

各向异性扩散控制聚集集团的豪斯道夫维数

冯 跃 新

江西电视大学,南昌,330046

冯 昌 京

江西水利规划设计院,南昌,330029

刘 申 之

江西师范大学计算中心,南昌,330027

1990 年 11 月 19 日收到

本文通过解析计算,给出了各向异性扩散控制聚集集团有效外半角 $\beta = \min\{\beta_x, \beta_y\}$, 修正了文献[1]关于有效外半角 $\beta = \max\{\beta_x, \beta_y\}$ 的假设,对各向异性扩散控制聚集集团的豪斯道夫维数 D 随各向异性扩散几率 p 的变化公式也作了相应的修正,并进行了计算机模拟实验,发现修正后的公式与实验符合较好. 与 Jullien 等人的计算机模拟结果进行了比较,在 $p \geq 1/4$ 时两者的结果是一致的.

PACC: 0540

一、引 言

最近,人们对各向异性扩散控制聚集(DLA)问题进行了很多研究^[1-4]. 余江等人^[1]利用 Ball^[2] 和 Turkevich^[3] 的结果,用坐标变换的方法解析地计算了在二维正方形点阵上各向异性扩散的 DLA 问题. 他们的结果表明,各向异性扩散的二维 DLA 集团具有标度不变性. 集团的外形轮廓为一菱形,两外半角分别为 β_x 和 β_y . 在引入一个假设:有效外半角 $\beta = \max\{\beta_x, \beta_y\}$ 之后,给出了集团的豪斯道夫维数 D 与行走粒子各向异性扩散几率 p 之间的关系式为

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

但由于以上的假设 $\beta = \max\{\beta_x, \beta_y\}$ 与实际不符,使给出的 $D(p)$ 的方程(1)也不正确. 本文通过解析计算表明有效外半角 $\beta = \min\{\beta_x, \beta_y\}$, 这样 D 与 p 之间的关系应为

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

修正后, D 的最大值为 2, 对应 $p = 0$ 或 $p = 1/2$, D 的最小值为 $5/3$, 对应 $p = 1/4$. 为了检验理论结果, 本文进行了计算机模拟实验. 实验结果表明, 修正后的(2)式与实验结果符合较好. 本文的最后部分与 Jullien 等人^[4]的计算机模拟结果进行了比较, $p \geq 1/4$ 时两者的实验结果一致, $p < 1/4$ 时出现差异, 通过对两种模型生长条件的分析, 对这一差异进行了解释.

二、各向异性扩散 DLA 集团的豪斯道夫维数

在讨论各向异性扩散 DLA 集团的豪斯道夫维数之前, 先回顾 Ball 等人的工作是有益的. 在 Ball 等人的工作中, 用一个外半角为 β 的圆锥体来模拟 DLA 集团的吸收, 这样, 随机行走的扩散问题就化为在简单的完全吸收的边界条件下求解拉普拉斯方程的定解问题. 对二维各向同性的扩散, 可由下述方程来描述:

$$\nabla^2 u = 0, \quad (3a)$$

$$\left. \begin{aligned} u &= 0 \\ \theta &= \pm\beta, \end{aligned} \right\} \quad (3b)$$

式中 u 为扩散场. 方程的解为

$$u(\rho, \theta) = c\rho^{\pi/2\beta} \cos(\pi\theta/2\beta), \quad (4)$$

式中 c 为归一化因子, ρ 为极坐标的极径, θ 为极坐标的极角, 随机行走粒子在圆锥上离顶点 ρ 处的通量为

$$\Phi(\rho) = (\pi/2\beta)c\rho^{\pi/2\beta-1}. \quad (5)$$

引入最大切断值 $\rho = R$ 和最小切断值 $\rho = a$, 这里 a 为点阵常数, 取 $a = 1$, 对(5)式积分可得: $dN/dt \approx cR^{\pi/2\beta}$, $dR/dt \approx c$, 这样, $dN/dR \approx R^{\pi/2\beta}$, $N \sim R^{\pi/2\beta+1}$, 即

$$D = \pi/2\beta + 1. \quad (6)$$

对二维各向同性扩散的 DLA 集团, Ball 假设集团的外形轮廓为一正方形, 因此外半角 $\beta = 3\pi/4$, 代入(6)式, 得集团的豪斯道夫维数 $D = 5/3$.

对二维各向异性扩散的 DLA 集团, 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几率, p' 为粒子沿 x 方向向右(或向左)移动到近邻格点上的几率, $p \neq p'$, $p + p' = 1/2$. 根据余江等人的工作, 行走粒子的扩散方程由下式描述:

$$\frac{(1-2p)}{2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + p \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad (7)$$

式中 u 表示各向异性扩散场, 作坐标变换:

$$x' = x, \quad (8a)$$

$$y' = y/\mu, \quad (8b)$$

式中

$$\mu = \sqrt{2p/(1-2p)}, \quad (9)$$

则方程(7)化为

$$\partial^2 u / \partial x'^2 + \partial^2 u / \partial y'^2 = 0, \quad (10)$$

即在 (x', y') 空间扩散为各向同性的, DLA 集团在此空间的外形轮廓为正方形, 即 $\beta'_x = \beta'_y = 3\pi/4$, 返回到 (x, y) 空间, 有

$$\beta_x = \pi - \tan^{-1}\mu, \quad (11a)$$

$$\beta_y = \pi/2 + \tan^{-1}\mu, \quad (11b)$$

由此得出各向异性扩散的 DLA 集团外部轮廓为一菱形, 两个外半角分别为 β_x, β_y , 菱形的形状只与各向异性扩散参数 μ 有关。由于这里出现了两个外半角 β_x, β_y , 为了能利用 $D = \pi/2\beta + 1$ 这一形式来计算各向异性扩散集团的 D , 文献[1]假设存在一个有效外半角 β , 并取 $\beta = \max\{\beta_x, \beta_y\}$, 然后代入(6)式中, 从而得出(1)式。但由于假设 $\beta = \max\{\beta_x, \beta_y\}$ 与实际不符, 使得(1)式不正确, 实际上有效外半角应为 $\beta = \min\{\beta_x, \beta_y\}$ 。这样 D 的公式相应地应改写成(2)式的形式。下面给出计算过程。

为了求出各向异性扩散 DLA 集团的豪斯道夫维数 D , 须知菱形边界上扩散粒子的通量 $\Phi(\rho)$ 。为此, 须从定解问题

$$\frac{1-2p}{2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + p \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \quad (12a)$$

$$u|_{\text{菱形边界}} = 0 \quad (12b)$$

求出。若直接求解方程(12)则很困难。在此, 我们仍采用(8a), (8b)式所作的变换, 先变到 (x', y') 空间进行求解, 在 (x', y') 空间, 这个问题的解是知道的。利用这个解再回到 (x, y) 空间, 这一问题就可解决。下面给出具体的推导过程。

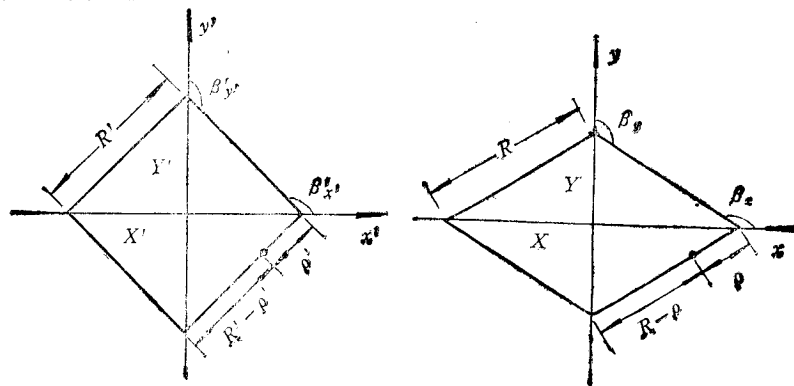


图1 通过(8a), (8b)式的变换, (x, y) 的空间定解问题(12)式变成了 (x', y') 的空间定解问题(13)式

通过(8a), (8b)式的变换, 方程(12)的定解问题化为(见图1)

$$\partial^2 u / \partial x'^2 + \partial^2 u / \partial y'^2 = 0, \quad (13a)$$

$$u|_{\text{正方形边界}} = 0 \quad (13b)$$

这就是各向同性扩散的 DLA 问题。这一定解问题的解可以通过 Schwarz-Christoffel 变换进行, 但这样做较复杂。在正方形比较大的情况下, 上述定解问题可以进一步近似简化成劈尖模型求解:

$$\partial^2 u / \partial x'^2 + \partial^2 u / \partial y'^2 = 0, \quad (14a)$$

$$u|_{\theta=\pm\beta} = 0 \quad (14b)$$

由(4)式可知, 这一问题的解为 $\Phi(\rho') = (\pi/2\beta')c'\rho'^{\pi/2\beta'-1}$, 式中 $\rho' = \sqrt{x'^2 + y'^2}$ 为边界上离顶点的距离, $\beta' = \pi - \tan^{-1}y'/x'$ 为劈尖的外半角, 以 $\Phi_x(\rho'), \Phi_y(\rho')$ 分别表示顶点在 x' 轴和 y' 轴上的劈尖的通量, 则正方形边界上粒子的通量 $\Phi(\rho')$ 有下列关系式:

$$\begin{aligned}\Phi(\rho') &= \Phi_{x'}(\rho') + \Phi_{y'}(R' - \rho') \\ &= \left(\frac{\pi}{2\beta_{x'}}\right) c' \rho'^{\pi/2\beta_{x'}-1} + \left(\frac{\pi}{2\beta_{y'}}\right) c'(R' - \rho')^{\pi/2\beta_{y'}-1},\end{aligned}\quad (15)$$

式中 R' 为正方形的边长, $R' = \sqrt{X'^2 + Y'^2}$, X', Y' 为正方形的半轴长. 回到 (x, y) 空间, 则得到菱形边界上粒子的通量为

$$\phi(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\beta_x}\right) c \rho^{\pi/2\beta_x-1} + \left(\frac{\pi}{2\beta_y}\right) c(R - \rho)^{\pi/2\beta_y-1}, \quad (16)$$

式中 $\beta_x = \pi - \tan^{-1}\mu$, $\beta_y = \pi/2 + \tan^{-1}\mu$, $c = \sqrt{2/(1+\mu)} c'$, $R = \sqrt{X^2 + Y^2}$. 知道边界上扩散粒子的通量后, 即可求出集团的豪斯道夫维数 D . 首先, 计算单位时间穿过菱形边界的粒子数, 因各条边界情况相等, 故只须计算一条边界即可. 对(16)式积分, 得

$$dN/dt \approx \int_0^{R-1} \phi(\rho) d\rho \sim R^{\pi/2\beta_x} + R^{\pi/2\beta_y}, \quad (17)$$

然后计算单位时间里 R 的生长率 dR/dt , 在 (x', y') 空间, 正方形各顶点的生长速率相同.

$$dX'/dt \sim c' \quad (18a)$$

$$dY'/dt \sim c' \quad (18b)$$

回到 (x, y) 空间, 用 $X' = X, Y' = Y/\mu$ 代入(18)式, 得

$$dX/dt \sim c' \quad (19a)$$

$$dY/dt \sim \mu c' = K, \quad (19b)$$

$$\begin{aligned}dR/dt &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{R} \left(2X \cdot \frac{dX}{dt} + 2Y \cdot \frac{dY}{dt} \right) \\ &= \frac{X}{R} \cdot \frac{dX}{dt} + \frac{Y}{R} \cdot \frac{dY}{dt} \\ &= c' \cos \beta + K \cos \beta \\ &= B,\end{aligned}\quad (20)$$

即 dR/dt 为一常数. 下面计算 dN/dR :

$$dN/dR \sim dN/dt \cdot dt/dR \sim R^{\pi/2\beta_x} + R^{\pi/2\beta_y}. \quad (21)$$

对(21)式积分, 得

$$\begin{aligned}N &\sim R^{\pi/2\beta_x+1} + R^{\pi/2\beta_y+1} \\ &= R^{\pi/2\beta_x+1} (1 + R^{\pi(\beta_x-\beta_y)/2\beta_x\beta_y}).\end{aligned}\quad (22)$$

在 $R \gg 1$ 的情况下

$$\text{若 } \beta_x > \beta_y, \text{ 则 } N \sim R^{\pi/2\beta_y+1}, \quad (23)$$

$$\text{若 } \beta_x < \beta_y, \text{ 则 } N \sim R^{\pi/2\beta_x+1}. \quad (24)$$

综合(23), (24)式, 若设有效外半角 $\beta = \min\{\beta_x, \beta_y\}$, 则

$$N \sim R^{\pi/2\beta+1}, \quad (25)$$

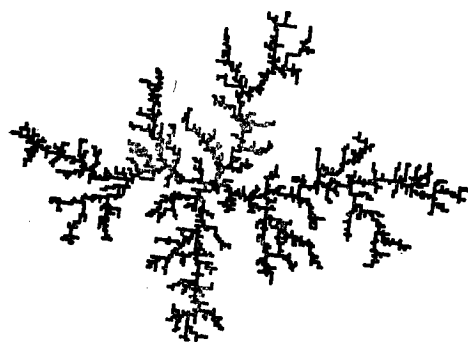
即

$$D = \pi/2\beta + 1. \quad (26)$$

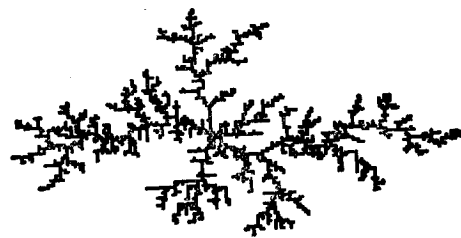
考虑到各向异性扩散几率 p 对 β_x, β_y 的关系, 即可写出(2)式.

三、计算机模拟实验及结果

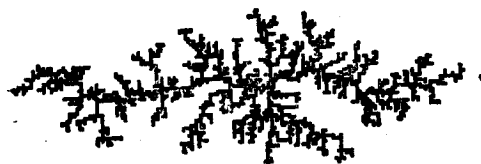
计算机模拟实验是在 ST-286 微机上进行. 在二维平面上建立正方晶格, 在晶格的中央放上一个种粒子, 初始时, 在半径 $r = 10$ 个晶格单位的圆上产生随机行走粒子, 该粒子在 y 轴方向向上(或向下)行走的几率为 p , 在 x 轴方向向右(或向左)行走的几率为 p' , $p + p' = 1/2$, $p \neq p'$. 当粒子行走到种粒子的最近邻时即被粘住, 然后在圆周上产生一个新的行走粒子. 若粒子未走到种粒子的近邻, 而是到半径 $r = 10$ 的圆周的外面, 则该粒子就被取消, 同时, 在圆周上产生一个新的行走粒子. 当聚集集团的生长半径达到 $r = 6$ 个晶格长度时, 产生行走粒子的圆的半径 r 变为 12 个晶格长度, 在此之后 r 随聚集集团的半径 R 的变化按 $r = 2R$ 而改变, 当 $r = 175$ 时, 就固定不动, 不再随 R 而变. 在模拟实验中, 为了减少计算机模拟时间, 对粒子的行走方式, 我们参照了 Meakin 的工



(a) 各向异性扩散几率 $p = 1/4$;
集团生长粒子数 $N = 2449$



(b) $p = 3/8$; $N = 1996$



(c) $p = 5/12$; $N = 1779$



(d) $p = 1/2$; $N = 8232$

图2 各向异性扩散 DLA 集团生长图案 集团生长半径 $R=100$

作^[9],即当行走粒子所处的位置与种粒子的距离 L 超过 $R + 10$ 个晶格长度时,行走粒子的步长为2个晶格单位.如果 L 超过 $R + 20$ 时,则步长为4个晶格单位.当 $L > R + 40$ 时,步长增长到8个晶格单位.当 $L > R + 80$ 时,步长增长到16个晶格单位.这样修正后,使计算机的模拟时间大为减少,从一个模拟实验大约运行40个小时到只需运行约6小时,而集团的性质未受到影响.当集团生长到一定的大小以后,实验就结束.对每个给定的 p 值,进行5个模拟实验,以取平均值.图2为模拟实验中集团生长的典型图案.从图2可以看出,在 $p = 1/4$ 时,图形是对称的,当 $p = 3/8$ 时, x 和 y 方向的对称性被破坏,图形变成一个菱形,当 $p = 5/12$ 时,图形变成一个更扁的菱形,而当 $p = 1/2$ 时,图形又恢复了 x 和 y 方向的对称性.下面对图形的这一结果作一定性分析.我们通过分析种粒子近邻四个点的生长几率来对图形的生长趋势作一大致的估计.如图3,行走粒子从圆周上产生, O 点为种粒子, a, b, c, d 四个点为种粒子的近邻,考虑 AB 弧上产生的行走粒子对 a, b 两点生长几率的影响,当 $p = 1/4$ 时,粒子沿 x 和 y 方向漂移的几率相等,由于各向同性, a, b 两点生长的几率相等,故集团的外形为 x 方向和 y 方向对称的.当 $p > 1/4$ 时,粒子的漂移以 y 方向为主.当粒子从 AB 弧上产生开始行走之后,向着 x 轴的运动要比向着 y 轴的运动更多,因此,在 x 轴上粒子 a 的生长几率比 y 轴上粒子 b 的生长几率更大,导致 x 和 y 方向对称性的破坏,图形成为菱形.随着 p 的增大,这种效果变得更明显,因而图形成为越来越扁的菱形.但 a 点的生长几率不随 p 的增大而线性增大.当 p 增大到一定值后,粒子几乎是垂直下落的.因此,只有 B 点及其附近的一小段才对 a 点的生长产生作用, AB 弧上其它地段不对 a 点产生作用.当 p 继续增大时,对 a 点生长有作用的区域反而减小,图形的对称性变好.在 $p = 1/2$ 的极限情况下,由于粒子只是沿着 y 轴的方向运动,因此只有圆上 B 点及近邻上产生的粒子才对集团的生长有作用.由于圆上行走粒子的产生是等几率的, a, b 两点的生长几率也就相等.这样, x 方向和 y 方向的生长图形也对称.

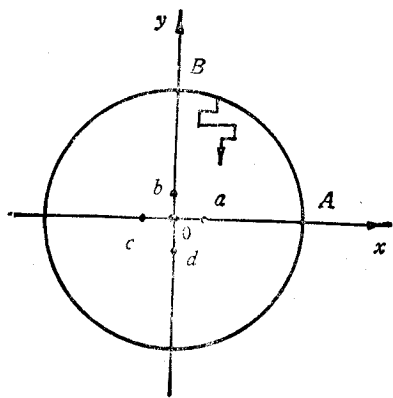


图3 粒子扩散聚集的计算机模拟示意图

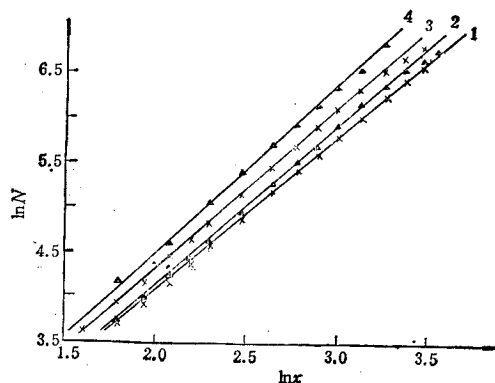


图4 不同扩散几率 p 时集团的豪斯道夫维数 D 随 r 的变化曲线.曲线1为 $p = 1/4, R = 100, D = 1.71$;曲线2为 $p = 3/8, R = 100, D = 1.77$;曲线3为 $p = 5/12, R = 100, D = 1.80$;曲线4为 $p = 1/2, R = 100, D = 1.89$

图 4 为扩散几率 p 分别为 $1/4, 3/8, 5/12, 1/2$ 时相应集团的豪斯道夫维数 D 随集团的半径 r 变化的实验曲线. 表 1 为对每一个 p 值, 五次模拟的实验结果, 其中 D 的值通过最小二乘法给出, 误差为标准误差. 从表 1 可以看出, 当 $p = 1/4$ 时, $D = 1.70$; 当 $p = 3/8$ 时, $D = 1.72$; 当 $p = 5/12$ 时, $D = 1.74$; 当 $p = 1/2$ 时, $D = 1.85$.

表 1 不同扩散几率 p 时集团的豪斯道夫维数 D

p	R	N	$\bar{N}$	D	$\bar{D}$
$1/4$	100	2449	2694	1.733	1.70 ± 0.04
		2799		1.662	
		3102		1.707	
		2432		1.654	
		2687		1.752	
$3/8$	100	1998	1806	1.774	1.72 ± 0.06
		1459		1.650	
		1676		1.702	
		1930		1.689	
		1996		1.806	
$5/12$	100	1493	2001	1.736	1.74 ± 0.05
		2619		1.652	
		1954		1.735	
		2158		1.792	
		1779		1.802	
$1/2$	100	7944	7977	1.813	1.85 ± 0.03
		8232		1.888	
		8832		1.870	
		7139		1.807	
		7736		1.860	

图 5 为修正前、后的 $D(p)$ 公式给出的 D 随 p 变化的曲线关系, 同时标出实验的标准误差范围. 由于 D 为 p 的连续、对称的函数, $p = 1/4$ 为对称轴, 故模拟实验时只取了 $p \geq 1/4$ 部分. 对 $p < 1/4$ 部分, 我们也进行过模拟实验, 结果表明, 除了集团的形状改变外(菱形的长轴方向在 y 轴上), 集团的 D 值与对称点上的 D 值一致. 从图 5 可以看出, 修正后的公式与实验结果符合得较好.

最后, 把本文的结果与 Jullien 的结果作一比较. 在 Jullien 的这一模型中, DLA 集团是在底长为 L 个晶格长度的半无穷二维狭长空间生长的集团, 生长条件为 $y=0$ 处种粒子均匀布满底线, 在 $y \rightarrow \infty$ 处扩散粒子源均匀分布, 如图 6(a), 通过研究这一狭长带中粒子的生长情况, 给出生长集团的豪斯道夫维数. Jullien 的这一模型相当于普通 DLA 集团, 当 R 很大时, 从中取一小块区域, 如图 6(b) 中 $ABCD$, 通过研究它的生长情况, 来推断整个集团的性质. 因此, 它的结果反映了 R 很大时集团的标准度性质. 将它和本文的实验结果相比, 发现在 $p \geq 1/4$ 时, 两者结果一致, 在 $p < 1/4$ 时, 两者出现差异. 下面通过对这两种模型的生长条件的分析, 对此进行解释. 在 $p > 1/4$ 时, 粒子的运动主要是沿着 y 轴的方向漂移. 图 6(b) 中 $ABCD$ 区域内粒子的生长主要是由 BC 弧上产生的行

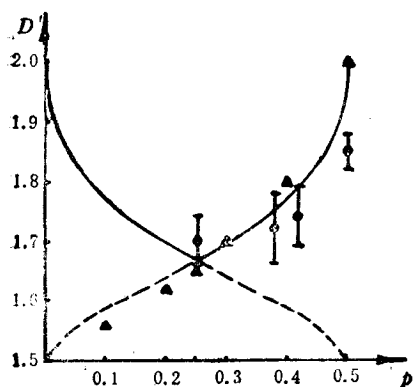


图5 集团的豪斯道夫维数 D 随扩散几率 p 变化的关系曲线 实线为修正后的(2)式给出的结果; 虚线为修正前的(1)式给出的结果; 圆点为模拟实验的结果; 三角形为 Jullien 等人的实验结果

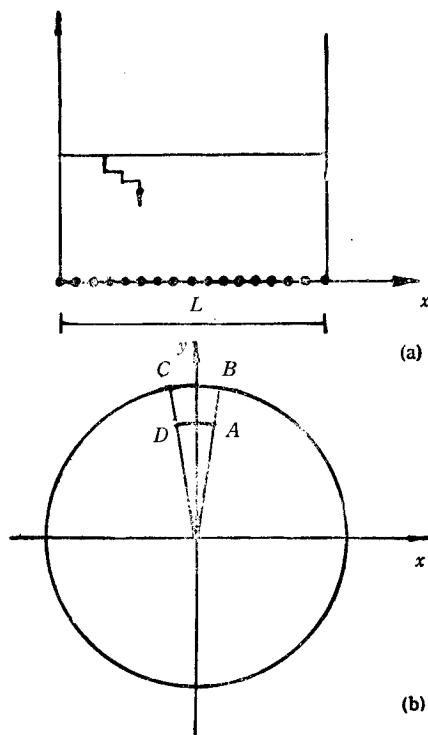


图6 两种模型生长过程示意图

(a) 为 Jullien 模型;
(b) 为 DLA 模型

走粒子引起的, BC 弧两侧的圆弧产生的行走粒子对 $ABCD$ 区域内集团的生长影响可以忽略, 因此在此情况下, 图 6(a), (b) 两种模型的生长条件基本相同, 故得出的结果一致. 当 $p < 1/4$ 时, 粒子的运动偏向于沿 x 轴方向, $ABCD$ 区域内集团的生长除来自 BC 弧上产生的行走粒子外, BC 弧两侧圆弧上产生的行走粒子对集团生长的影响不可忽略, 此时, 图 6(a), (b) 两种模型生长的条件变得不同, 故得出的结论出现差异. 对这一模型, 当我们令 $\beta_y = \pi$ 时, 得有效外半角 $\beta = \beta_x$, 可得

$$D = \pi / [2\pi - 2\tan^{-1} \sqrt{2p/(1-2p)}] + 1. \quad (27)$$

从图 5 可以看出, (27) 式可以很好地描述 Jullien 的结果.

- [1] 余江、胡岗, 物理学报, **38**(1989), 202.
- [2] R. C. Ball, B. M. Brady, G. Rossi and B. R. Thompson, *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 1406.
- [3] L. A. Turkevich and H. Scher, *Phys. Rev. Lett.*, **55**(1985), 1026.
- [4] R. Jullien, M. Koib and R. Botet, *J. Phys. (Paris)*, **45**(1984), 395.
- [5] P. Meakin, *Phys. Rev.*, **A27**(1983), 1495.

THE HAUSDORFF DIMENSION OF DIFFUSION-LIMITED AGGREGATION CLUSTERS WITH ANISOTROPIC DIFFUSION

FENG YUE-XIN

Jiangxi Television University, Nanchang, 330046

FENG CHANG-JING

Jiangxi Water Conservancy Design Academy, Nanchang, 330029

LIU SHEN-ZHI

Computation Center, Jiangxi Normal University, Nanchang, 330027

(Received 19 November 1990)

ABSTRACT

We obtain effective exterior half angle of the anisotropic diffusion DLA clusters $\beta = \min\{\beta_x, \beta_y\}$ by analytical calculation. The hypothesis of Yu Jiang about $\beta = \max\{\beta_x, \beta_y\}$ is modified and the formula of Hausdorff dimension D of the anisotropic diffusion DLA clusters varying with the anisotropic diffusion probability p is also modified. We also made simulation tests and find that the modified formula agrees well with experimental results. Finally, we compare our result with the numerical result of Jullien, and find a good coincidence when $p \geq 1/4$.

PACC: 0540