

ГЕНЕРИЧНА НЕСТАБИЛНОСТ В МОДЕЛА НА ДИФУЗИОННО-КОНТРОЛИРАНА АГРЕГАЦИЯ (ДКА): ЕФЕКТ НА ГЛОБАЛНИТЕ РАДИУСИ НА ПОРАЖДАНЕ И ИЗОСТАВЯНЕ

¹Христина Попова, ²Десислава Петкова, ¹Веселин Тончев

¹Институт по физикохимия „Акад. Ростислав Каишев“ – БАН

²Софийски университет „Св. Климент Охридски“

Резюме. Предложен е прост модел на дифузионно-контролиран растеж на два едномерни кластера с общи радиуси на пораждање и изоставяне без обмен на дифундиращите частици. Той е насочен към рационализиране на нестабилността наблюдавана в оригиналния модел на ДКА в две измерения. Използването на табулирани вероятности за присъединяване/изоставяне на частиците извършващи случайна разходка позволява намирането на скоростта на растеж на нестабилността. Така, откъд началните етапи, разликата в размерите на кластерите Δh расте като $\frac{d\Delta h}{dt} = 1 - \frac{\Delta b}{\Delta k}$, където радиусът на пораждање е $x_{max} + \Delta b$, радиусът на изоставяне е $x_{max} + \Delta k$, времето е измерено в брой частици генерирани за кластер, а x_{max} е размерът на по-големия кластер.

Keywords: diffusion-limited aggregation (DLA), growth instability, birth and killing radii, tabulated probabilities

Встъпление

Преди време публикувахме тук една статия (Tonchev & Yakimova, 2008), посветена на модела на Дифузионно-Контролираната Агрегация (ДКА) (Witten, Jr. & Sander, 1981) и в нея представихме оригинални резултати за преход от фрактален към (почти) линеен растеж. Тогава нямаше представа за природата на този преход, но наблюдението ни „устройваше“, защото бяхме наблюдавали и изследвали подобен преход в електрохимични условия далеч от равновесие,¹⁾ при тези условия кинетиката е практически мигновена и именно доставката на вещество към растящата повърхност е скоростопределящият етап. В това кратко писмо ще дадем обяснение на този преход на базата на още по-опростен, едномерен модел, което би ни позволило впоследствие, увеличавайки постепенно сложността, ще изградим рационален подход към начините за избягването на прехода, вече набелязани

в двумерния ни модел (Tonchev & Rangelov, 2010; Rangelov et al., 2012). Веднага ще отбележим, че се касае за алгоритмична нестабилност, която е неизбежна (*генерична*) и вторична, и е предизвикана от използването на общи, *глобални*, радиуси на генериране и изоставяне на частиците. Вторична е, защото самият фрактален растеж вече е резултат от нестабилност, или дори поредица нестабилности, в началото на която е преходът от изометричен към скелетен растеж (Tonchev & Nanev, 1995), а неизбежна, защото до нея се достига закономерно, което пък се илюстрира и обяснява от предложението тук модел. Както и в предишните статии, резултатите, представени тук, са получени с помощта на оригинални програмни средства.

Оригиналният модел на ДКА е предложен от Witten, Jr. & Sander (1981), а нашият мини-обзор (Tonchev & Yakimova, 2008) съдържа още литературни източници върху модела.

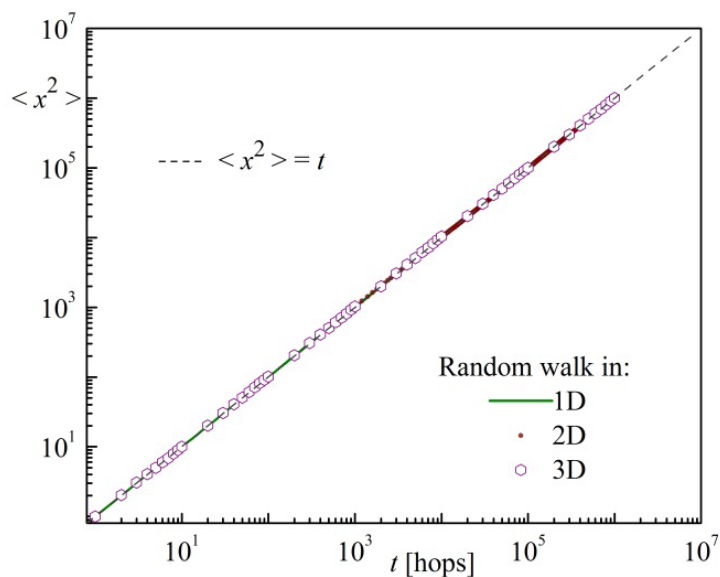
Едномерна дифузия

Този е най-простият модел на дифузия – „частица“ прави скокове с единична дължина и еднаква вероятност наляво или надясно върху правата x . Резултатът за средния квадрат на отместването за голям брой частици като функция на времето (измервано в брой скокове) не е оригинален, но ще помогне да навлезем по-плавно в темата, тръгвайки от „нулата“. Сравнили сме го с резултати за две и три измерения (Фиг. 1).

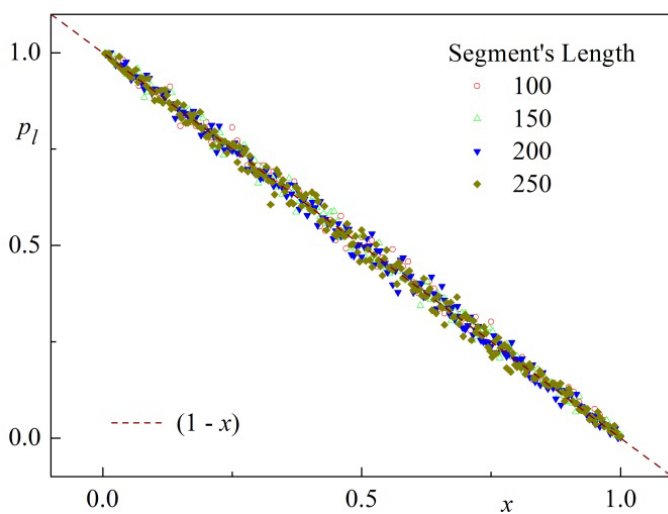
Много е важно да знаем, че не просто следим разстоянието на една частица след всеки неин скок, а следим 10000 частици една след друга, всички тръгващи от едно и също място, и за всяка стойност на времето (= номер на пореден дифузионен скок) получаваме усреднения квадрат на разстоянието, на което са се придвижили за това време. Ако бихме проследили траекторията на само една частица, не бихме забелязали изобщо тази зависимост, получена от Айнщайн при изследванията му върху Брауновото движение. Численият предфактор съдържа т.нар. дифузионен коефициент, а степента 1 е *универсална* и не зависи от размерността на пространството, т.е. в колко посоки може да скача частицата всеки път, когато избира посоката.

ДКА в едно измерение

Този „карикатурен“ вариант на оригиналния модел (Witten, Jr. & Sander, 1981) би могъл да изглежда и безинтересен, но изследванията върху него се появяват (Kesten, & Sidoravicius, 2008) в един достатъчно актуален контекст – разпространението на инфекции. За целите на нашето изследване този модел ще придобие интерес по-долу. В точката 0 на координатна ос x поставяме т.нар. „зародиш“, задаваме радиус на поражение и радиус на изоставяне (запазили сме термините и



Фиг. 1. Случайни разходки в едно, две и три измерения, зависимост на средното квадратично отместване от времето, измерено в брой скокове



Фиг. 2. Вероятност за достигане на левия край на отсечка с дължина L от частица, започваща случайна разходка от позиция xL .

дефинициите от двумерния модел). Смисълът на въвеждането на тези два радиуса е преди всичко от изчислителна гледна точка - оригиналното предположение е, че частиците се генерират от безкрайност и дифундират дотогава, докато достигнат растящия агрегат, но това е реално неприменимо. Радиусът на изоставяне има и физическия смисъл, че в реални условия в дадена система обикновено растат повече от един агрегати и когато една частица се отдалечи прекалено от даден, тя неизбежно попада в зоната на влияние на друг. Именно радиусът на изоставяне дефинира количествено какво значи „прекалено отдалечаване“.

От точката, която е на разстояние един радиус на поражение започва едномерна дифузия на една частица. Когато тя достигне най-вляво до точката 1, тоест стане най-близък съсед на частицата в 0, остава там (прилепва необратимо), а ние генерираме нова частица от точката с координата (радиуса на поражение + 1) и тя започва едномерна дифузия. Ако обаче някоя от частиците достигне надясно разстояние от края на растящия агрегат равно на радиуса на изоставяне, ние се отказваме от нея и генерираме нова частица от същото място, от което сме генерирали изоставената. Така едномерният агрегат ще расте надясно със скорост, която ще се определя от съотношението на двата зададени радиуса. Преди да продължим с модела, ще използваме един „трик“, който се появява в много и различни области – тъй като ще следим дифузията на много на брой частици върху права една след друга, можем да направим предварително изследване, в което да получим вероятността за присъединяване като функция на мястото на генериране спрямо двете точки – на присъединяване и изоставяне. Когато впоследствие се върнем към модела на ДКА в едно измерение, при всяко генериране на нова частица, ще решаваме дали се присъединява към кластера (вляво) или ще бъде изоставена (вдясно) не след като я оставим да дифундира, а на базата на вече пресметнатата вероятност и така ще спестим компютърно време и, евентуално, ще можем да получим аналитичен израз.

Вероятност за присъединяване

Пак разглеждаме една частица, която ще скача наляво или надясно с равни по дължина скокове, но не върху безкрайна права, а върху отсечка с определена дължина и ще пресметнем вероятността p_i тази частица да достигне левия край на отсечката в зависимост от това, на кое място от отсечката е началото на разходката i (знаем ли тази вероятност, другата вероятност – да достигне до десния край, я допълва до 1). Отново ще усредняваме – от дадено място върху отсечката ще тръгват последователно по 500 частици и ще преброим колко от тях са стигнали до левия край на отсечката, после този брой ще делим на 500. Получената зависимост е проста – вероятността е пропорционална на $1-x$, където x е частта от отсечката вляво от началото на разходката, отнесена към цялата дължина. И това (Фиг. 2) е

резултат, който не зависи от абсолютната дължина на отсечката, върху която частиците дифундират. Забележете също по-голямото колебание на стойностите на вероятността, когато частиците тръгват далеч от двата края.

Получихме вероятността за присъединяване на базата на много на брой независими опити, но броят им е пак много по-малък отколкото ще участват в следващите числени експерименти, а и получената вероятност е универсална, независима от абсолютната дължина на отсечката. Така можем да използваме произволно дълги отсечки и да растем върху тях големи клъстери с цел получаване на асимптотичното им поведение, без това да води до дълги пресмятания заради голямото време на дифузия. Само по себе си, това няма особен смисъл, защото единствената разлика, която можем да наблюдаваме е породена от задаването на дължината на двата радиуса – колкото по-близо е радиусът на изоставяне, толкова по-бавно ще расте агрегатът. При това скоростта, измервана в брой генерирани частици ще е независима от дължината на двата радиуса при равни стойности на отношението им, но ще е различна ако е измервана в брой дифузионни скокове.

Паралелна ДКА в едно измерение

Тук започва оригиналната част от изследването ни. Ще повишим пестеливо сложността на модела. Ще нарастваме едновременно два кластера (две отсечки), нека са разположени на две успоредни оси x и x' , с начални координати в нулите на тези оси и с *общи* радиуси на поражение и изоставяне. Когато една частица достигне радиуса на изоставяне, от нея ще се отказваме без последствия, т.е. наново ще решаваме къде да генерираме следващата частица, върху x или x' , с помощта на случайно число. Така, ако единият кластер успее да порасне повече, върху „неговата“ ос частиците пак ще се генерират от разстояние равно на радиуса на поражение, а върху другата ос към радиуса на поражение ще се добави и разликата в дължините на двата кластера (изоставането спрямо по-напредналия). Това ще намали вероятността на частиците да достигнат именно левия край на новата, по-дълга отсечка и така се развива нестабилност от типа „колкото повече, толкова повече“. В различни контексти можем да срещнем подобна нестабилност, наречена различно, дори „ефект на Матей“ (Merton, 1968) заради появата на описанието ѝ още в свещените книги: „защото всекиму, който има, ще се даде и преумножи, а от оногова, който няма, ще се отнеме и това, що има“ (Матей 25:29).

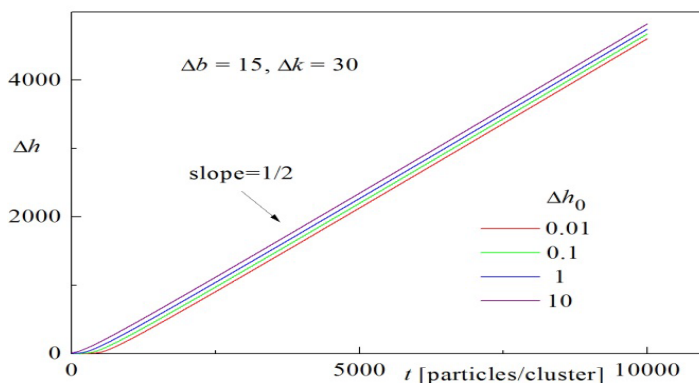
Вярно е, че в нашия случай не отнемаме частици от изоставящия кластер, но за него става все по-трудно да си „доставя“ частици, защото те ще бъдат генерирани от все по-далеч и така ще нараства вероятността да бъдат изоставени вместо да се присъединят към кластера, т.е. в рамките на развиващата се обща система от два кластера, на изоставящия му се отнемат все повече шансовете да расте. По пътя

към получаване на аналитичен израз ще намалим допълнително ролята на случайността, използвайки следните допустими приближения: (а) ще оставим първата частица да се отложи върху оста x ; (б) оттук нататък ще генерираме последователно частици върху двете оси (което е аналогично на *едновременно* генериране), вместо да решаваме всеки път върху коя ос да генерираме с помощта на генератора за случайни числа; (в) ще нарастваме и двата кластера не с цял брой частици, а само с такава част от частицата, равна на вероятността ѝ за присъединяване при конкретните условия, върху x тя е винаги $1 - \Delta b / \Delta k = (\Delta k - \Delta b) / \Delta k$, където Δb е радиусът на пораждање, а Δk е радиусът на изоставяне. Върху x' тази вероятност е модифицирана от наличието на разлика в размерите на двата кластера Δh и е $1 - (\Delta b + \Delta h) / (\Delta k + \Delta h) = (\Delta k - \Delta b) / (\Delta k + \Delta h)$. Така разликата в размерите на двата кластера след всяко генериране по една частица върху всяка ос ще бъде:

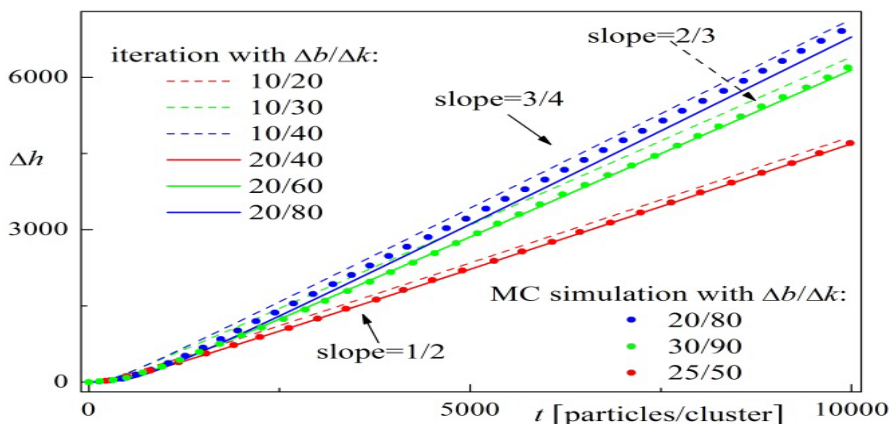
$$\Delta h_g = \Delta h_{g-1} + \left(1 - \frac{\Delta b}{\Delta k}\right) - \left(1 - \frac{\Delta b + \Delta h_{g-1}}{\Delta k + \Delta h_{g-1}}\right) = \Delta h_{g-1} + \left(\frac{\Delta k - \Delta b}{\Delta k}\right) \left(\frac{\Delta h_{g-1}}{\Delta k + \Delta h_{g-1}}\right) \quad (1)$$

$$(\Delta h_g - \Delta h_{g-1}) = \left(1 - \frac{\Delta b}{\Delta k}\right) \left(\frac{\Delta h_{g-1}}{\Delta k + \Delta h_{g-1}}\right) \quad (2)$$

и времевата еволюция на Δh може да бъде получена с кратък код, който итерира зависимостта по-горе, започвайки с някакво Δh_0 . Допуснахме, че $\Delta h_0 = 1$, но е ясно, че всякакви положителни, дори драстично малки, стойности биха нараствали монотонно с времето. Ще покажем (Фиг. 3), че скоростта на нарастване не е функция на началната разлика Δh_0 , а само на отношението $\Delta b / \Delta k$.



Фиг. 3. Развитието на неустойчивостта, измерено в разлика между размерите на двата кластера, Δh не зависи от началната разлика Δh_0 , времето е измерено като брой частици, генерирани за кластер



Фиг. 4. Зависимост на еволюцията на Δh от частното на двата радиуса – на пораждање и изоставяње, виж също и уравнение (3).

Остава да намерим и каква е явната форма на тази зависимост. Тя е:

$$\frac{d\Delta h}{dt} = 1 - \frac{\Delta b}{\Delta k} \quad (3)$$

както следва от фиг. 4.

Проверихме този резултат, като генерирахме напълно случайно частиците върху една от двете оси и ги оставяхме да дифундират докато се присъединят към съответния кластер увеличавайки размера му с 1 или бъдат изоставени. Резултатът, уравнение (3), беше идентичен, както се вижда от данните от Монте-Карло симулации на Фиг. 4.

За да стигнем до уравнение (3) направихме някои допускания. Може би най-оспорвано би било ограничението частиците да извършват само едномерна случайна разходка на фона на общи радиуси на пораждање и изоставяње. То, обаче, не е толкова неразумно – в някакви приемливи условия, далеч от ефекта на поглъщащата граница следва да се очаква симетрия по отношение на броя частици, генерирани върху едната ос и преминали върху другата в рамките на позволената им, вече двумерна, разходка.

Заклучение

Така предложеният тук модел може да послужи като отправна точка за размишления и моделиране в коренно различни една от друга области, където се наблюдава конкуренция за ресурси. При него дори няма пряка конкуренция за ресурсите, но

единият участник е получил в началото някакво, дори съвсем малко, предимство и после го е „използвал“ за да задава той правилата за достъп до ресурсите (в нашия случай радиусите на пораждане и изоставяне). В някакъв социален контекст този участник дори може да пледира за наличието на равни възможности - по една частица за единица време за всеки участник, подминавайки благоразумно факта на началното си стимулиране, предопределило нарастващите затруднения за другия участник в достъпа до иначе равните възможности.

Ще използваме резултатите от този модел при изграждане на методология на изследване на по-сложни модели. Например, при изследване на дифузионно-контролиран растеж на вицинални повърхности, както и при създаване на приемливи модификации на оригиналния модел на ДК с цел получаване на нови, физически надеждни, резултати (Rangelov et al., 2012).

БЕЛЕЖКИ

1. Р. Рашков и сътр., частно съобщение.

ЛИТЕРАТУРА

- Kesten, H. & Sidoravicius, V. (2008). A problem in one-dimensional diffusion-limited aggregation (DLA) and positive recurrence of Markov Chains. *Ann. Probab.*, 36, 1838 – 1879.
- Merton, R.K. (1968). The Matthew effect in science: the reward and communication systems of science are considered. *Science*, 159 (3810), 56 – 63.
- Rangelov, B., Goranova, D., Tonchev, V. & Yakimova, R. (2012). Diffusion limited aggregation with modified local rules. *Compt. r. Acad. bulg. Sci.*, 65, 899 – 904.
- Tonchev, V. & Nanev, C.N. (1995). Transition from isometric to skeletal crystal shapes. *Cryst. Res. & Technol.*, 30, 1105 – 1109.
- Tonchev, V. & Rangelov, B. (2010). Chemical spirals. *Chemistry*, 19, 405 – 416 [In Bulgarian].
- Tonchev, V. & Yakimova, R. (2008). About the diffusion, fractals, scaling and universality, Monte Carlo method or over quarter century of the model of diffusion-limited aggregation. *Chemistry*, 17, 47 – 56 [In Bulgarian].
- Witten, Jr., T.A. & Sander, L.M. (1981). Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon. *Phys. Rev. Lett.*, 47, 1400 – 1403.

GENERIC INSTABILITY IN THE MODEL OF DIFFUSION-LIMITED AGREGATION (DLA): THE EFFECT OF GLOBAL RADII OF BIRTH AND KILLING

Abstract. We construct a simple model of diffusion-limited growth of two 1D clusters with common birth and killing radii without exchange of the diffusing particles (pure 1D diffusion). It is aimed at rationalizing the instability observed in the original DLA model in 2D. Using tabulated probabilities for attachment/killing of the random walkers we obtain the velocity of the instability growth. Thus, beyond the initial stages the difference in the cluster sizes Δh grows as $\frac{d\Delta h}{dt} = 1 - \frac{\Delta b}{\Delta k}$, where the birth radius is $x_{\max} + \Delta b$, the killing radius is $x_{\max} + \Delta k$, the time is measured in number of particles released per growing aggregate and $x_{\max}$ is the size of the bigger cluster.

✉ **Dr. Vesselin Tonchev** (corresponding author)

Institute of Physical Chemistry

Bulgarian Academy of Sciences

1113 Sofia, Bulgaria

E-mail: vesselin.tonchev@gmail.com