20-04-2024

Υπολογιστική Φυσική Στερεάς Κατάστασης

Problem 2

Haka Kevin

Στην άσκηση αυτή καλούμαστε να μελετήσουμε το φαινόμενο της διάχυσης και την κατασκευή συσσωματώματος με την μέθοδο diffusion-limited aggregation (DLA). Αν και η μέθοδος θα μπορούσε να προσομοιωθεί και σε χώρο που τα σωματίδια κινούνται ελεύθερα προς κάθε κατεύθυνση στις δυο διαστάσεις εμείς θα αρκεστούμε σε ένα πλέγμα 451x451 όπου τα σωματίδια θα εκτελούν τυχαίους περιπάτους στους κόμβου του πλέγματος έως ότου συναντήσουν το συσσωμάτωμα και γίνουν κομμάτι του. Αν και ακολουθούμε τις οδηγίες της άσκησης για της παραμέτρους, ο λόγος που θεωρούμε πλέγμα με μήκος και πλάτος 451 αντί για 450 είναι πολύ απλά, για να τοποθετήσουμε τον σπόρο (αρχικό σωματίδιο) στο κέντρο του πλέγματος (απαιτεί πλέγμα με περιττό αριθμό μήκους και πλάτους) για να μην είναι μεροληπτική η ανάπτυξη ως προς κάποια κατεύθυνση, αν και σε μεγάλα πλέγματα η όποια μεροληψία θα έτεινε στο μηδέν. Το πλέγμα προγραμματιστικά θα το προσομοιώσουμε με έναν πίνακα 451x451 (όλα τα στοιχεία 0) όπου κάθε στοιχείο του πίνακα αντιστοιχεί σε έναν κόμβο του χώρου με τις αντίστοιχες συντεταγμένες. Αφού έχουμε κατασκευάσει το πλέγμα και έχουμε τοποθετήσει τον σπόρο στο κέντρο (αλλάζουμε την τιμή από 0 σε 1 στον πίνακα) ήρθε η στιγμή να τοποθετήσουμε το σωματίδιο που θα εκτελέσει τον τυχαίο περίπατο σε απόσταση 200 κόμβους μακριά από το κέντρο. Για να προσδιορίσουμε την αρχική θέση στο πλέγμα του τυχαίου περιπατητή αρκεί η παραγωγή ενός τυχαίου αριθμού στο διάστημα [0, 1) και με έναν απλό γραμμικό μετασχηματισμό να τον πάμε στο διάστημα [0, 2*π). Ο αριθμός αυτός θα αντιπροσωπεύει την γωνιά ως προς κάποιον νοητό άξονα και με απλή γεωμετρία υπολογίζουμε τις συντεταγμένες x,y (τις στρογγυλοποιούμε για να είναι ακέραιες) σε απόσταση 200 κόμβων από το κέντρο. Σε αυτό το σημείο πρέπει να σημειωθεί πως επειδή κινούμαστε σε ένα πλέγμα αλλά χρησιμοποιούμε ευκλείδεια γεωμετρία (μετρική L^2) για τις αποστάσεις το σύστημα είναι μεροληπτικό ως προς τις κατευθύνσεις δεξιά, αριστερά, πάνω και κάτω σε σχέση με τις διαγώνιους. Θα μπορούσαμε να το αποφύγουμε αυτό αν χρησιμοποιούσαμε μετρική L^2 γνωστή και ως γεωμετρία Taxicab ή Manhattan αλλά είναι λεπτομέρεια και στα πλαίσια της άσκησης δεν χρειάζεται. Κατά την διάρκεια του περιπάτου οι κανόνες έχουν ως εξής: Αν το σωματίδιο απομακρυνθεί περισσότερο από 225 κόμβων από το κέντρο να θεωρούμε ότι έχει χαθεί και να επανατοποθετούμε το σωματίδιο σε απόσταση 200 κόμβων. Αν το σωματίδιο φτάσει κοντά στο συσσωμάτωμα θα γίνει μέρος του, αλλάζοντας αντίστοιχα την τιμή της θέσης του πίνακα σε 1. Σε αυτό το σημείο να τονίσω πως ως κοντά ορίζουμε τους γείτονες κατά Von Neumann σε απόσταση ενός κόμβου, δηλαδή, τους γείτονες δεξιά, αριστερά, πάνω και κάτω σε απόσταση ενός κόμβου (όχι τους διαγώνιους). Η διαδικασία επαναλαμβάνεται έως ότου το συσσωμάτωμα αγγίξει ή ξεπεράσει τον νοητό κύκλο των 200 κόμβων. Τελευταία υποσημείωση είναι πως η ακτίνα όπου δημιουργούνται τα σωματίδια που εκτελούν τυχαίο περίπατο καθώς και η ακτίνα ασφαλείας (που θεωρούμε πως τα σωματίδια έχουν χαθεί) δεν χρειάζεται να είναι φιξαρισμένες στην τελική τους θέση, αντίθετα αρχικά θα μπορούσαν να είναι μικρότερες και καθώς εξελίσσεται η διαδικασία να μεγαλώνουν μέχρι την τελική τους θέση. Αυτό το τέχνασμα αν και εισάγει μια κάποια μεροληψία έχει σαν αποτέλεσμα να μειώνει κατά πολύ τον χρόνο εκτέλεσης των προσομοιώσεων. Αυτό συμβαίνει γιατί στην αρχή όπου ο χώρος είναι κενός είναι πολύ δύσκολο για τον τυχαίο περιπατητή να συναντήσει το κλάστερ, και κατά συνεπεία σπαταλά χρόνο στον τυχαίο περίπατο χωρίς να προσφέρει κάτι ουσιώδες στην προσομοίωση.

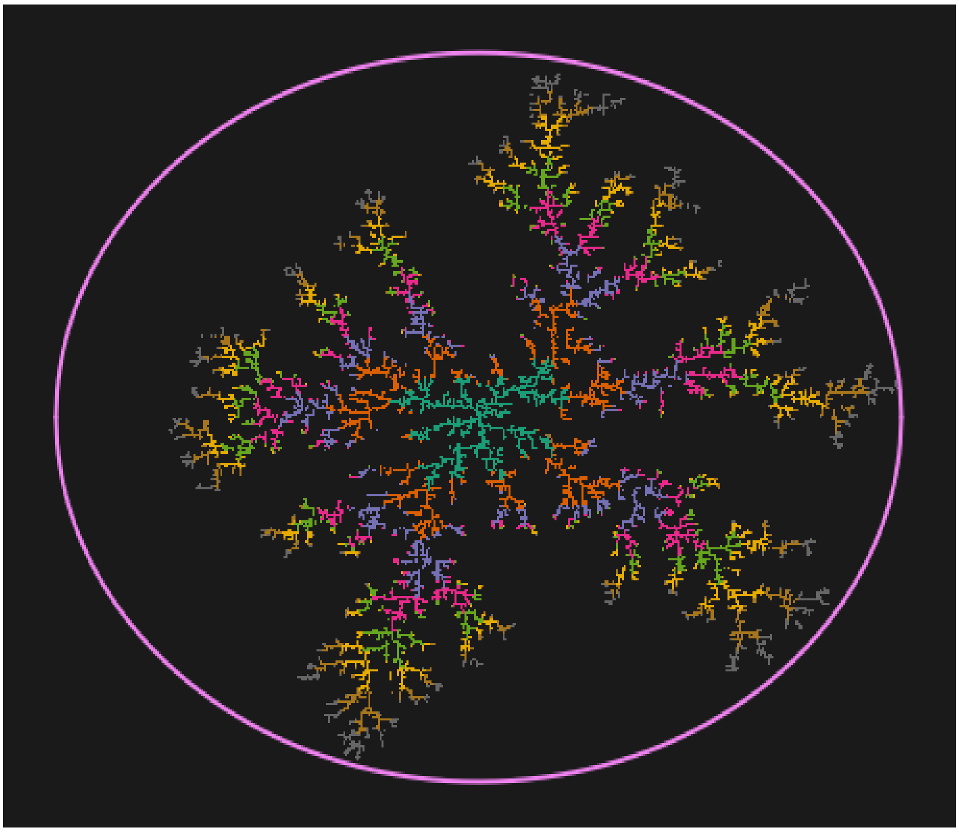

Figure 1 Φράκταλ κατασκευασμένο με την μέθοδο DLA. Το συγκεκριμένο αποτελείται από 11261 σωματίδια. Τα διαφορετικά χρώμα αντιπροσωπεύουν τις διαφορετικές ομάδες σωματιδίων κατά τον σχηματισμό.

Για τον υπολογισμό της διάστασης αυτού του φράκταλ εργαζόμαστε ως εξής: Διαλέγουμε τυχαία ένα κόμβο σε απόσταση το πολύ 10 κόμβων από το κέντρο του συσσωματώματος. Με κέντρο αυτό το σημείο κατασκευάζουμε ένα τετράγωνο πλευράς 11 (για να είναι ακεραίες οι συντεταγμένες του κέντρου χρειαζόμαστε περιττό αριθμό). Μετράμε ποσά σωματίδια βρίσκονται μέσα σε αυτό το τετράγωνο και το καταγράφουμε. Επαναλαμβάνουμε την διαδικασία 20 φορές για να πάρουμε τον μέσω όρο των σωματιδίων σε ένα τετράγωνο πλευράς 11. Κάνουμε την ίδια διαδικασία αυξάνοντας την πλευρά του τετραγώνου κατά 10 μέχρι το 101 (δηλαδή δέκα σημεία). Υπολογίζουμε τους λογάριθμους των δεδομένων αυτών (των πλευρών και του μέσου όρου σωματιδίων) και σχεδιάζουμε ένα διάγραμμα. Από τα δεδομένα αυτά μπορούμε να κάνουμε προσαρμογή την ευθεία ελαχίστων τετραγώνων και η κλίση της ευθείας μας δίνει την διάσταση του φράκταλ.

Η ευθεία ελαχίστων τετραγώνων στο figure 2 είναι: $M = 1.692 * L + 2.834$, συνεπώς η διάσταση του DLA είναι $df = 1.692$, και αν το συγκρίνουμε με την τιμή της βιβλιογραφίας 1.71 έχουμε: $απόκλιση = \frac{1.71-1.692}{1.71} 100\% = 1.05\%$.

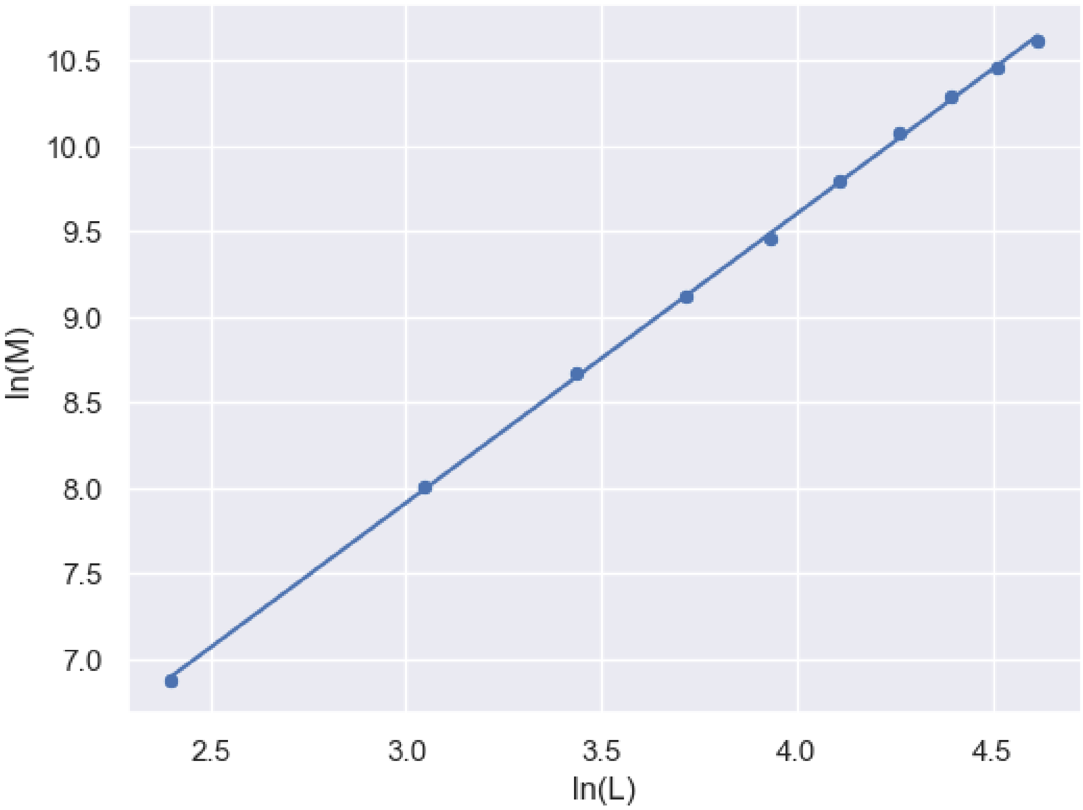

Figure 2 Γράφημα αναμεσά στον λογάριθμο πλευράς L τετραγώνου και του λογάριθμου του αριθμού των σωματιδίων M, καθώς και η ευθεία ελαχίστων τετραγώνων που ερμηνεύει τα δεδομένα.