

**Таруса, 01-03 октября 2014 года**

**Многомерное обобщение  
алгоритма DLA**

*А.Ю. Меньшутин*

# Примеры структур роста



*Natural Cu*



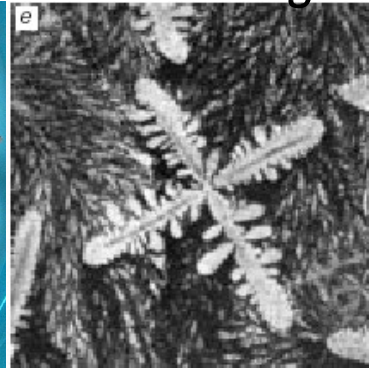
*Goethite in agate*



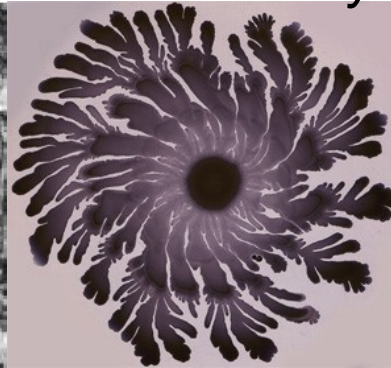
*Ice crystals*



Cu



Nanocrystal on  
a substrate



Bacteria colonia



Manganese oxide  
in chalcedony

Общее свойство — фрактальная, сильно разветвленная структура.

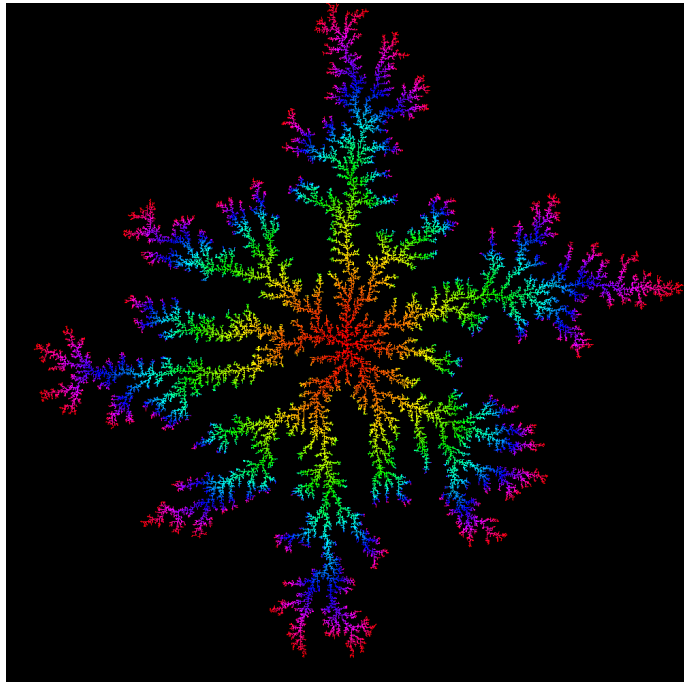
Основная геометрическая величина — фрактальная размерность  $D$ , связывающая число частиц в кластере и его характерный размер  $R$

$$N \propto R^D$$

# Введение

T.A. Witten & L.M. Sander, Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon, PRL 47 (1981) 1400.

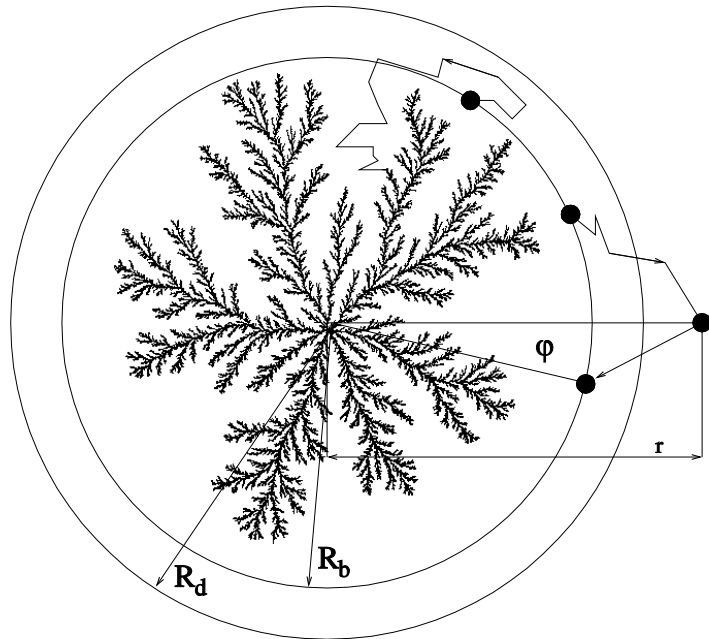
- На **квадратной решетке** имеется частица-зародыш (занятая **клетка**).
- Вдали от зародыша рождается новая частица.
- Новая частица совершает **случайное блуждание** на плоскости.
- Если новая частица подходит вплотную к занятой клетке, она прилипает (клетка становится занятой).
- Если частица уходит далеко от зародыша — она уничтожается.
- Рождение новой частицы и повтор процесса.



- 1) Какова фрактальная размерность  $D$
- 2) От чего зависит  $D$
- 3) Каковы асимптотические свойства таких объектов
- 4) Проверка аналитических предсказаний и сравнение различных моделей между

# Алгоритм

Наиболее эффективная реализация алгоритма — в безрешеточном случае:



- 1) Частицы — окружности единичного радиуса.
- 2) В начале координат находится частица-зародыш.
- 3) В случайном месте на окружности радиуса  $R_b$  рождается новая частица.
- 4) Новая частица совершает броуновское движение до тех пор, пока она не прилипнет.
- 5) Если частица выходит за окружность  $R_d$  ( $R_d > R_b$ ) она **возвращается** на окружность  $R_b$  с вероятностью

$$W(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \frac{x^2 - 1}{x^2 - 2x \cos \varphi + 1}, \quad x = r / R_b$$

- 6) Запуск новой частицы и повтор процесса с шага 3.

Часто,  $R_d \gg R_b$  и правило возврата частиц заменяется правилом уничтожения, что в итоге приводит к образованию неустойчивости в росте и необходимости использования *уменьшения шума*.

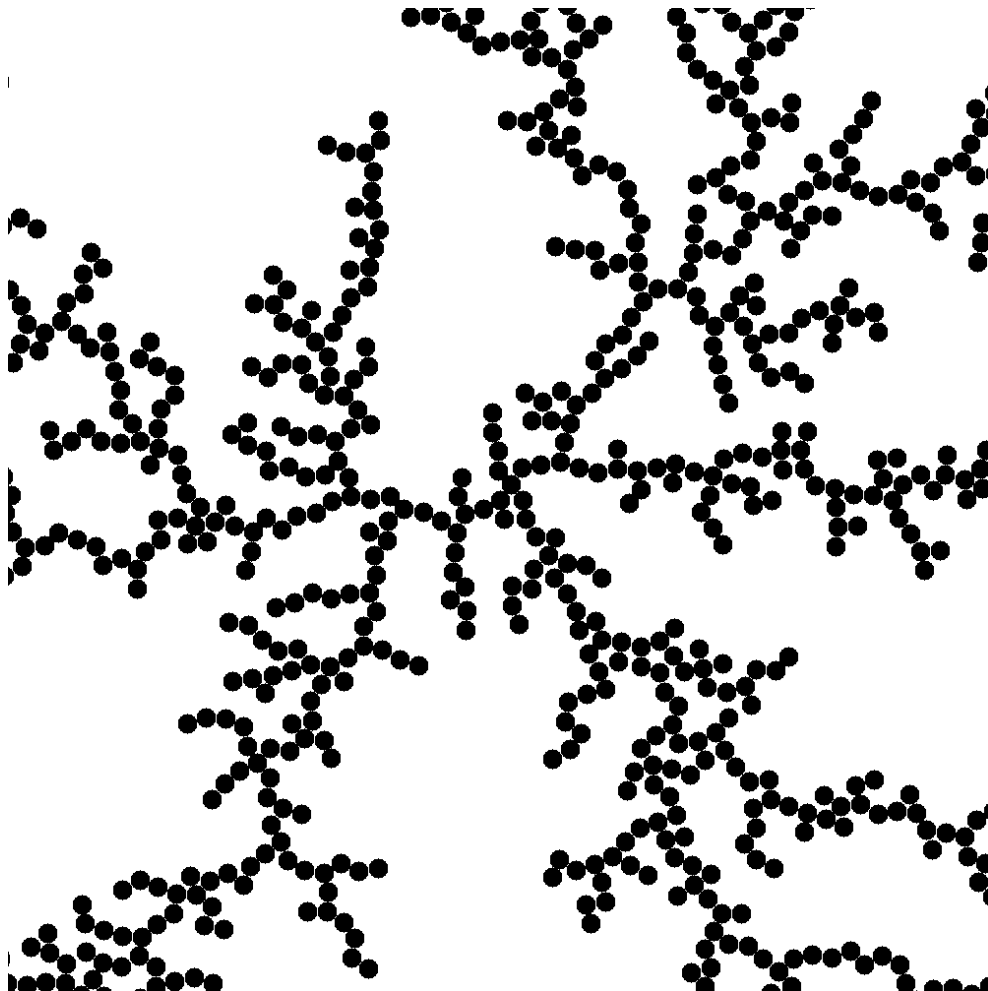
# Алгоритм

- 1) Необходима проверка столкновения с кластером на каждом шаге — надо ограничить число частиц кластера для проверки.
- 2) Частица, находящаяся вдали от кластера, может двигаться с большим шагом. Ее шаг должен быть меньше размеров свободной области.
- 3) Необходим эффективный алгоритм для поиска размеров свободной области.

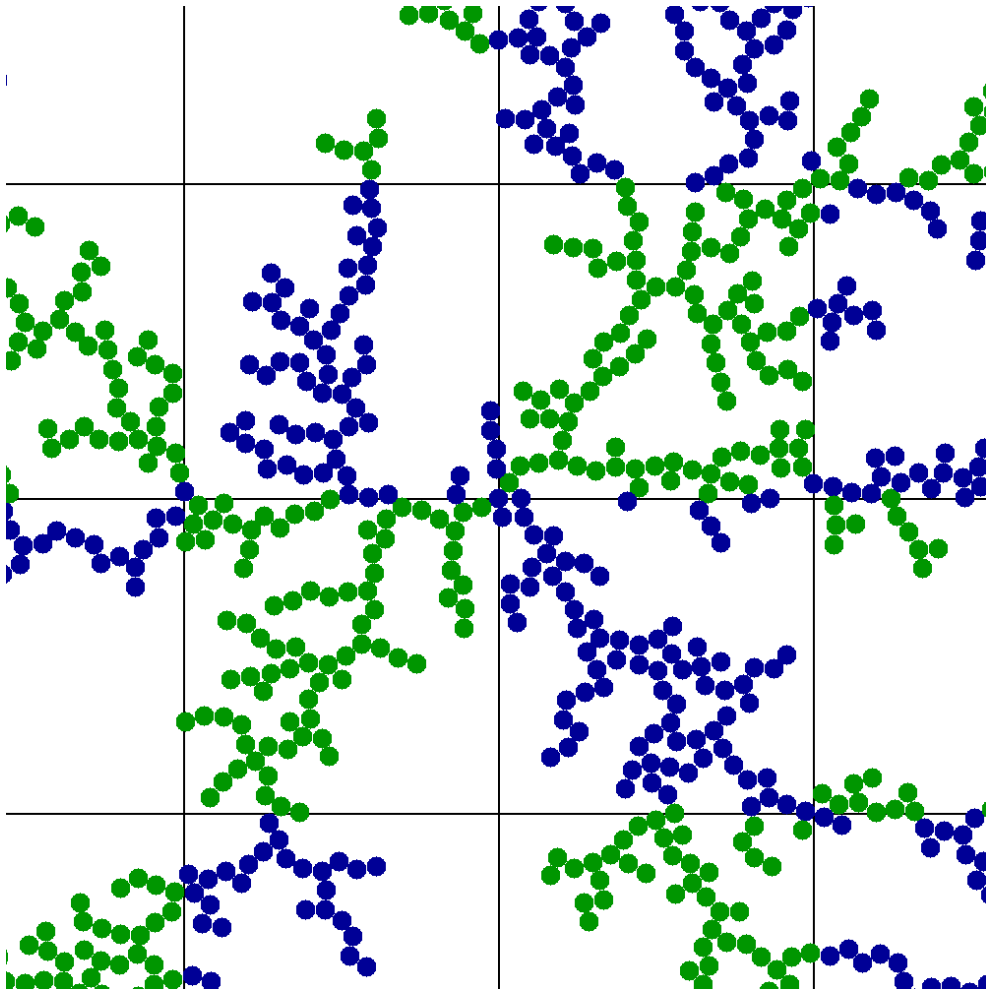
Задача проверки столкновения и поиска размеров свободной области решается одним и тем же методом.

Численный алгоритм для определения размеров свободной области, который мы используем, есть комбинация двух алгоритмов — Болла (R.C. Ball) и Микена (P. Meakin).

# Алгоритм

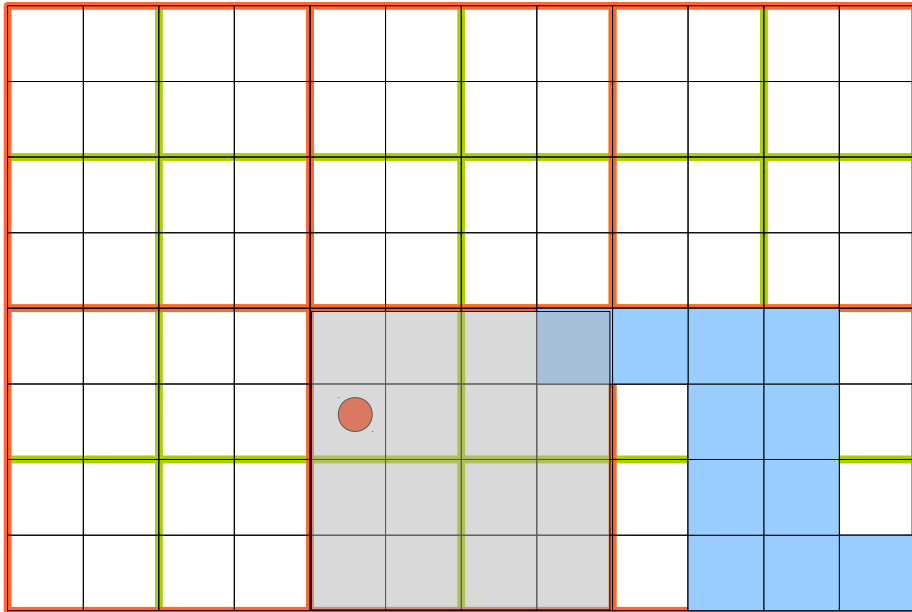


# Алгоритм



Вся плоскость разбита на ячейки размером 32.  
Каждая ячейка хранит координаты частиц, лежащих в ней, а также размер свободной области.

# Сравнение алгоритмов поиска свободной области



Занятая ячейка    
 
 Положение частицы

Иерархический алгоритм —  
 определение размера свободной  
 области путем поиска пустой ячейки  
 начиная с максимального уровня  
 иерархии  
 Затем — перескок частицы на  
 границу квадрата (используя  
 заранее вычисленное  
 распределение)

Модифицированный алгоритм —  
 определение размера свободной  
 области как размер вписанного  
 квадрата по значениям,  
 хранящимся в каждой ячейке



# Алгоритм

5	5	5	5	4	4	4	4	4	4
4	4	4	4	4	3	3	3	3	3
3	3	3	3	3	3	2	2	2	2
2	2	2	2	2	3	2	1	1	1
1	1	1	1	2	3	2	1		
1			1	2	3	2	1		1
1	1		1	2	3	2	1	1	1
1			1	2	2	2	2	2	2
		1	1	1	2	3	3	3	3
				1	2	3	4	4	4

Размеры свободной области определяются как размер вписанного квадрата с точностью до размера ячейки

При занятии новой ячейки (редкое событие) происходит пересчет размеров свободных областей во всем пространстве.

Возмущение распространяется непрерывно => перебор можно выполнять не по всему пространству

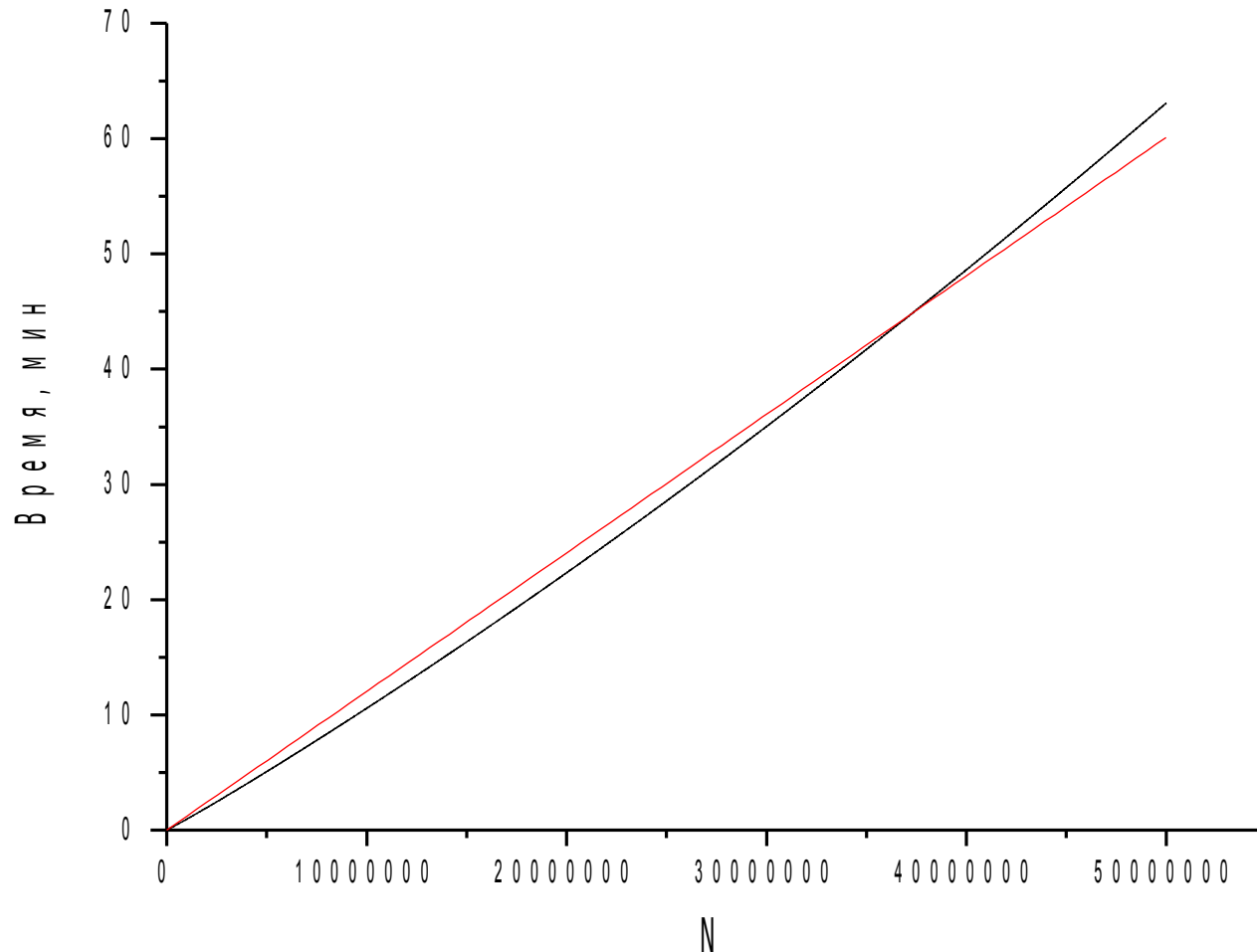
Максимальный размер отслеживаемой свободной области — 15 ячеек.

Вблизи кластера (ячейки с номером 1 на рисунке) — выполняется точное нахождение размеров свободной области.

Для больших кластеров используется две иерархических сетки.

# Эффективность алгоритма

Реализация предложенного алгоритма позволяет построить 1 кластер из 50 млн. частиц за 60 минут ( в ИТФ на кластере Парма <http://parma.chant.ru/>).



Время практически линейно по N

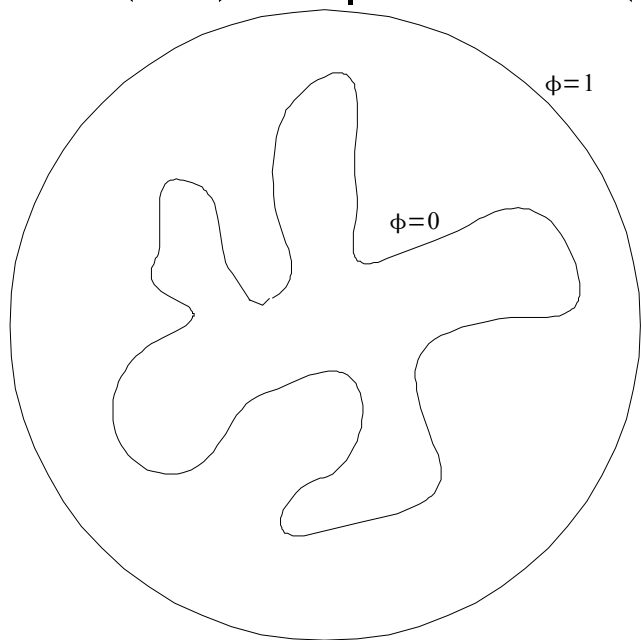
## Другие численные алгоритмы.

Модель диэлектрического пробоя  
— DBM — обобщение модели  
DLA

Решение уравнения Лапласа с гран.  
условиями и поиск вероятности роста  
 $P(r)$  в каждой точке поверхности.

$$\nabla^2 \phi = 0$$

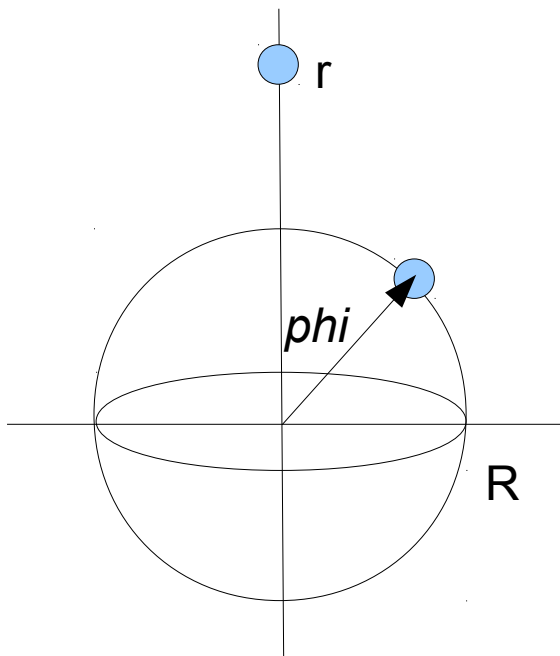
$$P(r) = |\nabla \phi(x)|^\eta$$



Метод конформных отображений  
Хастингса и Левитова.

Решение уравнения Лапласа методом  
итеративных конформных  
отображений. Поиск отображения  
внешности кластера из  $N$  частиц на  
внешность окружности.

# Многомерное обобщение алгоритма



Вероятность возврата в точку на сфере

$$P(\varphi) = \frac{d-2}{\Omega_d} \frac{1}{Rr^{d-2}} \frac{\left(1 - \frac{R^2}{r^2}\right)}{\left(1 - \frac{2R}{r} \cos \varphi + \frac{R^2}{r^2}\right)^{\frac{d}{2}}}$$

Вероятность ухода на бесконечность

$$P = \left(\frac{R}{r}\right)^{d-2}$$

# Алгоритм N-мерном пространстве

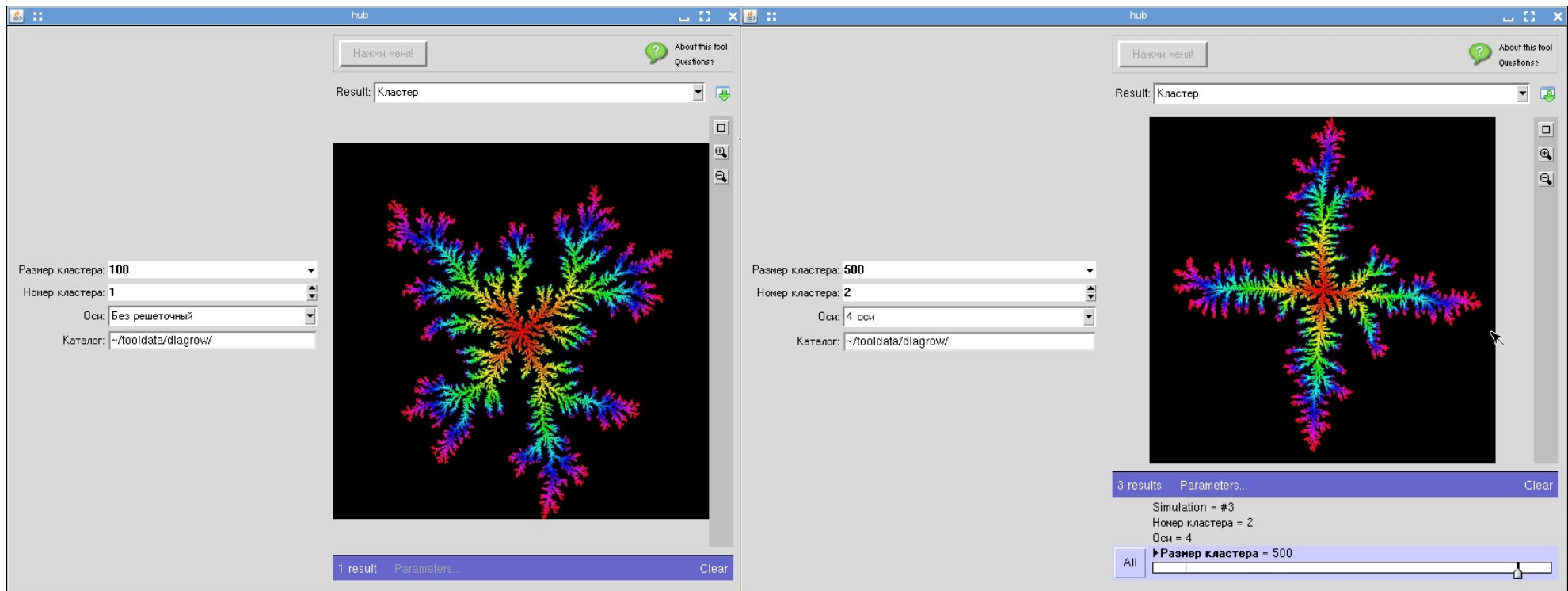
- 1) **Частицы — сферы** единичного радиуса.
- 2) В начале координат находится частица-зародыш.
- 3) В случайном месте на сфере радиуса  $R_b$  рождается новая частица.
- 4) Если частица находится далеко от кластера (на расстоянии  $L$ ) — сделать шаг в случайном направлении длиной  $L/2$ .
- 5) Если частица находится около кластера — сделать шаг 1-ой длины в случайном направлении.
- 6) Если частица сталкивается с кластером — она к нему прилипает.
- 7) Если частица выходит за окружность  $R_d$  ( $R_d > R_b$ ) она **возвращается** на окружность  $R_b$  с вероятностью

$$P(\varphi) = \frac{d-2}{\Omega_d} \frac{1}{Rr^{d-2}} \frac{\left(1 - \frac{R^2}{r^2}\right)}{\left(1 - \frac{2R}{r} \cos \varphi + \frac{R^2}{r^2}\right)^{\frac{d}{2}}},$$

или уничтожается с вероятностью  $R/r$ .

- 8) Запуск новой частицы и повтор процесса с шага 3.

# Повторяемость эксперимента



На базе ПО Hubzero создан программно-аппаратный комплекс, включающий приложения для генерации кластеров и для их анализа.

Большое число параметров и способов анализа делает запуск программ трудоемким.

Создание предметно-ориентированного языка позволит

- 1) Легко модифицировать основную логику работы алгоритма.
- 2) Описывать параметры кластеров, методы их анализа в простом человеко-понятном формате
- 3) Автоматически генерировать задачи для вычислительного кластера.

# Измерение фрактальной размерности

Скейлинговое соотношение связывает число частиц в кластере  $N$  и его линейный размер  $R$ .

$$N \propto R^D$$

$R$  может быть средним по ансамблю, средним по гармонической мере, максимальным размером кластера, размером окружности и т.д.

Если  $r_i(N)$  — координата  $N$ -ой частицы в  $i$ -ом ансамбле, то

$$\langle r \rangle = 1/K \sum_{i=1}^K r_i(N)$$

называется средним по ансамблю

Если вероятность роста в точке на поверхности кластера равна  $dq$  то

$$R_{dep}^{hm} = \int r dq$$

есть среднее по гармонической мере

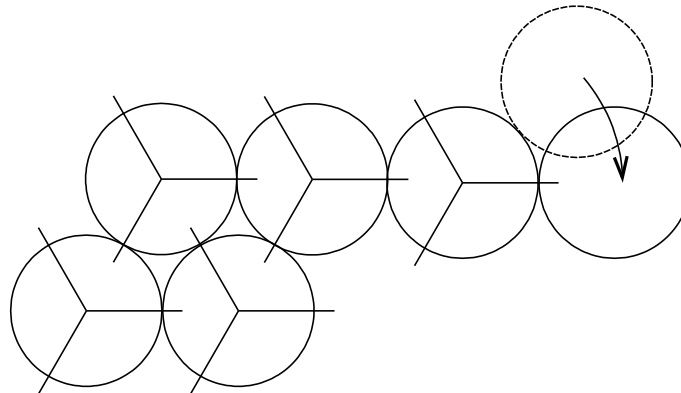
	Definition 1	$D$	Definition 2	$D$
$R_{dep}$	$\langle r \rangle$	1.70942(46)	$\langle \int r dq \rangle$	1.70922(97)
$R_2$	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}$	1.71003(45)	$\langle \sqrt{\int r^2 dq} \rangle$	1.7087(11)
$R_{gyr}$	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \langle r^2 \rangle_k}$	1.71008(96)	—	—
$R_{eff}$	—	—	$\langle \exp(\int \ln r dq) \rangle$	1.70944(87)
$\xi$	$\sqrt{R_2^2 - R_{dep}^2}$	1.74(3)	—	1.69(7)

# Анизотропные кластеры

На решетке свойства кластеров DLA отличаются от безрешеточных. Рост (например, на квадратной решетке) преимущественно происходит вдоль осей решетки. Кластеры имеют более регулярную структуру => меньше флуктуации.

Наиболее просто реализовать решеточный алгоритм путем изменения стандартного безрешеточного следующими правилами.

- 1) Каждая частица-кластера имеет  $N_{fr}$  антенн
- 2) Соответствующие антенны на разных частицах сонаправлены
- 3) При добавлении новой частицы она смещается к ближайшей антенне.

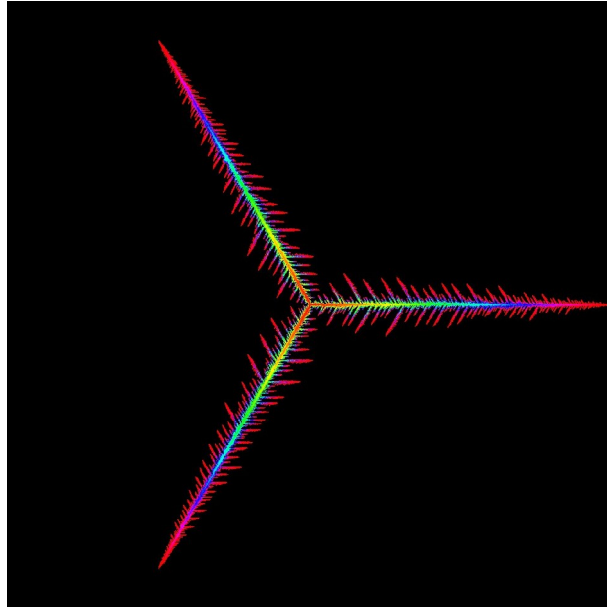


Варьируя число антенн можно перейти к безрешеточному пределу.

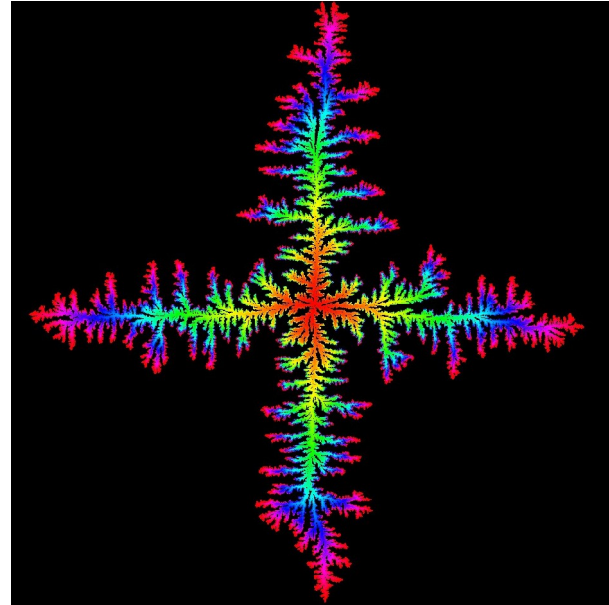


# Примеры анизотропных кластеров

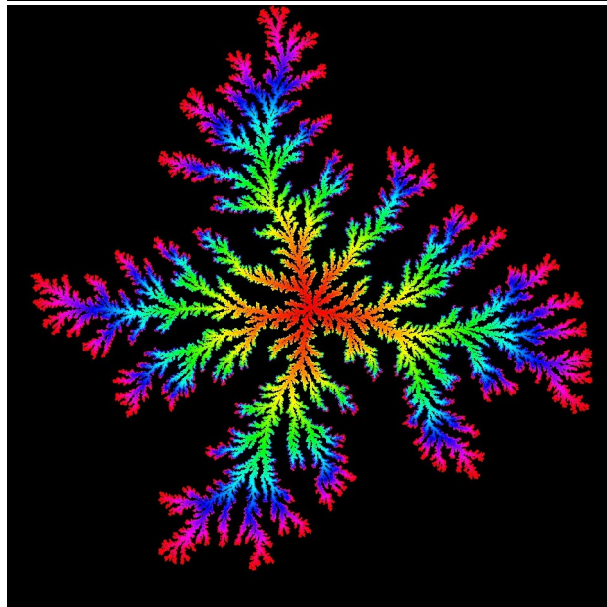
3



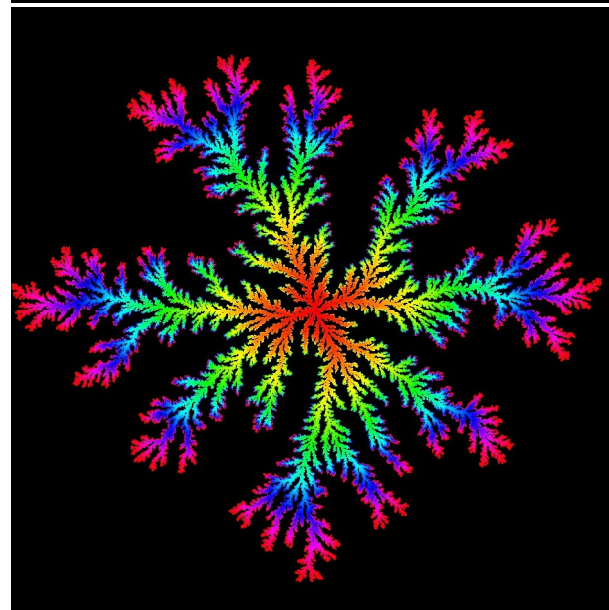
4



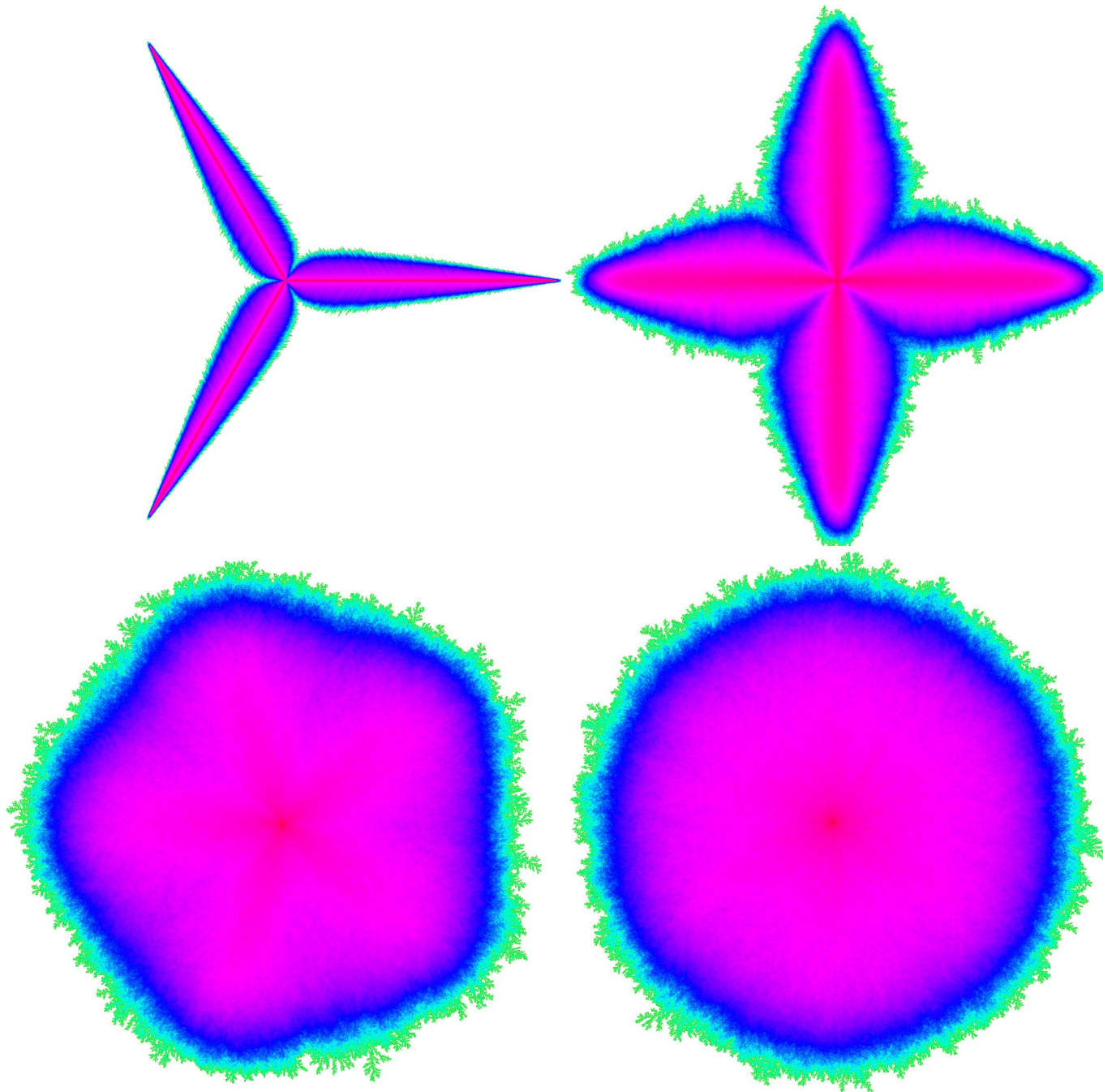
5



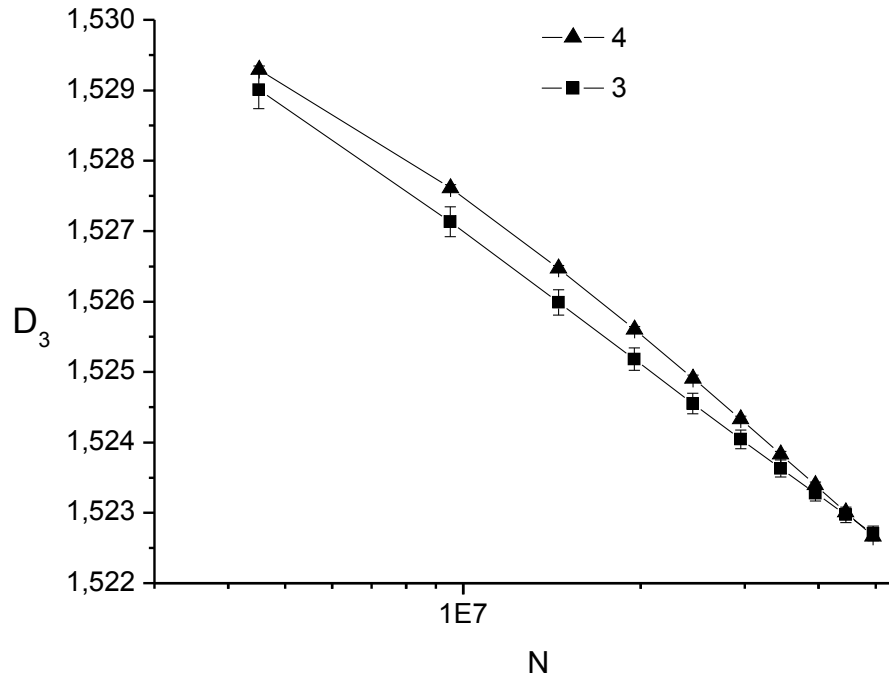
6



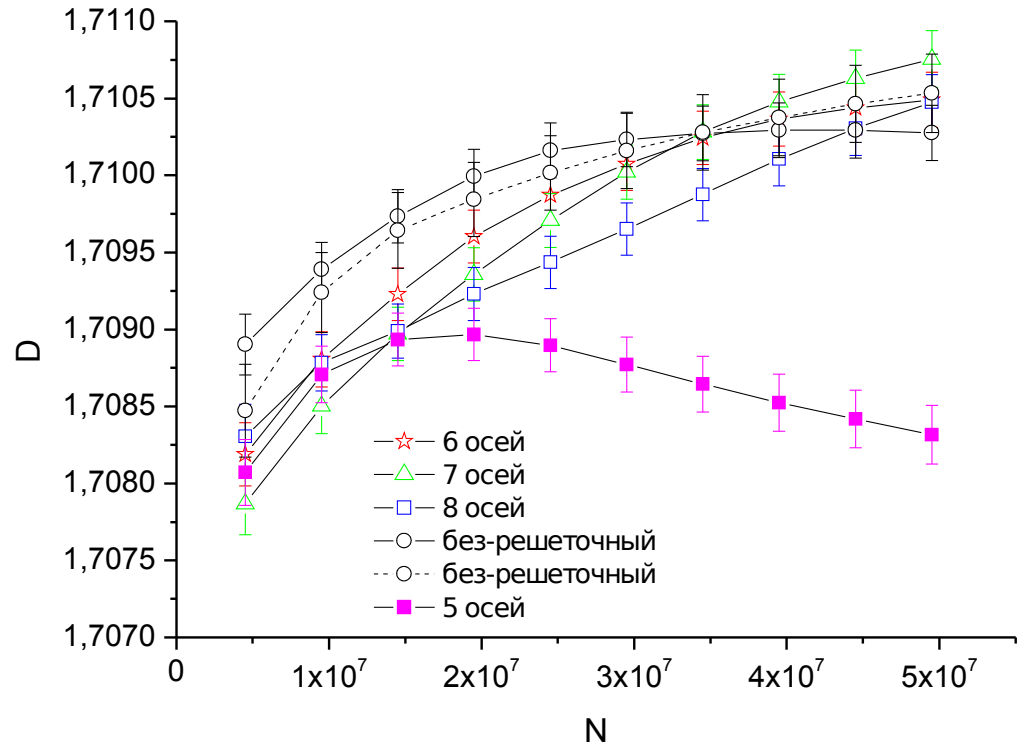
*Средняя плотность частиц на единицу поверхности*



# Оценка фрактальной размерности



$$D=A+B*\log(N)$$



## *Заключение.*

- Модель DLA может быть корректно реализованы в многомерном пространстве, не смотря на конечную вероятность ухода частиц на бесконечность.
- Моделирование в  $n$ -D может быть ускорено за счет использования методов, аналогичных 2D — большие шаги, возврат на окружность рождения.
- Для хранения координат частиц и ускорения поиска свободной области необходимо использование иерархической сетки, аналогичной 2D.