FRUH Arthur SCHOTT Antoine

TP Simulation Numérique: Diffusion-limited aggregation

1 Présentation du projet

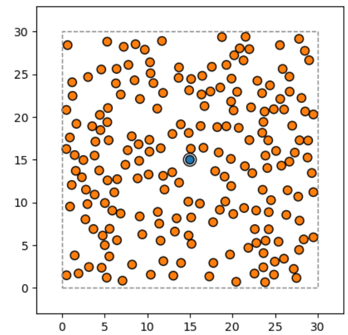


Figure 1: Situation initiale avec $L = 30$, 201 particules, un lien entre dimère de 1,5

On considère un système de $N = 201$ particules. une de ces particules est bleue, elle à une masse différentes des autres particules, une petite vitesse $|\vec{v}_{bleue}| \ll |\vec{v}_{orange}|$ et est positionné au centre de la boite au départ (Figure 1.). Les autres particules sont réparties aléatoirement avec une masse arbitraire $m_{orange} = 1$ et une vitesse correspondant à une énergie cinétique $k_b T = 5$.

Lorsqu'il y a collision entre l'agrégat (la ou les particules bleue) et un monomère, la transformation ci-dessous est effectué :

1. créer un nouveau dimère (et la liaison correspondante)
2. mettre à jour la norme de vitesse de la nouvelle particule agrégée ($|\vec{v}| *= \sqrt{\frac{m_{orange}}{m_{bleue}}}$)
3. mettre à jour la masse de la nouvelle particule agrégée ($m_{orange} \longrightarrow m_{blue}$)

Il y a alors une particule en plus dans l'agrégat. Il va cloître jusqu'à contenir toute les particules. Nous cherchons à étudier la forme de l'agrégat dans la situation finale.

2 Présentation du code

Nous avons d'abord modifié l'initialisation des monomères: la première particule qui est la première particule bleue à une vitesse fixée pour satisfaire la condition $|\vec{v}_{bleue}| \ll |\vec{v}_{orange}|$ Nous avons créé une nouvelle classe `Aggregate` pour gérer ces nouvelles particules:

- la fonction `__init__` permet l'initialisation des monomères et de l'agrégat en plaçant la particule bleue au centre
- la fonction `Dimer_paire_time` qui calcule le temps t de la prochaine collision entre dimère.
- la fonction `compute_next_event` qui renvoie le prochain événement entre une collison : monomère-mur,monomère-monomère et particule d'un dimère.
- la fonction `compute_new_velocity` qui calcule la nouvelle vitesse en fonction du cas de collision: particule-mur ou particule-particule. Dans ce dernier cas il y a le sous-cas collision monomère-agrégat qui nous intéresse plus particulièrement.
- Pour transformer selon les règles dictées partie précédente on appelle la fonction `aggregation`.

Nous avons aussi créé le fichier `event_code_classAggregation.py` qui lance la simulation et différencie bien la couleur entre les particules et l'agrégat.

3 Résultats

3.1 Impact de la masse des particules bleues

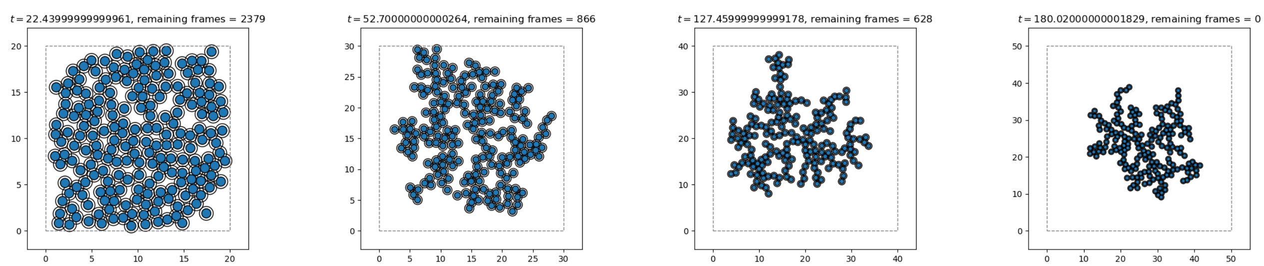
(a) $m_{bleue} = 10000$

(b) $m_{bleue} = 1$

Figure 2: Situations finales pour $L = 30$, avec 201 particules, m_{bleue} variant entre 1 et 10000 et un lien entre dimère de 1,5

Commençons par faire varier la masse : on remarque que pour $m_{bleue} \gg m_{orange}$ la forme finale de l'agrégat a une forme de fractale (a). Ce qui est moins le cas si $m_{bleue} = m_{orange}$ (b), car les particules s'ajoutant à l'agrégat ne réduisent pas leur vitesse. Cela déforme l'agrégat et permet a plus de particules de se connecter au centre de l'agrégat: on observe donc moins bien les ramifications.

3.2 Impact de la taille de la boite



(a) $L = 20$

(b) $L = 30$

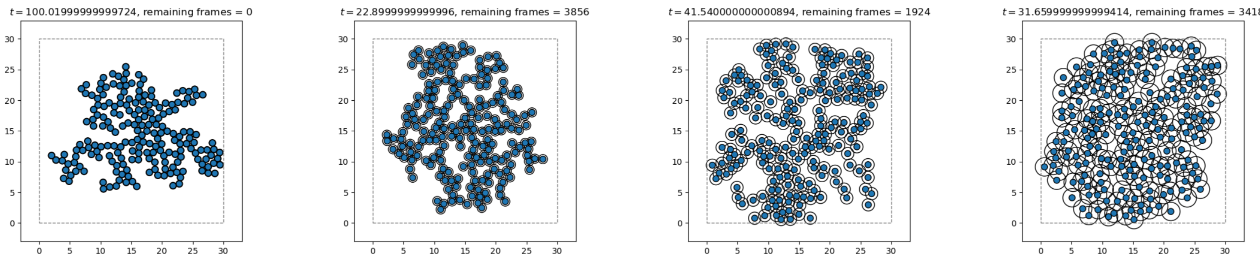
(c) $L = 40$

(d) $L = 50$

Figure 3: Situations finales pour L variant entre 20 et 50 ,avec 201 particules, $m_{bleue} = 10000$ et un lien entre dimère de 1,5

En faisant varier la taille de la boite on remarque que plus la boite est grande plus les ramifications de la fractale sont visibles. De plus en dessous d'une certaine taille les ramifications sont très difficiles à discerner (a).

3.3 Impact de la taille du lien entre les dimères



(a) $L_d = 1.1$ (b) $L_d = 1.5$ (c) $L_d = 2$ (d) $L_d = 3$

Figure 4: Situations finales pour $L = 30$ avec 201 particules, $m_{bleue} = 1000$ et un lien entre dimère l_d variant de 1,1 à 2

Jouons maintenant sur la taille du lien entre les particules formant un dimère : Si le lien est très faible (a) on voit très nettement la forme fractal. Dans le cas contraire, lorque le lien est très grand on ne voit presque plus la forme de fractale (d).

(a) $L_d = 1,5$ (b) $L_d = 2$

Figure 5: Situations finales pour $L = 30$ avec 201 particules, $m_{bleue} = 1$ et un lien entre dimère l_d variant entre 1,5 et 2

Un autre cas intéressant est lorsque $m_{bleue} = m_{orange}$: un lien entre les particules plutôt grand permet de plus s'étendre et ainsi contrebalancer la conséquence d'une masse plus faible. Ainsi la situation final (b) ressemble plus à une fractale que (a).