

Izračun strukture u centralnim problemima eliptičnih oblika

Lucija Tomašić

Mentor: prof. dr. Ana-Sunčana Smith

Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Bijenička 32, Zagreb

Računalno simuliranje hiperuniformne strukture jedan je od centralnih problema mnogih grana znanosti. U ovom seminarskom radu opisana je problem raspodjele eliptičnih oblika u dvodimenzionalnom prostoru pomoću modificiranog Lloydovog algoritma s ciljem da se dobije hiperuniformna struktura. Fizikalna svojstva dobivene računalno generirane strukture opisana su promatranjem funkcionala energije i strukturnog faktora.

I. UVOD

I.1. Motivacija

Računalno simuliranje strukture koja oponaša strukturu različitih stanja materije fundamentalan je praktičan problem koji može biti od koristi pri razotkivanju fizikalnih svojstava sistema. Od osobitog interesa su sistemi koji posjeduju naizgled skrivenu vrstu uređenja i makroskopski su uniformni iako nemaju kristalnu strukturu. Takvu strukturu, naprimjer, posjeduju stanice u životinjskom i biljnom tkivu. Pokazano je kako se Lloydovim algoritmom koji koristi točke kao generatore, čiji će način rada biti opisan kasnije, može računalno dobiti takva struktura [1]. Kako bi se detaljnije proučio problem i bolje definirala vrsta uređenja takvih sustava, došlo se do ideje korištenja elipsa kao generatora u algoritmu, umjesto točaka. Razlog tome je što jezgre stanica tkiva, čija struktura je od interesa, imaju eliptični oblik. U ovom seminarskom radu diskutirani su rezultati i fizikalna svojstva strukture koja se dobije kad se elipse koriste kao generatori u Lloydovom algoritmu. Kako bi se opisao problem, potrebno je prvo definirati osnovne pojmove, kao što su Voronojeva ćelija, hiperuniformnost i strukturni faktor, te opisati način rada Lloydovog algoritma.

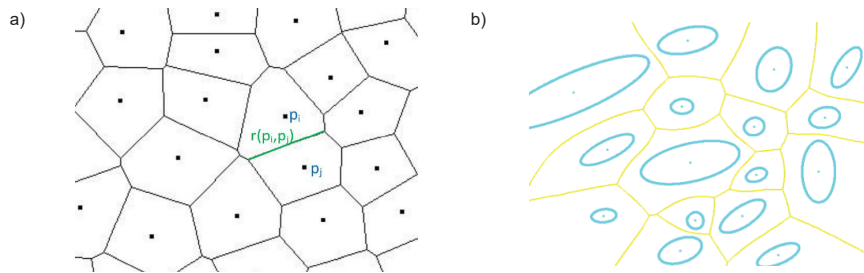
I.2. Vornojeve ćelije i Voronojev dijagram

Voronojeva ćelija $\hat{V}_i(p_i)$ koja odgovara podskupu p_i za dani skup podskupova ravnine $p = \{p_j\}_{j=1}^n \subseteq P$, gdje je P pravokutnik u \mathbb{R}^2 , definira se kao $\hat{V}_i(p_i) = \{z' \in P | d(z', p_i) \leq d(z', p_j); j = 1, \dots, n; j \neq i\}$. Nadalje, skup $\hat{V} = \{\hat{V}_j(p_j)\}_{j=1}^n$ naziva se Voronojev dijagram od p . Dakle, Vornojeve ćelije dijele ravnin na n ćelija tako da su sve točke koje sadrži i -ta ćelija od svih podskupova ravnine najbliže upravo podskupu p_i . Podskupove p_i nazivamo generatorima Vornojevih ćelija. Primjer Voronojevog dijagrama s točkastim generatorima prikazan je na Slici 1a. Voronojev dijagram s točkastim generatorima za koje vrijedi da su ujedno i centri masa ćelija naziva se centroidni Voronojev dijagram.

Pri računalnoj simulaciji od interesa će biti promatrati Voronojeve diagrame kojima generatori nisu točke nego elipse. Primjer Voronojevog dijagrama generiranog elipsama prikazan je na Slici 1b.

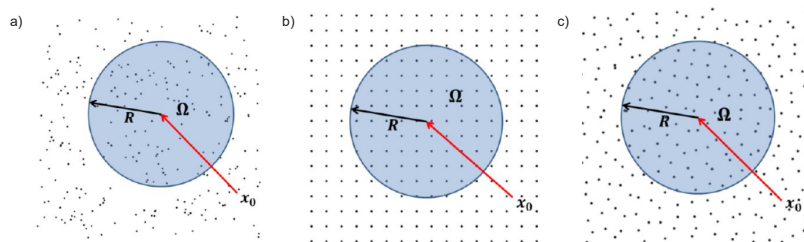
I.3. Hiperuniformnost i strukturni faktori

Hiperuniformnost je geometrijski koncept koji kvantitativno karakterizira strukturu materije. Općenito, hiperuniformna konfiguracija skupa točaka definira se kao ona kojoj varijanca broja točaka $\sigma_N^2(R) \equiv \langle N(R)^2 \rangle - \langle N(R) \rangle^2$ u nekom sfernom lokalnom području raste sporije od samog područja tijekom njegova povećanja.



Slika 1:

- a) Voronojev diagram generiran točkama [3].
b) Voronojev diagram generiran elipsama [4].



Slika 2: Primjeri hiperuniformnih i nehiperuniformnih struktura [2]:

- a) Kaotična nehiperuniformna struktura
b) Periodična hiperuniformna struktura
c) "Kaotična" hiperuniformna struktura.

U slučaju d -dimenzionalnog Euklidskog prostora \mathbb{R}^d , hiperuniformnost bi implicirala da varijanca $\sigma^2(R)$ raste sporije od R^d .

U kontekstu amorfne strukture, hiperuniformnost implicira 'skrivenu vrstu uređenja' za koju sistem može biti makroskopski uniforman. Iščezavanje fluktuacija gustoće za velike valne duljine centralan je koncept hiperuniformnosti.

Za tipične kaotične sisteme, kao što su tekućine i plinovi, vrijedit će $\sigma_N^2(R) \sim R^d$ pa oni neće biti hiperuniformni (Slika 2a). Nadalje, točkaste periodične konfiguracije su očiti primjer hiperuniformne strukture (Slika 2b). Moguće su i kaotične hiperuniformne strukture kakve imaju kvazikristali (Slika 2c).

Iščezavanje fluktuacija gustoće za velike valne duljine navodi na to da se hiperuniformnost može definirati i preko fizikalne veličine $S(\vec{k})$ koju nazivamo strukturni faktor. Po definiciji,

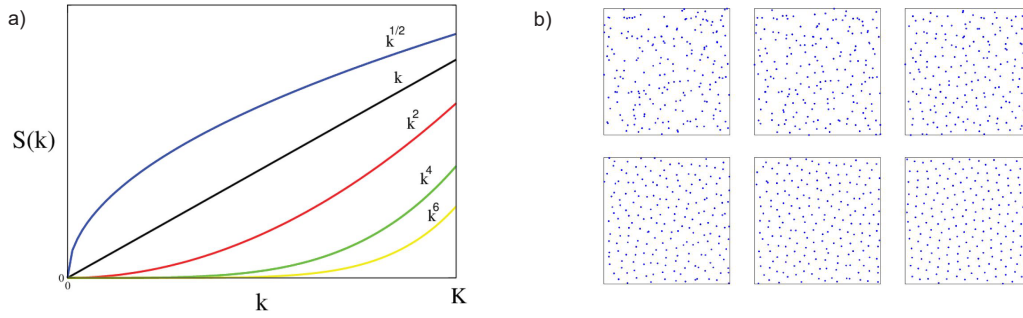
izraz za strukturni faktor glasi

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

gdje je \vec{k} valni vektor. Može se pokazati da je točkasti uzorak hiperuniforman ako strukturni faktor $S(\vec{k})$ iščezava u limesu malih valnih vektora $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$. Dakle, hiperuniformnost je definirana kao asimptotski limes

$$\lim_{|\mathbf{k}| \rightarrow 0} S(k) = 0. \quad (2)$$

Ovisno o ponašanju strukturnog faktora $S(\vec{k})$ u blizini $|\mathbf{k}| = 0$, tj. ovisno o načinu rasta varijance broja točaka $\sigma_N^2(R)$ s radijusom R , hiperuniformnost se može podijeliti u tri različite klase koje govore o stupnju uređenja sustava. Pretpostavimo da se strukturni faktor $S(\vec{k})$ u blizini



Slika 3: Ponašanje strukturnih faktora za različite konfiguracije:

a) Ovisnost $S(\mathbf{k}) = |\mathbf{k}|^\alpha$ za više vrijednosti α u intervalu $0 \leq |\mathbf{k}| \leq K$ [2].

b) Konfiguracije točaka za redom

$$\alpha = 1/2, 1, 2, 4, 6, \infty$$
 [2].

ishodišta u prvoj aproksimaciji može prikazati kao potencija valnog vektora:

$$S(\mathbf{k}) \sim |\mathbf{k}|^\alpha \quad (|\mathbf{k}| \rightarrow 0), \quad (3)$$

gdje je α redni broj potencije. Može se primjetiti da nije moguć hiperuniforman sistem za koji $\alpha \leq 0$, jer bi tada varijanca broja točaka rasla brže od volumena sfernog lokalnog područja. Podjela u tri klase ovisno o ponašanju strukturnog faktora ili varijance broja glasi [2]:

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 dano je na Slici 3. Promatrajući različite konfiguracije na Slici 3 može se primjetiti da povećavanje eksponenta α povećava red konfiguracija. Prva konfiguracija ($\alpha = 1/2$) predstavlja hiperuniformnost klase III, druga konfiguracija ($\alpha = 1$) hiperuniformnost klase II, dok ostale ($\alpha = 2, 4, 6, \infty$) imaju hiperuniformnost klase I. Primjer klase III ($\alpha = 1/2$) karakteriziran je visokom tendencijom čestica da se

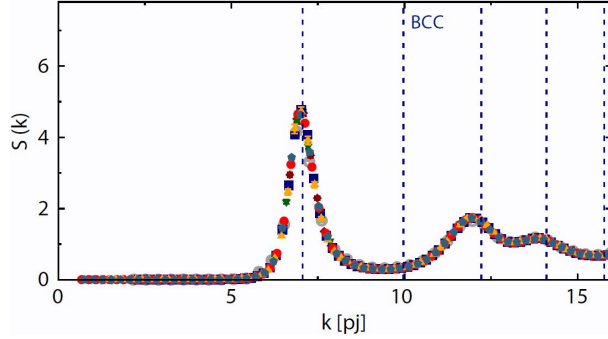
grupiraju u klustere. Povećavanjem eksponenta α povećava se stupanj uređenja i smanjuje grupiranje.

I.4. Lloydov algoritam za točke

Ključan korak pri računalnom simuliranju hiperuniformne strukture temelji se na Lloydovom algoritmu. Pokazano je da Lloydov algoritam za točkaste centroidne Voronojeve dijagrame daje efektivno hiperuniformnu strukturu [1]. Ovisnosti strukturnog faktora $S(k)$ o apsolutnoj vrijednosti valnog vektora k za točkaste generatore dana je na Slici 4. Lloydov algoritam za točkaste centroidne Voronojeve dijagrame sastoji se od 3 koraka:

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

Ovaj algoritam minimizira funkcional energije $E(\hat{V}, p)$ koji je za dan Voronojev dijagram \hat{V} i



Slika 4: Ovisnosti strukturnog faktora $S(k)$ o apsolutnoj vrijednosti valnog vektora k za točkaste generatore [1].

skup generatora p jednak

$$\begin{aligned} E(\hat{V}, p) &= \sum_{i=1}^n E(\hat{V}_i, p_i) \\ &= \sum_{i=1}^n \int_{\hat{V}_i} d^2(\vec{r}, p_i) d\vec{r}. \end{aligned} \quad (4)$$

Ta udaljenost $d(\vec{r}, p_i)$ je Euklidska udaljenost točke \vec{r} od generatora p_i . Iz izraza (4) može se primijetiti da je energija pojedine ćelije dana njenim momentom inercije.

II. METODE

Za dobivanje različitih konfiguracije korišten je modificirani Lloydov algoritam kod kojeg su Vornojeve ćelije generirane elipsama raznih veličina i gustoća. Zbog toga je bilo potrebno voditi računa o dvije veličine: elongacijama elipsa i površinskom udjelu elipsa u pravokutniku. Elongacija elipse, kojoj duljina velike polusozi iznosi a , a duljina male polusozi iznosi b , definirana je kao $\epsilon = \frac{b}{a}$. Nadalje, površinski udio elipsa u pravokutniku dan je izrazom

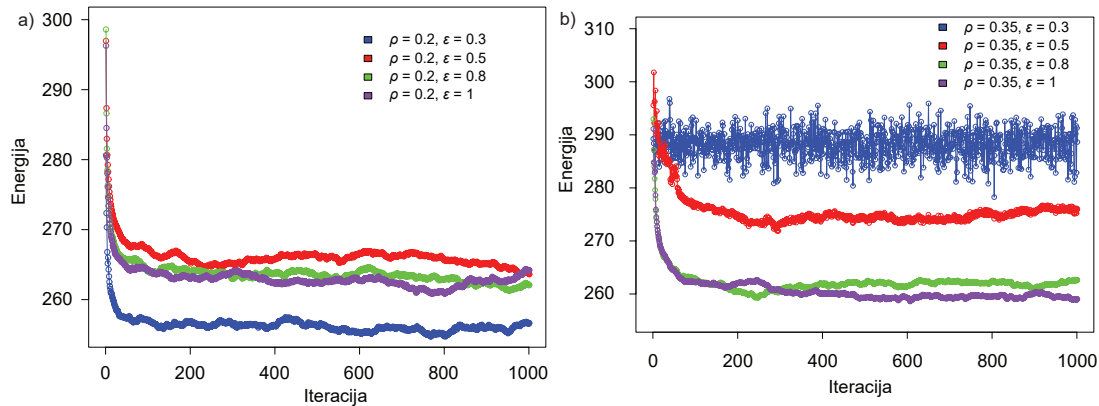
$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^n \pi a_i b_i}{A},$$

gdje A označava površinu pravokutnika. U nastavku teksta za veličinu ρ koristit će se izraz "gustoća".

Lloydov algoritam opisan u I.4 modificiran je tako što su umjesto točaka kao generatori

korištene elipse. Nulta iteracija modificiranog Lloydovog algoritma daobiva se slučajnim pakiranjem elipsi [5]. Pošto se elipse mogu presjecati, u algoritam je dodan korak koji površinu presjeka svodi na 0. Modificirani Lloydov algoritam koji radi s elipsama satoji se od 4 koraka:

1. Nasumična raspodjela p_i u pravokutnik P .
2. Konstrukcija Voronojevih dijagrama kojima su p_i generatori.
3. Zamjena p_i skupom generatora istih veličina i oblika kojima se centri masa poklapaju s centrima masa pripadnih Voronojevih ćelija.
4. Ako novonastali skup ne zadovoljava uvjet $p_i \cap p_j = \emptyset, \forall i, j \in \{1, 2, \dots, N\}, i \neq j$, nasumično se odabire jedna elipsa koja se translacija i rotira. Translacija je definirana vektorom čija duljina se dobiva iz uniformne distribucije u intervalu $[-\frac{b}{2}, \frac{b}{2}]$, gdje je b duljina male polusozi elipse. Translacije u x i y smjeru izvode se nezavisno. Kut rotacije slučajna je varijabla dobivena iz uniformne distribucije u intervalu $[0, \pi]$. Pomak (translacije u x i y smjeru te rotacija) se prihvaća ako se ukupna površina presjeka smanji ili ostane nepromjenjena. Ovaj postupak se ponavlja sve dok površina presjeka ne bude jednaka nula.



Slika 5: Ovisnost funkcionala energije o broju iteracija za različite vrijednosti gustoće (slika a) $\rho = 0.2$ i b) $\rho = 0.35$) te različite vrijednosti elongacija ϵ .

III. REZULTATI

Rezultati algoritma i potreban broj iteracija algoritma diskutirani su promatranjem funkcionala energije. Nadalje, razrađena je tema uređenja dobivenih sustava promatranjem ovisnosti strukturnih faktora o valnom vektoru. Dobiveni strukturni faktori uspoređeni su sa strukturnim faktorima dobivenim s Lloydovim algoritmom koji koristi točkaste generatore. Na poslijetku, odgovoreno je na pitanje jesu li dobivene konfiguracije hiperuniformne.

III.1. Funkcional energije

Kao što je već istaknuto, rezultati modificiranog Lloydovog algoritma ovisit će o elongacijama elipsa ϵ i površinskom udjelu elipsa u pravokutniku, tj. gustoći ρ . Ponašanje sustava razmatrat će se za vrijednosti elongacija jednakih $\epsilon = 1, 0.8, 0.5$ i 0.3 te za vrijednosti gustoća jednakih $\rho = 0.2, 0.35, 0.5, 0.65$ i 0.8 . Postavlja se pitanje za koje kombinacije ovih parametara će algoritam konvergirati, tj. u kojim slučajevima će davati uređene strukture, te koliko će iteracija algoritma biti potrebno. Na ta pitanja moguće je odgovoriti analizom ponašanja vrijednosti funkcionala energije, danog izrazom (4), kroz različiti broj iteracija algoritma. U ovom

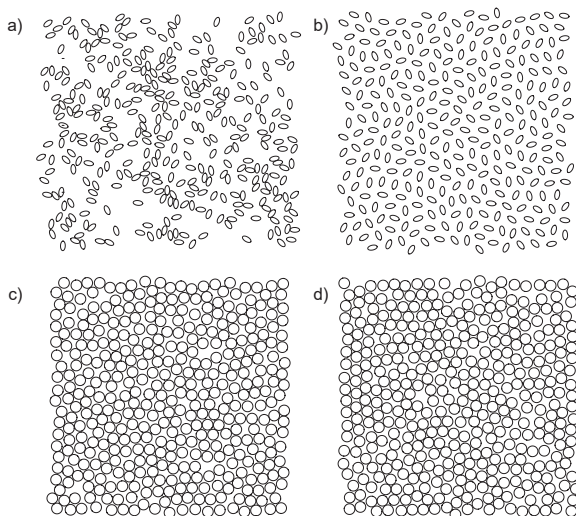
kontekstu konvergencija algoritma označava konvergenciju funkcionala energije nekoj vrijednosti, tj. kažemo da algoritam konvergira kada se vrijednost funkcionala energije prestane mijenjati porastom broja iteracija. Evolucija funkcionala energije s iteracijama algoritma za vrijednosti parametara $\rho = 0.2$ prikazana je Slici 5a. Kao što je i očekivano, za najmanju vrijednost gustoće $\rho = 0.2$, funkcional konvergira već za mali broj iteracija i to za sve vrijednosti elongacija.

Za male vrijednosti gustoća, algoritam skoro uvijek konvergira jer mala gustoća znači da algoritam ima dovoljno prostora za translaciju i rotaciju elipsi. Za vrijednost gustoće $\rho = 0.35$, algoritam će konvergirati za sve elipse osim onih najizduženijih, tj. one s najmanjim omjerom male i velike poluosi ($\epsilon = 0.3$). Graf koji predočava tu nekonvergenciju prikazan je na Slici 5b plavom bojom. Za sve ostale veće gustoće algoritam neće konvergirati. Cjelokupno razmatranje faznog prostora sistematično je prikazano u Tablici I.

Zašto algoritam konvergira za male gustoće, a za veće ne konvergira, postat će jasno ako se pogledaju konfiguracije prikazane na Slici 6. Na Slikama 6 a) i b) prikazane su konfiguracije elipsa gustoće $\rho = 0.35$ u nultoj i tisućitoj iteraciji algoritma. Za male vrijednosti gustoća algoritam

$\epsilon \backslash \rho$	0.2	0.35	0.5	0.65	0.8
1	✓	✓	×	×	×
0.8	✓	✓	×	×	×
0.5	✓	✓	×	×	×
0.3	✓	×	×	×	×

Tablica I: Ponašanja sustava za cjelokupni fazni prostor. Konvergencija i nekonvergencija su predočene simbolima ✓ i ×.



Slika 6: Konfiguracije elipsa za različite gustoće i iteracije algoritma: a) $\epsilon=0.5$, $\rho=0.35$, nulta iteracija, b) $\epsilon=0.5$, $\rho=0.35$, tisućita iteracija, c) $\epsilon=1$, $\rho=0.65$, nulta iteracija, d) $\epsilon=1$, $\rho=0.65$, tisućita iteracija.

skoro uvijek konvergira jer mala gustoća znači da algoritam ima dovoljno prostora za translaciju i rotaciju elipsi. Nadalje, na Slikama 6 c) i d) prikazane su konfiguracije gustoće $\rho = 0.65$ u nultoj i tisućitoj iteraciji algoritma na kojima se može vidjeti da za velike gustoće primjena Loydovog algoritma nema velikog utjecaja na raspored pa konvergencija neće biti moguća.

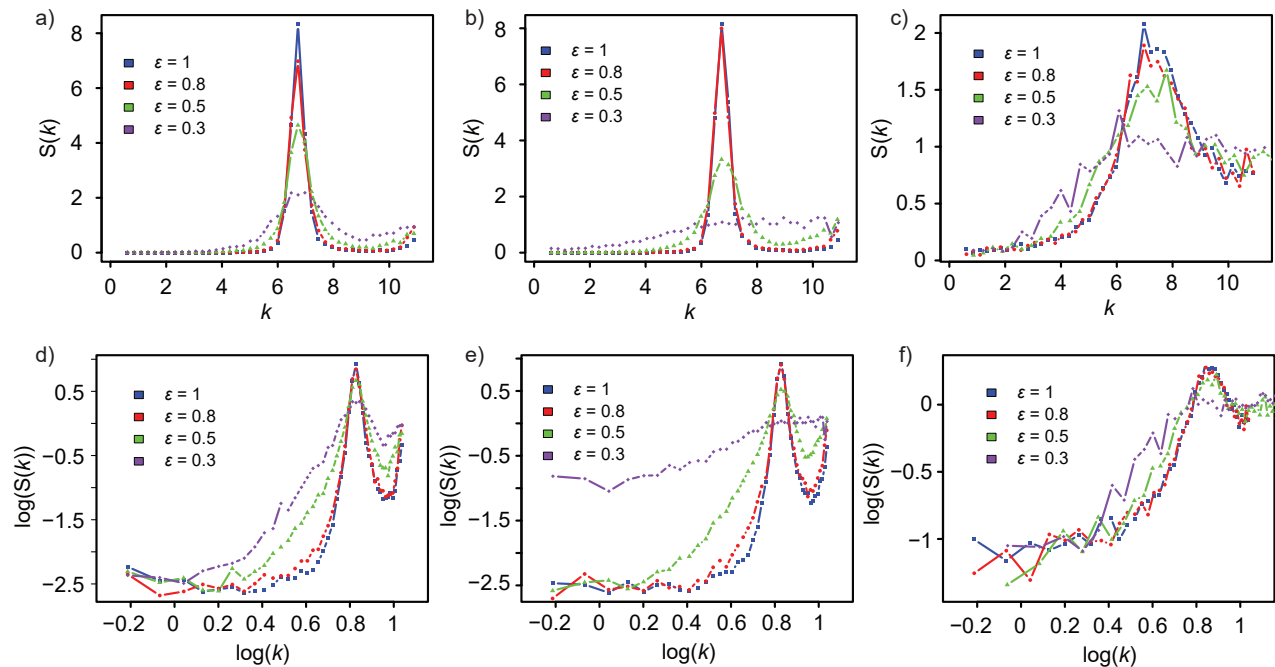
III.2. Strukturni faktor

Diskusija strukturnih faktora, računatih prema izrazu (1), čini okosnicu ovog seminar-

skog rada jer upravo oni predstavljaju fizikalnu veličinu koja ukazuje na stupanj skrivenog uređenja sustava. Grafičke ovisnosti strukturnog faktora $S(k)$ o apsolutnoj vrijednosti valnog vektora k i odgovarajuće logaritamske ovisnosti za različite vrijednosti gustoće ρ i elongacije ϵ elipsi prikazane su na Slici 7. Razlog zbog kojeg uz grafove ovisnosti $S(k) \sim k$ prikazane i logaritmirane ovisnosti $\log(S(k)) \sim \log(k)$ jest što na logaritamskoj skali dolazi do izraženije brzine promjene prikazane funkcije. Time se može lakše uočiti ponašanje funkcije u području malih vrijednosti valnog vektora k koje nam je važno za koncept hiperuniformnosti.

Promatranjem grafa ovisnosti $S(k) \sim k$ za najmanju vrijednost gustoće $\rho=0.2$ (Slika 7a) može se primijetiti da, neovisno o vrijednostima elongacija, grafovi strukturnih faktora će pratiti iste trendove. U limesu malih vrijednosti valnih vektora k , sve krivulje se približavaju nuli. Nadalje, za veće vrijednosti valnog vektora, sve krivulje imaju maksimum čiji položaj ne ovisi o vrijednosti elongacije. Ovi maksimumi ukazuju na postojanje kratkodosežnih korelacija na udaljenostima od prvog susjeda. Isto će vrijediti i za gustoće $\rho=0.35$ (Slika 7b) za sve elongacije osim za $\epsilon=0.3$, što je i očekivano jer je u prethodnom odjeljku III.1 pokazano da modificirani Lloydov algoritam neće konvergirati za tu vrijednost gustoće i elongacije. Na Slic 4 prikazana je ovisnost strukturnog faktora $S(k)$ o apsolutnoj vrijednosti valnog vektora k za strukture dobivene s Lloydovim algoritmom koji koristi točkaste generatore. I na tom grafu se može uočiti težnja strukturnog faktora ka univerzalnoj vrijednosti. Usporedbom grafičkih prikaza nameće se zaključak da se rezultati dobiveni s eliptičnim generatorima Voronojevih dijagrama ponašaju slično kao i točkasti generatori.

Da bi se odgovorilo na pitanje jesu li dobivene strukture hiperuniformne treba detaljnije proučiti ponašanje u području malih vrijednosti valnog vektora promatranjem grafova logaritamskih ovisnosti (Slika 7d, e i f). Za najmanju vri-



Slika 7: Grafički prikaz ovisnosti strukturnog faktora $S(k)$ o apsolutnoj vrijednosti valnog vektora k i odgovarajuće logaritamske ovisnosti za različite vrijednosti gustoće ρ i elongacije ϵ . Na slikama a) i d) su prikazane ovisnosti za gustoću $\rho=0.2$, na slikama b) i e) ovisnosti za gustoću $\rho=0.35$ te na slikama c) i f) ovisnosti za gustoću $\rho=0.5$.

jednost gustoće $\rho=0.2$ (Slika 7d) uviđa se konvergencija strukturnog faktora vrijednostima reda veličine $10^{-2} - 10^{-3}$. Za veću gustoću $\rho=0.35$ (Slika 7e) uviđa se jednaka konvergencija za sve elongacije osim za $\epsilon=0.3$. Za strukture kod kojih se primjećuje konvergencija strukturnog faktora vrijednostima reda veličine $10^{-2} - 10^{-3}$ u limesu malih valnih vektora k može se reći da su efektivno hiperuniformne. Za još veću gustoću $\rho=0.5$ ne primjećuje se takva konvergencija pa te strukture ne možemo sa sigurnošću smatrati hiperuniformnima.

IV. ZAKLJUČAK

Za dobivanje različitih konfiguracije korišten je modificirani Lloydov algoritam kod kojeg su Vornojeve ćelije generirane elipsama raznih veličina i gustoća. Promatranjem pomašanja vrijednosti funkcionala energije s povećanjem

broja iteracija algoritma utvrđeno je za koji dio faznog prostora algoritam konvergira te koliki broj iteracija algoritma je potreban. Nakon toga, za konvergirajući dio faznog prostora nacrtani su grafovi ovisnosti strukturnih faktora $S(k)$ o valnom vektoru k . Izgled tih grafova uspoređen je s izgledom onih dobivenih s Lloydovim algoritmom koji koristi točkaste generatore. Na posljetku, detaljnijom analizom ponašanja strukturnih faktora u limesu malih valnih vektora zaključeno je da se za vrijednosti gustoća i elongacija za koje algoritam konvergira dobivaju efektivno hiperuniformne strukture.

V. ZAHVALE

Zahvaljujem se mag. Jakovu Lovriću na pomoći, savjetima, strpljenju i velikodušnom dijeljenju svog znanja i vremena s ciljem uspješne izrade ovog rada.

-
- [1] Klatt, M.A; Lovrić, Jakov; Chen, Duyu; Kapfer C. Sebastian, Schaller, M. Fabian; Schönhöfer W. A. Phillip; 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.