Difusion Limited Agregation (DLA)

Arnau Riera.

Física de sistemes de fora l'equilibri, Universitat de Barcelona, Diagonal 647.

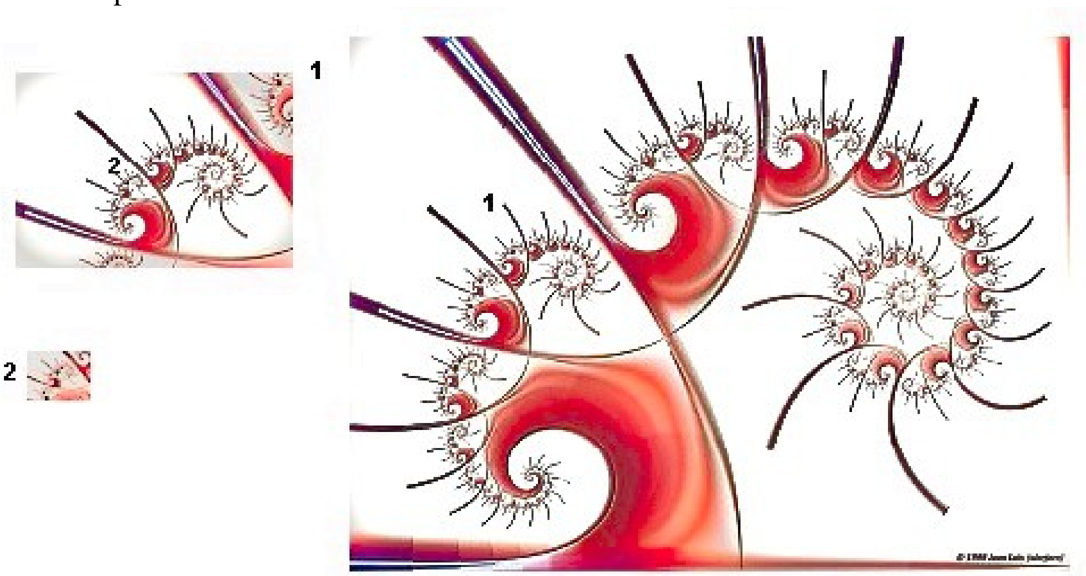
26 de Maig de 2004

Presentem un treball sobre el DLA. Fem primer una breu introducció als fractals, a continuació presentem en que consisteix el DLA i veiem que aquest efectivament és un fractal. Finalment presentem la nostra simulació i el valor que hem obtingut per la dimensió del DLA (1.76) que si bé difereix del valor que ens dóna la bibliografia, expliquem el perquè d'aquesta discrepància.

Què és un fractal?

Auto-similar (self-similarity)

Un fractal és un objecte auto-similar a diferents escales. Això vol dir que si ens fixem en una porció d'aquest i en fem un zoom, tornem a recuperar la imatge inicial. Vegem-ne un exemple:



Infinitud.

La conseqüència que té això, és que si tornessim a fer un altre zoom hauríem de tornar a recuperar la mateixa imatge, i així una altra i una altra vegada... Els fractals són per tant objectes infinits.

Quan parlem que diferents cossos o estructures que es formen a la natura tenen una estructura fractal, o que són fractals, és obvi que no compliran el requisit d'infinitud. Tot i aixó quan el nombre de partícules que forma una determinada estructura natural és molt gran, aquest queda ben aproximat.

Dimensió fraccionària o fractal.

Els fractals també es caracteritzen perquè el valor de la seva dimensió és no enter. A continuació veurem més detingudament com es pot entendre això.

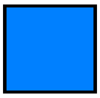
La dimensió fractal

Abans de poder assignar una dimensió a un objecte fractal, hem de definir què entenem per la dimensió. Per fer-ho agafem tres objectes de dimensió coneguda com són un segment (dimensió 1), una superfície quadrada (dimensió 2) i un cub (dimensió 3) els dupliquem l'escala, i analitzem com varia la seva mesura ("volum d-dimensional"):
Així doncs, el segment la duplica,

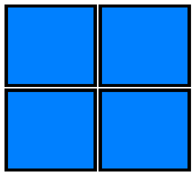
L_0

$2L_0$

La superfície quadrada la quadruplica,

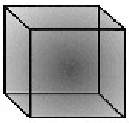


S_0

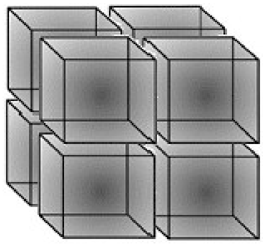


$4S_0 = 2^2S_0$

I el cub la multiplica per vuit.



V_0



$8V_0 = 2^3V_0$

Observem que la nova mesura és la mesura antiga multiplicada per el factor d'escala elevat a la dimensió de l'objecte. És a dir,

$$\mu = (\text{factor d'escala})^D \mu.$$

Si definim com el canvi en la mesura $R_\mu = \frac{\mu}{\mu.}$, i R_l com el canvi en l'escala, podem reescriure l'equació anterior;

$$R_\mu = R_l{}^D$$

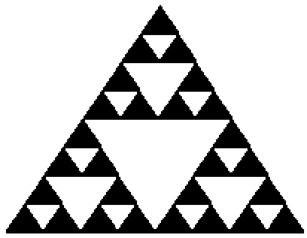
I per tant podem definir la dimensió d'un objecte com,

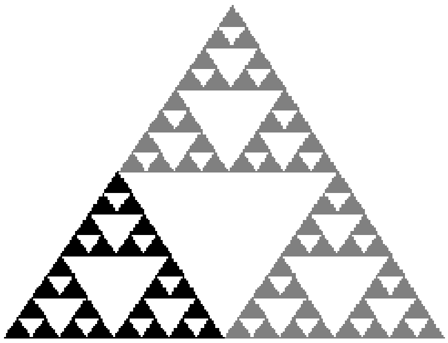
$$D = \ln\left(\frac{R_\mu}{R_l}\right)$$

Un exemple, el triangle de Sierpinski

La figura següent es coneix com el triangle de Sierpinski, si ens hi fixem compleix les característiques d'auto-similitud i infinitud fractals. Ens preguntem doncs per la seva dimensió.

Procedim doncs, de la mateixa manera que ho hem fet abans. En dupliquem l'escala, mirem com augmenta la seva mesura i apliquem la definició de dimensió.





Quan fem això veiem que la seva mesura és triplica i per tant

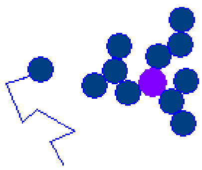
,

$$D = \ln\left(\frac{R_{\mu}}{R_{l}}\right) = \ln\frac{3}{2} = 1.585$$

La dimensió és fraccionària.

El DLA

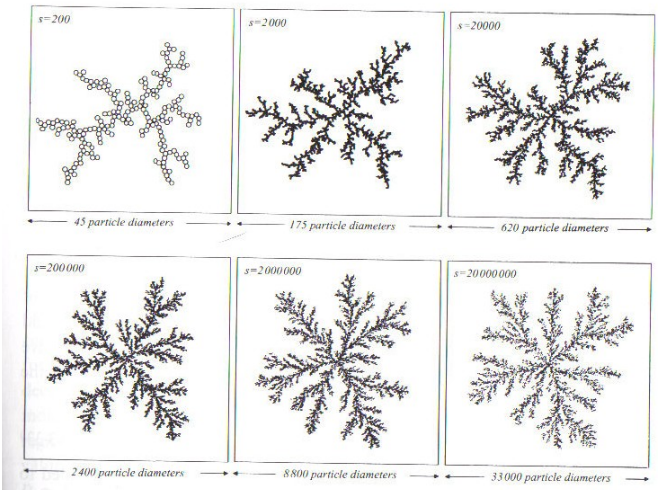
El DLA és un objecte que es construeix a partir d'un nucli central (o llavor) al que se li van llençant partícules random que al tocar aquest s'hi queden agregades formant així una estructura cada cop major.



En un principi el DLA es va crear com un mètode de simulació de diferents processos naturals, va ser més tard quan Witten i Sander
van estudiar-ne l'estructura d'escala que es van adonar que també era un fractal.

El DLA, un fractal.

Si mirem deferents estadis de creixement d'un DLA, ens adonem que és autosimilar.
En la seqüència següent cada gràfic és un DLA amb 10 vegades més partícules que l'anterior, no obstant veiem que efectivament tots els resultats són molt semblants.



Pel que fa a la dimensió es pot demostrar a partir de les simulacions que el nombre de partícules (que és proporcional a la mesura de l'objecte) escala amb el radi elevat a un exponent *D*:

$$N \propto R^D$$

On hem d'interpretar D com la dimensió del DLA i que s'ha mesurat per a simulacions de gran tamany obtenint el valor no enter de 1.71.

A més a més es pot demostrar que els objectes fractals pel sol fet de ser auto-similars han de tenir una funció de correlació radial de densitat a dos punts de la forma:

$$C(r) \propto r^{D-d}$$

On *d* és la dimensió de l'espai on està contingut l'objecte.

Doncs bé es va veure que per el DLA això també es verificava per una D=1.71.

Aquests dos fets que només verifiquen els fractals i que coincidien a amb el mateix valor de dimensió, feien inqüestionable que el DLA era un fractal.

La nostra simulació del DLA

Per fer una simulació del DLA amb ordinador definim primer molt concretament les característiques del nostre model.

- La simulació tindrà lloc en un pla de dues dimensions.
- Inicialment només hi ha una llavor o partícula fixa al centre del pla.
- Les partícules neixen a un punt aleatori i segueixen una trajectòria aleatòria.
- Les partícules només es poden moure en 8 direccions restringides.
- Quan una partícula en troba una altra al costat, aquesta s'hi queda adherida i es queda fixada a l'estructura.
- Quan una partícula es molt lluny del cristall considerem que s'ha escapat per difusió.
- Les partícules seran enviades d'una amb una. No es llençarà una nova partícula fins que l'anterior no s'hagi agregat a l'estructura o bé s'hagi escapat.

Funcionament del programa

El programa consisteix en una matriu quadrada, inicialment tota nul·la (tots els elements són zero), que representa el pla on creixerà el DLA. Una partícula en el pla es representa per un 1 en la columna x i fila y de la matriu essent (x,y) la posició de la partícula.

Sobre aquesta matriu tenen lloc les operacions següents:

```
Es fixa una llavor al centre del pla.
Repeteix fins que  el nombre de partícules agregades sigui 2000{
        Posició aleatoria de naixement a una distància 1.2 x radi del cristall.
        Llença una partícula
        Repeteix fins que la partícula no s'hagi quedat agregada o s'hagi escapat {
                Nova posició (x,y) a partir de l'antiga.
                Si la posició (x,y) té una altra part. al costat, llavors agrega-la a l'estructura
                Si la distància (x,y) del centre > 2 x radi del cristall, llavors s'ha escapat.
        }
}
```

Per a més detall es pot consultar el codi font del programa inclòs en el CD.

Els resultats del programa

Quan executem el programa aquest ens genera figures del DLA com les que hem trobat a la bibliografia.

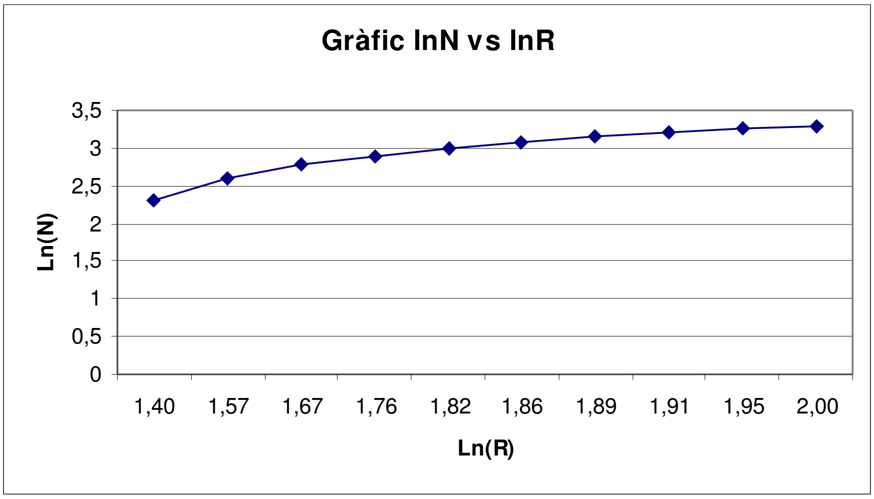
A més a més però ens agradaria calcular la dimensió de l'objecte obtingut. Per determinar-la hem decidit utilitzar el mètode de com escala el nombre de partícules en funció del radi, ja que els nostres companys ja ho feien per el mètode del box-counting.

Així doncs, li hem demanat al programa que ens mostri per pantalla quin és el radi del cristall cada 200 partícules agregades.
En aquest cas la mesura de l'objecte és proporcional al nombre de partícules agregades per tant segons hem vist anteriorment hauríem d'esperar un comportament tal,

$$N \propto R^D \Rightarrow \ln N = D \ln R + B$$

De manera que representant $\ln N$ en funció $\ln R$ obtindrem una recta de pendent D que podrem calcular fent la regressió lineal.

Fent això per una simulació



I ajustant per regressió els 6 últims punts que són els que s'aproximen més a una recta, ja que l'estructura consta de un nombre considerable de punts agregats obtenim els següents resultats:

$$D = 1.73$$
$$r=0.988$$

Observem que tot i que els punts estan considerablement alineats el valor de la dimensió no és el que esperàvem obtenir (1.71). Això ho atribuïm al poc nombre de partícules agregades (2000). Amb tant poques partícules els grans o partícules agregades no són infinitèssims enfront tota l'estructura, així com tampoc els efectes asimètrics han estat cancel·lats per l'estadística.

Una manera de solucionar això, és dir al programa que llenci moltes més partícules (de l'ordre de cent mil). No ens ha estat possible fer-ho ja que la versió del compilador C++ de que disposàvem limita la memòria dels programes (és una versió DOS de l'any 94) de manera que no ens permetia definir matrius majors a 220x220. Així doncs només caldria aconseguir una versió de compilador C++ recent que ens permetés definir matrius de mida major.

A caire de curiositat hem repetit aquest procés 10 vegades i hem obtingut els següents resultats per a la dimensió:1.73, 1.83, 1.75, 1.70, 1.65, 1.85, 1.93, 1.71, 1.87, 1.61 . La dimensió mitjana és D=1.76.

Bibliografia

http://www.fractovia.org
P. Meakin: Fractals, scaling and growth far from equilibrium. Cambridge University Press, Cambridge, **1998**