



Локальная клеточная модель роста снежных кристаллов

Клиффорд А. Райтер *

Департамент математики, Колледж Лафайет, Истон, Пенсильвания 18042, США

Принято 8 июня 2004 г.

Абстрактный

Снежные кристаллы имеют богатое разнообразие форм с поразительной гексагональной симметрией. Двумерные типы включают дендритные, звездчатые, секторные и пластинчатые формы. Физические исследования показали, что конкретная форма снежных кристаллов зависит от температуры и насыщенности при росте. Мы исследуем простую локальную двумерную модель, имеющую всего два параметра, демонстрирующие желаемое разнообразие. Рост дендритов особенно реалистичен. Мы используем эту модель для изучения влияния различных условий роста.

© 2004 Elsevier Ltd. Все права защищены.

1. Введение

Снежные кристаллы обладают замечательной, интригующей шестикратной симметрией, демонстрируя при этом широкое разнообразие форм. В 1611 году Кеплер предположил, что симметрия снежных кристаллов связана с гексагональной упаковкой сфер [1], что является выдающимся предвидением, учитывая современное понимание гексагональной молекулы. упаковка кристаллов льда [2]. На рис. 1 показано некоторое разнообразие естественно возникающих снежных кристаллов. Эти изображения взяты из обширной коллекции фотографий природных снежинок, выполненных Бентли и Хамфрисом [3]. снежных кристаллов, как природных, так и искусственных, а также предоставил обширные коллекции фотографий снежных кристаллов [4]. Он обнаружил, что форма снежных кристаллов сильно зависела от насыщенности и температуры во время роста (он фактически напрямую изменял температуру воздуха и снежных кристаллов). температура водяной бани, используемой для введения пара). Наблюдаемые формы включают дендриты, звездчатые формы, секторы, пластинки, иглы, колонны, свитки, чашечки и многие другие. Снежинки могут сочетать в себе черты в бесконечном разнообразии, например дендриты; Он заметил, что многие сфотографированные изображения снежинок, особенно в [3], ухудшаются из-за сублимации и, следовательно, могут не представлять собой самые совершенные снежные кристаллы.

Наша цель — создать простую локальную модель роста снежинок, которая демонстрирует разнообразие двумерных форм, наблюдаемых в снежных кристаллах. По мотивам Накая мы стремимся использовать только два параметра. Однако при разработке нашего алгоритма мы используем общие физические понятия. Мы не пытаемся подогнать уравнения физики. Модель, которую мы даем, является двумерной, поэтому мы не можем надеяться смоделировать формы снежных кристаллов, которые имеют существенные трехмерные компоненты. Например,

* Факс: +1 610 330 5721.

Адрес электронной почты: reiterc@lafayette.edu

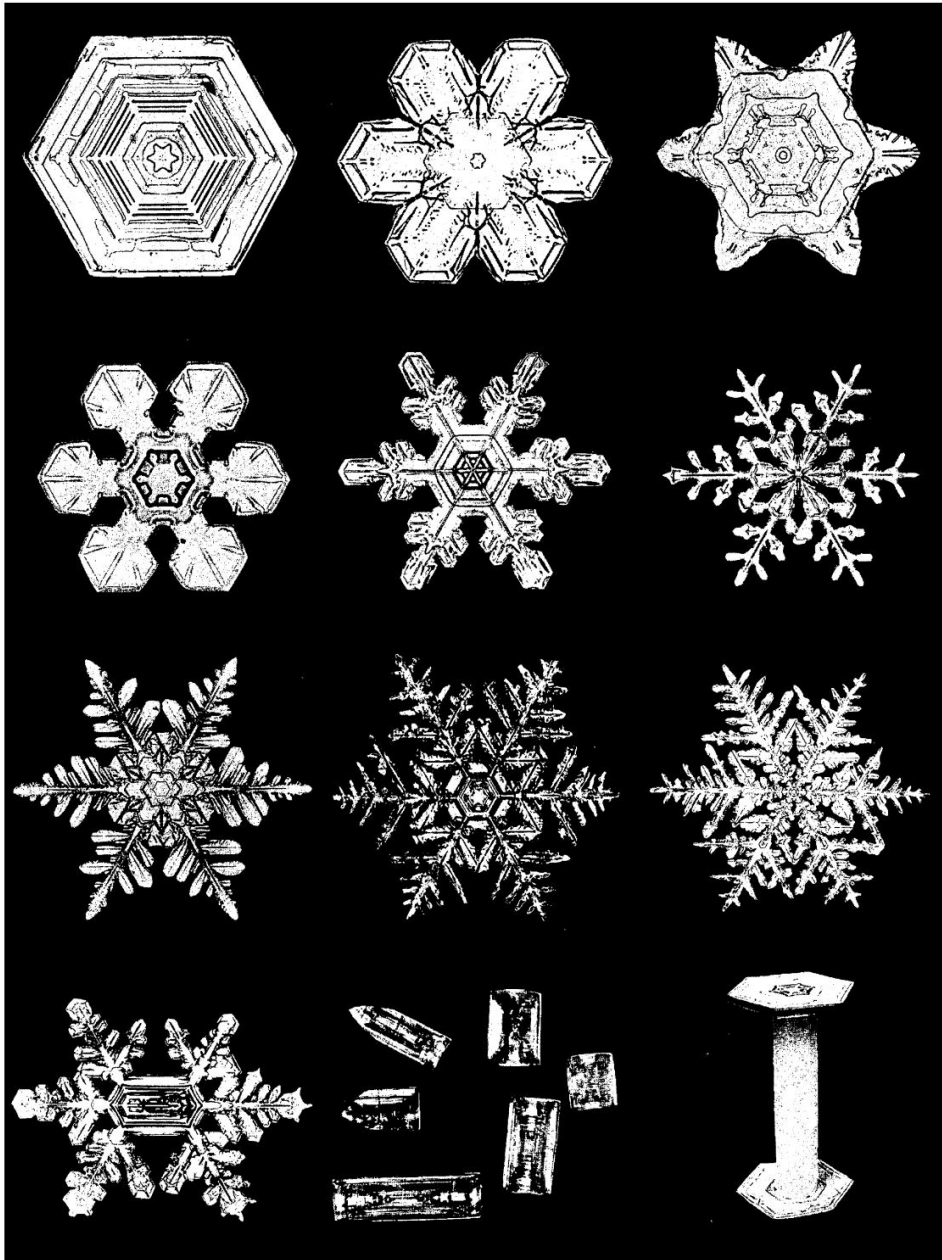


Рис. 1. Снежные кристаллы: пластинчатые, секторные, звездчатые, дендритные, неправильные и трехмерные.

иглы и столбец с колпачком, показанные в правом нижнем углу рис. 1, выходят за рамки нашей модели.

мы увидим, что мы можем легко продемонстрировать моделирование роста кристаллов секторной, звездчатой, дендритной и пластинчатой форм.

Хотя все формы снежных кристаллов обладают своей красотой, папоротниковая структура роста дендритов особенно привлекательна. Догерти и др. недавно провели обширную работу по росту дендритов в лаборатории [5–7]. решения, основанные на моделях фазового поля, можно найти в [8,9].

Вольфрам популяризировал булеву модель роста снежинок [10,11], которая развивается на гексагональной решетке с помощью Следующее правило: на каждом временном шаге каждая клетка либо ледяная, либо нет. На следующем шаге клетки, бывшие ледяными, остаются ледяными. в то время как клетки, которые не были льдом, становятся льдом тогда и только тогда, когда ровно одна из соседних ячеек является льдом. Хотя эта модель предоставляет примеры абстрактных пластин и секторов, она не обеспечивает глобального дендрита или звездного роста.

предлагается в том смысле, что поведение булевых гексагональных автоматов удивительно похоже на своего рода рост снежинки. Мы представляем гораздо более реалистичную модель, но работаем в том же духе, поскольку искали очень простую локальную модель.

Кокс и Рейтер [12] использовали локальную модель с реальными значениями, основанную на линейных комбинациях и подсчете ячеек льда, появляющихся в двухуровневой окрестности. Коэффициенты вместе с фоновым уровнем образовывали набор из пяти используемых параметров. В этой модели появилась чувствительность к фоновому уровню, и было легко получить большое разнообразие форм, но рост был довольно абстрактным, и рост дендритов, в частности, не выглядел очень физическим. Могут также быть обнаружены дополнительные ранние модели клеточного роста. в ссылках на [12]. Также, как и наша модель, решетка связанных карт представляет собой локальную ячейковую модель с реальными значениями в ячейках. Однако такие модели роста кристаллов, основанные на физике, рассматривались [13,14]. В большинстве работ с решетками связанных карт используются хаотические нелинейные карты для обновлений, которые не являются физически мотивированными и которые, конечно, приводят к чувствительному и сложному поведению. Еще одна статья с хорошими примерами моделирования роста дендритов — [15]. Отличия от этих примеров и изменение двух фундаментальных параметров иллюстрируют широкий диапазон моделей роста, аналогичных тем, которые наблюдаются для природных и искусственных снежных кристаллов.

2. Модель и диаграмма параметров

Модель, которую мы исследуем, использует шестиугольное расположение ячеек, и каждая ячейка содержит реальное значение. Очень неформально мы рассматриваем значение любой ячейки как измерение количества воды в этом месте ячейки. Значения, равные единице или выше, считаются соответствующими. для льда, а более низкие значения принимаются для представления воды в форме, которая может перемещаться в соседние ячейки. Используемые нами автоматы можно описать в два этапа. Каждый этап может быть вычислен с использованием ближайшей соседней шестиугольной ячейки с действительным знаком. автомат, и, следовательно, используемый нами алгоритм можно рассматривать как одноэтапный автомат в окрестностях, содержащих два уровня. Первый этап заключается в определении восприимчивых участков. Это участки, которые являются льдом или имеют непосредственного соседа, являющегося льдом. На следующем этапе значения клеток задаются значениями в рецептивных сайтах плюс константа плюс диффузионный член. Диффузионный член представляет собой локальное среднее модифицированного клеточного поля, полученное путем установки рецептивных сайтов на. об усреднении будет сказано ниже. На рис. 2 показана диаграмма, иллюстрирующая расчет для одного небольшого участка. Обратите внимание, что нули в массиве невосприимчивых участков используются в качестве значений при усреднении, а нули в массиве. Восприимчивых сайтов являются заполнителями. Мотивацией для модели является то, что восприимчивые сайты рассматриваются как постоянно хранящие любую массу, которая поступает в эту точку. Масса в невосприимчивых сайтах может свободно перемещаться и, следовательно, движется к среднему значению. Константа, добавленная к восприимчивым участкам, соответствует идее, что «добавление константы» не только является особенно простым обобщением модели, но и очень неформально отражает идею о том, что некоторое количество воды может быть доступно из-за пределов плоскости.

Константа, которую нужно добавить к восприимчивым участкам, является одним из параметров, которые мы варьируем. Второй параметр, который мы варьируем, — это уровень фона. Обычно мы начинаем с одной ячейки со значением один (ледяное семя) в море. постоянный фон. Обычно мы будем обозначать добавленную константу буквой c , а уровень фона — буквой b .

Граничные условия принимаются фиксированными на уровне фона на фиксированном (евклидовом) расстоянии от начальной ячейки. Эти граничные условия пытаются сделать граничные условия максимально изотропными. Однако разные точки на границе имеют разное количество. шестиугольные шаги от центра, поэтому для прохождения информации от центра к различным точкам на границе требуется разное время. Для невосприимчивого поля можно использовать различные взвешенные средние значения. Мы будем использовать среднее значение текущего значения ячейки со средним значением его ближайшего значения. соседи Таким образом, центральная ячейка имеет вес $1/2$, а каждая из шести соседних ячеек имеет вес $1/12$.

На рис. 3 показана диаграмма конфигураций, возникающих в результате нескольких фоновых уровней 0.6 b 0.95 и констант сложения 0.6 c 1 . Мы встроили одно изолированное затравочное число в шестиугольное расположение фонового уровня размером примерно 400 на 400 . На рис. Конфигурация будет развиваться до тех пор, пока лед не приблизится к (круговой) границе или пока не произойдет $10\,000$ итераций. Обратите внимание на появление дендритов, звездных форм, секторов и пластин. Самая темная половина значений серого, используемых на изображении, соответствует значениям ячеек. ниже 1 , причём чёрный соответствует 0 . Самая светлая половина соответствует льду, однако в этом случае мы меняем местами значения так, чтобы белый соответствовал 1 . Таким образом, мы получаем контраст на границе между льдом и нет;

При $b = 0$ и $c = 0$ роста не происходит. При $b = 0$ и $c > 0$ образуются плиты, скорость которых зависит от c , при высоких уровнях c мы получаем плиты, сектора или широкие звездные формы. При низких уровнях c и при низких уровнях b мы получаем рост дендритов; при высоких уровнях b мы получаем звездчатые или более абстрактные формы. Существует значительное разнообразие форм, и дендриты кажутся необычайно естественными.

На рис. 4 показаны более подробные версии выбранных параметров, иллюстрирующие рост тонких дендритов, рост толстых дендритов, рост дендритов, которые почти превратились в звездчатую форму, и несколько абстрактную секторную форму. На тонком дендрите можно наблюдать вторичные дендриты различной длины. и виден рост третичных дендритов. Обратите внимание на довольно регулярный характер роста вторичных дендритов на более толстом дендрите. Внизу слева — результат очень регулярного дендрита.

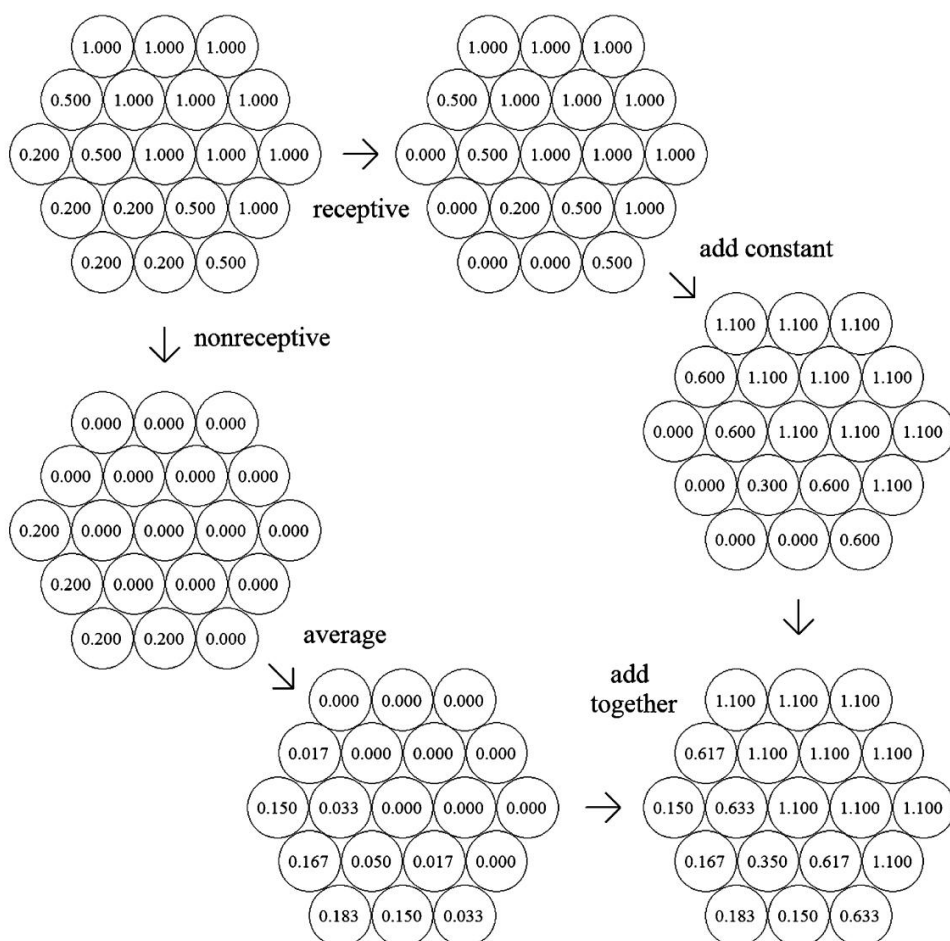


Рис. 2. Иллюстрация алгоритма на небольшом участке.

рост, при котором рост перекрывается и образует своего рода звездную форму. Это было бы более очевидным, если бы было небольшое количество. произошло плавление или размытие формы. Последний пример имеет своего рода секторную форму. Мы описываем такой рост как абстрактный, поскольку в форме имеются несколько неестественные небольшие пробелы. Модель Паккарда-Вольфрама снова имеет очень похожие особенности. , небольшое размытие может привести к реалистичным формам снежинок.

Иллюстрации дополнительных значений b и c , некоторых других радиусов поля роста и некоторых анимаций роста. для выбранных параметров можно найти в [16]. Анимации там показывают, что рост дендритов развивается. Через фазы мы также видим, что разнообразие форм и основное качественное поведение сохраняются в заданном диапазоне. радиусов.

3. Вариация диффузии

Ожидается, что диффузия парового поля невосприимчивых участков в позиции P и времени t , обозначенная $u(t, P)$, будет удовлетворять уравнению диффузии $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta u$, где a — константа диффузии, а Δ — лапласиан. $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$. Лапласиан можно аппроксимировать на гексагональной решетке с помощью

$$\Delta u \approx \frac{2}{3} (u_{x1} + u_{x2} + u_{x3} + u_{y1} + u_{y2} + u_{y3} - 6u) \quad \text{будет;}$$

H2Hn8 ПР ут;НЕТ !

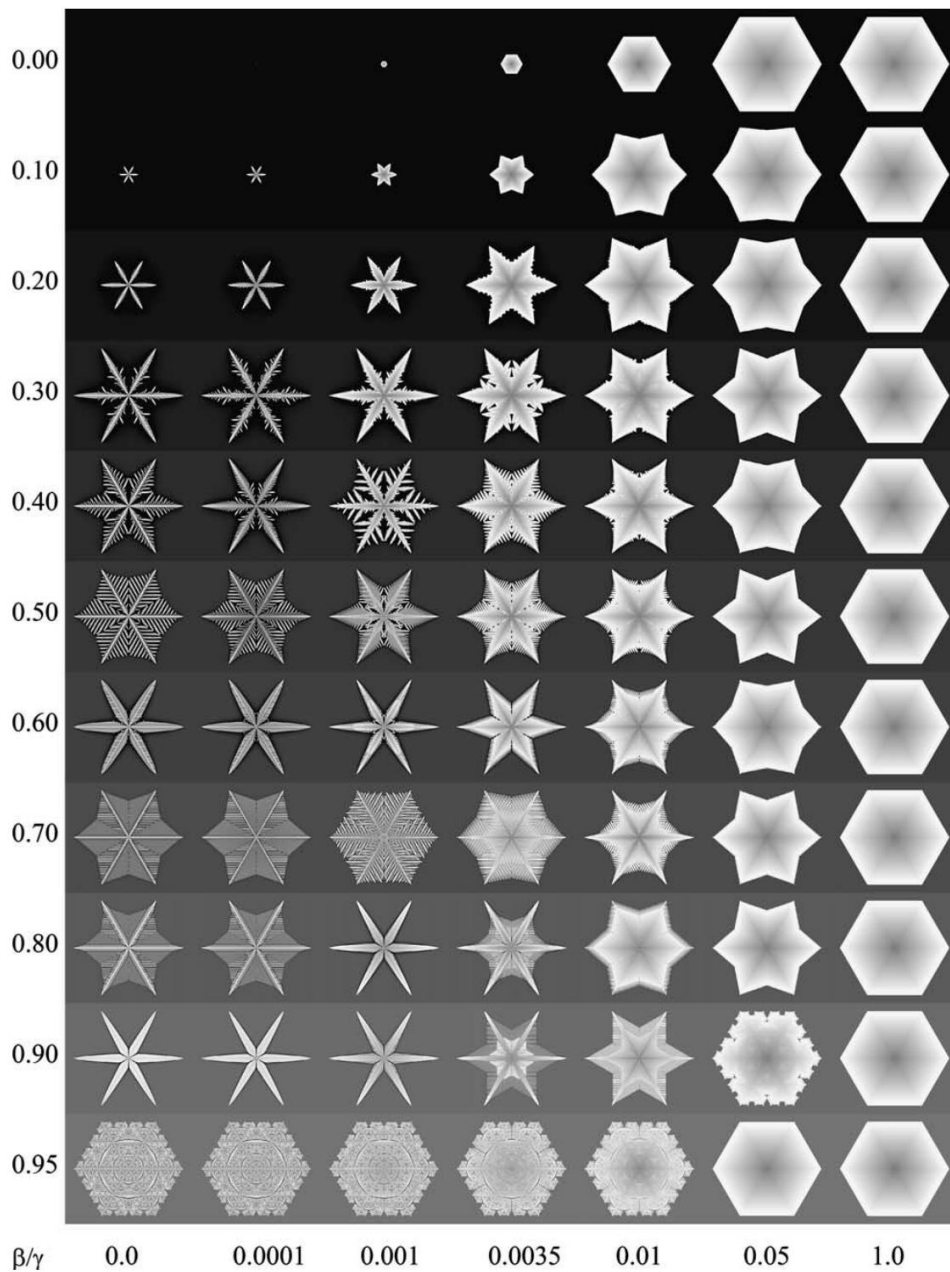


Рис. 3. Формы роста, обозначенные буквами b и c, различаются.

где $\text{nn}(P)$ обозначает множество ближайших соседей P . Таким образом, решения можно аппроксимировать на гексагональной решетке формулой

$$P \rightarrow 12; \quad \frac{a}{n_2 n n_0 P} \text{будт}; \quad \text{ут;H !}$$

где мы реорганизовали константы через $a = 8a$, так что наша модель с весом центра $1/2$ и весом $1/12$ для соседей соответствует принятию $a = 1$.

Реальный рост очень чувствителен к a . По нашему опыту, если не брать крайние значения, качественное поведение диаграммы (b, c) не зависит от выбора a . Однако детали значительно различаются. Примеры, где константа диффузии варьируется для $b = 0,4$ и $c = 0,0001$. Обратите внимание, что значения $a = 0,5, 0,501, 0,502$ дают очень хорошие значения.

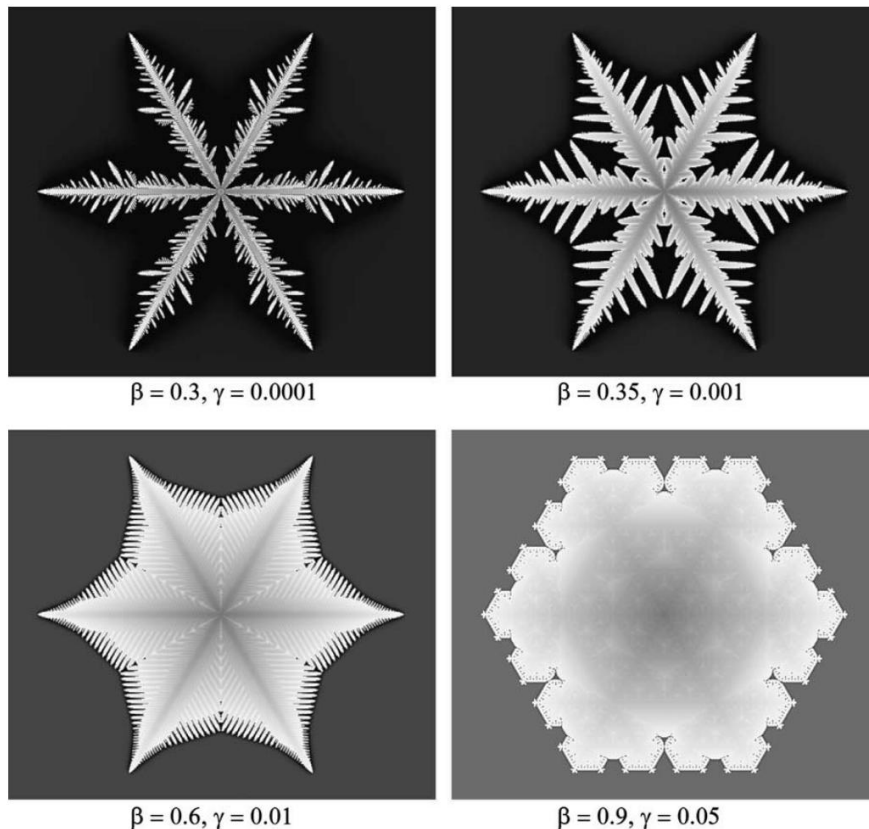


Рис. 4. Избранные дендритная, звездчатая и секторная формы.

на разных изображениях, однако, все они демонстрируют рост дендритов. На рисунке также показана стандартная модель, когда $a = 1$. выглядит очень похожим на случай $a = 0.5$. Красивая модель роста со многими уровнями дендритов возникает при $a = 2,003$. и экстремальная ситуация с взрывным поведением возникает, когда $a = 2.69$. Когда a достигает этого последнего уровня, исходного. сайт имеет отрицательный вес, поэтому неестественное поведение неудивительно. роста появится в [16].

4. Вариации условий

Одним из преимуществ простой модели является возможность изучения вариаций. Сначала мы рассмотрим модифицированную исходную модель. На рис. 6 показаны примеры использования небольших случайных конфигураций на участках размером $q = 3$ или $q = 5$. Первый показывает рост дендритов с шестью различными ветвями, но основной тип роста на каждой ветви кажется одинаковым. Второй похож, но с более толстым ростом. Примеры с $q = 5$ демонстрируют более существенные изменения по сравнению с шестикратной симметрией. Кажется, они имеют близкую к двусторонней симметрии в двух направлениях. Первый в некоторой степени наводит на мысль о нерегулярности. в левом нижнем углу рис. 1. Последний пример имеет заметные пробелы и четко видимый рост дендритов четвертого уровня. Таблицу bc, дающую некоторые дополнительные примеры для $q = 3$, можно найти в [16].

Во-вторых, мы рассмотрим несколько примеров того, что происходит, когда параметры роста изменяются в середине процесса. Рост основан на идее о том, что снежные кристаллы естественного происхождения образуются, когда они падают в воздух по-разному. температура и влажность. На рис. 7 приведены два примера. Первый начинается с параметров, определяющих рост пластины, затем с — это. изменяется так, что происходит рост дендритов. Второй начинается с роста дендритов, затем невосприимчивое поле пропорционально изменяется, чтобы соответствовать новым граничным условиям, и рост продолжается с параметрами, соответствующими абстрактным. Рост сектора/пластины Мы видим, что создать слегка несовершенный рост кристаллов и совместить рост довольно просто. образуется на одном и том же кристалле.

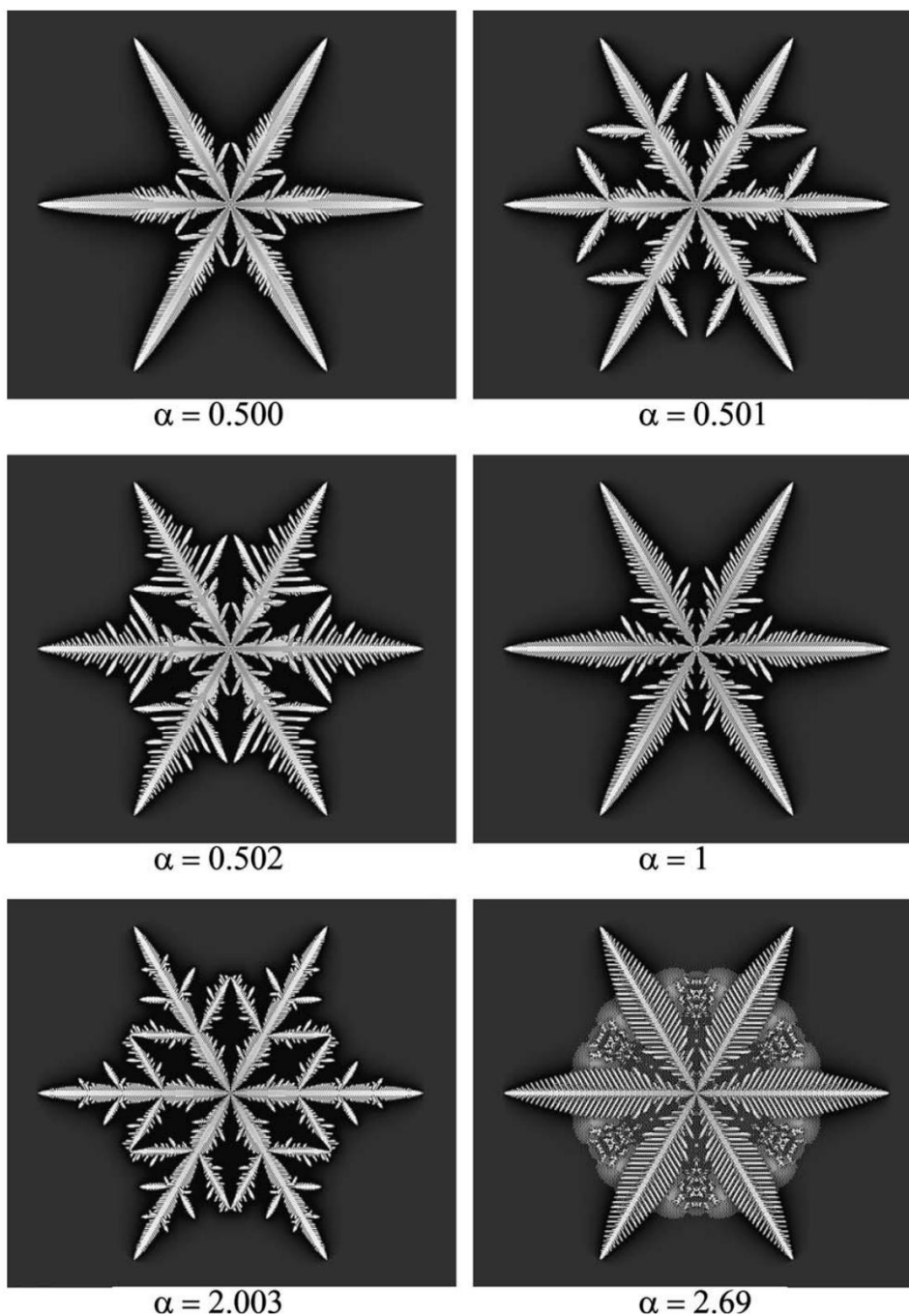


Рис. 5. Разнообразие форм, возникающих при различных константах диффузии при $b = 0,4$, $c = 0,0001$.

5. Выводы

Простая модель шестиугольного массива клеток показывает многие формы роста, наблюдаемые в естественном снеге. В модели используются ячейки с действительными значениями, а различие между восприимчивыми и невосприимчивыми сайтами проводится с помощью. Порог, за исключением порога, обновления плавные, как и насыщенность и температура. В лабораторных экспериментах со снежными кристаллами модель имеет всего два параметра. Варьирование этих параметров приводит к реалистичному результату.

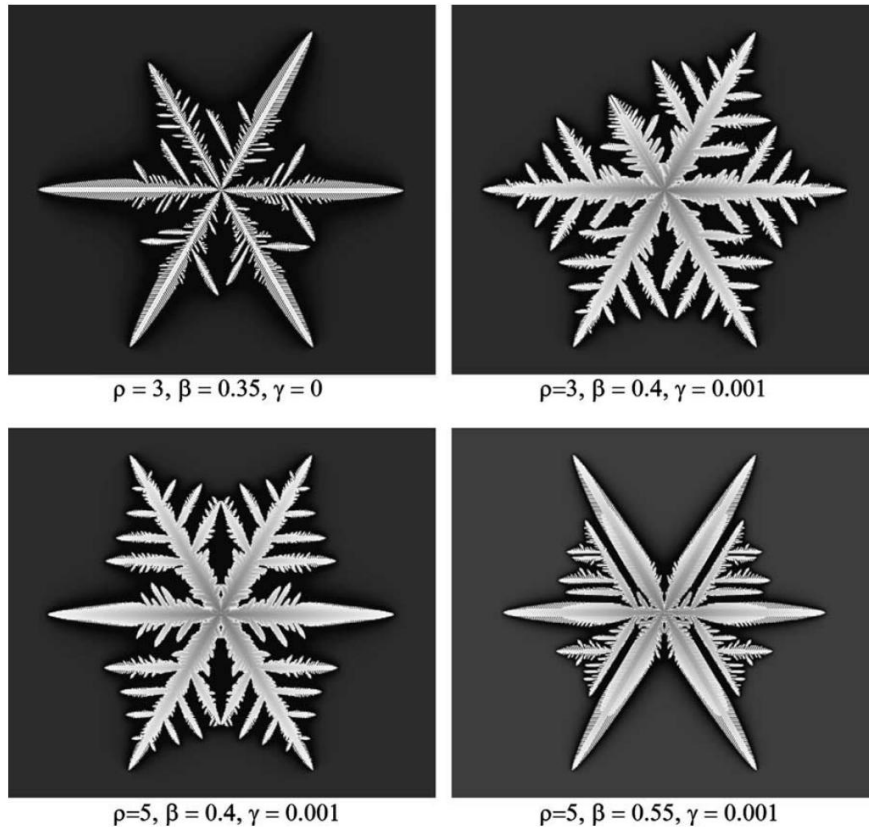


Рис. 6. Рост из случайного начального кластера.

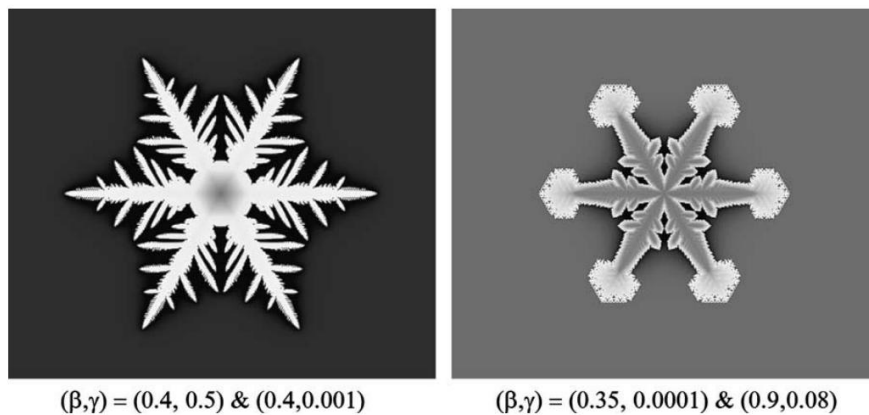


Рис. 7. Рост при изменении параметров.

рост дендритов, а также пластинок, секторов и звездчатых форм. Мы видим, что меняется исходная конфигурация затравки и. изменение параметров роста может привести к росту с реалистичным внешним видом. Хотя это двумерная модель. Мы надеемся, что эта простая модель вдохновит на дальнейшие исследования с использованием дискретных локальных клеточных моделей.

для изучения явлений, проявляющих чувствительное поведение в самых разных формах.

Ссылки

- [1] Кеплер Дж. Шестисторонняя снежинка (1611 г.), перевод Oxford University Press, 1966 г.;
- [2] Либбрехт К., Расмуссен П. Снежинка: тайная красота зимы Стиллиутер: Voyageur Press 2003, вспомогательный материал: <http://www.Snowcrystals.com>.
- [3] Бентли В.А., Хамфрис В.Дж. Снежные кристаллы. McGraw-Hill Book Company, 1931, а также Нью-Йорк: Dover Publications.
- [4] Накая У. Снежные кристаллы: природные и искусственные. Издательство Гарвардского университета, 1954.
- [5] Догерти А., Каплан П.Д., Голлуб Дж.П. Развитие бокового разветвления при росте дендритных кристаллов. *Phy Rev Lett* 1987;58:1652–5.
- [6] Догерти А., Голлуб Дж. П. Стационарный рост дендритов NH_4Br из раствора. *Phys Rev A* 1988;38:3043–53.
- [7] Догерти А., Гунавардана А. Средняя форма трехмерных дендритов: сравнение пивалиновой кислоты и хлорида аммония *Phys Rev E* 1994;50:1349–52.
- [8] Карма А. и др. Модели затвердевания. Доступно по адресу: <http://www.circs.neu.edu/members/alain.htm>.
- [9] Уоррен Дж. и др. Рабочая группа по инструментам моделирования фазового поля. Доступно по адресу: <http://www.ctcms.nist.gov/solidification/index.html>.
- [10] Паккард Н.Х. Решетчатые модели затвердевания и агрегации. В: Вольфрам С., редактор. автоматы Сингапур: World Scientific Publishing; 1986. стр. 305–10.
- [11] Вольфрам С. Новый вид науки. Шампейн: Вольфрам Медиа, 2002.
- [12] Кокс А.М., Рейтер К.А. Булевы гексагональные автоматы . 2003; 27:447–54. mvp/hx_auto/index.html.
- [13] Кесслер Д., Левин Х., Рейнольдс В. Модель решетки со связанным отображением для роста кристаллов. *Phys Rev A* 1990;42:6125–8.
- [14] Сакагути Х., Отаки М. Модель решетки связанных карт для дендритных структур. *Physica A* 1999;272:300–13.
- [15] Пури С., Ооно Ю. Исследование динамики фазового разделения с использованием клеточных динамических систем II. *Ред. A* 1988;38:1542–65.
- [16] Рейтер К. Вспомогательные материалы для локальной клеточной модели роста снежных кристаллов. Доступно по адресу <http://www.lafayette.edu/~reiterc/mvp/sfn/index.html>.