



Dyfuzja i tworzenie się dendrytów

Jerzy Karczmarczuk

Zakład Informatyki, Uniwersytet w Caen, Francja

1. Wstęp

Wyobraźmy sobie następujące doświadczenie. W przestrzeni wypełnionej cieczą zawieszamy nieruchome, lepkie ziarenko zwane dalej jądrem, następnie w pewnej odległości od niego tworzymy drugie ziarenko, które może swobodnie się poruszać. Ten drugi punkt podlega ruchom Browna, „dyfunduje” losowo po całej przestrzeni, jak na poniższym rysunku na lewo. W końcu dotknie jądra, przykleja doń, nieruchomieje i powiększa jądro tworząc zlepek, agregat ziaren. Jeśli teraz uruchomimy kolejną i jeszcze parę tysięcy następnych dyfuzji, jak będzie ewoluował kształt rosnącego agregatu? Czytelnik, który by nie widział rozwiązania na poniższym rysunku mógłby podejrzewać, że jądro rośnie jak nieforemna, ale dosyć zwarta „buła”. Otóż nie, na prawym rysunku widzimy wyraźnie tworzenie się struktur filamentarnych, dendrytów (od greckiego *dendros*: drzewo).



Rys. 1. Próbkę losowej trajektorii i agregat wynikający z dyfuzji

Dlaczego tak się dzieje? Otóż jest to dość zrozumiałe, dyfundująca cząstka się zatrzyma, jeśli zahaczy o coś, a znacznie łatwiej jest zderzyć się z zewnętrzną „koroną”, niż przedostać się wąskimi kanałami blisko wyjściowego centrum. Można stwierdzić, że z grubsza 75% agregatu, jego centralna część, już nie ewoluuje, ustala się, a wzrost jest prawie wyłącznie peryferyjny.

Zajmiemy się symulacją komputerową zjawiska.

2. Symulacja poprzez „spacer pijaka”

Wystarczy dysponować sporą tablicą wypełnioną np. zerami i generatorem liczb losowych, który w pętli generuje jeden z czterech możliwych kierunków ruchu. W oparciu o ten wynik zwiększa się lub zmniejsza wartość współrzędnej x lub y dyfundującej cząstki, aż dotknie ona, tj. stanie się sąsiadem miejsca w tablicy zawierającego liczbę różną od zera. Wtedy element tablicy odpowiadający położeniu

cząstki, staje się np. równy 1, i rozpoczynamy nową generację. Dyfundująca cząstka zachowuje się jak półprzytomny obywatel, który ma gdzieś iść, ale zderza się z gęsto ustawionymi latarniami i po każdym zderzeniu zapomina poprzedni kierunek...

Możemy też nieco skomplikować tablicę, tak by różne fragmenty agregatu zawierały „wiek” (czas od przyklejenia) cząstki. Pozostaje ustalić warunki początkowe symulacji: cząstka może startować z dowolnego miejsca na zewnątrz koła zawierającego aktualny agregat. Program jest powolny, cząstka może się „wałęsać” dość długo, zanim dotrze do dendrytu. Można go przyspieszyć przez odrzucenie nieefektywnych trajektorii, jeśli cząstka oddali się nadmiernie, wtedy zamiast czekać, aż wróci, niszczymy ją, i zaczynamy nową dyfuzję, z mniejszej odległości.

Program można przyspieszyć także zauważając, że jeśli dyfundująca cząstka znajduje się daleko od dendrytu, musi i tak przebyć odpowiednio długą drogę, aby doń dotrzeć. Więc, zamiast losować małe kroczki, można od razu wygenerować nowy punkt daleko od aktualnej pozycji. Wybieramy odległość nieco mniejszą niż najmniejsza odległość cząstki od agregatu, a ponieważ dyfuzja jest z założenia izotropowa, kierunek „skoku” jest losowany równomiernie w przedziale $[0, 2\pi)$ z dodatkowym warunkiem, żeby to był kierunek zbliżający cząstkę do jądra.

To już nie jest fizyka, ale dzięki temu podczas naszej symulacji dendryt rośnie w oczach. Ta optymalizacja jest typowym „komputerowym oszustwem”, zgodnym jednak, co należy podkreślić, z modelem zjawiska, tylko czas symulowany przestaje mieć cokolwiek wspólnego z czasem rzeczywistym. Wymaga to oczywiście obliczenia długości tego skoku, co też kosztuje, ale jeśli dysponujemy komputerem z dużą pamięcią, sporo obliczeń można zoptymalizować, tworząc np. specjalną tablicę zawierającą pozycje wszystkich cząstek agregatu.

Do czego nam ta symulacja może być potrzebna, dlaczego uznaliśmy to doświadczenie za ciekawe?

3. Dendryty w przyrodzie

Otóż dendryty są wszędzie i uniwersalność mechanizmów ich powstawania i ich własności topologiczne pozwalają je lepiej zrozumieć. Oczywiście trudno się doszukiwać wspólnych cech sieci dopływów rzecznych i struktury neuronu w mózgu, ale naprawdę wiele dość odległych od siebie zjawisk modeluje się zbliżoną matematyką. Oto kilka przykładów.



Rys. 2. Kilka przykładów rzeczywistych dendrytów

Od lewej mamy: wzrost bakterii na pożywce, tzw. figurę Hele-Shawa powstającą gdy do cienkiej warstwy lepkiej cieczy wtłoczy się trochę cieczy mniej lepkiej (albo gazu), wreszcie tzw. obrazek Lichtenberga: wyładowanie elektryczne w dielektryku. (Aktualnie dysponuje się lepszymi możliwościami technicznymi niż miał Lichtenberg (1742–1799), „pompuje się” np. kawałek szkła organicznego elektronami z akceleratora, aż do wybuchowego rozładowania. Naukowcy nadal pracują nad własnościami tych wyładowań, (ale przy okazji można sobie kupić taki kawałek pleksiglasu z malowniczym dendrytem jako pamiątkę turystyczną...). A środkowy obraz równie dobrze może przedstawiać osad resublimowanego metalu, np. magnezu, albo przekrój przez kawałek rafy koralowej. Wiele kryształów rośnie w ten sposób, a młody (lub niegdyś młody) chemik amator miał prawdopodobnie okazję zabawić się w „ogród chemiczny”: do słoika ze szkłem wodnym wrzucamy parę kryształów siarczanu miedzi, żelaza, manganu, czy kobaltu. Siarczany się rozpuszczają i reagują z krzemianem sodu tworząc nierozpuszczalną błonkę, która wskutek osmozy puchnie i w pewnym miejscu pęka, co powoduje wyładowanie siarczanu, „wystawienie palca” natychmiast utrwalonego powstaniem nowej błonki, itd. Tworzą się kolorowe formy zbliżone kształtem do koralu. Proponujemy także czytelnikowi oglądnięcie pod mocną lupą kłaczką sadzy, albo nalotu w zamrażalniku lodówki.

4. Dlaczego taka zbieżność form?

Widzimy teraz dlaczego dendryty chemiczne mogą mieć coś *formalnie* wspólnego z iskrzeniem. Nowa odnoga drzewa w ogrodzie chemicznym jest najsłabsza, końce nowych odnóg będą pękać najłatwiej. Oczywiście zjawisko jest losowe, czasami pękają fragmenty starsze, ale statystycznie wynik sprzyja tworzeniu się form drzewiastych.

Iskry: pioruny, czy wyładowania Lichtenberga, są obszarami zjonizowanego, przewodzącego gazu, stanowią rodzaj elektrody. Jak wszyscy wiemy, o ile potencjał elektryczny elektrody jest stały, tak natężenie pola zależy od krzywizny powierzchni, największe jest w pobliżu ostrzy. Tam najłatwiej jest jonizować nowe obszary i rozszerzać iskrę-elektrodę o nowe odnogi.

Podobnie jest z figurami Hele-Shawa, tutaj trzeba przeanalizować zależność napięcia powierzchniowego, które ścisła wprowadzaną obcą kroplę, od lokalnej krzywizny powierzchni. Co do bakterii, Czytelnik zechce sam się zastanowić, wzięwszy pod uwagę, że bakterie muszą mieć pożywienie, a dodatkowo zatrują otoczenie, utrudniając tym samym rozmnażanie. Oczywiście najmłodsze pokolenie jest najbardziej agresywne...

Ale dlaczego to ma coś wspólnego ze „spacerem pijaka”? Otóż ma, tylko trudno nam tutaj wyłuszczyć wszystkie szczegóły. W skrócie: pole elektryczne, albo inne pola fizyczne (np. prędkość nieściśnialej cieczy, itp.) spełniają równanie

Laplace'a, w dwóch wymiarach: $(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)V = 0$. Można wykazać, że jeśli dla danego punktu (x,y) w przestrzeni na zewnątrz dendrytu zsumujemy wartości pola elektrycznego z punktów, do których dostajemy się wielokrotnie generując trajektorię losową, to wynik będzie równoważny rozwiązaniu równania Laplace'a. Tak też w niektórych problemach fizyki i techniki rozwiązujemy to równanie. Oto pożytek z symulowanych pijaków...

5. Fraktalny wymiar dendrytów

Opisany na początku niniejszego tekstu mechanizm zwany DLA (*Diffusion-Limited Aggregation*, agregacja ograniczona dyfuzją) został przeanalizowany dość niedawno, w 1981 przez T. A. Wittena i L. M. Sandera. Nie miejsce tu, aby omawiać wiele fascynujących szczegółów, ale nasza symulacja wystarczy, aby zmierzyć wymiar topologiczny powstałej figury. Co to jest ten wymiar? Wiemy, że żyjemy w przestrzeni trójwymiarowej, że „zwykły” obiekt materialny o określonej gęstości posiada masę, która z definicji gęstości jest proporcjonalna do jego objętości, a więc do r^3 , gdzie r jest jakimś charakterystycznym rozmiarem liniowym, np. promieniem kulki, gdyby obiekt był z grubsza kulisty. W przestrzeni dwuwymiarowej objętość należy zastąpić polem powierzchni. Zwarta „bula” będzie miała wymiar równy 2. Natomiast cienka „nitka”, która by powstała, gdyby cząstki ją tworzące układały się jedna za drugą, bez gwałtownych zawrotów i samo-przecinań, posiadałaby wymiar równy 1. Charakterystyczną własnością byłaby długość nitki w funkcji liczby zawartych w niej cząstek.

Otóż możemy podczas symulacji DLA mierzyć zależność między promieniem (maksymalnym lub średnim) powstałego agregatu, a liczbą cząstek wchodzących w jego skład. Okazuje się, że ta zależność, w granicy dużej liczby cząstek wyraża się empiryczną formułą: $N = const \cdot r^{1.7}$. Taki ułamkowy wymiar zwykle bywa nazywany fraktalnym, jak większość Czytelników wie, i często bywa on niezmiennikiem, wynosi tyle samo dla bardzo różnych układów fizycznych. Mechanizm DLA w trzech wymiarach, który jest tak samo łatwy do symulacji jak dwuwymiarowy (tylko znacznie powolniejszy...) dostarcza wymiaru z grubsza równego 2.5.

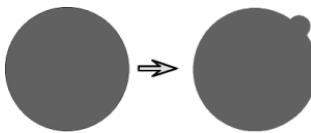
Nieco bardziej skomplikowany model, w którym cząstka może z pewnym prawdopodobieństwem „odmówić” przyklejenia się, i poruszać się nadal, dostarcza dendrytów bardziej gęstych i włochatych. Mają one większy wymiar fraktalny. Zależność tego wymiaru od „lepkości” cząstek też jest interesującym problemem fizycznym.

6. Model Hastingsa i Levitova

W 1998 r., M. B. Hastings i L. S. Levitov zauważyli, że rozwiązanie równania Laplace'a w dwóch wymiarach może wykorzystać znaną od *bardzo* dawna teorię

funkcji zmiennej zespolonej i tzw. transformacje konforemne na płaszczyźnie zespolonej.

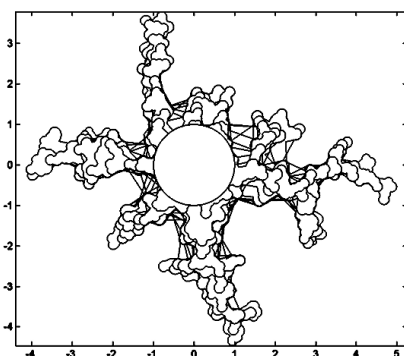
W skrócie: wyobraźmy sobie transformację geometryczną dysku jednostkowego, czyli obszaru zmiennej zespolonej z takiego, że $|z| \leq 1$: $f_{r,\phi}(z)$ w dysk z „wystawionym palcem”, przedstawiony na rysunku obok.



Parametry (r, ϕ) określają położenie i rozmiar odnogi, ϕ będzie losowane, r zależne od generacji. Funkcja f pozwoli nam skonstruować *znacznie* bardziej złożoną funkcję, która transformuje okrąg jednostkowy w dendryt. Gdybyśmy znali tę niezmiernie skomplikowaną funkcję $D(z)$, która opisuje dendryt zawierający, powiedzmy, N cząstek, to $D(f(z))$ opisałby dendryt z jedną cząstką więcej. Bierzemy więc komputer, zaczynamy od $D_0(z)$ przedstawiającego dysk, zbiór punktów odległych nie więcej niż R od centrum, i iterujemy. Funkcja f nie jest nadmiernie skomplikowana, ale jest nieprzyjemna, na przykład $f_{r,\phi}(z) = e^{i\phi} f_r(z) e^{-i\phi}$, gdzie

$$f_r(z) = \sqrt{z} \left\{ (1+r) \frac{1+z}{2z} \left[1+z+z \sqrt{1 + \frac{1}{z^2} - \frac{2(1-r)}{z(1+r)}} \right] - 1 \right\}^{1/2}$$

(Dodatkowo, podczas iteracji należy przeskalowywać r , aby zachować poprawne proporcje). Oto początkowe narastanie warstw w tym modelu.



Programu generującego ten obrazek nie będziemy omawiać. Naszym celem było zauważenie, że dość abstrakcyjnie przedstawiana uczniom teoria zmiennej zespolonej znajduje czasami w fizyce nieoczekiwane zastosowania, a komputery pozwalają na operowanie funkcjami tak złożonymi, że nie sposób ich przedstawić na papierze, gdyż wynikają z wielokrotnych (czasami: setek tysięcy razy) iteracji.