

各向异性扩散 DLA 的标度性质*

余 江 胡 岗¹⁾

(北京师范大学物理系)

1988年4月4日收到

本文利用坐标变换的方法讨论了各向异性扩散对 DLA 集团标度行为的影响。对二维正方形点阵,解析计算了各向异性扩散 DLA 集团的 Hausdorff 维数。结果表明,此时生长集团的 Hausdorff 维数 D 随各向异性扩散概率 p 连续变化,其最大值为 $5/3$, 最小值为 $3/2$ 。还将这里所得到的理论结果与 Jullien 等人的数值结果进行了比较,发现它们符合得很好。最后,还解析讨论并计算了各向异性扩散 DLA 的广义维数 $D_q(p)$ 。

一、引 言

微小粒子通过不可逆聚集而形成大集团的生长过程是一种非常普遍的自然现象。这类非平衡生长过程的一个显著特征就是最终形成一个具有随机分形(fractal)结构的生长集团。通常,人们用 Hausdorff 维数描述这种分形体。近年来,由 Witten 和 Sander 提出的 DLA^[1] 模型成功地解释了生长集团的分形结构,人们对这类不可逆生长过程又产生了极大的兴趣。到目前为止,人们从计算机模拟和理论两方面对 DLA 集团进行了相当广泛的研究,取得了一些有意义的结果^[2],但仍有许多问题有待于澄清。最近,人们对 DLA 集团各向异性问题进行了广泛的研究^[3-5]。Turkevich 等人利用“连续时间随机行走”(continuous-time random-walk)理论对不同类型的点阵解析计算了二维 DLA 集团的 Hausdorff 维数。他们的结果表明,DLA 集团的 Hausdorff 维数与具体的点阵形式有关^[3]。Meakin 利用计算机模拟详细研究了各向异性粘着概率、各向异性扩散和各向异性点阵对 DLA 集团标度行为的影响^[4],部分地证实了 Turkevich 等人的预测。

本文主要讨论各向异性扩散对 DLA 集团标度性质的影响。我们根据 Turkevich 等人^[3]和 Ball 等人^[3]关于各向同性 DLA 集团的外形为正方形的基本假设,利用坐标变换的方法解析计算了扩散是各向异性的二维 DLA 集团的 Hausdorff 维数。我们发现,此时的 DLA 集团的 Hausdorff 维数 D 随各向异性扩散概率 p 连续变化,其最大值为 $D_{\max} = 5/3$, 对应于 $p = 1/4$, 即各向同性扩散 DLA 集团的情形。它的最小值为 $D_{\min} = 3/2$, 对应于 $p = 0$ 或 $p = 1/2$ 。此时的生长集团是沿 x 轴或沿 y 轴的棒状分形体。我们还利用这种方法讨论了以表面沉积方式生长的 DLA 集团^[6]的 Hausdorff 维

* 国家自然科学基金资助的课题。

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心。

数,发现理论值与数值结果^[6]符合得很好. 此外,我们还利用“楔”模型^[7]讨论了各向异性扩散 DLA 的广义维数 $D_q(p)$. 通过对“楔”模型做简单的修改,得到广义维数 $D_q(p)$ 一个解析表达式. 当 $p = 1/4$ 时,即扩散为各向同性时,我们的结果要比文献^[7]的理论值更接近计算机模拟结果.

二、各向异性扩散 DLA 集团的 Hausdorff 维数

在 DLA 生长过程中,集团生长概率分布的奇异性强度决定集团的生长率. Turkevich 和 Ball 等人^[3,5]假设这些奇异性强度与一种正规物体——外半角为 β 的圆锥体所产生的奇异性强度相同(见图 1). 这样,随机行走的扩散问题就简化为在完全吸收边界条件下求解拉普拉斯方程的定解问题. 在二维正方形点阵中,一般 DLA 集团中的扩散粒子可由下述方程描写:

$$\nabla^2 u = 0, \quad (1a)$$

$$u|_{\theta=\pm\beta} = 0, \quad (1b)$$

式中 u 代表扩散场. 方程(1)的一般解为

$$u(r, \theta) = c r^{\pi/2\beta} \cos(\pi\theta/2\beta), \quad (2)$$

式中 c 为归一化因子. r 为极坐标中的极径, θ 为极角. β 为代表生长集团的 V 形体的外半角(参见图 1). 容易看出,离尖端 ρ 处扩散粒子落在 V 形体表面上的稳定通量为

$$\Phi(\rho) = (\pi/2\beta)c\rho^{(\pi/2\beta)-1}. \quad (3)$$

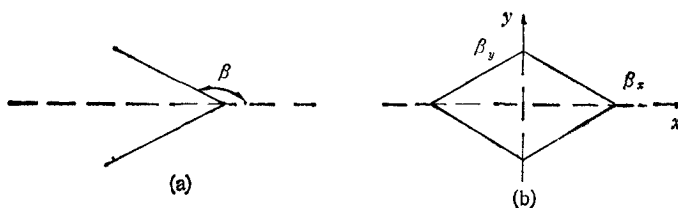


图 1

(a) 圆锥模型 拉普拉斯场在尖角附近产生的奇异性可用来模拟生长概率的奇异性

(b) DLA 集团的轮廓图对各向同性的 DLA 集团, $\beta_x = \beta_y = 3\pi/4$, 即外形为正方形;对各向异性扩散的 DLA 集团, $\beta_x \neq \beta_y$, 其外形一般是菱形

引入最大切断值 $\rho = R$ 和最小切断值 $\rho \approx a$ (a 为点阵常数,这里取 $a = 1$, R 为生长集团的最大半径),对(3)式积分可得 $dN/dt \approx cR^{\pi/2\beta}$ 和 $dR/dt \approx c$, 其中 N 表示生长集团的粒子数,消去时间因子后,可得 $dR/dN \approx R^{-\pi/2\beta}$. 利用标度假设 $R \approx N^{1/D}$, 即可得到生长集团的 Hausdorff 维数 D 与外半角 β 的关系

$$D = \pi/2\beta + 1. \quad (4)$$

由于一般 DLA 集团的外部轮廓已假定为正方形^[3,5], 所以 $\beta = 3\pi/4$. 这样由(4)式可得 $D = 5/3$, 这个值与计算机模拟结果 $D = 1.71$ ^[8] 基本符合.

为了研究各向异性扩散 DLA 的标度性质,我们引进各向异性扩散概率的概念.

在二维正方形点阵中,设 p 为扩散粒子沿 y 方向向上(或向下)移动到近邻格点上的概率, p' 为沿 x 方向向左(或向右)移动一个格点的概率. 当 $p = p' = 1/4$ 时,扩散为各

向同性,对应于一般 DLA; 当 $p + p' = 1/2$ 且 $p \neq 1/4$ 时,扩散是各向异性的,对应于各向异性 DLA 集团. 此时,随机行走粒子由下式描写:

$$\frac{1-2p}{2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + p \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad (5)$$

式中 u 表示各向异性扩散场. 如果考虑坐标变换

$$x' = x, \quad (6a)$$

$$y' = y/\mu, \quad (6b)$$

式中参数 μ 定义为

$$\mu = \sqrt{2p/(1-2p)}, \quad (7)$$

那么,方程(5)可写成

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y'^2} = 0. \quad (8)$$

这是描写各向同性扩散过程的拉普拉斯方程. 由此看出,变换(6)式改变了扩散场的情态,因而也改变了 DLA 的生长机制. 由于生长集团的标度性质与具体的生长机制密切相关,所以变换(6)式必然会改变 DLA 集团的标度行为. 利用这个特性,我们可以先在 (x', y') 空间中求解问题,然后再返回到 (x, y) 空间.

由于在坐标系 (x', y') 中方程 (1a), (1b) 成立,根据 Ball 等人^[4]的讨论可认为在此坐标系中 DLA 集团的外形仍为正方形,即 $\beta_x = \beta_y = 3\pi/4$. 这样,回到坐标系 (x, y) 中,相应的外半角 β_x 和 β_y 由下式给出:

$$\beta_x = \pi - \tan^{-1} \mu, \quad (9a)$$

$$\beta_y = \pi/2 + \tan^{-1} \mu. \quad (9b)$$

在推导(9)式中,利用了极坐标与直角坐标的变换关系: $\tan \theta = y/x$ 和 $\beta'_x = \beta'_y = 3\pi/4$. 由方程(9)可知,各向异性扩散 DLA 集团的外部轮廓为菱形,而且这种形状的形成只与各向异性扩散参数 μ 有关. 这样,对任何确定的 μ ,各向异性扩散 DLA 集团的菱形轮廓将在整个生长过程中保持不变. 由此我们可以合理地假定这种生长集团具有自相似结构,其标度性质可由一个 Hausdorff 维数来描写. 值得注意的是这种情况与各向异性粘着概率的效果^[3]完全不同. 在那里任何具有菱形轮廓的 DLA 集团最终都将生长成棒状的紧实体.

为了能利用圆锥模型^[3,5]计算各向异性 DLA 集团的 Hausdorff 维数,我们假定有效外半角为

$$\beta = \max(\beta_x, \beta_y). \quad (10)$$

稍后我们将说明这一假设的合理性并利用数值结果来验证这个假设的正确性.

根据方程(4), (7), (9)和(10),可求出各向异性扩散 DLA 集团的 Hausdorff 维数为

$$D(p) = \begin{cases} \pi/[2\pi - 2\tan^{-1} \sqrt{2p/(1-2p)}] + 1 & 0 \leq p \leq 1/4; \\ \pi/[\pi + 2\tan^{-1} \sqrt{2p/(1-2p)}] + 1 & 1/4 \leq p \leq 1/2. \end{cases} \quad (11)$$

由(11)式可以看出, $D(p)$ 为 p 的连续、对称函数. 当 $p = 1/4$ 时, $D(p)$ 取得最大值

$D_{\max} = 5/3$; 而当 $p = 0$ 或 $p = 1/2$ 时, $D(p)$ 取得最小值 $D_{\min} = 3/2$. 值得注意的是, $p = 0$ 或 $1/2$ 对应于弹道 (ballistic) 生长过程. 对单一种粒子说来, 其二维生长集团的 Hausdorff 维数应为 $D = 1$. 这里, 一个有意义的新结果是, 当 $p \rightarrow 0$ 或 $1/2$ 时, D 的极限值不为 1, 而是有一跃变.

在各向异性扩散场中, 由于生长集团具有稳定的菱形轮廓, 因此, 扩散粒子沿 x 轴和 y 轴方向落到生长集团表面的通量应该相等. 这样, 由(3)式可知, 一定存在一个有效外半角 β 与此通量相对应. 考虑到 $\beta_x + \beta_y = 2\pi$ 以及在正方形点阵上生长集团的外形应为正四角形这一特点, 所以假定有效外半角 β 由(10)式给出.

为了具体验证上述理论, 下面我们讨论 DLA 模型的一种变型^[6]. 在这个模型中, DLA 集团生长在二维空间中一条长为 L 的底线上. 由于在 $y = 0$ 处种粒子集团的均匀分布和在 $y \rightarrow \infty$ 处扩散粒子源的均匀分布, 因而可认为生长概率在 y 方向上是非奇异性的, 即在方程(10)中可取 $\beta_y = \pi/2$. 这样, 有效外半角为 $\beta = \beta_x$. 利用(4)(7)和(9)式容易推得

$$D = \pi/[2\pi - 2\tan^{-1}\sqrt{2p/(1-2p)}] + 1. \quad (12)$$

这个结果表明, 当各向异性扩散概率 p 由 0 变到 $1/2$ 时, 相应的 Hausdorff 维数 $D(p)$ 则由 $3/2$ 增加到 2. 在图 2 中, 我们把(12)式的解析结果与 Jullien 等人的数值结果进行了比较. 图 2 中实线代表方程(11), 而长为点为 Jullien 等人的计算机结果, 其中点的长度表示统计误差. 我们看到, 两者在计算机误差范围内符合得很好. 而且计算机结果的确倾向于当 $p \rightarrow 0$ 时, $D \rightarrow 3/2$. 这意味着, 在 $p = 0$ 时, D 有一个有限的跃变.

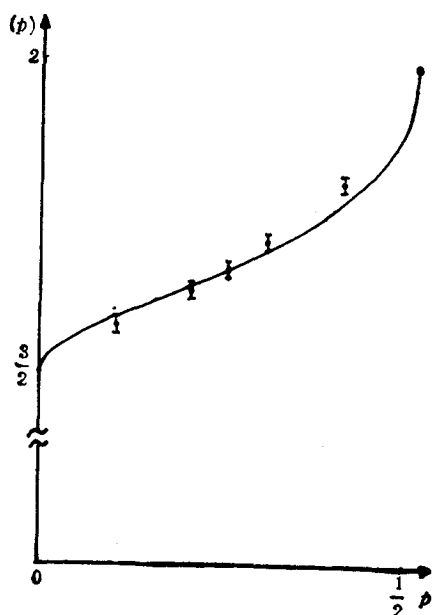


图 2 Hausdorff 维数 $D(p)$ 的变化曲线 实线表示方程(11)的结果; 点代表 Jullien 等人的数值结果.

三、各向异性扩散 DLA 的广义维数 $D_q(p)$

在随机生长过程中, 生长集团的表面性质对确定这些分形体的长时结构起着重要的作用^[8-10], 而调和测度 (harmonic measure)^[11,12] 则为人们定量地研究这种表面性质提供了有用的方法. 实际上, 这种调和测度本身也具有非平庸的标度行为, 而且构成一种具有幂律 (power-law) 奇异性的分形集合.

假若设 p_i 为随机行走粒子落在生长集团边界上点 r_i 附近 ε 区间内的概率; 那么, 由 $\{p_i\}$ 可构造出一套无穷等级的广义维数 D_q

$$D_q = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (q-1)^{-1} \log \left[\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i^q(\varepsilon) \right] / \log \varepsilon. \quad (13)$$

这里 $N(\varepsilon)$ 表示覆盖整个边界所必需的 ε 区间的数目. 目前, 人们认为这无穷多个广义维数 $D_q (0 \leq q \leq \infty)$ 可完全描述调和测度, 从而完全描述相应的随机生长过程.

如果假定在一个分形维数为 f 的集合上, 只有一种形式的奇异性, 如 $(s-s_0)^{\alpha-1}$ 形式的幂律奇异性, 那么广义维数 D_q 可由下式给出^[7]:

$$D_q = \min[1, (q\alpha - f)/(q-1)]. \quad (14)$$

因此, 如果知道 f 与 α 的关系, 那么利用上式即可容易地求出所有的广义维数 D_q . 最近, Halsey 等人利用“楔”模型^[7]给出了 f 与 α 的一个合理的近似关系

$$1/\sin(\pi/2\alpha) = \left[\frac{2}{3^\alpha - 1} \right] \left[\frac{3^f - 1}{2} \right]^{1-\alpha}, \quad (15)$$

并给出了 Hausdorff 维数 D 与 α 的关系

$$D = 1 + \alpha. \quad (16)$$

他们的基本思想是: 假定生长集团的表面生长层是由一些内角为 θ 的楔形体构成, 而且在每个楔形的边上还分布着内角相同但边长较小的小楔形: 在这些小楔形的边上又分布着更小的楔形, 等等. 由此构成一种自相似结构. 为了使楔形的内角 θ 在生长过程中保持不变, 楔形尖端部分的生长率 G_t 和两侧的生长率 G_s 之比应满足

$$G_t/G_s = 1/\sin(\theta/2), \quad (17)$$

式中 θ 与 α 的关系为 $\alpha = \pi/(2\pi - \theta)$. 如果假定尖端部分的边长 l 与侧面生长区的边长 L 之比为 $l/L = 1/2$, 那么经过简单代数运算即可求得(15)式.

由文献[7]中的讨论可知, (15)式的结果是很粗糙的. 对(14)式, Halsey 等人选取的最佳 f 值为 $f = 0.42$, 由(15)式得出 $\alpha = 0.75$. 然而, 根据这一对 f - α 值算出的广义维数与数值结果相差比较大(见表1), 而且相应的 Hausdorff 维数 $D = 1.75$ 也与计算机模拟结果的 $D = 1.71$ 不符. 我们认为造成这一误差的原因之一是, 在楔模型中, 两侧的生长方向并不是一致垂直于侧面, 而是沿侧面有一个缓慢的变化. 为了减小由于这个因素带来的误差, 应适当缩小尖端生长部分并增大侧面生长区. 为此, 我们将比值 l/L 由 1:2 改为 1:5. 这样, 仿照文献[7]中的讨论, 所求得 f 与 α 的关系式为

$$1/\sin(\pi/2\alpha) = \left[\frac{5}{6^\alpha - 1} \right] \left[\frac{6^f - 1}{5} \right]^{1-\alpha}. \quad (18)$$

表 1 利用不同方式求得的广义维数 D_q

q	D_q (数值)	D_q^1 (理论)	D_q^2 (理论)
2	0.980 ± 0.010	1.080	0.990
3	0.856 ± 0.005	0.915	0.848
4	0.810 ± 0.006	0.860	0.800
5	0.782 ± 0.006	0.833	0.776
6	0.763 ± 0.008	0.816	0.762
7	0.748 ± 0.010	0.805	0.753
8	0.735 ± 0.012	0.797	0.746

注: D_q (数值)表示计算机模拟的数值结果; D_q^1 代表利用文献[7]中的理论所得到的广义维数; D_q^2 表示利用 $f-\alpha$ 最佳近似关系式(18)求得的广义维数.

若仍取 $f = 0.42$, 则由上式即可求得 $\alpha = 0.705$. 将这对数值代入(14)式后得到的 D_q 值与计算机模拟结果在统计误差范围内符合(见表 1), 而且相应的 Hausdorff 维数 ($D = 1.706$)也与数值结果 ($D = 1.71$)一致. 因此, 我们把 $\alpha = 0.705$ 和 $f = 0.42$ 称为一对最佳值, 而方程(18)则为 f 与 α 的最佳近似关系式.

现在, 让我们利用(14)(16)和(18)式来讨论各向异性扩散 DLA 的广义维数 $D_q(p)$. 在前一节中, 给出了各向异性扩散概率 p 和相应的 Hausdorff 维数 $D(p)$ 的函数关系, 即方程(11), 这样, 利用(16)式, 可以求出 α 与 p 的关系

$$\alpha(p) = \begin{cases} \pi/[2\pi - 2\tan^{-1}\sqrt{2p/(1-2p)}] & 0 \leq p \leq 1/4; \\ \pi/[\pi + 2\tan^{-1}\sqrt{2p/(1-2p)}] & 1/4 \leq p \leq 1/2. \end{cases} \quad (19)$$

将 $\alpha(p)$ 代入最佳近似关系式(18)中, 可求得 $f(p)$, 把 $\alpha(p)$ 和 $f(p)$ 代入(14)式后, 得到

$$D_q(p) = \min[1, (q\alpha(p) - f(p))/(q - 1)]. \quad (20)$$

不难看出, 当 $p = 1/4$ 时, (20)式重新给出各向同性扩散 DLA 的广义维数, 即表 1 中的 D_q^1 . 利用(20)式, 对不同的 p 具体计算了相应的广义维数 $D_q(p)$. 这些结果见表 2, 它表明, 对任意 q 值, $D_q(p)$ 随 p 连续变化, 而且当 $p = 1/4$ 时, $D_q(p)$ 取得最大值, 当

表 2 对于不同的各向异性扩散概率 p , 广义维数 $D_q(p)$ 的理论值

$D_q(p) \backslash p$ q	0.01	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
2	0.644	0.732	0.807	0.878	0.933	0.993
3	0.587	0.653	0.709	0.763	0.804	0.849
4	0.568	0.627	0.677	0.724	0.761	0.802
5	0.559	0.614	0.661	0.705	0.740	0.777
6	0.553	0.606	0.651	0.694	0.727	0.763
7	0.550	0.601	0.645	0.686	0.718	0.754
8	0.547	0.597	0.640	0.680	0.712	0.747

注: p 从 0.5 到 0.25 的变化与表中所列的一致.

$p = 0$ 或 $1/2$ 时取得最小值. 另外, 对固定的 p , $D_q(p)$ 还满足: 当 $q > q'$ 时, $D_q(p) < D_{q'}(p)$.

- [1] T. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.*, **47**(1981), 1400.
- [2] T. Witten and L. M. Sander, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 5686.
- [3] H. J. Herrman, *Phys. Rep.*, **136**(1986), 153.
- [4] R. C. Ball, R. M. Brady, G. Rossi and B. R. Thompson, *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 1406.
- [5] L. A. Turkevich and H. Scher, *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 1026.
- [6] R. Jullien, M. Kolb and R. Botet, *J. Phys. (Paris)*, **45**(1984), 395.
- [7] T. C. Halsey, P. Meakin and I. Procaccia, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 854.
- [8] P. Meakin, *Phys. Rev.*, **A27**(1983), 1495.
- [9] A. Coniglio and H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 1068;
M. Plischke and Z. Racz, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 415.
- [10] P. Meakin and L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 2053.
- [11] H. G. E. Hentschel and I. Procaccia, *Physica*, **8D**(1983), 853.
- [12] P. Meakin, H. E. Stanley, A. Coniglio and T. A. Witten, *Phys. Rev.*, **A32**(1985), 2364.

THE SCALING PROPERTIES OF DLA CLUSTERS WITH ANISOTROPIC DIFFUSION

YU JIANG HU GANG

(Department of Physics, Beijing Normal University)

ABSTRACT

We present a coordinate transformation approach to study the effect of anisotropic diffusion on the growth of DLA clusters. For two-dimensional square lattice, we calculate analytically the Hausdorff dimension of the anisotropic diffusive DLA clusters, and show that the Hausdorff dimension D varies continuously with the anisotropic diffusion probability p , with $D_{\max}=5/3$ and $D_{\min}=3/2$. We also compare our results with the numerical results of Jullien et al., and find a very good coincidence. Finally, we discuss analytically the generalized dimensions D_q for DLA clusters with anisotropic diffusion.