Física Computacional: Resolución problema 1, guía 5

Martín Famá

Fecha de entrega: 17/09/2020

1 Resumen

Se implementó un programa en C++ para simular el proceso DLA (difussion limited aggregation). Un conjunto de partículas libres confinadas a una grilla periódica evolucionan mediante un random walk en dicha grilla. Una semilla inicial es colocada en la grilla. Si una partícula entre en contacto con la semilla, se pega y pasa a formar parte del agregado. Las estructuras resultantes son fractales de gran complejidad y belleza. En este trabajo analizaremos algunas características de un agregado resultante.

2 DLA - Agregado dendrítico

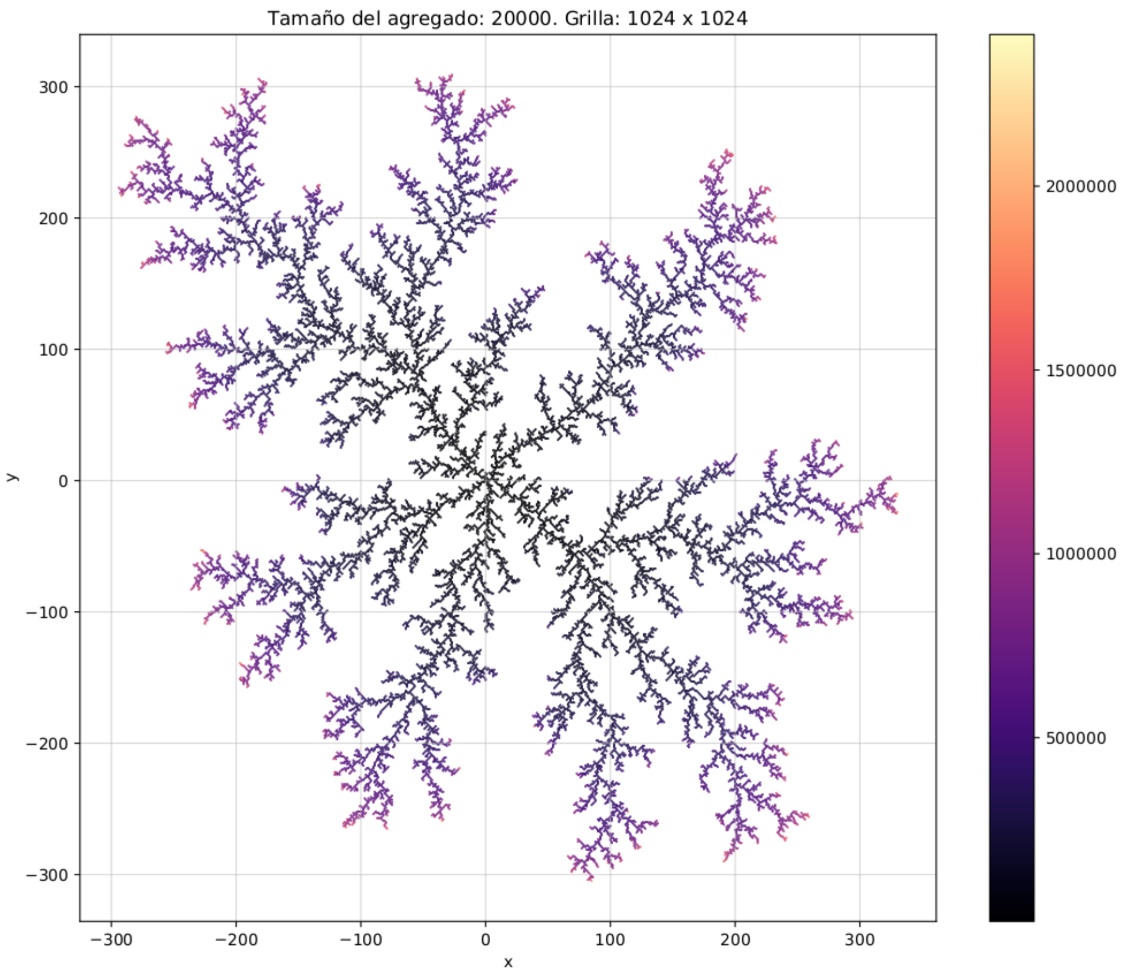


Fig. 1: Agregado que se generó a partir de 20.000 partículas libres en una grilla de 1024 x 1024. A esta estructura se la denomina dendrita.

En la figura 1 se puede ver un agregado dendrítico resultante de 20.000 partículas inicialmente distribuidas uniformemente en una grilla de 1024 x 1024. La semilla inicial fue un punto en el medio de la grilla, que se puede ver claramente como el origen de la dendrita. La barra de colores representa el tiempo en que se pegó cada partícula al agregado, medido en número de iteraciones desde el inicio de la simulación. Vemos que la mayoría de las partículas se pegan relativamente rápido, pues la mayoría de la estructura tiene un color que indica un crecimiento en no más de 500.000 iteraciones. Es esperable que las últimas partículas libres tarden mucho tiempo en pegarse, pues estadísticamente cuando quedan menos partículas el valor esperado de partículas pegadas por iteración disminuye.[1]

3 Dimensión fraccionaria

En la figura 2 se puede ver como aumenta la masa del agregado (contado como cantidad de partículas pegadas) en función del radio, medido desde el punto de la semilla inicial. Vemos que para radios chicos ($r < 10$), la masa total no presenta un comportamiento predecible, ya que a esa escala se hace notar que hay una grilla discreta. Para radios grandes ($r > 200$), llegamos a la escala del agregado desde el punto de vista macroscópico. De hecho podemos ver que la masa deja de aumentar después de $r \approx 300$, que es justamente el tamaño máximo del agregado. Entre estos dos radios hay una región en donde el agregado presenta una forma de fractal, con autosimilitud en su estructura. En esta región, se puede determinar la *dimensión fraccionaria* del agregado. Esta cantidad cae entre 1 y 2, las dimensiones usuales de una línea y de una figura en un plano, respectivamente. En este caso, se determinó que nuestro agregado tiene una dimensión fraccionaria de $d = 1.656$. Se puede ver que en la región de autosimilitud, la masa aumenta proporcionalmente a d de manera constante y predecible.

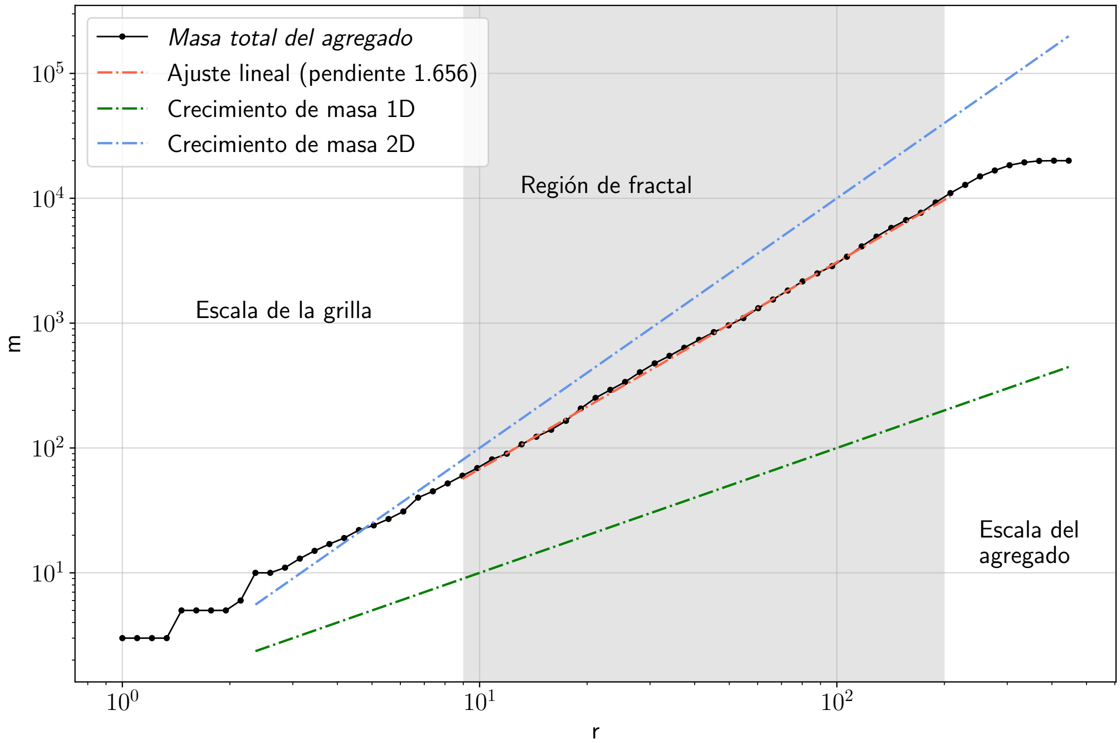
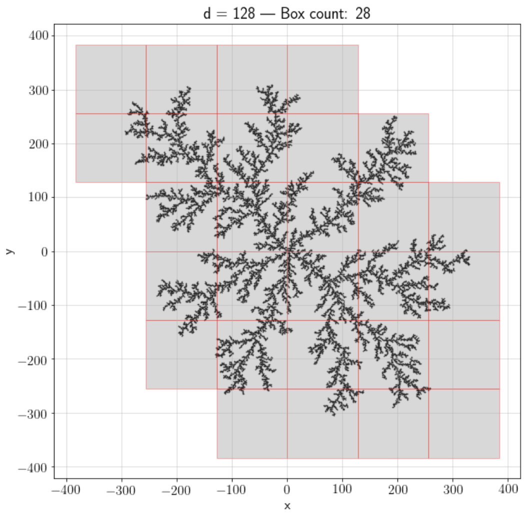


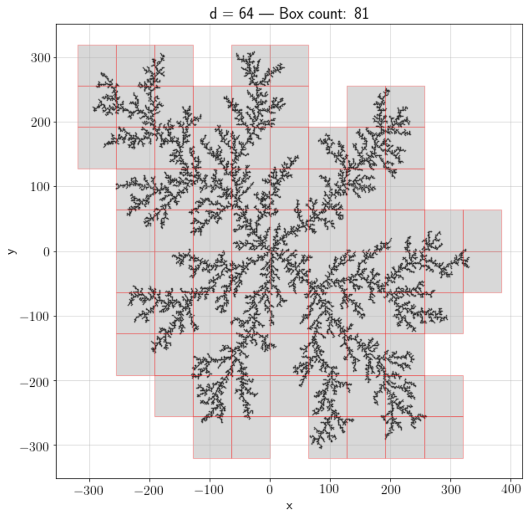
Fig. 2: Crecimiento de la masa del agregado como función de r. Vemos que su masa aumenta más rápido que una línea (pendiente 1), pero no tan rápido como una figura en dos dimensiones (pendiente 2).

[1] Un método común que se implementa para que la simulación no tarde demasiado en las últimas partículas es finalizar cuando queda ya se pegó algún porcentaje de las partículas, como por ejemplo el 95%.

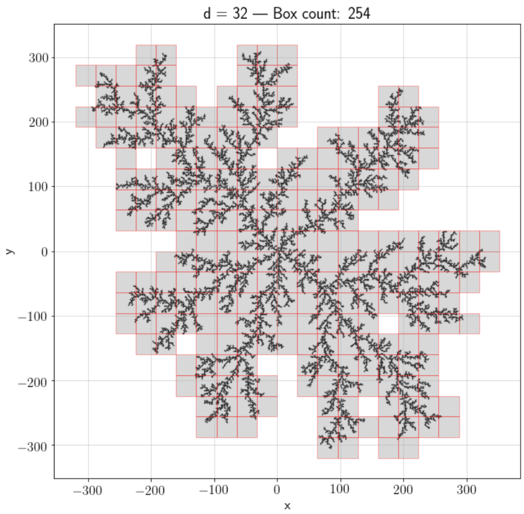
3.1 Box counting



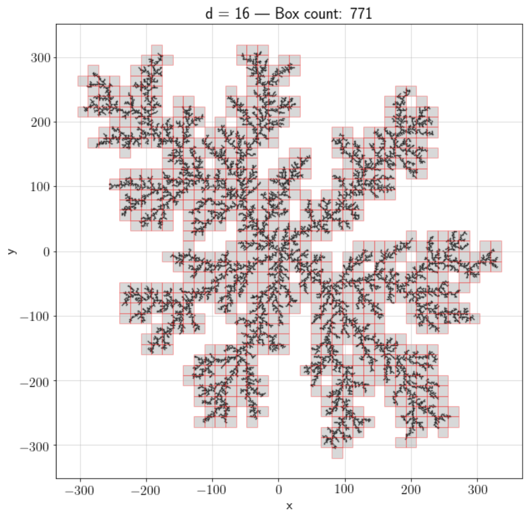
(a) $d = 128$



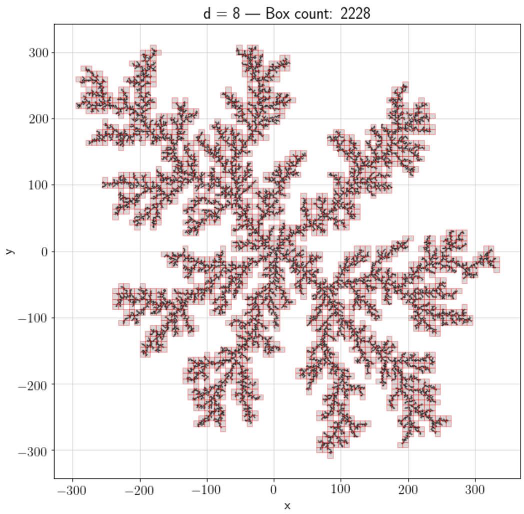
(b) $d = 64$



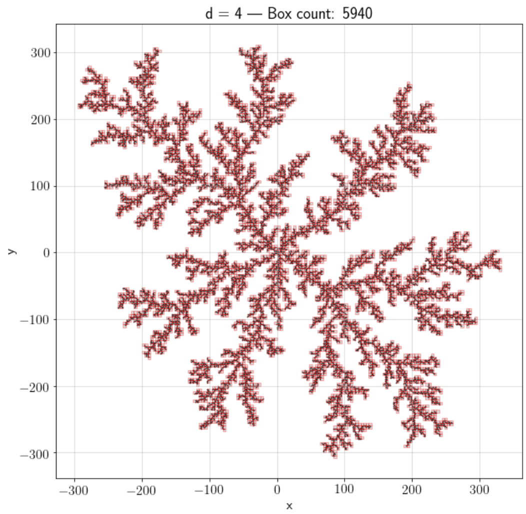
(c) $d = 32$



(d) $d = 16$



(e) $d = 8$



(f) $d = 4$

Fig. 3: Método de box counting con distintos tamaños de cajas

En la figura 3 se puede ver el método box counting aplicado a nuestro agregado, con distintos tamaños de cajas. Vemos que para d grande (de la escala del agregado), no nos dice mucho, pero al ir disminuyendo d, se presenta información más detallada sobre la densidad de la estructura, hasta inevitablemente llegar a $d = 1$ (no se muestra) en donde redundandemente reproducimos el agregado.Código implementado en Python.

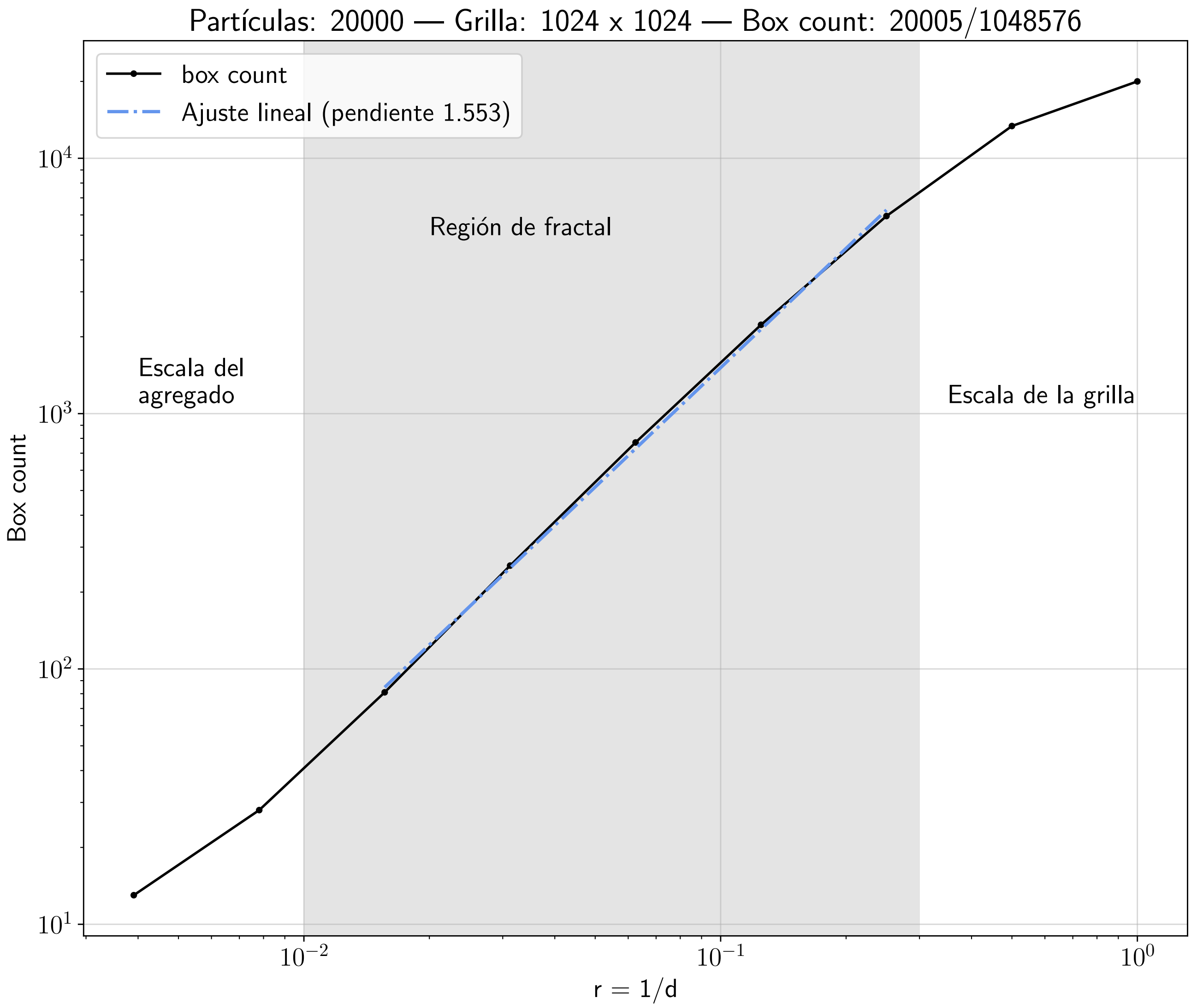


Fig. 4: Cantidad de cajas en el método box counting en función de $r = 1/d$, es decir la *resolución*.

En la figura 4 se pueden ver la cantidad de cajas contadas en función de la *resolución* $r = 1/d$. Vemos que como en el método en que se calculaba la masa del agregado en función del radio, acá tenemos una región lineal en donde se puede determinar la dimensión fractal, que en este caso dio $D = 1.553$.

Uno se podría preguntar porque la dimensión fractal nos dió distinto para el método box counting que para el método de contar masa en función del radio ($D = 1.656$). La realidad es que tenemos una resolución limitada, y entonces habrá una pequeña variación sobre el valor teórico $D = 1.6$ para un agregado de estas caracterísicas pero de resolución infinta (un zoom in eterno se podría hacer). Una manera de remediar esto es generar varios agregados (recordamos que son *random* walks las trayectorias de las partículas, con lo cuál obtenemos distintos agregados), calcular D para cada uno, y promediar. Efectivamente, en un ensemble de 20 agregados, obtenemos $D = 1.55997... \approx 1.6$, con una desviación estándar de $\sigma = 0.01$ (los D de cada agrgeado calculados con el método de box counting).