

网格上布鲁塞尔体系化学振荡的粗粒化模拟

Coarse-grained Simulations of Chemical Oscillation in Lattice Brusselator System

摘要点击 297 全文点击 118 投稿时间: 2011-4-27 采用时间: 2011-5-23

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/04/425-433

中文关键词 [化学振荡](#) [粗粒化](#) [动力学蒙特卡罗](#)

英文关键词 [Chemical oscillation](#) [Coarse-grained](#) [Kinetic Monte Carlo](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
饶汀	中国科学技术大学化学物理系, 合肥230026	
张珍	中国科学技术大学化学物理系, 合肥230026	
侯中怀*	中国科学技术大学化学物理系, 合肥230026 ; 中国科学技术大学合肥微尺度科学国家实验室, 合肥230026	hzhlj@ustc.edu.cn
辛厚文	中国科学技术大学化学物理系, 合肥230026	

中文摘要

将一种有效的粗粒化的动力学蒙特卡罗(KMC)方法用于加速模拟二维格气布鲁塞尔体系中的振荡行为. 这种方法是将微观网格合并得到粗粒化的网格, 并在该粗粒化网格上按粗粒化的反应速率执行KMC, 即粗粒化的KMC. 数值结果表明, 由于非线性三分子反应导致的相邻元胞之间的关联是不能忽略的. 通过正确的考虑这一边界效应, 引入了所谓的b-LMF方法. 大量的数据表明, 只要体系的扩散系数不是很小, b-LMF方法能够很好的重现体系的振荡行为. 另外, 发现该方法所得的结果与KMC的偏离在合适的粗粒化尺度下存在一个接近于0的极小值, 这一粗

英文摘要

The oscillation behavior of a two-dimension lattice-gas Brusselator model was investigated. We have adopted a coarse-grained kinetic Monte Carlo (CG-KMC) procedure, where $m \times m$ microscopic lattice sites are grouped together to form a CG cell, upon which CG processes take place with well-defined CG rates. Such a CG approach almost fails if the CG rates are obtained by a simple local mean field (s-LMF) approximation, due to the ignorance of correlation among adjacent cells resulting from the trimolecular reaction in this nonlinear system. By proper incorporating such boundary effects, thus introduce the so-called b-LMF CG approach. Extensive numerical simulations demonstrate that the b-LMF method can reproduce the oscillation behavior of the system quite well, given that the diffusion constant is not too small. In addition, the deviation from the KMC results reaches a nearly zero minimum level at an intermediate cell size, which lies in between the effective diffusion length and the minimal size required to sustain a well-defined temporal oscillation.

Copyright@2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计