Agregación limitada por difusión

Pablo Chehade
pablo.chehade@ib.edu.ar
Física computacional, Instituto Balseiro, CNEA-UNCuyo, Bariloche, Argentina

Se simuló un proceso de agregación limitada por difusión en una red cuadrada con condiciones de borde periódicas y se obtuvo una estructura dentrítica. Se calculó su dimensión fractal a partir de dos definiciones: dimensión de masa y dimensión de box-counting, obteniendo $D_1 = 1{,}692 \pm 0{,}003$ y $D_2 = 1{,}53 \pm 0{,}03$, respectivamente.

I. INTRODUCCIÓN

Agregación limitada por difusión (DLA por sus siglas en inglés) es un modelo estándar que busca describir el fenómeno de difusión de partículas libres que al entrar en contacto con un agregado (estructura fija), quedan adheridas. De este modo, el agregado crece en tamaño y su estructura queda determinada por la difusión de las partículas, que a nivel microscópico se manifiesta como un random walk, y las interaccciones de las mismas con el agregado.

Una manera de caracterizar las estructuras resultantes es por medio de la dimensión fractal, la cual generaliza el concepto de dimensión. Si bien existen numerosas definiciones de este concepto, en el presente se considerarán dos de ellas:

- Dimensión de masa: sea M la cantidad de partículas (masa) dentro de un círculo de radio r con origen en el centro de la estructura. En un rango intermedio de r, dicha cantidad se comporta como $M(r) \,\alpha\, r^{D_1}$, donde D_1 es la dimensión de masa.
- Dimensión de box counting: sea N la cantidad de cajas de tamaño d necesarias para cubrir la estructura. Su comportamiento en un rango intermedio de $r = 1/d$ es $N(r) \,\alpha\, r^{D_2}$, donde D_2 es la dimensión box counting.

II. MÉTODO EXPERIMENTAL

Se simuló un DLA con una red cuadrada de tamaño 1024×1024 y 20000 partículas. La condición inicial constó de un agregado en el centro formado por una única partícula denominada 'semilla' y partículas libres distribuídas al azar en toda la red. En cuanto a la evolución del sistema, se tuvieron en cuenta ciertas consideraciones. En primer lugar, puede haber más de una partícula libre por sitio. En segundo lugar, estas partículas no interactúan entre sí, sino sólo con el agregado. En tercer lugar, una partícula queda adherida al agregado quieto si es primer vecino del mismo. En función de las consideraciones anteriores, la evolución se llevó a cabo del siguiente modo: en cada paso de tiempo todas las partículas libres fueron movidas aleatoriamente a las posiciones vecinas a lo largo de los enlaces de la red. Posteriormente, fueron adheridas al agregado aquellas partículas que estén en contacto con la estructura fija a lo largo de los enlaces de la red y a 45°.

III. RESULTADOS

A. Estructura dentrítica

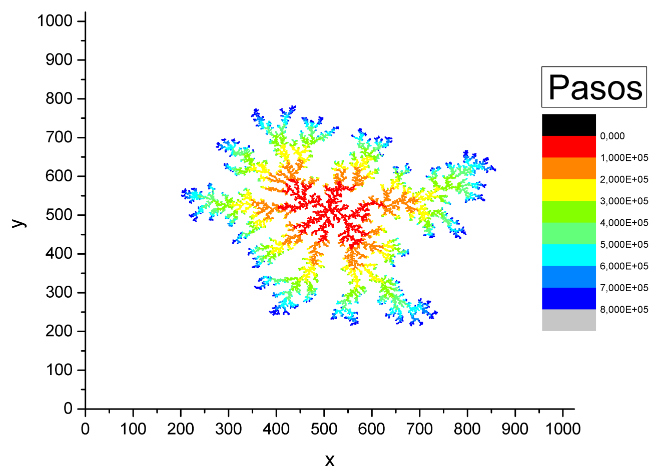

Figura 1: Simulación de DLA de 20000 partículas en una red periódica de 1024×1024. En colores se indicó en qué paso de tiempo se adhirió cada partícula a la estructura

Luego de 800000 pasos de tiempo se adhirieron 18522 partículas. El agregado resultante se grafica en la figura 1. En colores se indicó en qué paso de tiempo fue adherida cada partícula. Se observa que la estructura crece desde el centro, lo cual concuerda con que la semilla se encuentra en esa posición. Además, la estructura es una dendrita autosemejante que no refleja la geometría de la red que la subyace. También se observa que las partículas se adhieren progresivamente en las ramas exteriores. Esto se justifica en la estructura ramificada de la dentrita: es poco probable que una partícula con movimiento aleatorio llegue al centro de la estructura sin ser atrapada en el camino por alguna de las ramas exteriores. Asimismo, el agregado tiene propiedades geométricas de autosimilaridad e invariancia de escala, propias de los fractales. Sin embargo, a diferencia de los anteriores, estas propiedades dejan de cumplirse en las escalas micro y macro, debido a que se hacen evidentes la discretización de la grilla y el tamaño finito de la estructura, respectivamente. Por último, la estructura no llena completamente el espacio de dos dimensiones, pero lo cubre de una manera peculiar que da cuenta de una dimensión intermedia entre 1 y 2, una dimensión fractal.

B. Dimensión fractal

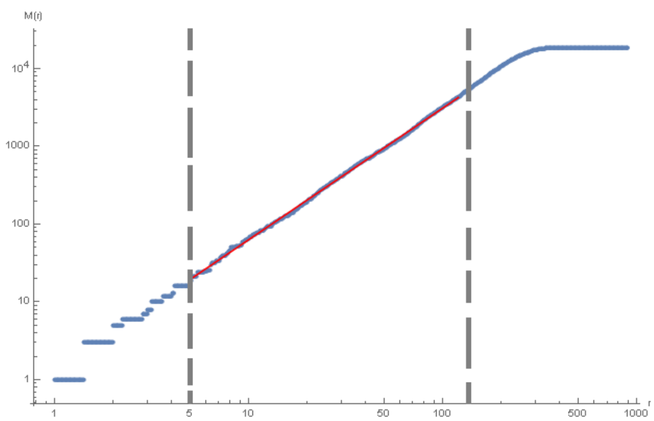

Figura 2: Cantidad de partículas M dentro de un círculo centrado en la semilla en función del radio r del mismo.

Se procede a calcular las dimensiones fractales D_1 y D_2 para la dendrita de la figura 1. En primer lugar, se calculó $M(r)$ para distintos radios. El resultado se grafica en escala "log-log" la figura 2. Se pueden distinguir claramente tres regiones:

- $r < 5$: el comportamiento es no lineal debido a la discretización de la red. Para valores cercanos a 1 se satura en $M(r) = 1$ correspondiente a la semilla.
- $5 < r < 120$: comportamiento lineal sobre el que aplica la definición de dimensión de masa. En esta región se realizó un ajuste lineal de mínimos cuadrados, cuya pendiente corresponde a $D_1 = 1{,}692 \pm 0{,}003$, mayor a 1 y menor que 2.
- $r > 120$: se hace evidente el tamaño finito de la estructura. Para valores mayores a 500 se produce la saturación de $M(r)$ debido a que la dendrita está completamente contenida.

En segundo lugar, se calculó la cantidad de cajas de tamaño d necesarias para cubrir la estructura. Los valores de $N(r)$ obtenidos con $r = 1/d$ se grafican en la figura 3 en escala "log-log". Al igual que $M(r)$, se distinguen tres regiones en el siguiente orden para r creciente: saturación por discretización de la grilla, comportamiento lineal y saturación por tamaño finito de la estructura. En la región lineal se realizó un ajuste de mínimos cuadrados, cuya pendiente es la dimensión fractal $D_2 = 1{,}53 \pm 0{,}03$, mayor que 1 y menor que 2. Este valor es distinto a D_1 calculado anteriormente. Para que los valores sean idénticos habría que repetir los cálculos anteriores para un ensamble de dentritas. Este proceso no se llevó a cabo debido a que el programa tarda demasiado tiempo en ejecutar.

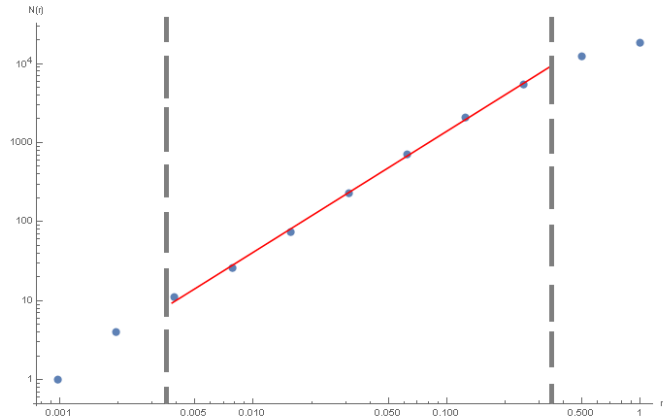

Figura 3: Cantidad de cajas N necesarias para cubrir la estructura en función de $r = 1/d$, con d tamaño de las cajas.