

# 计算物理A第十八次作业

王锐泽 PB18020766

## 1 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。

## 2 实现方法

- DLA生长模拟

DLA的想法是存在若干生长中心,外界的粒子从边界上生成并且进行随机游走,若触碰到生长中心,则停下游走形成团簇,后续的粒子若碰到团簇就被粘住,形成一个生长的图案。

本次实验中采取的算法如下:

建立 $(N+1) \times (N+1)$ 背景网格,使用二维数组  $cnt[N+1][N+1]$ 来记录生长情况。生长中心的对称中心定在 $cnt[N/2][N/2]$ 。程序初始化时, $cnt$ 数组全部置零(表示未生长),然后给一个 $(2d+1) \times (2d+1)$ 大小的生长中心赋值为1,表示此处是生长的核。接下来,不断随机地从边界生成粒子,让粒子随机游走,判断是否游走出边界,若走出边界,则开始新粒子的进入,若下一步就会和值为1的矩阵元素重合,则此处也将矩阵元素从0变为1,表示粒子生长到此处。调节模拟中投入的粒子总数 $NP$ 得到不同尺寸的DLA图案。本次实验设置 $N=400, d=1, NP=10^6$ ,运行时长较长。

- sandbox计数法

sandbox法是一种很好的计算单中心生长的分形维数的方法。其原理是计算一系列边长为 $r$ 的盒子中的生长粒子个数 $N$ 。理论上,对于分形图形,有 $N(r) \sim r^D$ 。做出双对数图,可以通过直线斜率求得分形维数 $D$ 。

本次实验中采取的算法如下:

在得到生长矩阵 $cnt$ 之后,采用从中心 $cnt[N/2][N/2]$ 开始往外计数的方法,以步长为1开始计数并将每一步对应的数据输入txt文件,直到将包裹这个图形的最小方形给计数完毕就退出循环。

- 回转半径法( $R_g$ 法)

回转半径法也是一种计算自相似图形分形维数的方法。计算回转半径公式如下:

$$R_g^2 = \frac{\sum_{i=1}^N r_i^2}{N}$$

根据计数的个数(面积) $N$ 和 $R_g$ 满足 $N \sim R_g^D$ 来得到分形维数。

本次实验中采取的算法如下:

在得到生长矩阵之后,开始和sandbox法一样从中心开始一层一层计数,计数得到的个数为 $N$ ,同时在计数过程中可以计算得到不同 $N$ 下的回转半径 $R_g$ 。最后将各个数据输出到txt文件中。值得一提的是为了避免生长的边缘效应造成的误差,我将输出控制在计数的粒子数为总生长的0.7。

### 3 程式说明

- DLA.c

这是一个用于生成DLA点阵上的生长与否信息的文件的程式。同时具有输出两种计算分形维数方法相关的数据的功能。

- rdm.h

这是一个包含了使用16807产生器生成指定长度的 $[0, 1]$ 上均匀分布随机数函数的头文件。

```
double rdm()
```

该函数输出值为 $(0,1)$ 上的随机数，生成的方法是线性同余法，具体是16807生成器实现。使用的初始种子为 $I=46984$ ，然后每一次能采用静态变量的方法记录 $I_n$ 的值，实现每一次输出值都不同的效果。

- size\_(N+1)\_(# of particles).txt

这是输出背景矩阵为 $(N+1) \times (N+1)$ 维，总共生长粒子数为(# of particles)的数据txt文件。

- sandbox.txt

这是输出盒子边长 $r$ （第一列）和像素计数 $N$ 的数据文件。

- Rg.txt

这是输出面积（第一列）和回转半径 $R_g$ 的数据文件。

### 4 计算结果

#### 4.1 DLA生长图示

采取背景网格为 $401 \times 401$ ，不同生长阶段图解如下：

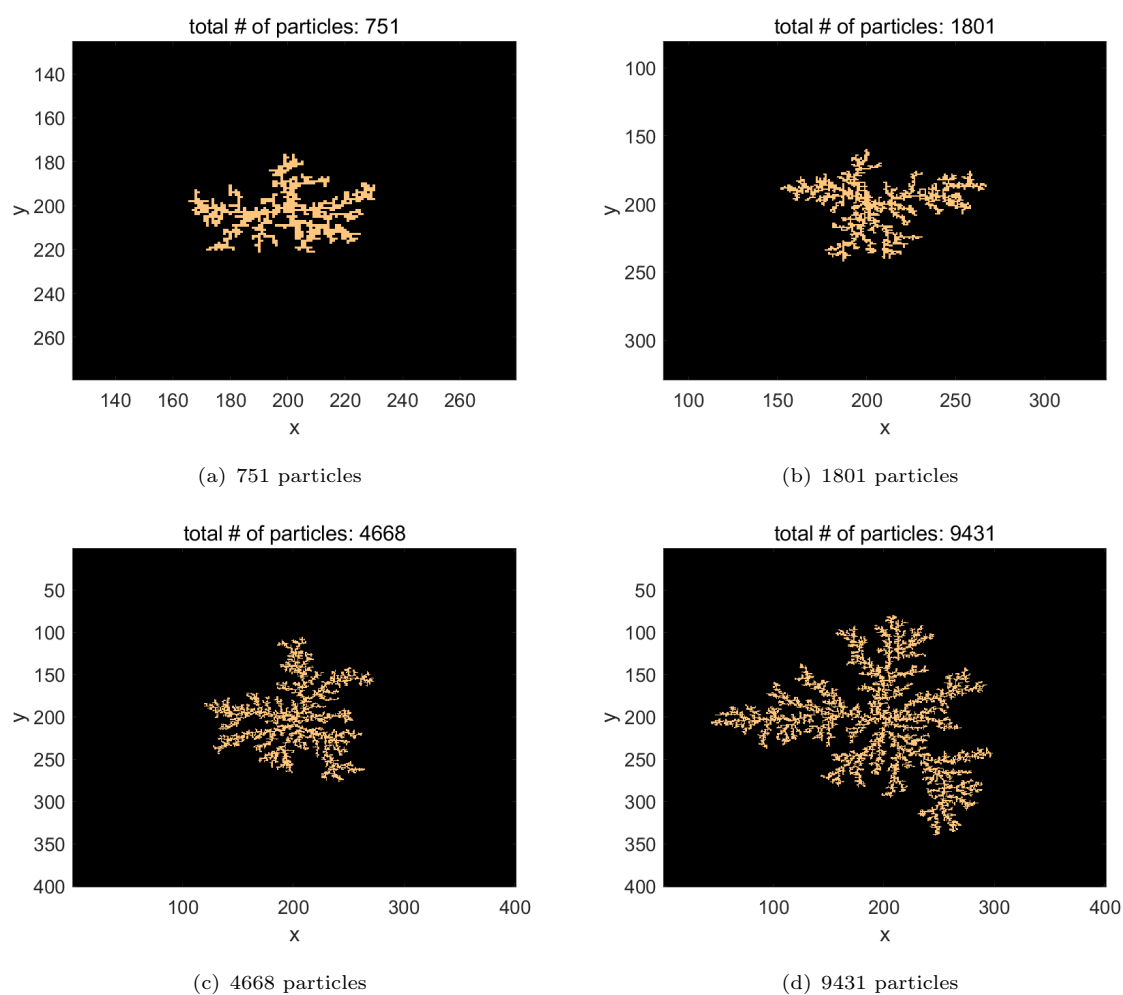


图 1: 不同阶段的DLA生长

可以看出粒子清晰地体现出延展方向，呈支状生长。

笔者还尝试了二中心的生长情况：

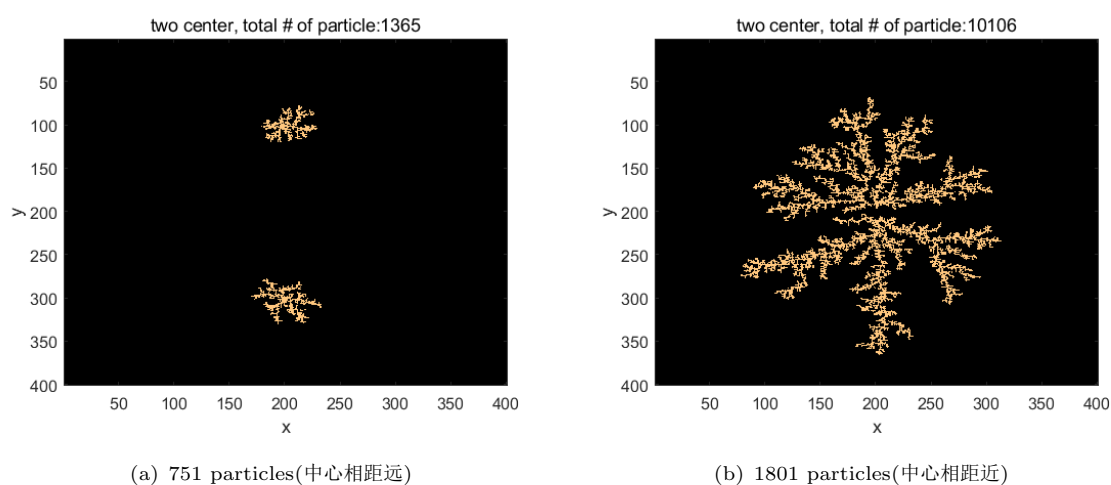


图 2: 不同阶段的双中心DLA生长

有趣的是发生了相规避生长的情况，两个团簇不会融合成一个，而是各自占据一半地盘向外延伸。

## 4.2 分形维数计算

### 4.2.1 sandbox法

先对上述的单中心生长进行计算，采用sandbox法得到结果如下：

$$D = 1.679$$

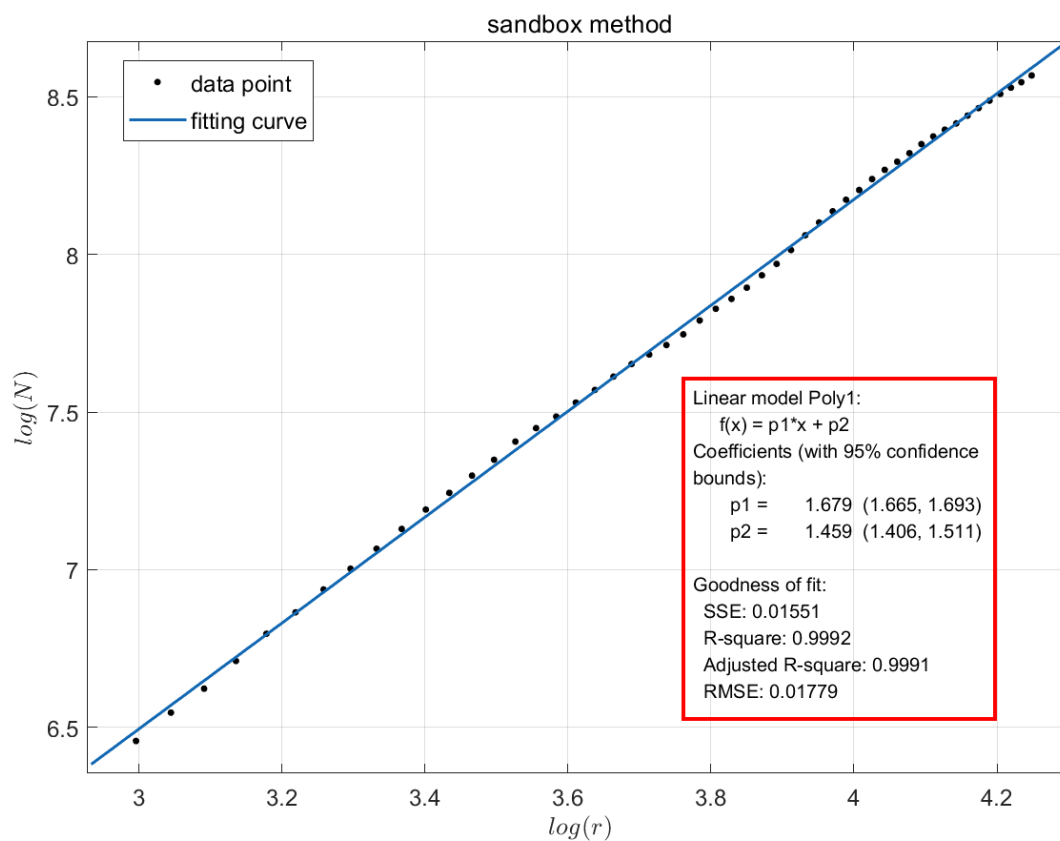


图 3: sandbox method

理论上DLA生长的分维数为1.60~1.70，我们的计算和这个符合。

接着对双中心(图2 (b))进行分维数计算：

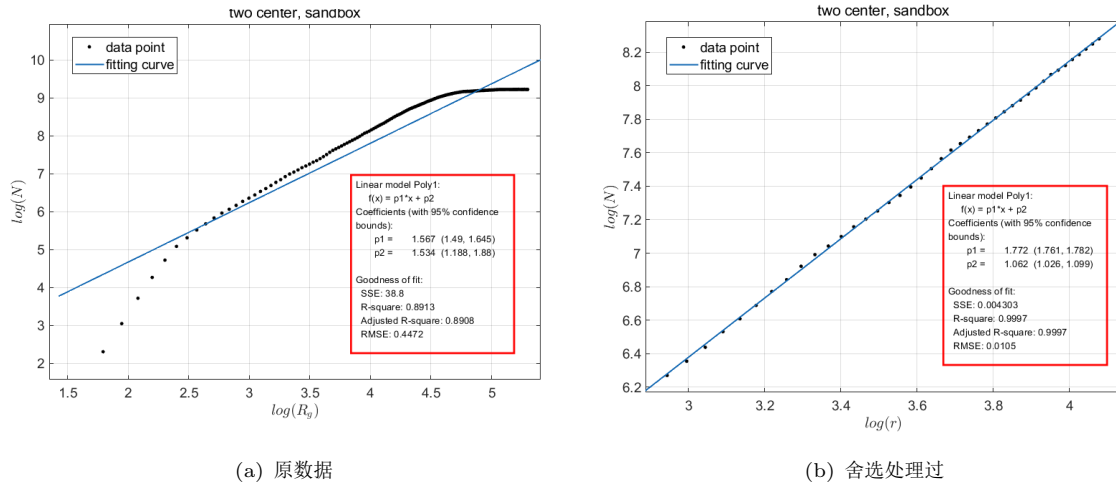


图 4: 双中心的分维数计算

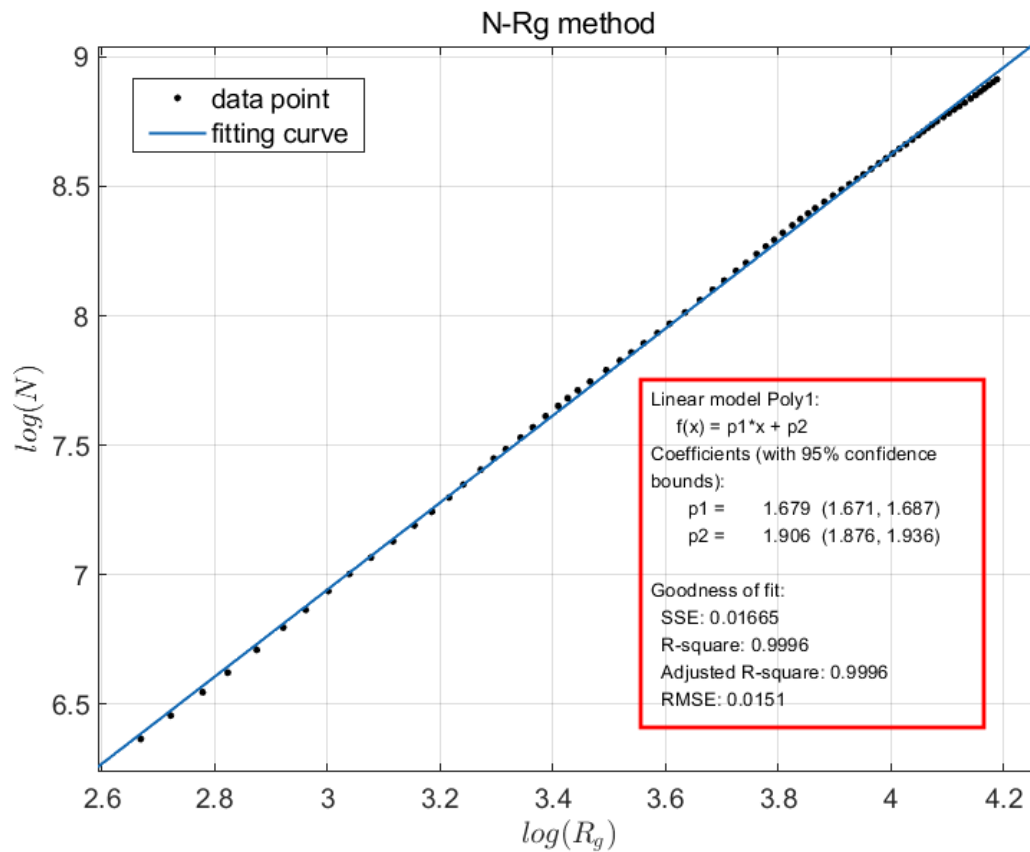
我此时选择的双中心分别为 $cnt[N/2 - 10][N/2]$ 和 $cnt[N/2 + 10][N/2]$ , 所以仍然从 $cnt[N/2][N/2]$ 开始sandbox计数仍然是合理的。只是由于不在是单中心了, 线性区域变得更窄了, 经过挑选线性区域的图(b)得到的分维数为1.772, 略大于理论值, 这也一定程度上体现出sandbox法比较适合单中心生长图形。

#### 4.2.2 回转半径法

先对上述的单中心生长进行计算, 采用回转半径法得到结果如下:

$$D = 1.679$$

这得到的分维数和sandbox法一样, 所以说明这个图形分维数约为1.679。

图 5:  $R_g$  method

接着对双中心(图2 (b))进行分维数计算:

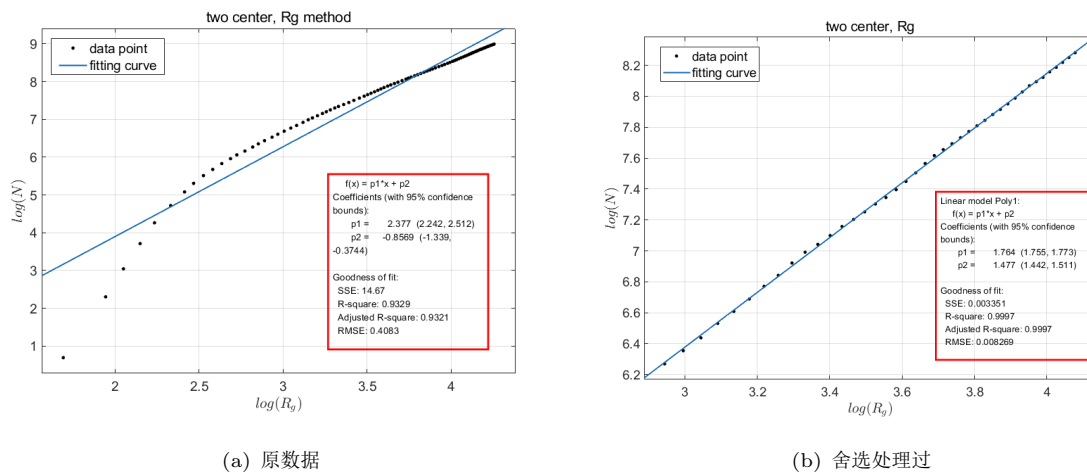


图 6: 双中心的分维数计算

和sandbox法出现类似的偏离线性情形, 原因可能是笔者在计算的时候把 $(N/2, N/2)$ 当成生长中心计算, 实际上在多中心时采取下列的公式会更加准确一点:

$$R_g^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (r_i - r_j)^2}{2N(N-1)}$$

此处计算得到的分维数为：

$$D = 1.764$$

略大于理论值范围。

## 5 总结

- 扩散限制凝聚是一个模拟薄膜生长，自然沉积过程的很好的模型，具有丰富的物理意义。本次实验通过二维DLA的模拟，得到了其分维数和基本图形性质，加深了理解。
- 本次实验采用固定边界，所以最开始生长过程粒子游走到触碰团簇的概率小，需要投入很多粒子，等待时间长。一个比较好的改进方法是将固定边界变成不断变化的生长边界，始终保持比最大团簇尺寸大上数圈，然后以此为边界生长。