بررسی رفتار مقیاس بندی سطح مشترک در محیط‌های متخلخل با استفاده از محاسبات عددی

زهرا رضایی [i]

چکیده

این مقاله به مطالعه یک مدل کاتوره‌ای برای سطح مشترک متحرک در محیط متخلخل می‌پردازد. این مدل با مدل استاندارد KPZ (Kardar-Parisi-Zhang) در اضافه شدن نوفه ی فرونشان که بازتاب کننده اثر محیط متخلخل است، تفاوت دارد.

دیده می‌شود که فرم مقیاس بندی Family-Vicsek در محیط متخلخل نیز برقرار است و توان‌های مقیاس بندی در این محیط در d=1 بُعد به دست آمده و با توان‌های مقیاس بندی در غیاب نوفه فرونشان مقایسه می‌شود. نرخ تغییرات متوسط ارتفاع سطح مشترک در محیط متخلخل برای مدل RD (Random Deposition) ، تابعی نزولی از زمان و به فرم t^{k-1} (که k<1) به دست می‌آید.

کلمات کلیدی

محیط‌های متخلخل، رشد سطح، نوفه فرونشان، پهنای سطح مشترک، تابع مقیاس بندی

Numerical Studyof Scaling Behavior of Interface in Porous Media

Zahra Rezaee

ABSTRACT

An stochastic model of an interface moving through porous media is studied in this paper. This model differs from the standard Kardar-Parisi-Zhang by the fact that the fluctuations are quenched random variables. It is concluded that the Family-Vicsek scaling form is valid for porous media. Scaling exponents in porous media and in the absence of quenched noise are calculated and compared for dimension d=1.

It's obtained that the rate of average height increment of interface in porous media for RD (Random Deposition) model is in the form of t^{k-1}; k<1. It shows, this rate is a decreasing function of time.

KEYWORDS

Porous media ; Surface growth ; Quenched noise ; Interface width ; Scaling function

۱- مقدمه

اخیراً رشد سطوح موضوع چندین مطالعه در زمینه‌های نظری، شبیه سازی و تجربی شده است که کار بردهای فراوانی در مسائلی نظیر جریان در یک محیط متخلخل، انتشار جبهه آتش، خطوط شاره در ابررساناها و رشد فیلم های نازک دارد [۱]. معادلات پیوسته ای نظیر معادله KPZ به طور موفقیت آمیزی در توصیف زبری سطح مشترک عمل کرده اند [۱۱] که به قرار زیر است:

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = F + \nu\nabla^2 h(x,t) + \frac{\lambda}{2}(\nabla h(x,t))^2 + \eta(x,t) \qquad (۱)$$

در این رابطه، جمله اول (F) به عنوان مثال درفرایند لایه نشانی متوسط تعداد ذرات است که به مکان x می‌رسند و $\eta(x,t)$ نوسانات تصادفی در فرایند رشد را بازتاب می‌نماید و یک عدد تصادفی ناهمبسته است که متوسط آن صفر است:

[i] دانشجوی کارشناسی ارشد فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر. Rezaee@aut.ac.ir

$$\langle \eta(x,t) \rangle = 0 \qquad (۲)$$

و گشتاور دوم آن به وسیله فرمول زیر داده می‌شود:

$$\langle \eta(x,t)\eta(x',t') \rangle = 2D\delta^d(x-x')\delta(t-t') \qquad (۳)$$

رابطه فوق بر این مفهوم دلالت دارد که نوفه، همبستگی مکانی و زمانی ندارد.

اگر نوفه را به صورت یک توزیع گاوسی در نظر بگیریم شرایط (۲)و(۳) برآورده می‌شود. توزیع دیگری که این شرط را برآورده می‌کند و اغلب در شبیه سازی عددی استفاده می‌شود و ما نیز از آن استفاده کرده‌ایم، تو زیع یکنواخت است که در آن یک عدد تصادفی با احتمال مساوی در بازه [-D,D] انتخاب می‌شود.

معادله KPZ به تابع مقیاس بندی Family-Vicsek برای پهنای سطح مشترک می‌انجامد [۶]:

$$W(L,t) \approx L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) \qquad (٤)$$

که در آن t زمان و L اندازه سیستم است. برای $u \rangle\rangle 1$، $f(u) \approx u^\beta$ و برای $u \rangle\rangle 1$، $f(u) \approx const$ است [٥]. این پهنا با رابطه زیر داده می‌شود:

$$w(L,t) = \frac{1}{L^d}\left\langle (h(x,t)-\bar{h}(x,t))^2 \right\rangle \qquad (٥)$$

همچنین توان زبری[۱] α، توان رشد[۲] β و توان دینامیکی[۳] z طبق روابط زیر تعریف می‌شوند:

$$W(L,t) \quad t^\beta \qquad t \ t_x \qquad (٦)$$

$$W_{sat}(L) \approx L^\alpha \qquad t \rangle\rangle t_x \qquad (۷)$$

$$t_x \approx L^z \qquad (۸)$$

که در آن t_x زمان اشباع و W_{sat} زبری اشباع نامیده می‌شود. این توان‌ها مستقل از یکدیگر نیستند و با رابطه زیر به هم مرتبط می‌شوند:

$$z = \frac{\alpha}{\beta} \qquad (۹)$$

اثر محیط متخلخل به صورت نوفه‌ی فرونشان[٤] $\eta(x,h)$ در معادله مربوط به سطح مشترک وارد می‌شود [۱] و [۳].

معادله‌ای که حرکت سطح مشترک در محیط‌های متخلخل را توصیف می‌کند به قرار زیر است:

$$(۱۰) \quad \frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = F + \nu\nabla^2 h(x,t) + \frac{\lambda}{2}(\nabla h(x,t))^2 + \eta(x,t) + \eta(x,h)$$

که در آن:

$$\langle \eta(x,h) \rangle = 0 \qquad (۱۱)$$

$$\langle \eta(x,h)\eta(x',h') \rangle = 2D_q\delta^d(x-x')\delta(h-h') \qquad (۱۲)$$

این رابطه به بی نظمی میدان تصادفی معروف است [۱]. همان طور که دیده می‌شود این معادله با اضافه کردن اثر محیط متخلخل به معادله KPZ به وجود آمده است و کاربردهای فراوانی نظیر حرکت شاره در یک محیط متخلخل [۱] و نیز مسأله حوزه های نفتی دارد.

معادله KPZ را می‌توان به طور تحلیلی و به وسیله تکنیک گروه‌های بازبهنجارش حل کرد [۱۲]؛ اما حل (۱۰) فقط از طریق محاسبات عددی امکان پذیر است. بنابراین، برای بررسی این موضوع که آیا سطح مشترک موجود در محیط‌های متخلخل نیز یک رفتار مقیاس بندی دارد و همچنین محاسبه توان‌های مقیاس بندی مربوطه به ازای پارامترهای مختلف مسأله، به حل عددی معادله مربوطه می‌پردازیم.

۲- حل عددی

به منظور حل عددی معادله (۱۰) در بُعدِ $d=1$، از روش اویلر برای محاسبه مشتق‌ها استفاده می‌کنیم که پس از مرتب کردن معادله به رابطه بازگشتی زیر برای به دست آوردن ارتفاع سطح مشترک می‌رسیم:

$$h(x,t+\Delta t) = h(x,t) + \Delta t\{F + \frac{\nu}{(\Delta x)^2}[h(x+\Delta x,t) - 2h(x,t) + h(x-\Delta x,t)] + \frac{\lambda}{2(\Delta x)^2}[h(x+\Delta x,t) - h(x,t)]^2 + \eta(x,j) + \eta(t)\} \qquad (۱۳)$$

که در آن $j = Round(h(x,t))$ است و برای بهتر شدن دقت، $j = 0.1Round(h(x,t))$ در نظر گرفته‌ایم تا به شرایط مربوط به نوفه میدان تصادفی نزدیک‌تر شویم.

با در نظر گرفتن شرط اولیه $h(x,0)=0$ می‌توان به وسیله (۱۳) دینامیک مسأله را دنبال کرد و مقدار $h(x,t)$ را به ازای هر مکان و هر زمان دلخواه پیدا کرد.

مقدار Δt را 0.1 (یا هر مقداردلخواهی بنا به دقت مسأله) و برای راحتی Δx را مساوی یک در نظر گرفته ایم [۸] یا به عبارت دیگر، اندازه سیستم (L) را به L ستون مجزا تقسیم کرده‌ایم. بنابراین، رابطه بازگشتی (۱۳) به رابطه زیر تبدیل می‌شود:

$$h(x,t+\Delta t) = h(x,t) + \Delta t\{F + \nu[h(x+\Delta x,t) - 2h(x,t) + h(x-\Delta x,t)] + \frac{\lambda}{2}[h(x+\Delta x,t) - h(x,t)]^2 + \eta(x,j) + \eta(t)\} \qquad (١٤)$$

برای محاسبه عددی در یک زمان خاص، مقدار $h(x,t)$ به ازای $x = 1,2,\ldots,L$ حساب می‌شود و سپس دینامیک مسأله با تبدیل $t \to t+\Delta t$ انجام می‌گیرد. نوفه گرمایی $\eta(x,t)$ تابعی از زمان و مکان است؛ پس در هر فاصله زمانی و مکانی، این

مقدار با توزیع احتمال مورد نظر بدست آمده و در مسأله وارد می‌شود [۲]؛ اما نوفه $\eta(x,h)$ تابعی از مکان و ارتفاع است؛ بنابراین قبل از شروع دینامیک مسأله، به وسیله توزیع مربوطه یک بار آن را مقداردهی کرده و در حین تحول زمانی مسأله هرگاه به مکان (x,h) رسیدیم، نوفه مربوطه را در مسأله وارد می کنیم. این فرایند را برای یک آنسامبل[۵] با تعداد زیادی نمونه انجام می‌دهیم تا به جواب دقیقی برسیم.(در محاسبات n=100 نمونه در نظر گرفته شده است).

پهنای سطح مشترک در زمان t به وسیله رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$W(L,t) = \sqrt{\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}[h(i,t)-\bar{h}(t)]^2} \qquad (۱۵)$$

توان‌های مورد نظر را می‌توان با استفاده از (٦)، (٧) و (٨) و از طریق محاسبه شیب خطوط $\ln(\ )-\ln(\ )$، $\ln(\ _{sat})-\ln(\ )$ و $\ln(t_x)-\ln(L)$ به دست آورد که به ترتیب نشانگر توان‌های β و α و z هستند [٤]، [٧]، [٩]، [١٠].
چون این توان‌های مقیاس بندی از یکدیگر مستقل نیستند و رابطه (٩) بین آنها حاکم است؛ پیدا کردن دو توان کافی خواهد بود.

قبل از بررسی معادلات مربوط به محیطهای متخلخل، صحت اجرای برنامه را در مورد معادلات EW، RD و KPZ بررسی و مقادیر به دست آمده را با نتایج تئوری موجود مقایسه می‌کنیم.

مدل RD با معادله کاتوره ای $\frac{\partial h}{\partial t} = F + \eta(x,t)$ و مدل EW با معادله $\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = F + \nu\nabla^2 h(x,t) + \eta(x,t)$ و به همراه گشتاورهای (٢) و (٣) توصیف می شوند.

در مورد مدل RD به ازای زمان‌های طولانی نیز اشباعی در پهنای سطح مشترک رخ نمی‌دهد؛ بدین معنا که $\alpha = \infty$ است و همان گونه که انتظار می‌رود در این مدل، نبود همبستگی در سطح به عدم اشباع می‌انجامد.

توان رشد محاسبه شده با برنامه برای این مدل $\beta = 0.5$ است که با توان β محاسبه شده از حل نظری این مدل کاملا مطابقت دارد.

برای محاسبه توان β در مورد معادلات EW و KPZ برنامه را به ازای زمان های نه چندان طولانی (قبل از زمان رسیدن به اشباع) اجرا می‌کنیم و با استفاده از روش جفت کردن[٦] نمودارباپک خط راست به محاسبه این توان می‌پردازیم.

مقدار توان رشد را $\beta = 0.254$ به دست آوردیم. مقدار دقیق این توان که از حل تئوری به دست می‌آید $\beta = 0.250$ است. در مورد معادله KPZ مقدار به دست آمده از طریق تقریب گروه های بازبهنجارش تک حلقه $\beta = 0.333$ است که در این مقاله این مقدار را $\beta = 0.339$ به دست آورده ایم.

در مورد معادله KPZ به خاطر اینکه می‌خواستیم مقدار به دست آمده را با مقدار تئوری تقریب گروه‌های بازبهنجارش تک حلقه‌ای مقایسه کنیم، لذاثابت جفت شدگی[٧] $g^2 = \Lambda^{d-2}\frac{\lambda^2 D}{\nu^3}$ را مقدار $g^* = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2}$ که نقطه ثابت جاذب (همگرا) در d=1 بُعد است، برگزیدیم؛ زیرا این معادله به خاطر تصحیحات ناشی از تقاریب حلقه‌ای بالاتر، برای g های دیگر به مقادیر کمی متفاوت با نتیجه تئوری تقریب گروه‌های بازبهنجارش تک حلقه می‌رسد[٨]. بنابراین در یک بعد داریم:

$$\Lambda^{-1}\frac{\lambda^2 D}{\nu^3} = \frac{1}{\pi}$$

که در آن $\Lambda = \pi / a$ مقدار قطع شدگی و a ثابت شبکه است که همان Δx است که در اینجا برابر با ١ فرض شده است، بنابراین خواهیم داشت:

$$\lambda^2 D = \nu^3 \Rightarrow \lambda^2 = \frac{\nu^3}{D}$$

این ثابت را با نگه داشتن مقادیر D و ν و تغییر مقدار λ تعیین می‌کنیم. در نتیجه برای مقادیر $D = 0.5, \nu = 1$ مقدار $\lambda \approx 1.4$ به دست می‌آید.

برای به دست آوردن توان α از روش محاسبه همبستگی ارتفاع-ارتفاع[٨] استفاده کرده‌ایم؛ زیرا با این روش می‌توان با زمان اجرای کمتر به مقدار دقیق تری دست یافت.

همبستگی ارتفاع-ارتفاع به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$c(l,t) = [< (h(x,t) - h(x \quad l,t))^2 \quad]^{1/2} \qquad (١٦)$$

و توان زبری می‌تواند از رابطه زیر تعیین شود:

$$c(l) \propto l^{\alpha} \qquad (١٧)$$

این مقدار در برنامه به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$c^2(l,t) = 1/L\sum_{i=1}^{L}\left|h(x_i,t) - h(x_i + l,t)\right|^2 \qquad (١٨)$$

شیب نمودار $Ln(c^2)$ بر حسب $Ln(l)$ نمایانگر مقدار 2α است. مقدار α از طریق محاسبه عددی برای معادله EW، 0.49 و برای معادله KPZ، 0.48 به دست آمد.

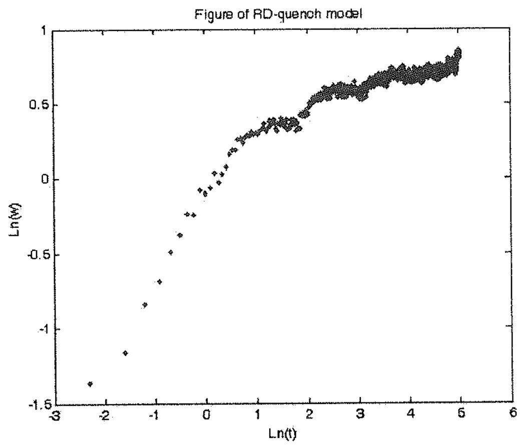
خلاصه نتایج به دست آمده از طریق برنامه به همراه نتایج حاصل از محاسبات تئوری در جدول زیر با هم مقایسه شده است.

جدول (۱): مقایسه توان های مقیاس بندی به دست آمده از طریق محاسبات عددی با نتایج تئوری

	تئوری			محاسبات عددی		
	α	β	z	α	β	z
RD model	∞	0.500	----	∞	0.500	----
EW model	0.50	0.250	2	0.490	0.254	1.92
KPZ model	0.50	0.333	1.51	0.480	0.339	1.46

مقدار $\alpha + z$ از طریق محاسبات عددی در معادله KPZ تقریبا 1.9 به دست آمده است که با مقدار $\alpha + z = 2$ مربوط به ناوردایی گالیله‌ای این معادله همخوانی خوبی دارد.

اکنون می‌توان به محاسبه عددی معادلات مربوط به سطح مشترک در محیط‌های متخلخل پرداخت. ابتدا نوفه $\eta(x,h)$ را به معادله RD اضافه می‌کنیم تا تاثیر آن را بررسی کنیم. همان طور که در شکل (۱) دیده می‌شود، نمودار ln(w)-ln(t) در این مورد از حالت خطی خارج شده و به فرم زیر در می‌آید:



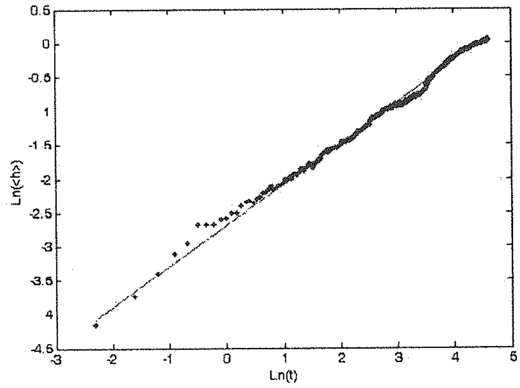
شکل (۱): نمودار لگاریتم پهنای سطح مشترک بر حسب لگاریتم زمان برای مدل RD در محیط متخلخل به ازای $1 \quad 2D_t \quad 2D_q$

این، نشان می‌دهد که محیط متخلخل همانند اصطکاک عمل کرده است و سطح مشترک در طول مسیر تحت تاثیر این اصطکاک قرار می‌گیرد که با گذشت زمان باعث کاهش توان رشد β می‌شود.

مقدار متوسط ارتفاع سطح مشترک در مدل RD مساوی Ft؛ یا به عبارت دیگر به صورت زیر است:

$$\langle h(x,t)\rangle \propto t \qquad (۱۹)$$

برای بررسی تابعیت متوسط ارتفاع سطح مشترک نسبت به زمان در مدل RD در محیط متخلخل، نمودار ln(<h>) بر حسب ln(t) را رسم می‌کنیم.



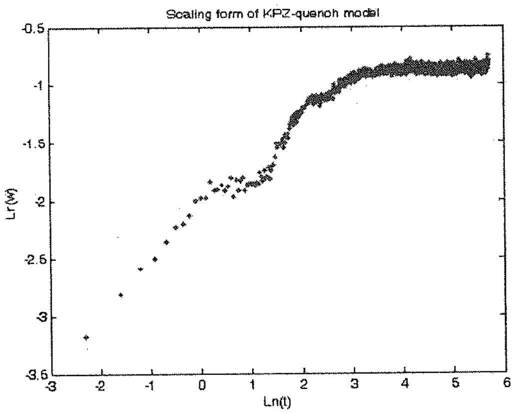
شکل (۲): نمودار $Ln(<h>)$ بر حسب $Ln(t)$ برای مدل RD در محیط متخلخل $1 \quad 2D_t \quad 2D_q$

خطی بودن این معادله حاکی از این است که :

$$\langle h(x,t)\rangle \propto t^k \qquad (۲۰)$$

و شیب به دست آمده از نمودار (k=0.6 به ازای پارامترهای مربوطه) نشان می‌دهد که در محیط متخلخل k<1 است.

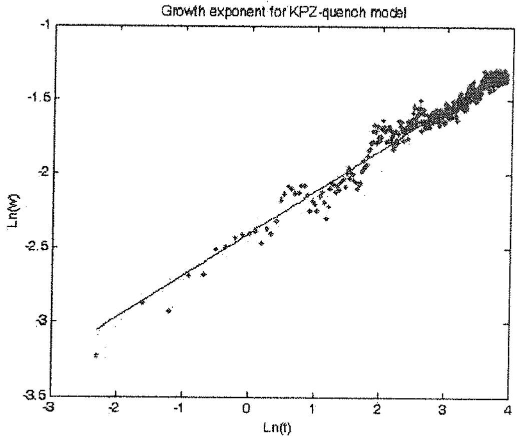
نمودار (۳) وجود یک فرم مقیاس بندی در مورد معادلات KPZ به همراه نوفه فرونشان را نشان می‌دهد.



شکل (۳): نمودار فرم مقیاس بندی برای مدل KPZ در محیط متخلخل

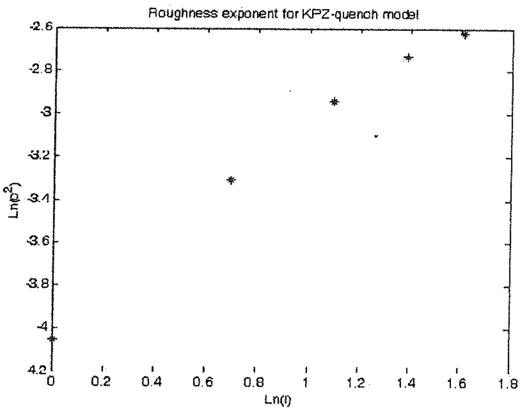
برای بررسی مسأله سطح مشترک در محیط های متخلخل معادله کلی (۱) را در نظر می‌گیریم.

شیب نمودارهای (٤)و(٥) توانهای α و β را برای مدل KPZ به همراه نوفه فرونشان، نشان می‌دهد.



شکل (۴): نمودار نمودار لگاریتم پهنای سطح مشترک برحسب لگاریتم زمان برای معادله KPZ در محیط متخلخل به ازای

$$\nu = 2D_t = 2D_q = 1, F \quad 0, \lambda \quad 1.4$$



شکل (۵): نمودار لگاریتم c^2 بر حسب لگاریتم l برای معادله KPZ در محیط متخلخل به ازای $F = 0, \nu = 2D_t = 2D_q = 1$

خطی بودن نمودارهای مربوط به محاسبه α و β، گویای این مدعاست که سطح مشترک در محیطهای متخلخل از دو معادله (٦) و (٧) تبعیت می‌کند؛ پس همان گونه که دیده می‌شود سطح مشترک در محیطهای متخلخل نیز از تابع مقیاس بندی Family-Vicsek تبعیت می کند، اما با توان‌های مقیاسی متفاوت.

جدول (۲): مقایسه توان های مقیاس بندی برای مدل های EW و KPZ با توانهای معادل آنها در محیط متخلخل

	EW	KPZ	EW برای محیط متخلخل	KPZ برای محیط متخلخل
α	0.490	0.480	0.530 ± 0.02	0.530 ± 0.02
β	0.254	0.339	0.188 ± 0.02	0.281 ± 0.03

۳- نتایج

با مشتق گیری نسبت به زمان از (۱۹) می توان دریافت که نرخ افزایش متوسط ارتفاع سطح مشترک (یا به عبارتی سرعت حرکت متوسط ارتفاع سطح مشترک) در مدل RD ثابت است؛ اما مشتق گیری از (۲۰) نشان می‌دهد که این سرعت در محیط متخلخل از رابطه زیر پیروی می‌کند :

$$\frac{\partial\langle h(x,t)\rangle}{\partial t} \propto t^{k-1} \qquad (۲۱)$$

و با توجه به اینکه k<1 است، اثر اصطکاکی محیط متخلخل باعث می‌شود که سرعت متوسط ارتفاع سطح مشترک تابعی نزولی از زمان و با تابعیت (۲۱) باشد.

نتایج محاسبات عددی حاکی از این است که شکل مقیاس بندی سطح مشترک در محیطهای متخلخل نیز از تابع مقیاس بندی Family-Vicsek تبعیت کند.

جدول (۲) نشان می‌دهد که توان α در هر دو مدل EW و KPZ در محیط متخلخل افزایش می‌یابد. این بدان معناست که محیط متخلخل باعث افزایش زبری سطح مشترک می‌شود. همچنین کاهش توان β در محیط متخلخل نشانگر این است که در این محیط اثر اصطکاکی سطح مشترک باعث کاهش توان رشد می‌شود.

با توجه به جدول (۲) برای مدل KPZ در محیط متخلخل به دست می‌آید: $\alpha + z = 2.42$، که نشان می‌دهد ناوردایی گالیله‌ای در این محیط ها معتبر نیست.

٤-قدردانی

در پایان لازم می دانم از نظرات و پیشنهادهای ارزنده دکتر رضا ترابی قدردانی کنم.

۵-مراجع

[۱] A.L.Barabasi and H.EStanley' *Fractal concept in surface growth'*;Cambridge university press,1995

[۲] A.Chakrabarti and R.Toral; "*Numerical study of a model for interface growth*",Phys.Rev.B, Vol.40,p.p. 11419-11421.1989

[۳] David A.kessler and Herbert Levine and Yuhai Tu; "*Interface fluctuations in random media*" , Phys.Rev.A,Vol.43,p.p. 4551-4554,1991

[۴] F.D.Reis;"Universality in two-dimensional Kardar-Parizi-Zhang growth", Phys.Rev.E,Vol.69, p.021610,2004

[٥] F.Family and T.Vicsek' *Dynamics of fractal surface';* World scientific,1991.

[٦] F.Family and T.Vicsek; "*Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model*" , J.Phy.A, vol. 18, p.p. L75- L81, 1985.

[٧] H.Fogedby;"Kardar-Parizi-Zhang equation in the weak noise limit:pattern formation and critical dimension", Phys.Rev.E,Vol.73,p031104,2006

[٨] Keye Moser and Janos Kertesz; "*Numerical solution of Kardar-Parisi-Zhang equation in one, two and three dimensions*",Physica A , Vol.178,p.p.215-226,1991.

[٩] L.A.Amaral,A.L.Barabasi and H.E.Stanley;"Universality classes for interface growth with quenched disorder; Phys.Rev.Lett, Vol.73,p 69,1994

[١٠] M.Beccaria and G.Curci;"Numerical simulation of the Kardar-Parisi-Zhang equation, Phys.Rev.E, Vol.50,p. 460, 1994

[١١] M.Kardar, G.Parisi and Y.C zhang; " *Dynamic scaling of growing interface*" , Phys.Rev.Lett, vol. 56, , p.p.889 - 892, 1986

[١٢] Thomas Nattermann and Lei-Han Tang; "*Kinetic surface roughening I. The Kardar-Parisi-Zhang equation in weak-coupling regim*",Phys.Rev.A, Vol.45,p.p. 7156-7161, 1992.

۶- زیرنویس ها

---

[1] Roughness exponent
[2] Growth exponent
[3] Dynamic exponent
[4] Quenched noise
[5] Ensemble
[6] Fitting
[7] Coupling constant
[8] Height-height correlation