

Izračun strukture u centralnim problemima eliptičnih oblika

LUCIJA TOMAŠIĆ

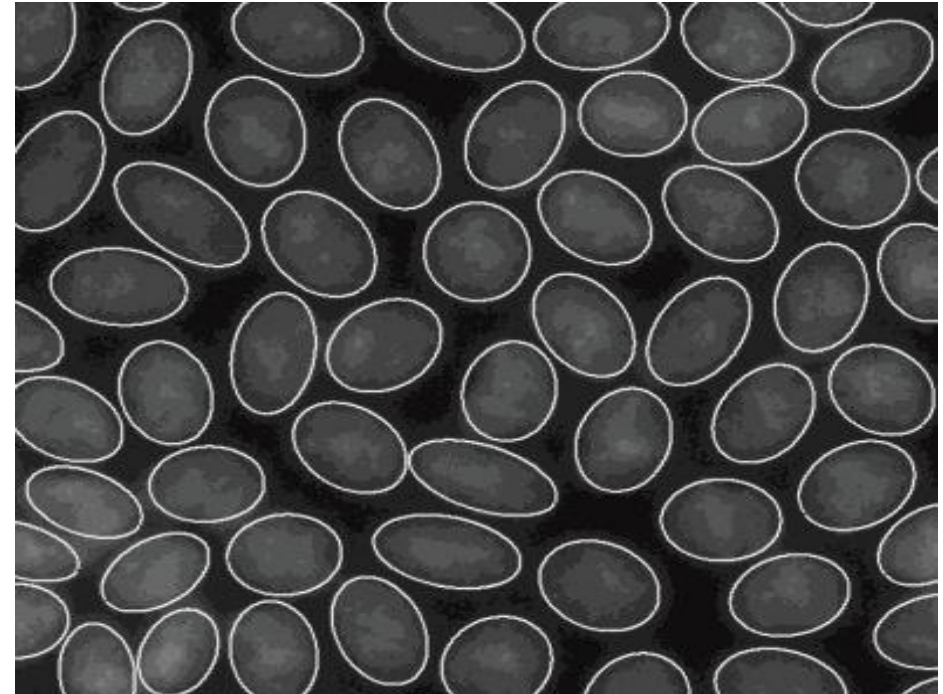
MENTORICA: PROF. DR. ANA-SUNČANA SMITH

FIZIČKI ODSJEK, PMF, BIJENIČKA 32, ZAGREB

GRUPA ZA RAČUNALNE BIOZNANOSTI, INSTITUT RUĐER BOŠKOVIĆ, BIJENIČKA 54, ZAGREB

Motivacija

- Sistemi sa skrivenom vrstom uređenja
- Stanice tkiva
- Hiperuniformnost
- Lloydov algoritam

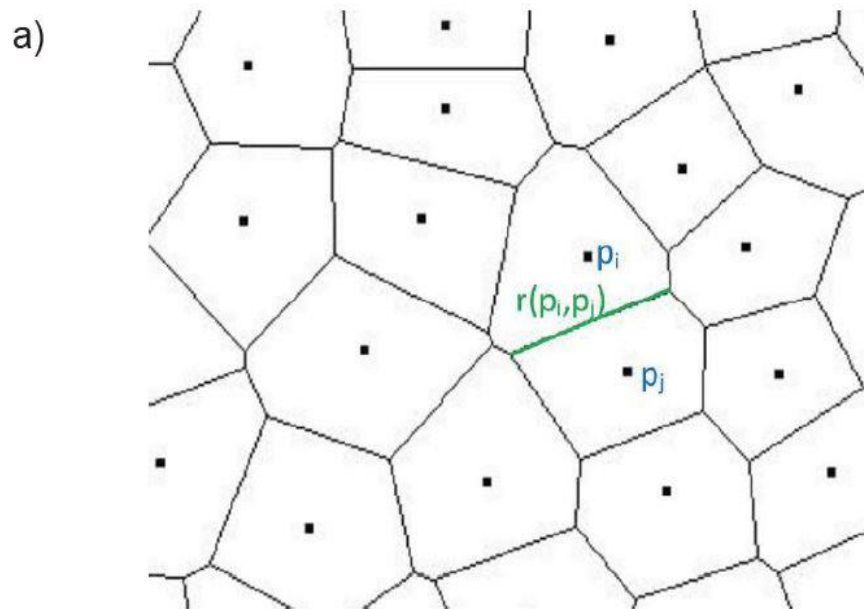


Jezgre stanica epitelnog tkiva

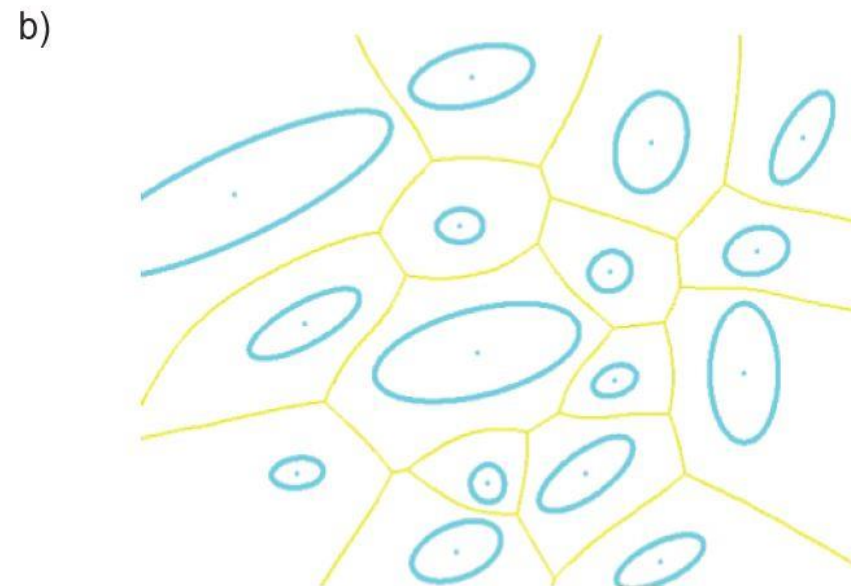
Voronojeve ćelije

- Voronjeva ćelija za dani skup p definira se kao:

$$\hat{V}_i(p_i) = \{z' \in P | d(z', p_i) \leq d(z', p_j); j = 1, \dots, n; j \neq i\}$$



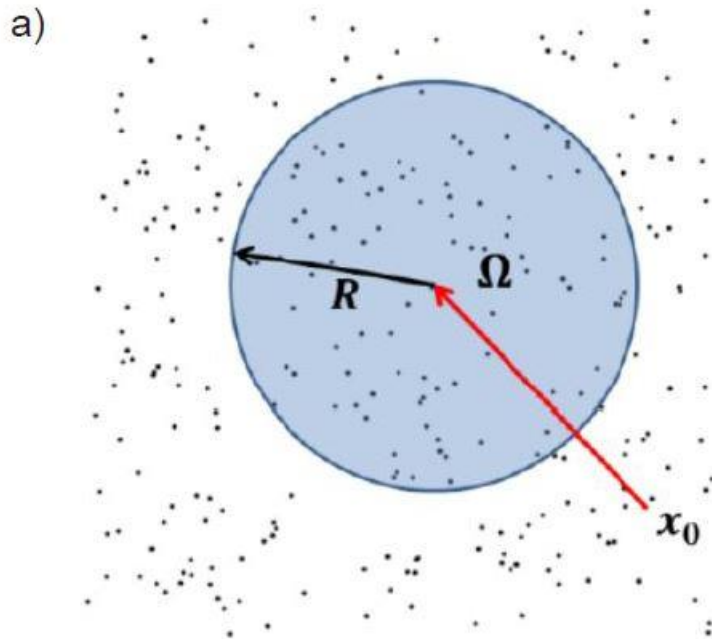
Voronojev dijagram generiran točkama [3].



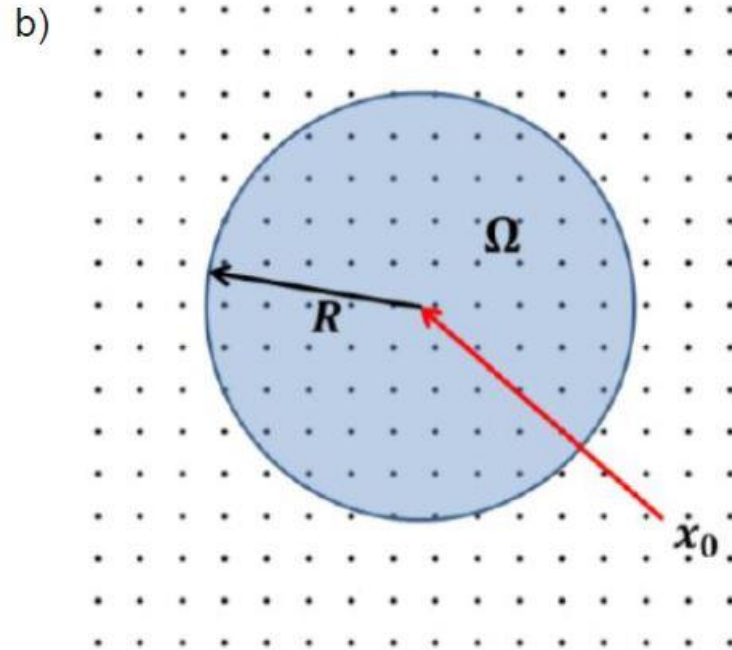
Voronojev dijagram generiran elipsama [4].

Hiperuniformnost

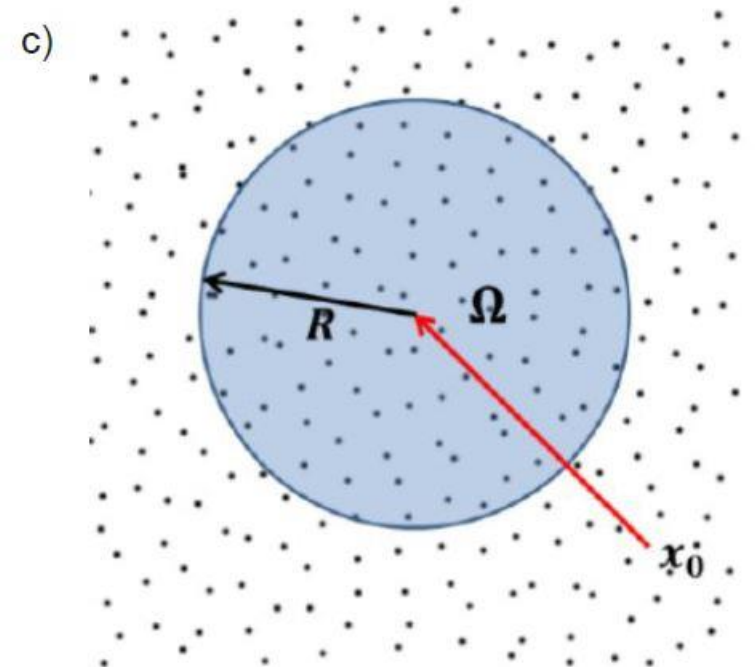
- Varijanca broja točaka $\sigma^2(R)$ u nekom sfernom lokalnom području raste sporije od samog područja



a) Kaotična nehiperuniformna struktura [2]



b) Periodična hiperuniformna struktura [2]



c) "Kaotična" hiperuniformna struktura [2]

Strukturni faktor

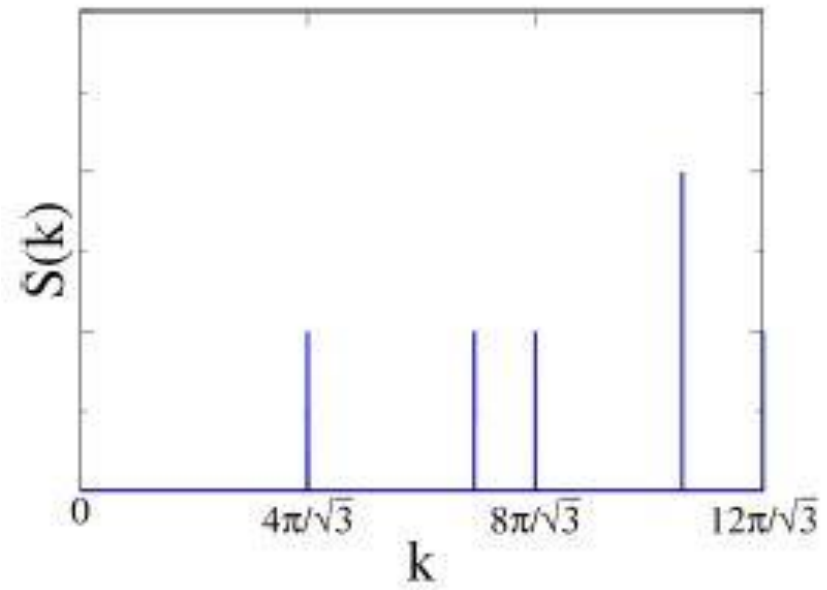
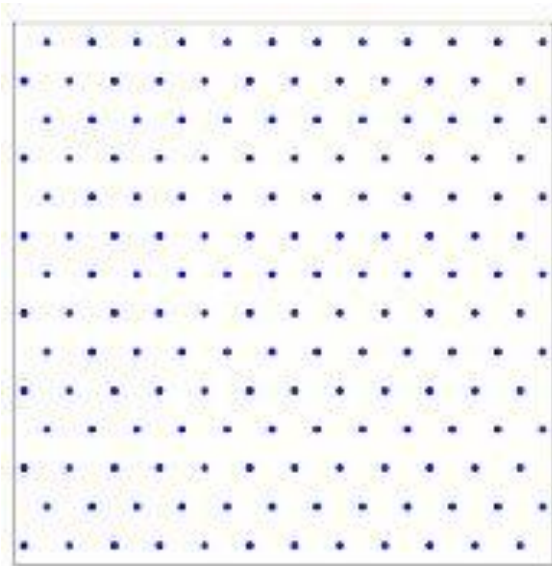
- Strukturni faktor:

$$S(\vec{k}) = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \right|$$

- Hiperuniformnost implicira:

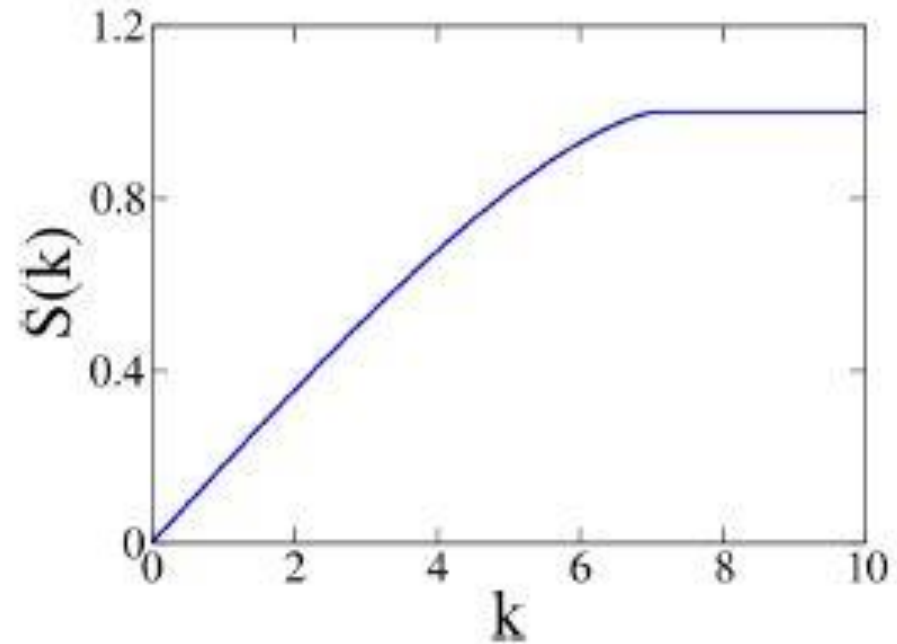
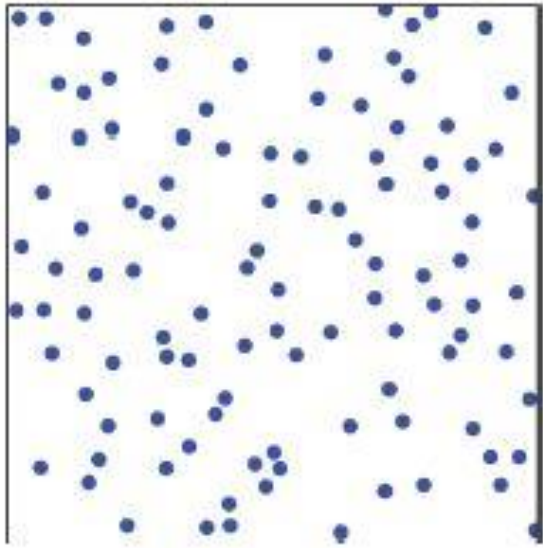
$$\lim_{|\mathbf{k}| \rightarrow 0} S(k) = 0$$

Strukturni faktor



Strukturni faktor kristalne rešetke [2].

Strukturni faktor



Strukturni faktor neperiodične hiperuniformne konfiguracije [2].

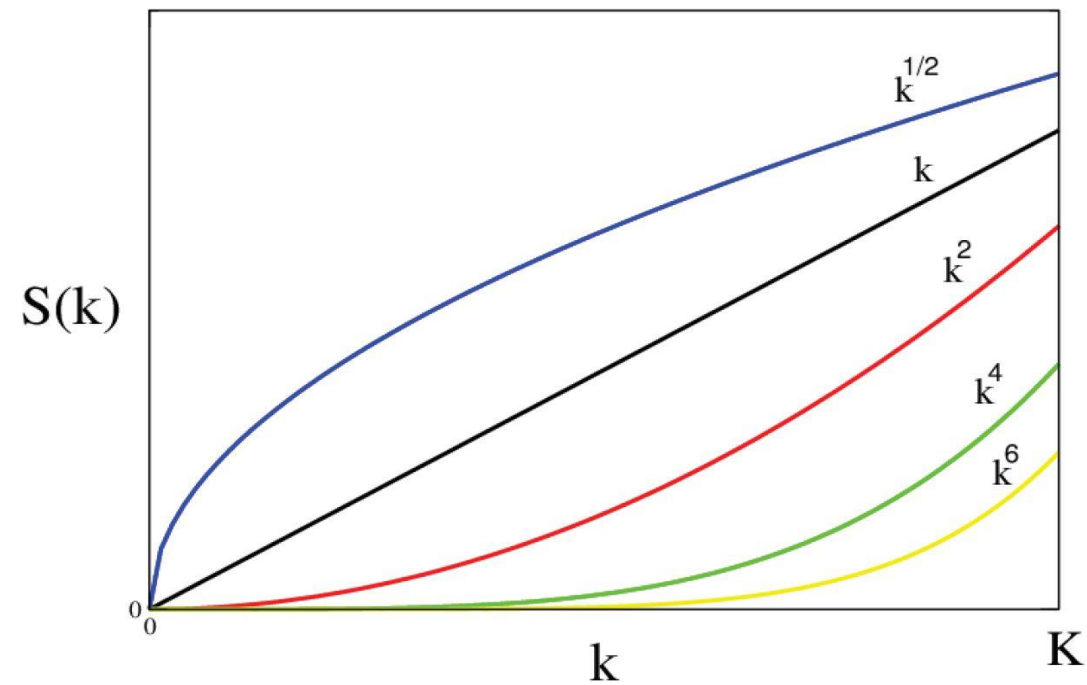
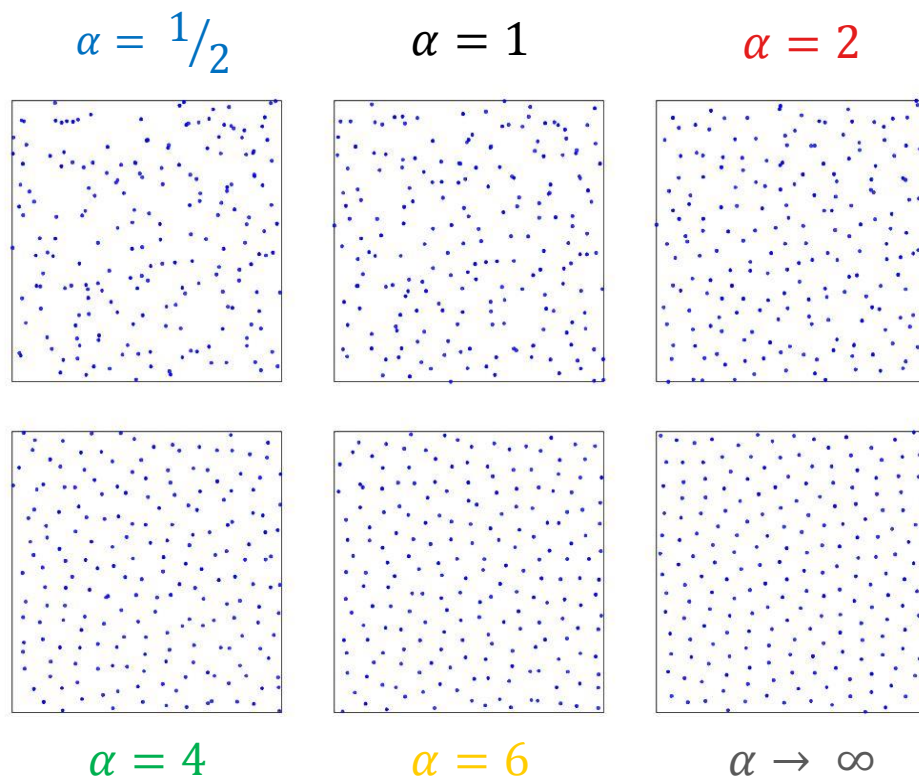
Klase hiperuniformnosti

- Pretpostavimo:

$$S(\mathbf{k}) \sim |\mathbf{k}|^\alpha \quad (|\mathbf{k}| \rightarrow 0)$$

- Tri klase hiperuniformnosti:

1. KLASA I za koju vrijedi
 $\sigma_N^2(R) \sim R^{d-1}, \alpha > 1.$
2. KLASA II za koju vrijedi
 $\sigma_N^2(R) \sim R^{d-1} \ln R, \alpha = 1.$
3. KLASA III za koju vrijedi
 $\sigma_N^2(R) \sim R^{d-\alpha}, 0 < \alpha < 1.$



Ponašanje strukturnih faktora za različite konfiguracije [2]:

- Konfiguracije točka za redom $\alpha = 1/2, 1, 2, 4, 6$.
- Ovisnost $S(k) \sim k^\alpha$ za više vrijednosti α .

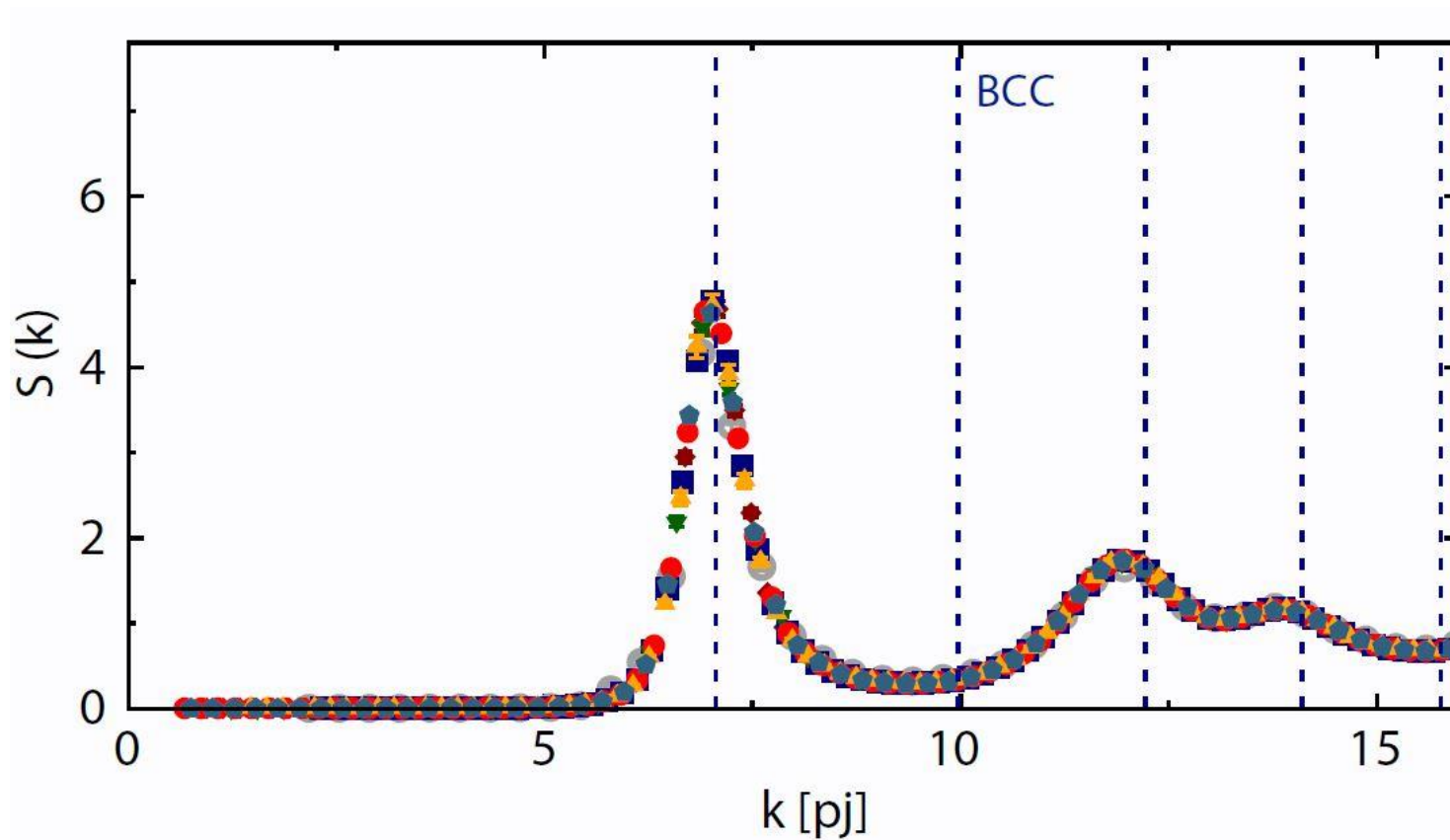
Lloydov algoritam za točke

1. Nasumična raspodjela p u pravokutnik P .
2. Konstrukcija Voronojevih dijagrama kojima su p generatori
3. Zamjena p skupom generatora istih veličina i oblika kojima se centri masa poklapaju s centrima masa pripadnih Voronojevih ćelija.

- Minimizira funkcional energije (moment inercije):

$$\begin{aligned} E(\hat{V}, p) &= \sum_{i=1}^n E(\hat{V}_i, p_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \int_{\hat{V}_i} d^2(\vec{r}, p_i) d\vec{r}. \end{aligned}$$

Lloydov algoritam za točke



Ovisnosti strukturnog faktora $S(k)$ o apsolutnoj vrijednosti valnog vektora k za točkaste generatore [1].

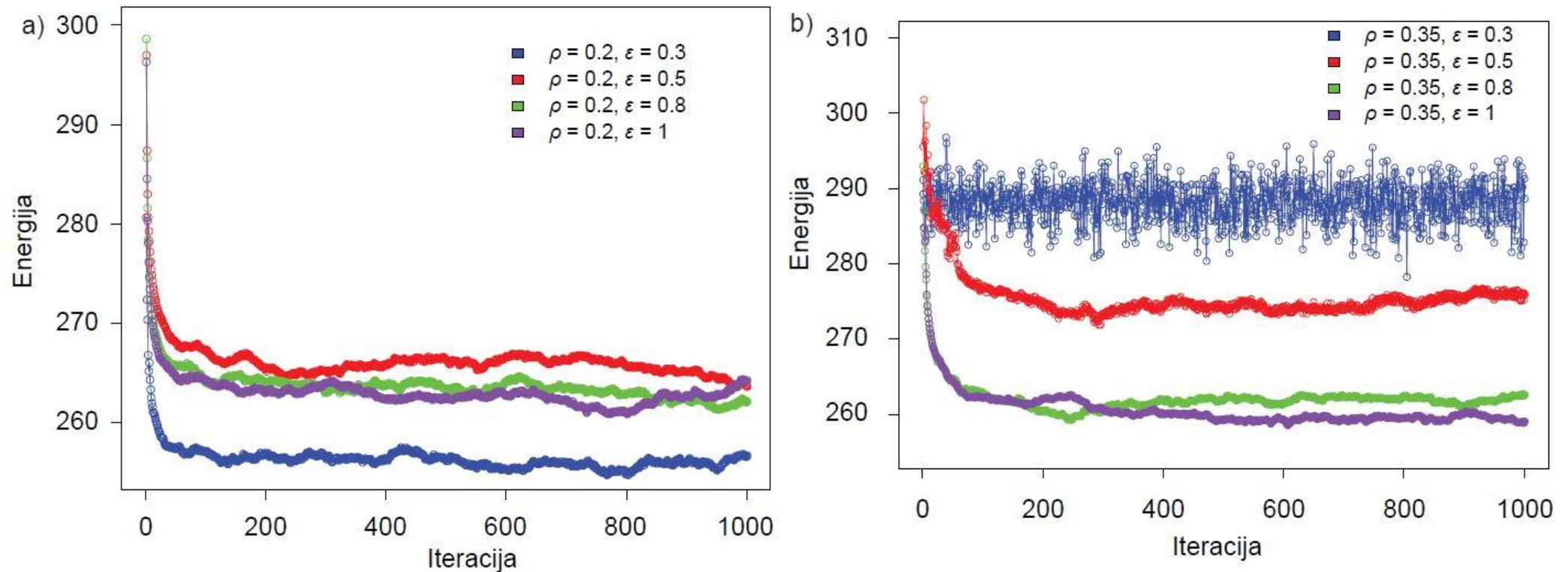
Lloydov algoritam za elipse

1. Nasumična raspodjela p u pravokutnik P .
2. Konstrukcija Voronojevih dijagrama kojima su p generatori
3. Zamjena p skupom generatora istih veličina i oblika kojima se centri masa poklapaju s centrima masa pripadnih Voronojevih ćelija.
4. Ako se elipse preklapaju [5]:
 - nasumični odabir jedne elipse koja se pomiče (translacija u x i y smjeru i rotacija)
 - Translacija - definirana vektorom čija duljina se dobiva iz uniformne distribucije u intervalu $[-b/2, b/2]$ gdje je b duljina male poluosi elipse
 - Rotacija - kut rotacije slučajna je varijabla dobivena iz uniformne distribucije u intervalu $[0, \pi]$
 - Pomak se prihvaća ako se ukupna površina presjeka smanji ili ostane nepromijenjena
 - Ponavljanje postupka sve dok površina presjeka ne bude jednaka nula.

Rezultati

- Funkcional energije:
 - Ovisnost funkcionala energije o broju iteracija algoritma
 - Ponašanje sustava za vrijednosti elongacija elipsa jednakih $\varepsilon = 1, 0.8, 0.5$ i 0.3 te za vrijednosti gustoća jednakih $\rho = 0.2, 0.35, 0.5, 0.65$ i 0.8
 - Konvergencija algoritma
- Strukturni faktor:
 - Ovisnosti strukturnih faktora o valnom vektoru
 - Stupanj uređenja struktura
 - Efektivna hiperuniformnost

Funkcional energije

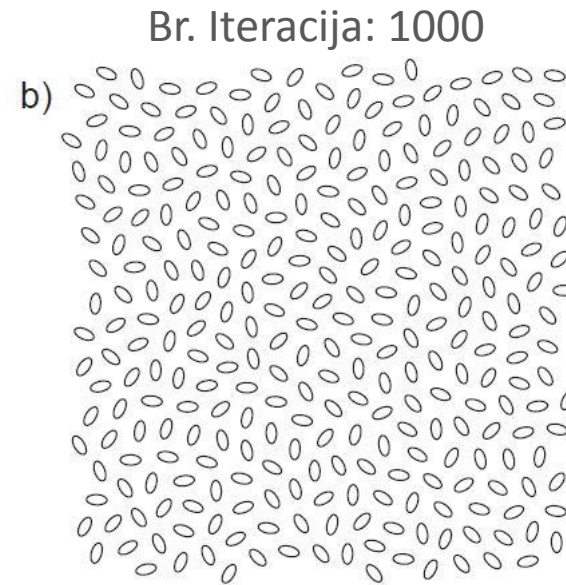
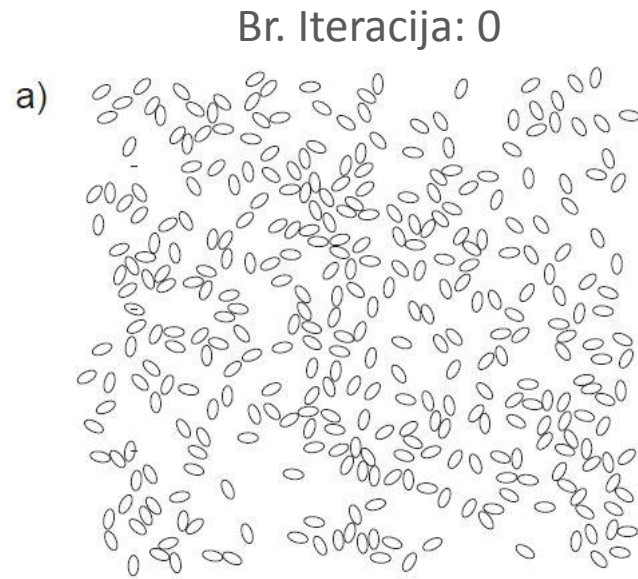


Ovisnost funkcionala energije o broju iteracija za $\rho = 0.2$ i $\rho = 0.35$

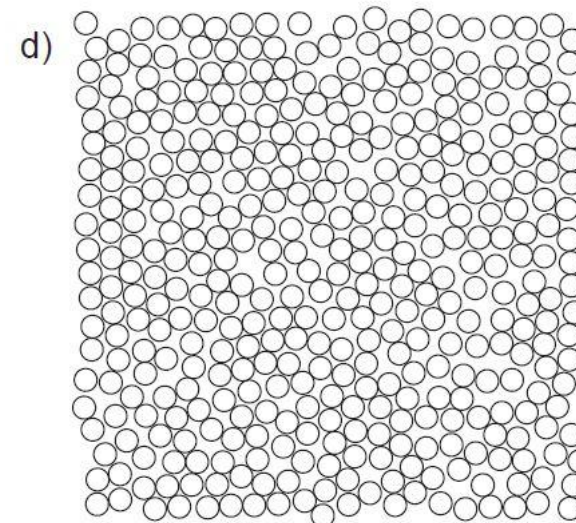
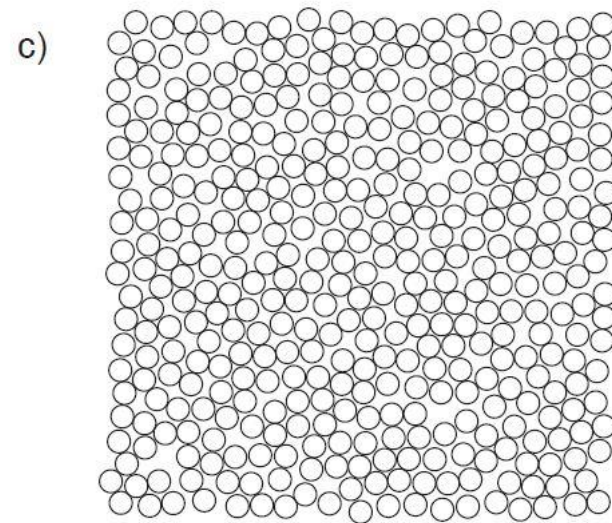
$\varepsilon \backslash \rho$	0.2	0.35	0.5	0.65	0.8
1	✓	✓	X	X	X
0.8	✓	✓	X	X	X
0.5	✓	✓	X	X	X
0.3	✓	X	X	X	X

Ponašanja sustava za cjelokupni fazni prostor. Konvergencija i nekonvergencija su predočene simbolima ✓ i X.

$\rho = 0.35$



$\rho = 0.65$

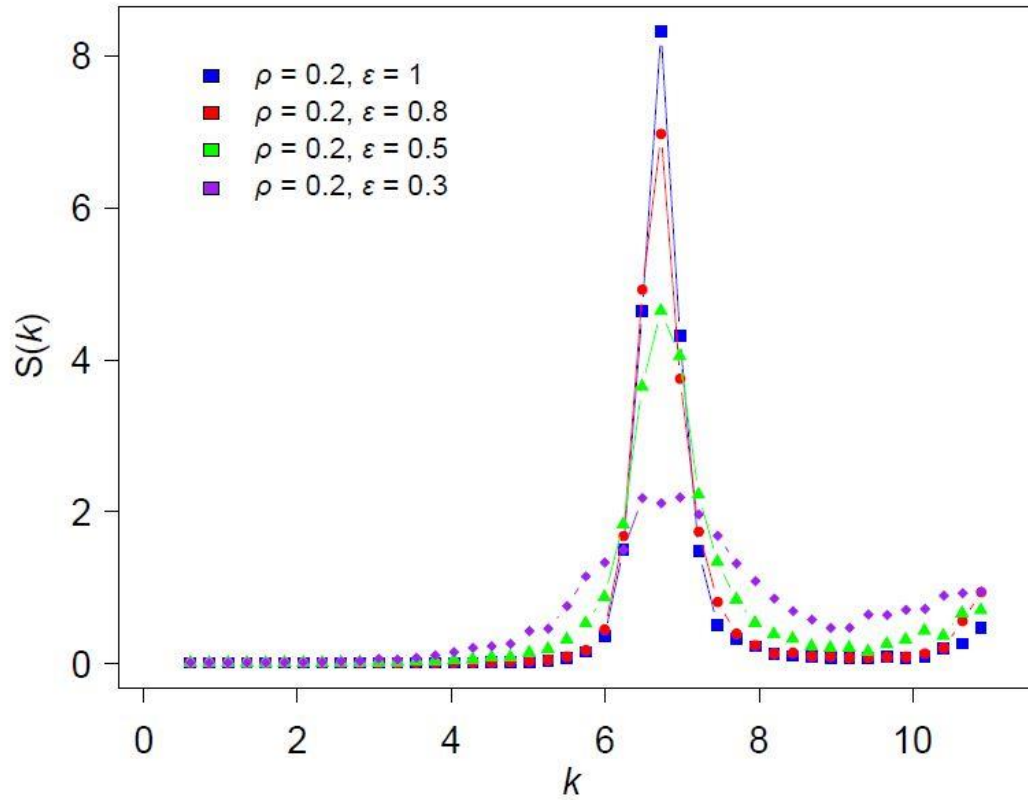


Konfiguracije elipsi za različite gustoće i iteracije algoritma:

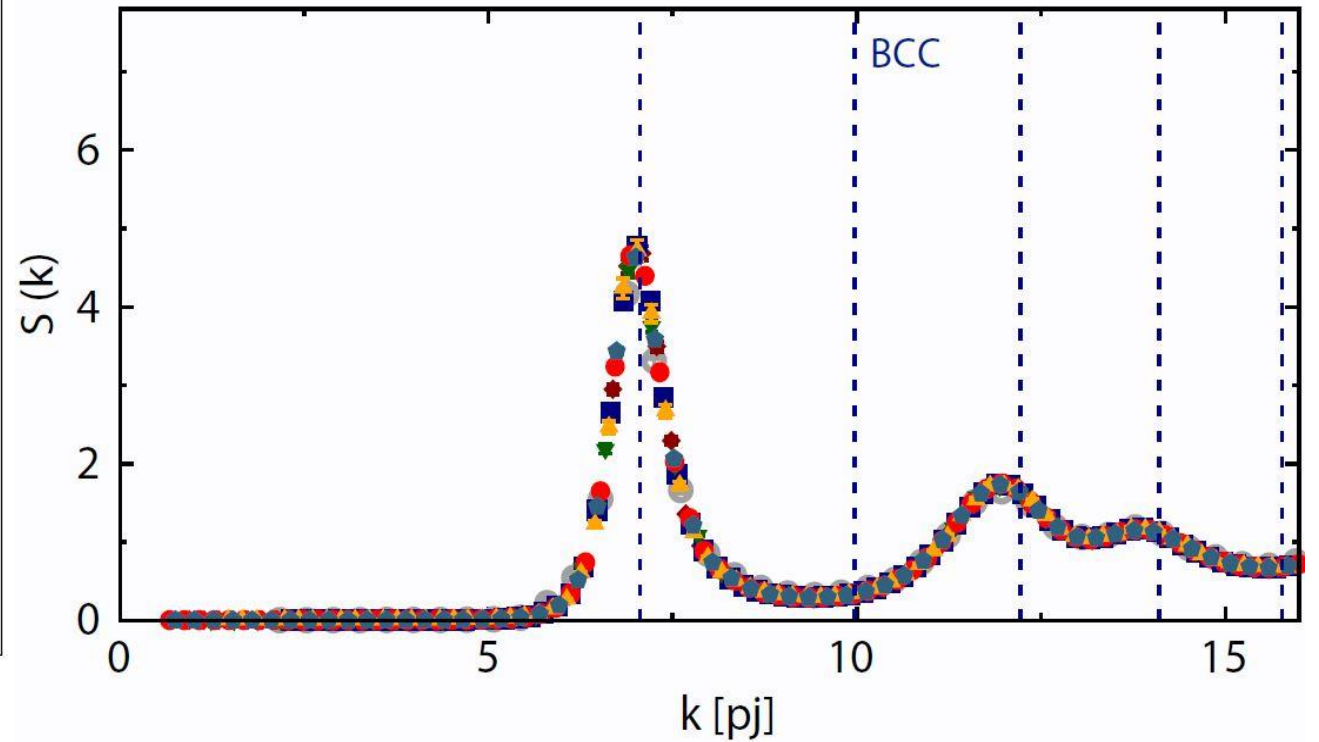
a) i b) $\varepsilon = 0.5$, $\rho = 0.35$

c) i d) $\varepsilon = 1$, $\rho = 0.65$

Strukturni faktor

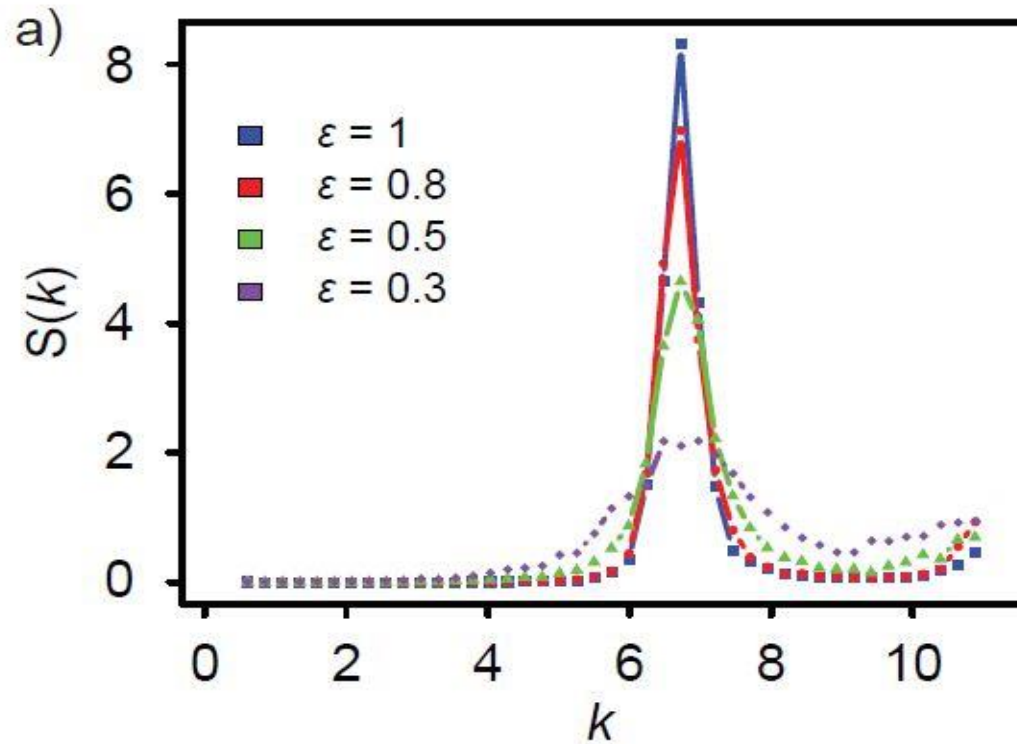


Strukturni faktor za eliptične generatore

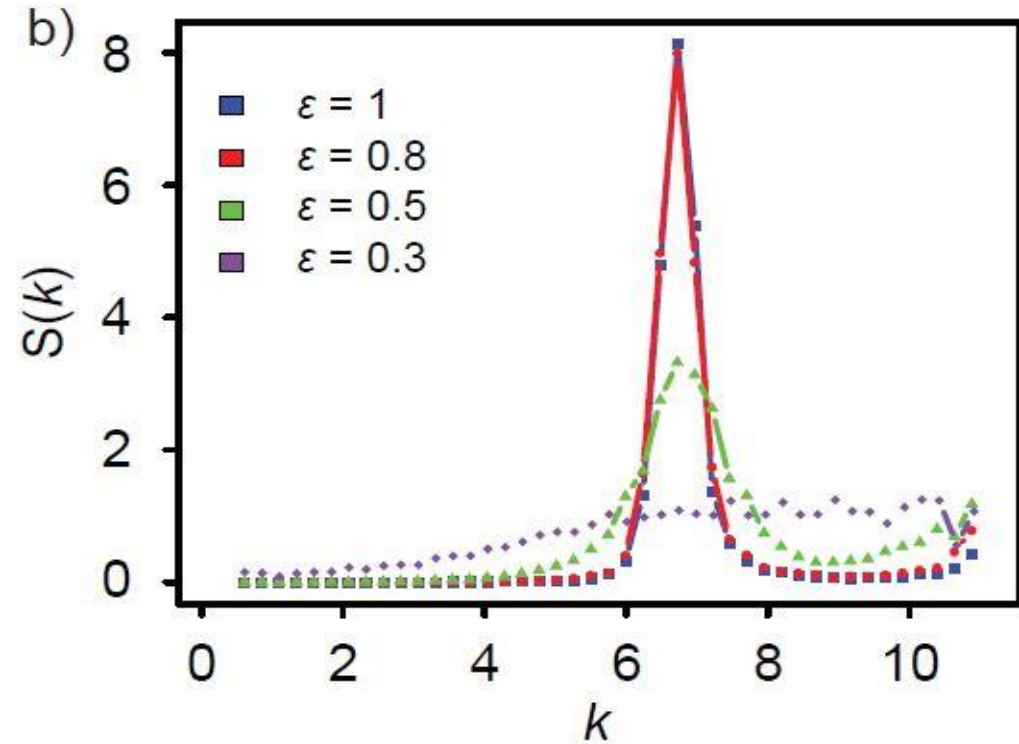


Strukturni faktor za točkaste generatore [1]

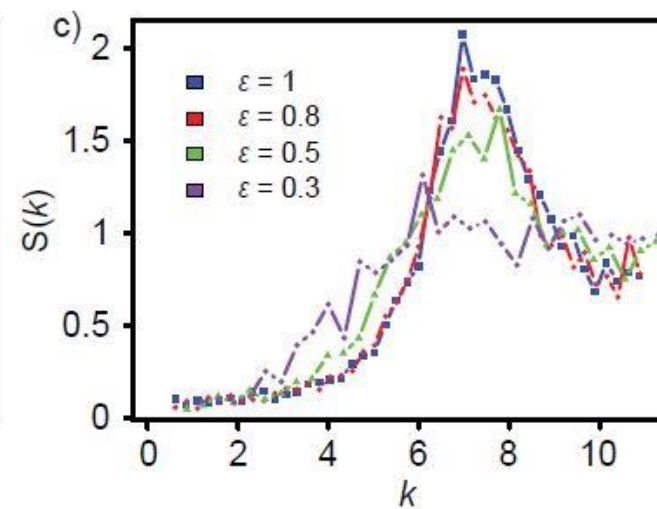
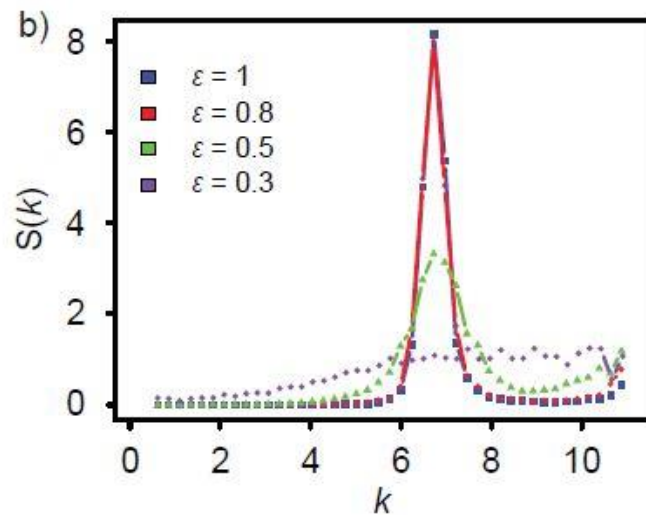
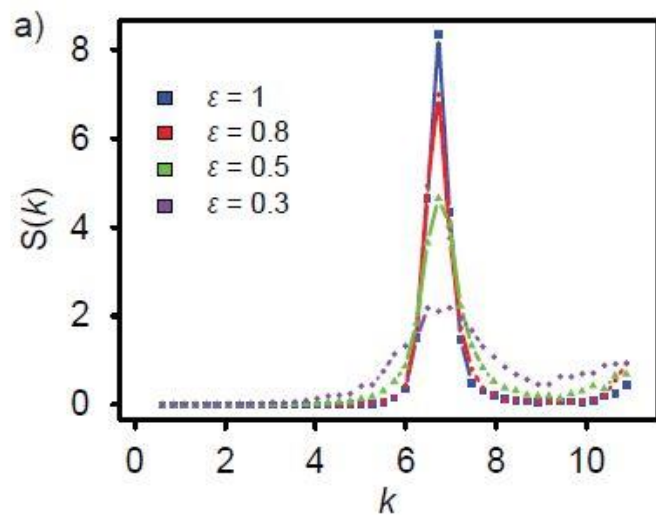
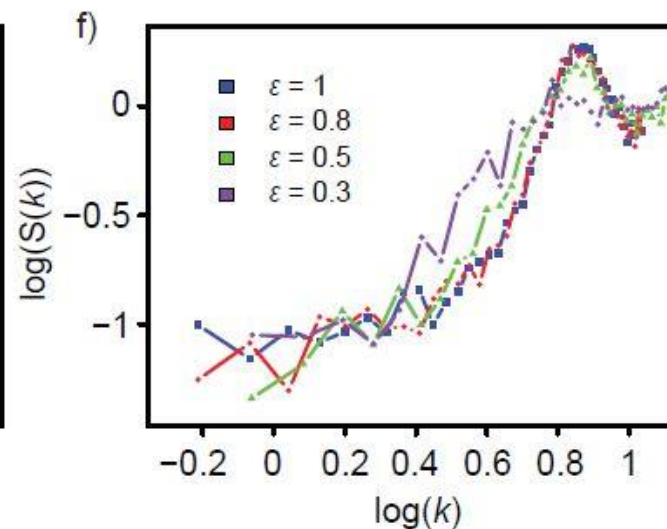
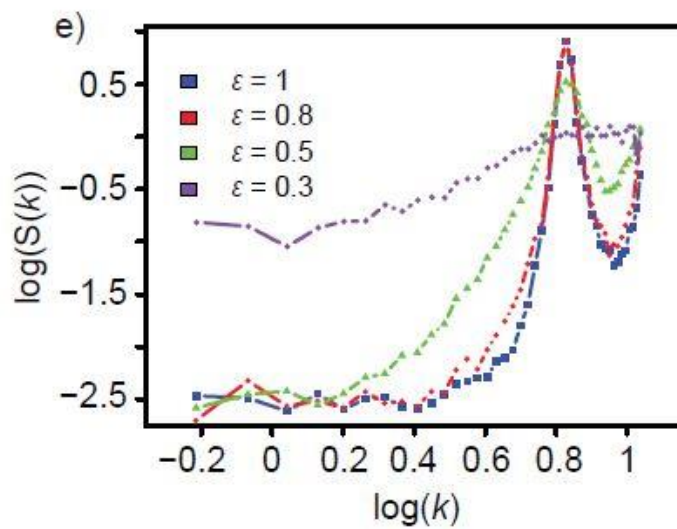
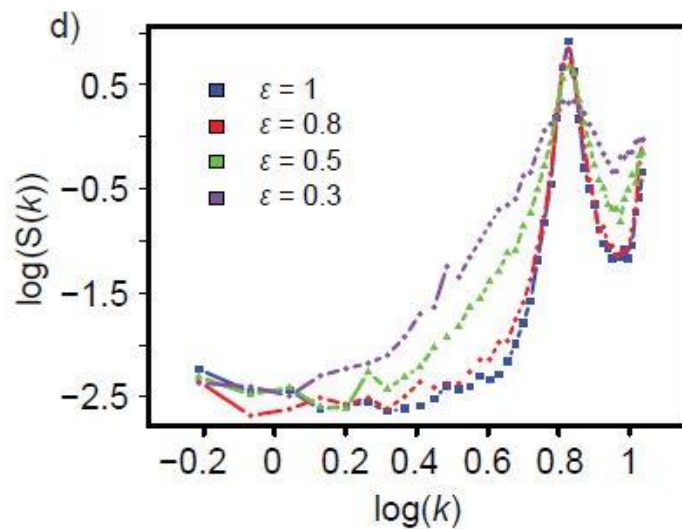
Strukturni faktor



Ovisnost $S(k) \sim k$ za $\rho = 0.2$



Ovisnost $S(k) \sim k$ za $\rho = 0.35$

$\rho = 0.2$ $\rho = 0.35$ $\rho = 0.5$ Ovisnost
 $S(k) \sim k$ Logaritamska
ovisnost

Zaključak

- Za dio faznog prostora modificirani Lloydov algoritam konvergira
- Konvergencija za mali broj iteracija algoritma
- Efektivno hiperuniformne strukture

Literatura

- [1] Klatt, M.A; Lovrić, Jakov; Chen, Duyu; Kapfer C. Sebastian, Schaller, M. Fabian; Schönhöfer W. A. Phillipp; Gardiner, S. Bruce; Smith, Ana- Sunčana; Schröder-Turk, E. Gerd; Torquato, Salvatore, *Universal hidden order in amorphous cellular geometries*, Nature Communications, 2019.
- [2] S. Torquato, *Hyperuniform states of matter*, Physics Reports Volume 745, 2018.
- [3] <http://asserttrue.blogspot.hr/2010/02/voronoi-tessellation-in-linear-time.html>
- [4] <https://www.ima.umn.edu/impacts/voronoi>
- [5] Lovrić, J.; Kaliman, S.; Barfuss, W.; Schroeder-Turk, G.; Smith, A.-S.; *Geometric effects in random assemblies of ellipses*, Soft Matter, 2019.