

8. Übungsblatt zu Computersimulationen SS 2006

Schreiben Sie ein Programm zur Erzeugung eines **Diffusion-Limited-Aggregate** Clusters auf einem zweidimensionalen, quadratischen Gitter der Kantenlänge L . Zu Beginn der Simulation wird der Platz in der Mitte mit einem Teilchen ('Seed') besetzt. Es wird dann ein weiteres Teilchen in eine Zelle gesetzt, welche auf einem Kreis mit Radius R_s vom Zentrum liegt. Dieses Teilchen kann frei diffundieren, also einen unbiased random walk in zwei Dimensionen ausführen. Das Teilchen hüpft dabei zufällig von einem nächsten zum anderen nächsten Nachbarn. Das Teilchen kann so lange diffundieren, bis es entweder am Cluster 'hängen' bleibt, also einen freien Platz in der unmittelbaren Nachbarschaft eines bereits vom Cluster besetzten Platzes einnimmt, oder einen Abstand $R_d > R_s$ vom Zentrum überschritten hat. In diesem Fall wird das Teilchen vernichtet und ein neues im Abstand R_s vom Zentrum erzeugt. (Das Verhältnis R_d/R_s bleibt während der Simulation unverändert.) Daraus ergibt sich der folgende Algorithmus:

1. Starten Sie mit einem leeren Quadratgitter der Seitenlänge L und besetzen Sie den mittleren Gitterplatz mit einem Teilchen.
2. Die aktuelle Größe des Aggregats sei durch den Radius R_{max} gegeben. Setze ein Teilchen auf einen zufällig gewählten Platz, welcher den Abstand $R_s \lesssim R_{max}$ vom Ursprung hat, und lassen Sie es zu einem zufällig gewählten Nachbarplatz hüpfen.
3. Wenn das Teilchen einen Nachbarplatz des Aggregats erreicht, so wird es dem Aggregat hinzugefügt und R_{max} wird, wenn nötig, erhöht (und damit auch R_s). Überschreitet das Teilchen den Abstand R_d ($R_d > R_s \lesssim R_{max}$), so wird es vernichtet.
4. Iterieren Sie 2 und 3 bis das Aggregat aus N Teilchen besteht.

Betrachten Sie nun die Aggregatmasse $M(r)$, welche in konzentrischen Kreisen vom Radius r um das Anfangsteilchen enthalten ist. Das entsprechende Volumen $V(r)$ ist durch die Gesamtzahl der Zellen innerhalb des Kreises r gegeben und damit auch die zugehörige Dichte $\rho(r) = M(r)/V(r)$. $M(r)$ ist dabei die Zahl der Aggregatteilchen im Volumen $V(r)$. Die fraktale Dimension folgt aus

$$M(r) \propto r^{D_f}, \quad r \leq R_{max},$$

oder

$$D_f(r) = \ln(M(r))/\ln r.$$

Stellen Sie die fraktale Dimension als Funktion von r dar. Visualisieren Sie den Programmablauf.