计算物理第18题

PB18000039 徐祺云

一　作业题目

进行单中心DLA模型的模拟 (可以用圆形边界，也可以用正方形边界), 并用两种方法计算模拟得到的DLA图形的分形维数，求分形维数时需要作出双对数图。

二　算法及主要公式

扩散限制聚集（DLA）模型过程简单介绍如下：先在二维正方格子的中心放上一个粒子作为核心, 再在远处随机产生一个粒子并让它作随机的扩散运动, 一旦它进到核心的最近邻位置就停下成为两个粒子组成的核心。此后在远处不断产生新的粒子重复上述过程, 直到成千上万个粒子聚集，得到的就是 DLA 生长图形。

具体程序实现思路如下：取二维正方形边界作为生长范围，在正方形的正中央放置一个粒子作为核心。在正方形的边界上随机一个位置，作为新加入粒子的起始点，并开始二维随机游走。若该粒子与核心相接触，则将其加入核心，成为团簇；若该粒子走出了边界，则舍弃粒子。完成加入核心或者舍弃粒子操作后，重新随机生成一个粒子，过程重复如上，即可得到结果(新粒子加入边界和判定舍弃粒子的边界相同，都为该正方形区域外边界)。

这里用两种方法来模拟得到的 DLA 图形的分形维数：

1. 盒计数法

定义ε 为度量的尺寸，例如将尺寸取为 $\varepsilon = 1/4$ ，意味着边长分成等

长的四段，区域被分为十六块；定义$N(1/\varepsilon)$为计数网格中含有图形像素的方格数目，直到最小的网格尺寸达到像素为止。

这里为了选取网格的方便，可以设置初始的二维区域为$512 * 512$，那么，ε 就可以是 $1, 1/2, 1/4, 1/8, 1/16\cdots$, 直到降到 $1/512$。将一系列 $N(\varepsilon)\Delta\varepsilon$ 数据作 $\ln N(\varepsilon) \sim \ln(1/\varepsilon)$ 图，如能得到一条直线，它说明 $N(\varepsilon)$ 和 ε 有如下关系:

$$N(\varepsilon) \sim (1/\varepsilon)^D$$

即直线的斜率 D 是图形的分维。

2. Sandbox 法

将一系列尺寸 $r(>1)$ 不断增大的方框覆盖到分形图形上，计数不同方框中象素数 N (即以象素为测量单元)，在 $\ln N \sim \ln r$ 图上如有直线部分，则在此范围内存在: $N \sim r^D$, 直线部分的斜率即分形维数 D。

将生长中心选为方框中心，从图像的中心位置出发，将正方形边长逐步扩大，计数 N ，最后绘制 $\ln N - \ln r$ 散点图并拟合，得到直线的斜率即为分维。

三　计算结果与分析

运行$main.c$ 。其中选用二维区域大小$512 * 512$(方便盒计数法选择参数)，初始种子为1052319784。

将生长核心放在正中央，取粒子数为1000时：

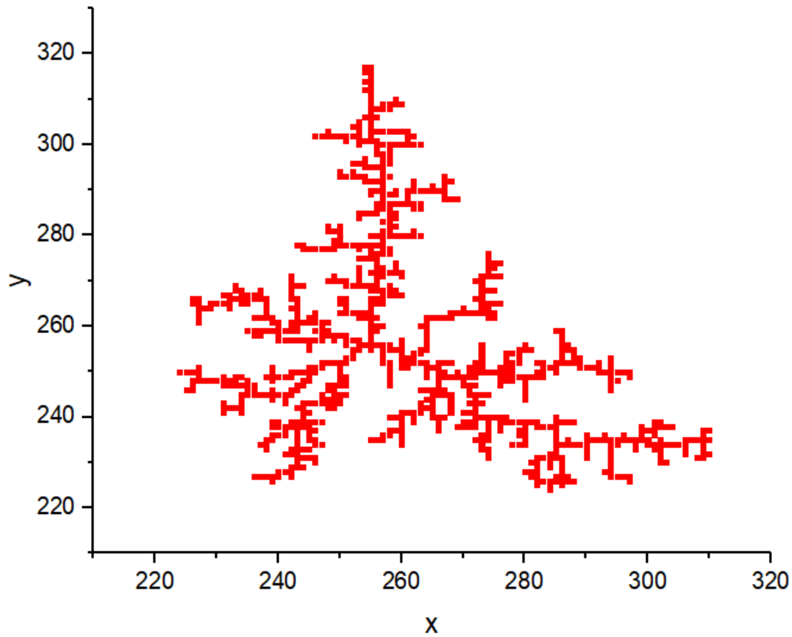

图 1: $N = 1000$时的DLA图样

可初步见有DLA图形生长的趋势，但只在中心区域附近，效果不明显。将粒子数取为5000时：

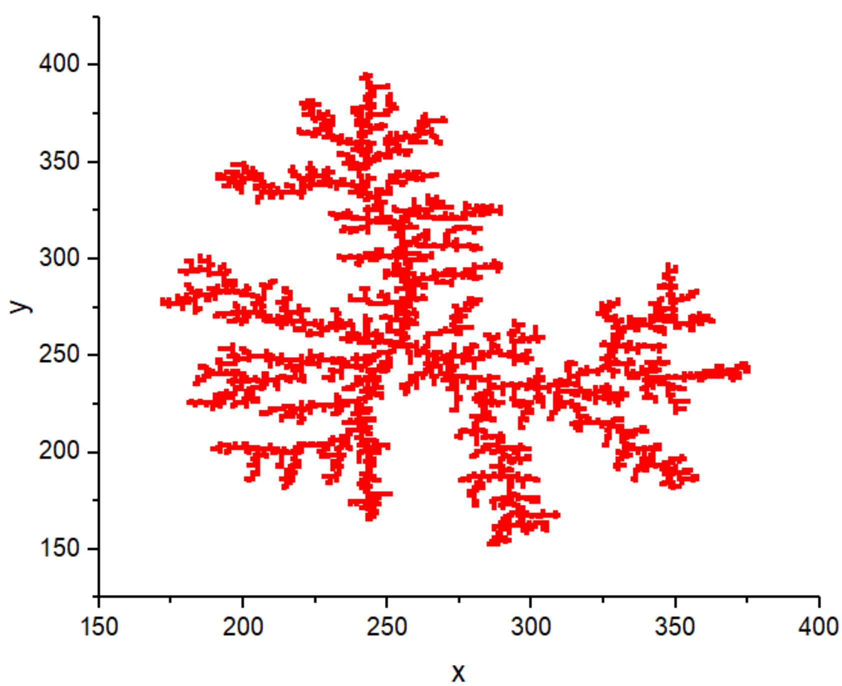

图 2: $N = 5000$时的DLA图样

可见对于$512 * 512$的二维网格区域,$N = 5000$时已经可以得到较好的DLA 生长图样。

下面选取粒子数为11000（为什么选取11000呢?因为如果粒子数过多，会堆积到边界上，且与初始种子值有关，故这里在保证不堆积到边界的情况下取一个较大的N），绘制生长图样如下：

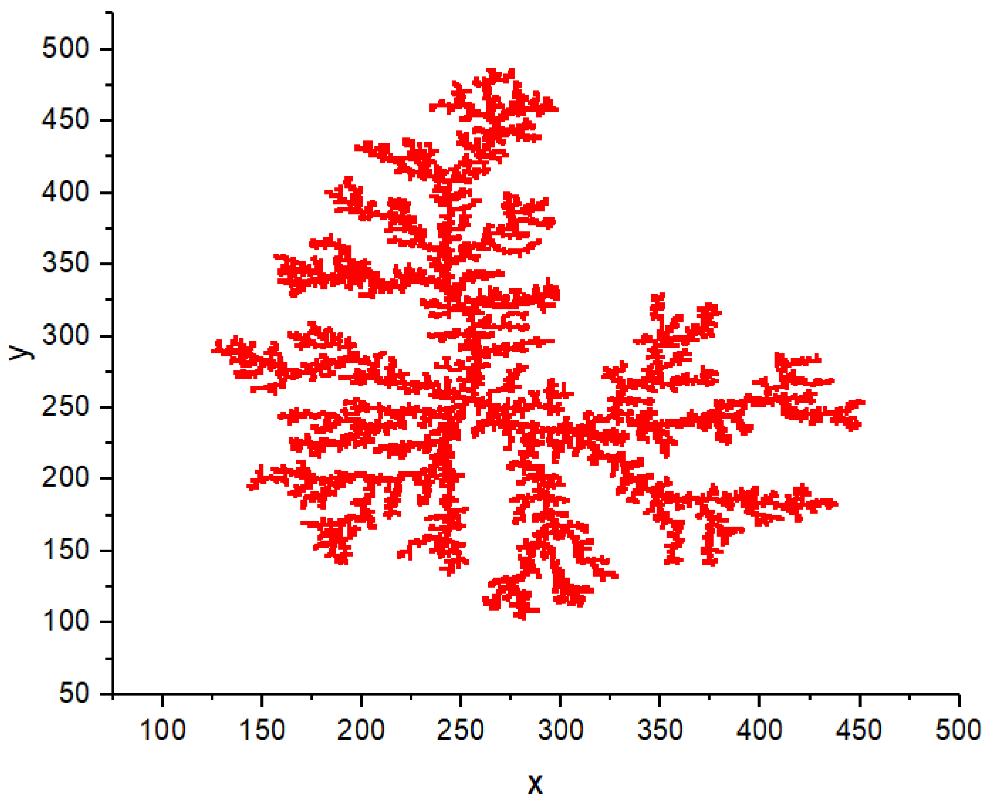

图 3: $N = 11000$时的DLA图样

倘若继续取大粒子数，例如取$N = 12500$，DLA 聚集会生长到边界上，此时图样就不能采用来计算分形维数了：

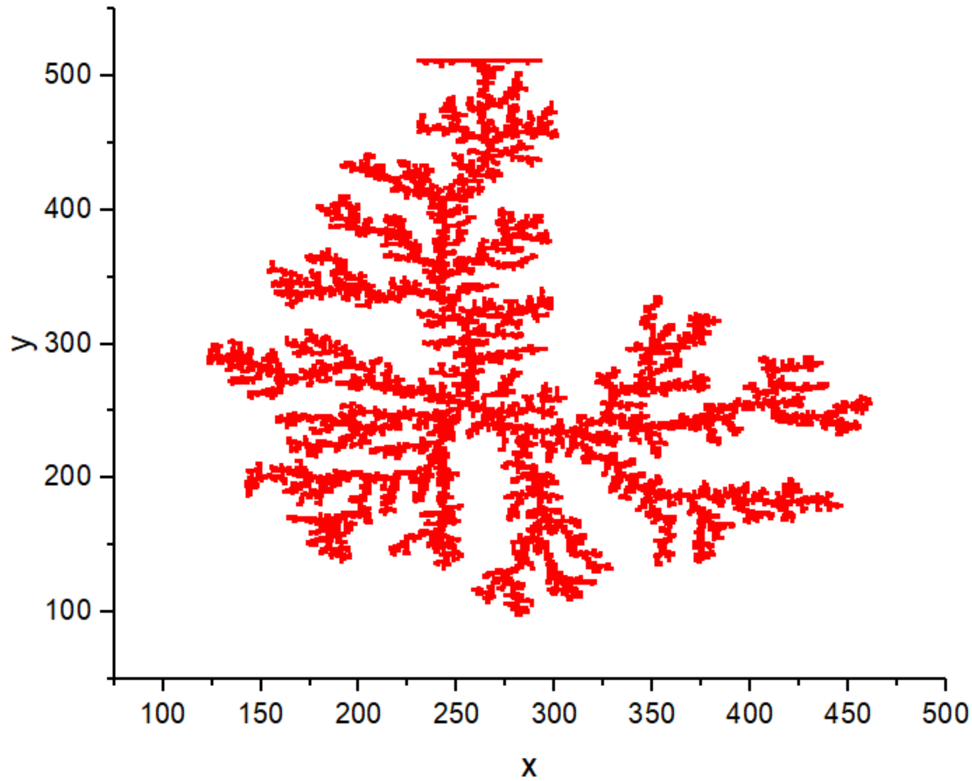

图 4: $N=12500$时的DLA图样

可见 DLA 生长图形与上边界接触并且堆叠，一方面是因为初始种子所决定；另一方面由粒子生成与移动规则所影响。可见应当选取适当大小的粒子数N，使得DLA图样生长清晰且不触边，尽量减小盒计数法、Sandbox法求分形维数的误差。

下面取$N=11000$来用两种方法计算分形维数：

盒计数法

ε 取 $1,\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{8},\frac{1}{16},\frac{1}{32},\frac{1}{64},\frac{1}{128},\frac{1}{256},\frac{1}{512}$ ，绘制 $\ln N(\varepsilon)\sim\ln(1/\varepsilon)$ 双对数图如下：

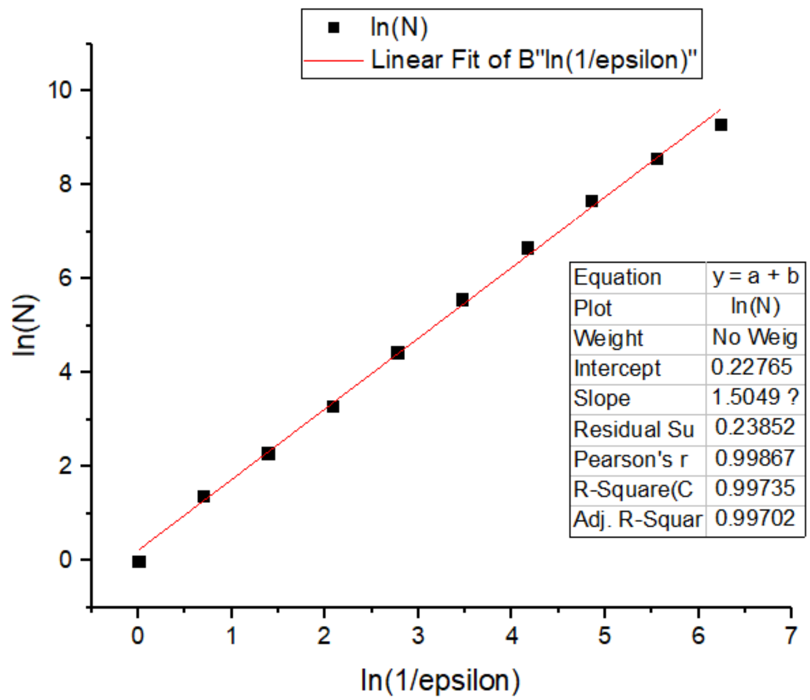

图 5: 盒计数法双对数图

拟合得到的斜率k为1.5049，即分形维数约为 1.5049

Sandbox法

取 r 从 1 到 449，步长为4，绘制 $\ln N \sim \ln r$ 双对数图如下：

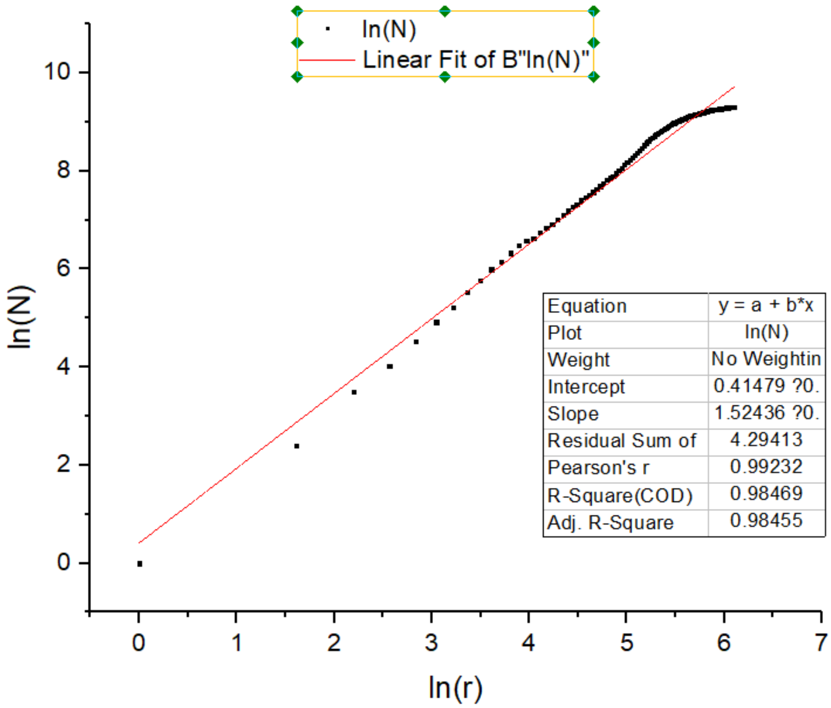

图 6: Sandbox法双对数图

拟合得到的斜率k为1.5244，即分形维数约为 1.5244

比较两种方法，发现得到的分形维数在1.5左右，相差不是很大，其中盒计数法拟合的$R^2 = 0.99702$，说明拟合误差小，数据点比较符合直线分布，因此这个结果比较可信；$Sandbox$法拟合的$R^2 = 0.98455$，且明显可见数据点后端有弯曲，误差可能略大一些。

四　结论

本次实验用正方形边界进行了单中心的DLA模拟，在$512 * 512$像素大小的网格上，分别取N=1000, 5000, 11000, 12500，绘制了他们的DLA生长图形，得到了较为良好的结果。然后采用了N=11000的DLA生长数据，分别使用盒计数法、Sandbox计数法两种方法，绘制了双对数图，拟合得到了DLA图形的分形维数：1.5049,1.5244。