, $x_0 = \sqrt{\frac{\nu^3}{\sigma^2 \lambda^2}}$, 则可移去 KPZ 模型中所有系数. 在数值求解时非线性项存在能稳定方程^[11], 但并非任意 Δx

和 Δt 都能保证数值求解模型的稳定性. 在数值模拟时, 取 $D = 0.5$, $\Delta x = 1$, $\Delta t = 0.001$, $\nu = 1$, $\lambda = 2$, 这些参数能保证模型具有稳定的数值解. 另外, 数值积分采用周期性的边界条件.

图 1 为 KPZ 模型中生长时间 $t = 2, 16, 32, 100$ 时界面形貌图, 表面的高度变化用不同的灰度等级来表示(黑色表示高度值较小), 数据点阵为 256×256 . 图 2 为生长时间 $t = 32$ 表面高度的傅里叶变换图像, 可以看出灰度的变化无优先取向, 所以生长表面是各向同性的.

K-S 模型的数学表达形式为 $\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - \kappa \nabla^4 h + \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 + \eta$, 相对于 KPZ 模型而言, 加入了对空间的 4 次偏微分项 $\kappa \nabla^4 h$, 表示界面演化过程中的扩散效应. 其中 κ 正比于表面的扩散系数, 我们称

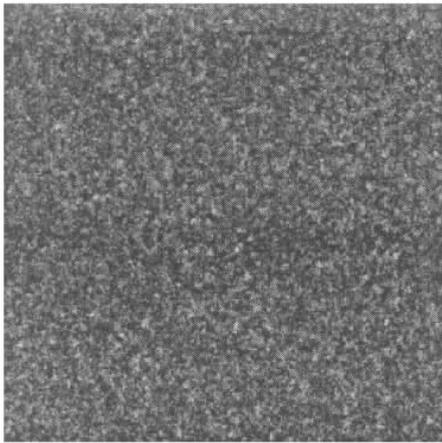
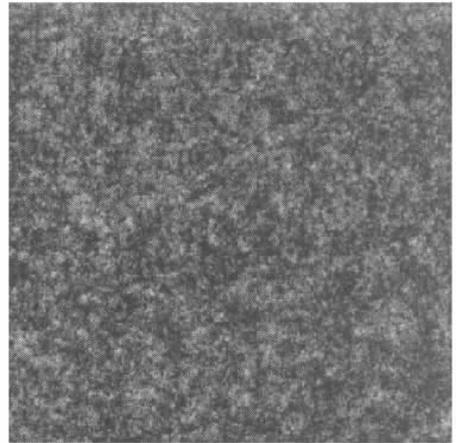
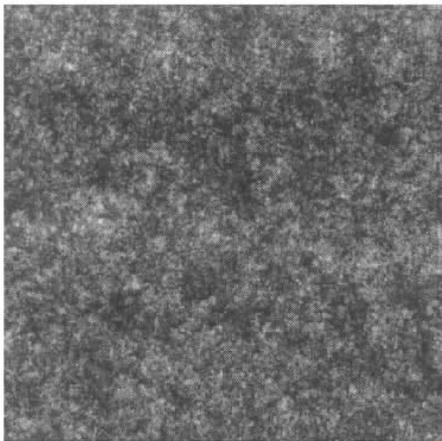
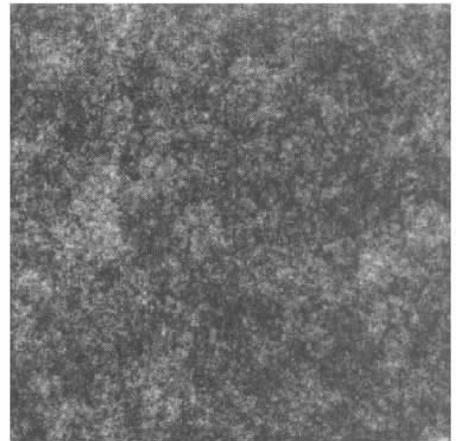
(a) $t = 2$ (b) $t = 16$ (c) $t = 32$ (d) $t = 100$

图 1 KPZ 模型中生长时间 $t = 2, 16, 32, 100$ 的界面形貌图



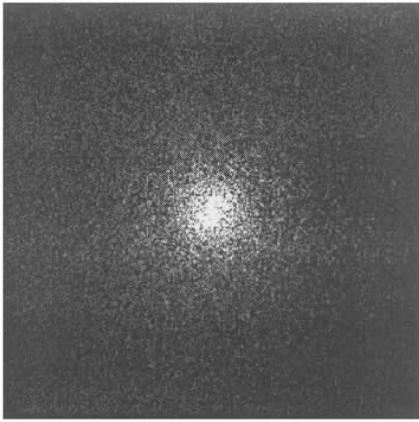


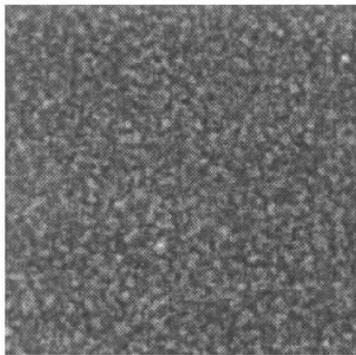
图 2 KPZ 模型中生长时间 $t = 32$ 表面形貌的傅里叶变换图像

$\kappa \nabla^4 h$ 为表面扩散项. 由于表面扩散项的加入, 模型的数值稳定性受到了很大影响, 需要对 K-S 模型线性部分的稳定性进行分析. 首先对模型两边做空间傅里叶变换, 得到 $\frac{\partial F(h)}{\partial t} = -k^2 \nu F(h) - k^4 \kappa F(h)$, 其中 k 为空间波数, $F(h)$ 为界面高度 h 的空间傅里叶变换. 因此, $F(h)$ 随时间的变化遵守 $F(h)$

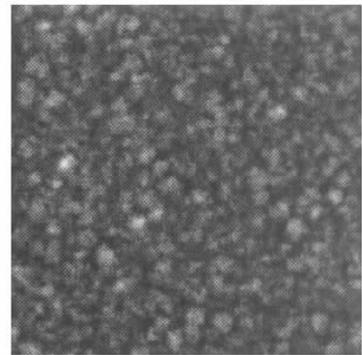
$= e^{-(\nu k^2 + \kappa k^4)t}$. 在 K-S 模型中, $\nu < 0$, 而在 KPZ 模型中, $\nu > 0$ ^[6], 因此, 存在一个低频区域, 表面高度按照指数生长, 临界波数 $k_c = \sqrt{|\nu|/\kappa}$. 如同 KPZ 模型, 非线性项部分对稳定模型也有积极作用.

同样利用数值积分方法来求解 K-S 模型, 首先把模型写成下面的形式: $\Delta h = \nu \nabla^2 h \Delta t - \kappa \nabla^4 h \Delta t + \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 \Delta t + \left(\frac{24D}{\Delta x^2 \Delta t}\right)^{1/2} R(r, t)$, $R(r, t)$ 表示时间和空间无关均匀分布的随机数, 介于 -0.5 和 0.5 之间. 如对 KPZ 模型的数值积分, 利用关系 $h' = h/h_0$, $t' = t/t_0$, $x' = x/x_0$ 等无量纲量对 K-S 模型进行变换, 令 $h_0 = \frac{\nu}{\lambda}$, $t_0 = \frac{\kappa}{\nu^2}$, $x_0 = \sqrt{\nu t_0}$, 则可去除 K-S 模型中所有系数. 在解模型时取 $D = 0.5$, $\Delta x = 1$, $\Delta t = 0.001$, $\nu = -0.2$, $\kappa = 2$, $\lambda = 2$, 这些参数能保证 K-S 模型具有稳定的数值解.

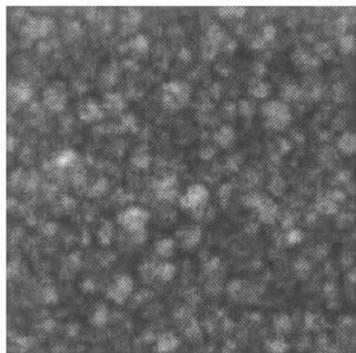
图 3 为 K-S 模型中生长时间 $t = 2, 16, 32, 100$ 的界面形貌图, 表面高度变化也用不同的灰度等级来表示, 数据点阵为 256×256 . 图 4 示出 $t = 2, 16$ 时生长界面一维横截面的高度变化.



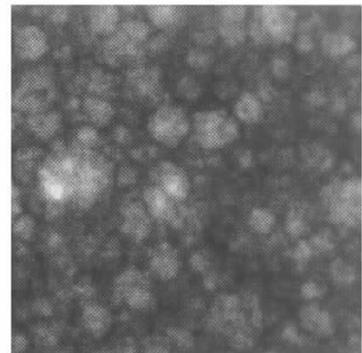
(a) $t = 2$



(b) $t = 16$



(c) $t = 32$



(d) $t = 100$

图 3 K-S 模型中生长时间 $t = 2, 16, 32, 100$ 的界面形貌图



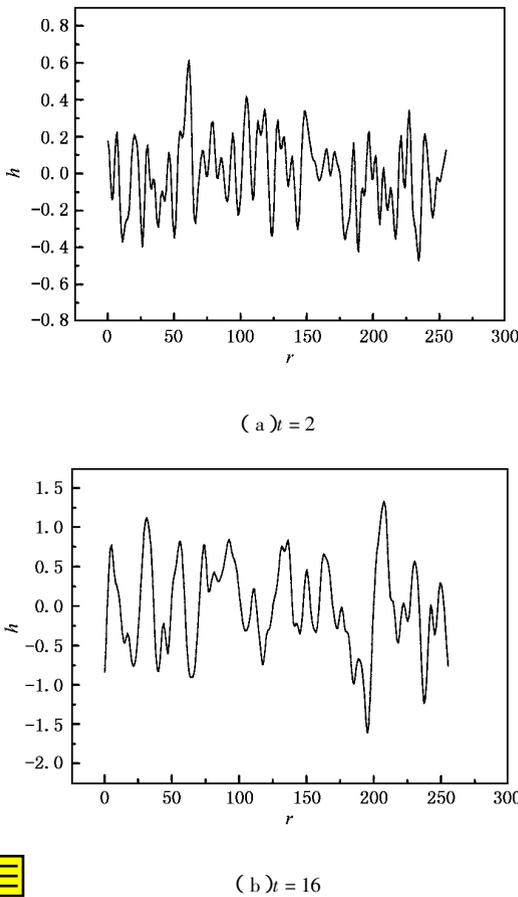


图 4 K-S 模型中生长时间 $t = 2$ 和 16 时表面的一维横截面高度起伏

由图 1 到图 4 可以看出 K-S 与 KPZ 模型所决定的界面有下列特征 (1) 生长界面没有形成规则的岛状结构,且各向同性。(2) 生长界面具有不同尺度的颗粒,且在一定的尺度范围之内,各种大小不同的颗粒在表面上均匀分布。(3) 随着演化时间的增加,表面水平方向的特征尺度变得越来越大。(4) 相对于 KPZ 模型而言, K-S 模型所决定的界面具有更加明显的颗粒特征。(5) 随着沉积时间的增加, K-S 模型所对应的表面具有明显的蜂窝状结构,而在 KPZ 模型中界面蜂窝状结构不明显。从上面的分析可以看出, K-S 与 KPZ 模型所决定的非平衡界面在一定的尺度范围内具有明显的分形特征^[12], 并且这种特征可以用自仿射分形模型来描述。但是,在 KPZ 与 K-S 模型的演化过程生长表面具有不同的特点。

由于界面演化中随机项的存在,生长界面的高度分布应该接近于高斯分布。图 5 为 K-S 模型中生长时间 $t = 1$ 和 16 时表面高度的概率分布,可以看出在初始生长时,高度概率分布非常接近于高斯分布,随着生长的继续,高度概率分布中心偏离了平均

高度,且整个分布也偏离了高斯分布,这是由于非线性项的存在破坏了 $h \rightarrow -h$ 的对称性。对于 KPZ 模型所对应表面也具有类似的特性,非线性项的存在破坏了高度概率分布的对称性。

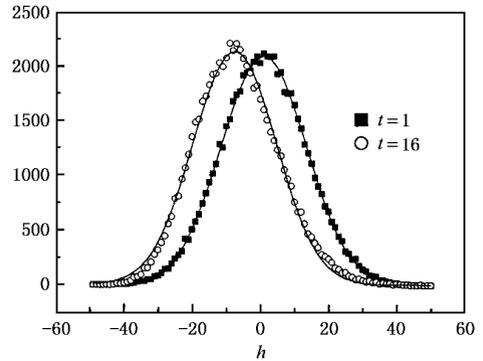


图 5 K-S 模型中生长时间 $t = 1$ 和 16 时表面高度概率分布及其高斯拟合

3. 生长界面的分形描述与统计参数

为了对 K-S 与 KPZ 模型对应的表面形貌特征做进一步研究,需要对生长界面做定量的统计分析。表面高度-高度相关函数可以对表面结构的统计特性进行细致描述,其定义式为 $H(r, t) = [h(r, t) - h(0, t)]^2$, 其中 $h(r, t)$ 表示界面上位置坐标 r 生长时间 t 的高度,这里取 $h(0, t) = 0$ 。由上面的分析可知,在 K-S 与 KPZ 模型中生长界面在一定尺度范围内呈现分形特征^[13],由动态标度假定,其表面的高度-高度相关函数 $H(r, t)$ 具有下面的形式:

$$H(r, t) = \begin{cases} Cr^{2\alpha} & r \ll \xi(t), \\ 2w^2(t) & r \gg \xi(t), \end{cases} \quad (1)$$

其中 α 为局域粗糙度指数,描述生长界面局域粗糙程度,较小的 α 值,表示表面局域高度变化越剧烈,分形特征越明显,反之,表面局域结构较为平滑。 $\xi(t)$ 为横向相关长度,描述表面高度最大相关距离。 $w(t) = \{ [h(r, t)]^2 \}^{1/2}$ 为 t 时刻表面的标准偏差粗糙度,描述表面粗糙程度。在动态标度范围内, $\xi(t)$ 和 $w(t)$ 按照指数规律变化,即 $w(t) \propto t^\beta$, $\xi(t) \propto t^{1/z}$, 其中 β 为生长指数, z 为动态标度指数。在动力学标度假定中有 $z = \alpha/\beta$ 。(1) 式表明分形表面具有短程的空间标度不变性和长程的时间标度不变性。计算非平衡界面的高度-高度相关函数,并由此求出 α, ξ, w, β 和 z 为定量描述界面演化的关键。

从上面分析可以看出,生长界面是各向同性的

表面,在计算标准偏差粗糙度和高度-高度相关函数时,可以沿水平方向做相关.对于离散的高度数据,标准偏差粗糙度 w 和高度-高度相关函数 $H(md)_N$ 分别由下列公式给出:

$$w^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h_i^2, \quad (2)$$

$$H(md)_N = \frac{1}{N-m} \sum_{i=1}^{N-m} [h_{i+m} - h_i]^2, \quad (3)$$

其中 d 为水平扫描线上相邻两个离散数据点之间的距离,即 Δx . h_i, h_{i+m} 表示扫描线上位置坐标为 i 和 $i+m$ 的界面高度.在计算 $H(md)_N$ 时,当 m 较大时,可以平均的数据较少,统计平均性差.由于采集的数据点阵为 256×256 ,取 $m = 100$.为了扩大可以平均的点数,对每一条水平线做相关运算后,再对垂直方向 256 条扫描线求平均值.

对于 t 时刻,高度-高度相关函数可以唯象表示为^[14]

$$H(r) = 2w^2 \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{r}{\xi} \right)^{2\alpha} \right] \right\}. \quad (4)$$

图 6(a) 和 (b) 分别示出 K-S 与 KPZ 模型中生长时间 $t = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 100$ 时表面的高度-高度相关函数曲线.对于 K-S 模型所决定的表面,在对数-对数坐标中,当 r 较小时, $\ln(H(r)) - \ln(r)$ 为直线,即 $H(r)$ 正比于 $r^{2\alpha}$,当 r 较大时, $H(r)$ 趋于常量 $2w^2$. 转折点的位置即为横向相关长度 $\xi(t)$. 由上面的分析可知, w 和 t 满足关系 $w(t) \propto t^\beta$, 通过对 w 的拟合,可得到生长指数 β . 另外,按照 (4) 式,通过对高度-高度相关函数在全段的拟合可以求出粗糙度指数 α 和横向相关长度 ξ ,并由 $\xi(t) \propto t^{1/z}$ 可以拟合出动态标度指数 z . 对于 KPZ 模型,高度-高度相关函数也有类似的变化趋势,但从图 6(b) 中可以看出高度-高度相关函数已经偏离了 (4) 式的变化规律,因此,不能通过全段拟合的方法来求粗糙度指数 α . 在 KPZ 模型中,粗糙度指数 α 是通过在 $\ln(H(r)) - \ln(r)$ 在 $r \ll \xi$ 区域内的直线拟合而得到. 为了与 K-S 模型做比较,在 KPZ 模型中用已经拟合出的 α 按照 (4) 式对高度-高度相关函数做全段拟合得到横向相关长度 ξ . 后面的分析可以看到,这种近似带来了动态标度指数 z 与 α/β 的较大偏差. 表 1 列出 K-S 与 KPZ 模型中不同生长时间下界面的标准偏差粗糙度 w 和横向相关长度 ξ .

对于分形表面,生长界面常常表现出两种不同类型的空间标度行为. 第一种类型中,不同生长时间的高度-高度相关函数 $H(r, t)$ 在短程区域 ($r \ll \xi$) 重

叠在一起,亦即 $H(r, t)$ 有一个时间不变的系数 C ^[15]. 在这种情况下,界面的演化过程为静态的. 第二种类型中, $H(r, t)$ 在短程区域 ($r \ll \xi$) 随时间而改变,对应着一个随时间变化的系数 C , 界面演化过程为非静态的. 从图 6(a) 可以看出,当 $r \ll \xi$ 时,高度-高度相关函数没有重叠,显然,在 K-S 模型中界面的演化属于第二种类型. 对于 KPZ 模型,当生长时间较小时,高度-高度相关函数在短程区域不重叠,生长过程为非静态的. 当生长时间较长时, $H(r, t)$ 几乎重叠在一起,生长过程变为静态的,且出现了双重分形结构.

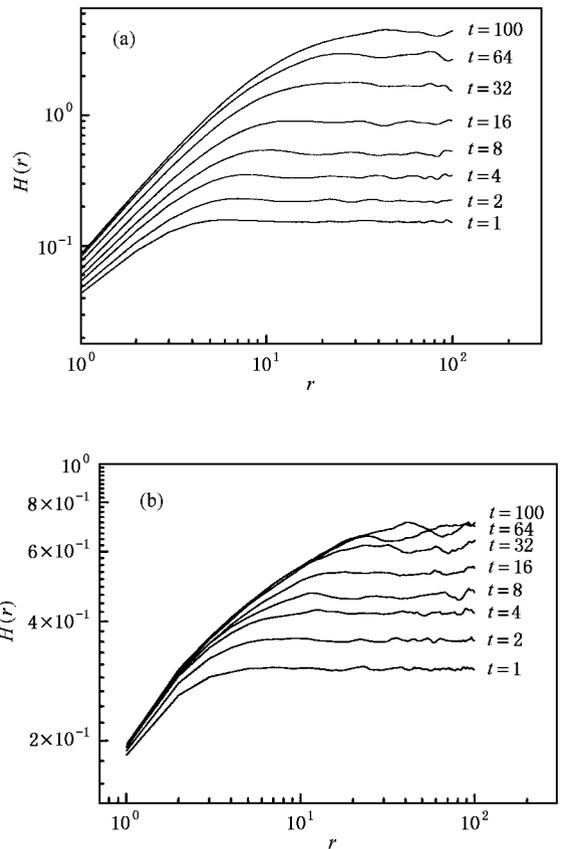


图 6 K-S(a) 与 KPZ(b) 模型中不同生长时间下表面的高度-高度相关函数曲线图

图 7(a) 示出 KPZ 模型中粗糙度指数和生长指数随时间的变化关系,粗糙度指数和生长指数是通过生长过程进行 10 次数值模拟后得到的,每次模拟取不同的随机数种子. 可以看出粗糙度指数 α 在 0.45 左右,且随着生长的进行,整体上有变小的趋势,当生长时间 $t > 20$, α 稳定在理论值 0.38 左右^[16]. 在生长过程中,生长指数 β 在 0.1 左右,有下降的趋势. 图 7(b) 示出 KPZ 模型中 z^{-1} 以及 β/α 随

生长时间的变化关系,其中 z^{-1} 是由公式 $\xi(t) \propto t^{1/z}$ 对横向相关长度拟合后得到.可以看出,两条曲线基本上有类似的变化规律,但有一定的偏差,这是由于在 KPZ 模型中拟合 ξ 时存在的较大误差引起的.

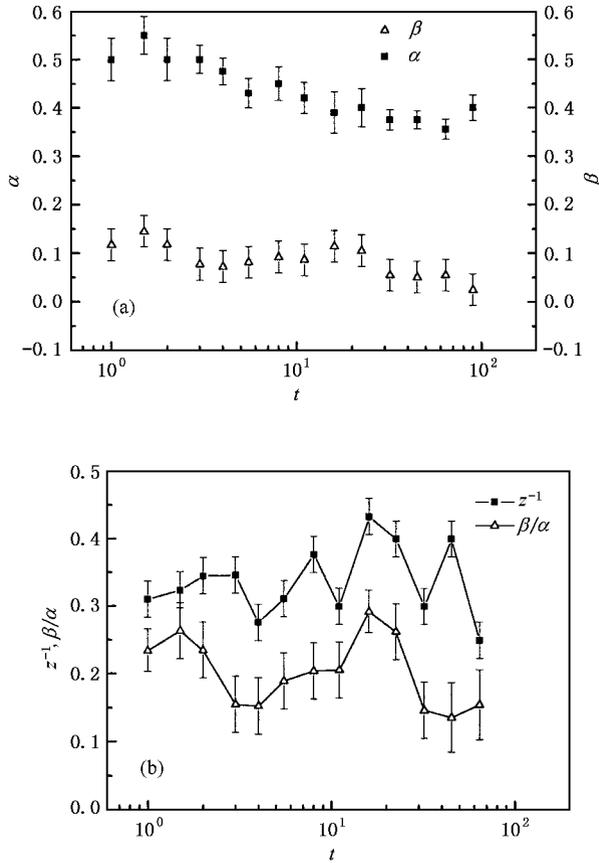


图 7 KPZ 模型中粗糙度指数、生长指数随时间变化(a)和动态标度指数 z^{-1} 与 β/α 对比(b)

图 8(a) 示出 K-S 模型中,粗糙度指数和生长指数随时间的变化关系.粗糙度指数 α 基本上稳定在 0.75 左右. β 的变化较复杂,在初始时 β 基本上是常数,当达到某一时间后, β 开始上升,随后下降.在 $(1+1)$ 维模拟中, β 也有类似变化规律^[10].图 8(b) 示出 K-S 模型中动态标度指数 z^{-1} 以及 β/α 随时间的变化关系.可以看出,两条曲线符合较好,有相似的变化规律.从生长界面的形貌特征以及得到的粗糙度指数、生长指数和动态标度指数来看,在 $(2+1)$ 维情况下,KPZ 与 K-S 模型差别很大.我们认为在现有的时间和空间尺度下,KPZ 与 K-S 模型具有不同的特征,属于完全不同的两类.

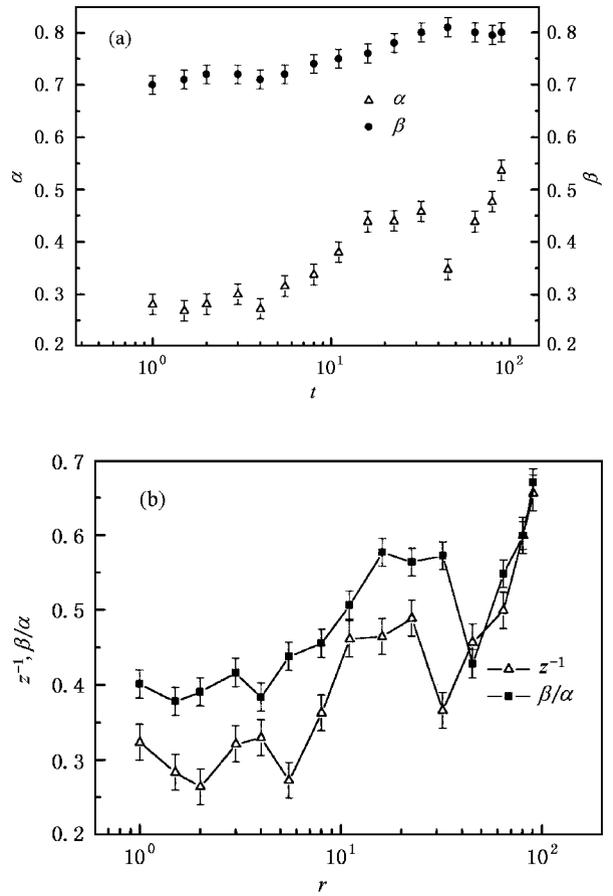


图 8 K-S 模型中粗糙度指数、生长指数随时间变化(a)和动态标度指数 z^{-1} 与 β/α 对比(b)

表 1 K-S 与 KPZ 模型中不同生长时间下界面的标准偏差粗糙度 w 和横向相关长度 ξ

生长时间 t	K-S 模型		KPZ 模型	
	w	ξ	w	ξ
1	0.077	2.0 ± 0.05	0.153	1.1 ± 0.05
2	0.111	2.5 ± 0.05	0.180	1.3 ± 0.04
4	0.169	3.0 ± 0.05	0.211	1.6 ± 0.05
8	0.255	3.9 ± 0.07	0.234	2.0 ± 0.05
16	0.436	5.0 ± 0.03	0.266	2.6 ± 0.04
32	0.844	6.9 ± 0.03	0.311	3.5 ± 0.05
64	1.473	8.9 ± 0.06	0.336	4.3 ± 0.07
100	2.232	12.0 ± 0.05	0.352	4.8 ± 0.07

4. 结 论

本文通过数值模拟方法,给出了 $(2+1)$ 维情况

下 K-S 与 KPZ 模型所决定表面的演化过程. 模拟结果表明, KPZ 与 K-S 模型所对应的表面都具有明显的分形特征. 相对于 KPZ 模型而言, 当演化时间较长时, 扩散项对界面的演化影响较大, K-S 模型所决定的界面具有更加明显的颗粒特征. 随着沉积时间的增加, 在 K-S 模型中生长界面具有蜂窝状结构, 而 KPZ 模型中蜂窝状结构不明显. 利用数值相关分析,

分别得到 KPZ 与 K-S 模型中生长界面的粗糙度指数、生长指数和动态标度指数随时间的变化关系. 根据两种模型中表面的形貌特征及粗糙度指数、生长指数、动态标度指数的数值及变化规律, 我们认为在现有的时间和空间尺度下, 对于 $(2+1)$ 维情况, K-S 与 KPZ 模型表现出不同的特性, 属于不同类型的物理模型.

- [1] Kuramoto Y 1984 *Chemical Oscillations , Waves , and Turbulence* (Berlin Springer)
- [2] Sivashinsky G I 1977 *Acta Astron.* **4** 1177
- [3] Sivashinsky G I and Michelson D M 1980 *Prog. Theor. Phys.* **63** 2112
- [4] Hayot F *et al* 1993 *Phys. Rev. E* **47** 911
- [5] Cuemo R *et al* 1995 *Phys. Rev. E* **52** 4853
- [6] Procaccia I *et al* 1992 *Phys. Rev. A* **46** 3220
- [7] Yakhot V 1981 *Phys. Rev. A* **24** 642
- [8] Zaleski S 1989 *Physica D* **34** 427
- [9] Cuemo R *et al* 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4464
- [10] Sneppen K ,Krug J ,Jensen M H ,Jayaprakash C and Bohr T 1992 *Phys. Rev. A* **46** 7351
- [11] Rost M and Krug J 1995 *Physica D* **88** 1
- [12] Viscek T 1989 *Fractal Growth Phenomena* (Singapore :World Scientific)
- [13] Krim J and Palasantzas G 1995 *Int. J. Mod. Phys. B* **9** 599
- [14] Sinha S K , Sirota E B and Garoff S 1988 *Phys. Rev. B* **38** 2297
- [15] Family F 1990 *Physica*(Amsterdam) **168** A 561
- [16] Zhao Y P ,Wang G C and Lu T M 2001 *Characterization of Amorphous and Crystalline Rough Surface : Principles and Applications* (New York :Academic) p 360

The study of two-dimensional growth interface in Kuramoto-Sivashinsky and Karda-Parisi-Zhang models

Qi Hong-Ji Huang Li-Hua Shao Jian-Da Fan Zheng-Xiu

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics , Chinese Academy of Sciences , Shanghai 201800 ,China)

(Received 26 December 2002 ; revised manuscript received 25 February 2003)

Abstract

We have studied the evolution of $(2+1)$ -dimensional surface morphology in the Kuramoto-Sivashinsky (K-S) and Karda-Parisi-Zhang (KPZ) models by using the numerical simulation approach. The results show that the surface morphology has the self-affine fractal properties in both the models and exhibits a cellular structure after long-time growth in K-S model. With numerical correlation, dynamic scaling characteristics are observed explicitly in both models, and the roughness exponent, the growth exponent and the dynamic exponent are all obtained. From the simulation results we suggest that the two models have the different properties in present time and space scale, and are not in the same universality class.

Keywords : Kuramoto-Sivashinsky (K-S) model, Karda-Parisi-Zhang (KPZ) model, fractals, numerical simulation

PACC : 0545, 0555, 7115Q