**30-04-2024**

# Υπολογιστική Φυσική Στερεάς Κατάστασης

Problem 3

Haka Kevin

Στην άσκηση αυτή καλούμαστε να μελετήσουμε το φαινόμενο αλλαγής φάσης μέσα από την θεωρία της διήθησης. Η βασική ιδέα είναι να απαντήσουμε στο ερώτημα, ποιος είναι ο κρίσιμος όγκος πόρων σε ένα πορώδες υλικό ώστε να σχηματίζονται κανάλια από την μια άκρη στην άλλη με αποτέλεσμα μέσα από αυτά να μπορεί να διηθηθεί υγρό. Αν και το φαινόμενο απαιτεί μια μαθηματική μοντελοποίηση στις τρις διαστάσεις εμείς θα το μελετήσουμε στις δυο διαστάσεις αλλά ακριβός η ίδια διαδικασία ακολουθείται και σε μεγαλύτερες διαστάσεις και προφανώς και σε οποία γεωμετρία μπορούμε να φανταστούμε, εμείς θα αρκέσουμε σε ένα τετραγωνικό πλέγμα.

Αρχικά κατασκευάζουμε έναν πίνακα NxN το οποίο θα αντιπροσωπεύσει το χώρο (πλέγμα). Διατρέχουμε όλα τα στοιχεία του πίνακα και με μια πιθανότητα p ορίζουμε την τιμή 1 (ανοιχτό) και αντίστοιχα με πιθανότητα 1-p ορίζουμε την τιμή 0 (κλειστό). Με δυο πολύ απλά βήματα το “υλικό” (πίνακας) μας έχει κατασκευαστεί, το μόνο που απομένει είναι να μελετήσουμε το μέγεθος των “πόρων” (cluster) που έχουν σχηματισθεί. Ως cluster ορίζουμε όλες τις τιμές 1 του πίνακα που συνδέονται μεταξύ τους σε απόσταση 1 μονάδας σε γεωμετρία Taxicab.

Επειδή η διαδικασία του εντοπισμού και της καταγράφεις των cluster στον πίνακα είναι πολύ απαιτητική, καθώς θα χρειαστεί και για τα αποτελέσματα να τρέξουμε αρκετές προσομοιώσεις, θα χρειαστούμε έναν σχετικά αποδοτικό αλγόριθμο να κάνει αυτή την δουλειά. Ο αλγόριθμος που θα χρησιμοποιήσουμε είναι ο Cluster Multiple Labelling Technique. Για τα αποτελέσματα εκτελούμε συνολικά 100 προσομοιώσεις για 5 διαφορετικά μεγέθη πλέγματος (200x200, 400x400, 600x600, 800x800 και 1000x1000).

Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε στο πρώτο διάγραμμα του Figure 1 το οποίο μελετά το μέσο μέγεθος των cluster ($I_{av}$), φαίνεται να υπάρχει ένα κρίσιμο σημείο στο οποίο μετά από αυτό, τα cluster έχουν μεγαλώσει τόσο που συνενώνονται τόσο γρηγορά που γίνονται σχεδόν ένα. Το μέγεθος του πίνακα φαίνεται να επιδρά κάνοντας την καμπύλη ακόμα πιο απότομη και το φαινόμενο ακόμα ποιο έντονο όσο μεγαλώνει ο πίνακας. Το κρίσιμο σημείο θα μπορούσαμε να το προσεγγίσουμε από το σημείο καμπής των καμπύλων στο πρώτο η και τρίτο διάγραμμα με χρήση πρώτων διαφορών, αλλά δεν χρειάζεται καθώς στο δεύτερο διάγραμμα το σημείο είναι πολύ ξεκάθαρο. Αυτό συμβαίνει γιατί στο δεύτερο διάγραμμα το στην μετρούμενη ποσότητα (παρόμοια με την πρώτη, $I_{av}$’) δεν συμπεριλαμβάνεται το μέγεθος του μεγαλύτερου cluster το οποίο όμως μετά το κρίσιμο σημείο είναι σχεδόν το αποκλειστικό cluster, και η αφαίρεση του έχει ως αποτέλεσμα την απότομη πτώση της καμπύλης, και τον σχηματισμό της κορυφής. Στο τρίτο διάγραμμα που μελετά το αναλογικό μέγεθος του μεγαλύτερου cluster ως προς το μεγαλύτερο μέγεθος που θα μπορούσε να έχει ($P_{max}$), παρατηρούμε την πολύ απότομη κλιμάκωση του μεγέθους στο κρίσιμο σημείο.

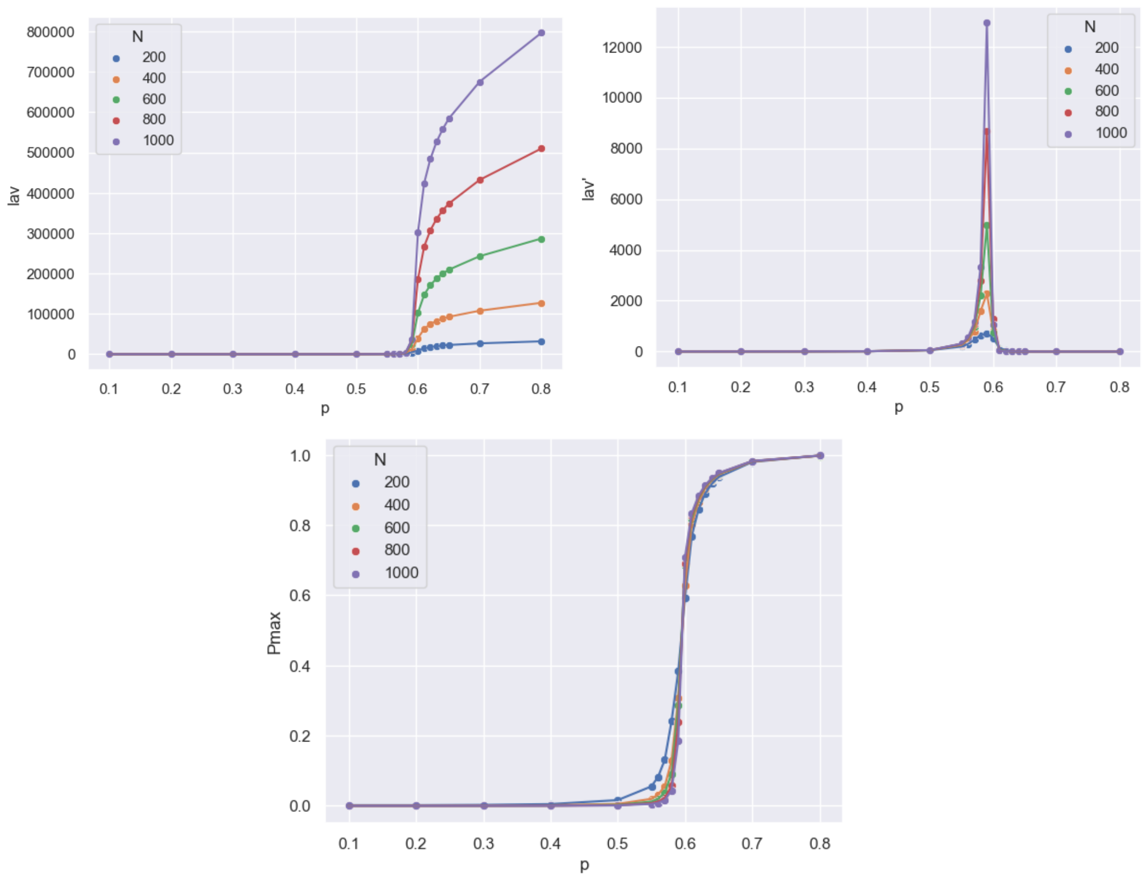


*__Figure 1__ Στο πρώτο διάγραμμα έχουμε το μέσο μέγεθος των cluster συνάρτηση της πιθανότητας p για διαφορά μεγέθη πίνακα. Στο δεύτερο διάγραμμα έχουμε το ίδιο με το πρώτο διάγραμμα χωρίς να συμπεριλαμβάνεται το μεγαλύτερο cluster. Στο τρίτο διάγραμμα έχουμε το αναλογικό μέγεθος του μεγαλύτερου cluster ως προς το μεγαλύτερο εν δύναμη μέγεθος που θα μπορούσε να έχει συνάρτηση της πιθανότητας p και για διάφορα μεγέθη πίνακα.*

Στα διαγράμματα του Figure 2 μελετώνται οι σχέσεις που ακολουθούν το $I_{av}$ πριν το κρίσιμο σημείο και τα $I_{av}$’ και $P_{max}$ μετά το κρίσιμο σημείο ως προς την ποσότητα $|p - p_c|$. Αν και υπάρχουν θεωρητικές λύσεις για τις παραπάνω σχέσεις, είναι σωστές για N τείνει στο άπειρο. Παρόλα αυτά εμείς θα τις χρησιμοποιήσουμε και θα προσεγγίσουμε τους εκθέτες γ, γ’ και β συμφώνα με τις παρακάτω σχέσεις.

$$I_{av} \sim |p - p_c|^{-\gamma} \quad p < p_c \tag{1}$$

$$I_{av}{}' \sim |p - p_c|^{-\gamma'} \quad p > p_c \tag{2}$$

$$P_{max} \sim |p - p_c|^{\beta} \quad p > p_c \tag{3}$$

Αν λογαριθμίσουμε τις παραπάνω σχέσεις μπορούμε να πάρουμε τους εκθέτες ως κλίσεις ευθειών. Όπως μπορούμε να δούμε και στα διαγράμματα του Figure 2 από τα λογαριθμιμένα δεδομένα μας χαράζουμε τις ευθείες ελάχιστων τετράγωνων. Αν και θα μπορούσαμε εφόσον έχουμε τιμές των παραμέτρων για διάφορα μεγέθη πλέγματος να κάνουμε ένα fitting στα δεδομένα για να προβλέψουμε την τιμή στο άπειρο πλέγμα όπου έχουμε και θεωρητικές τιμές θα αρκεστούμε για απλότητα στην τιμή του μεγαλύτερου πλέγματος (1000x1000) που έχουμε ως την καλύτερη. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα λοιπόν έχουμε: γ = 2.131 και β = 0.137 τα οποία έχουν αποκλίσεις 10.8% και 1.36% αντίστοιχα από τις θεωρητικές τιμές (43/18 και 5/36). Η τιμή του γ' που βρήκαμε είναι 3.925.

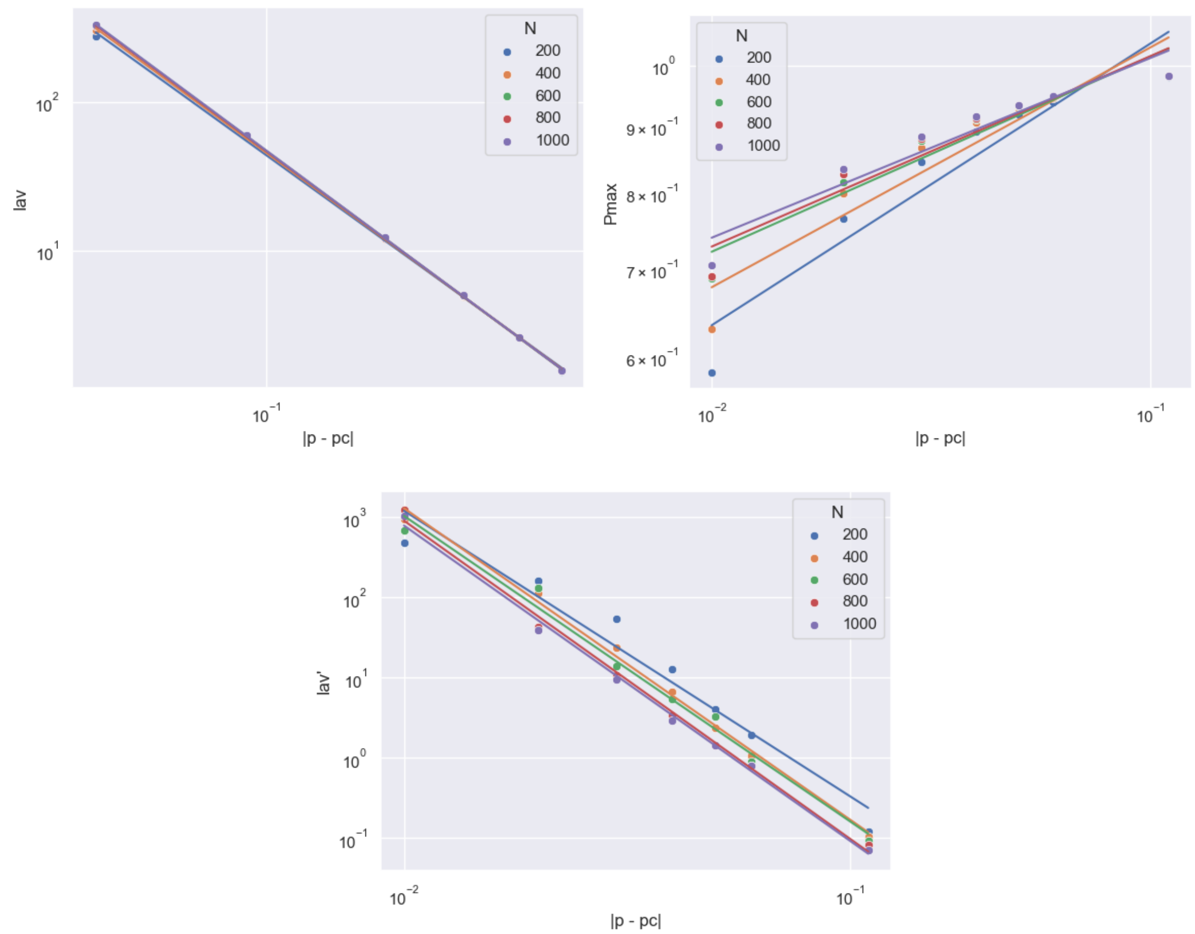


***Figure 2*** *Στο πρώτο διάγραμμά μελετάται η σχέση του μέσου μεγέθους των cluster* ***μέχρι το κρίσιμο σημείο*** *σε διπλή λογαριθμική κλίμακα. Στο δεύτερο και τρίτο διάγραμμα αντίστοιχα μελετώνται οι σχέσεις του μέσου μεγέθους των cluster χωρίς την συμπερίληψη του μεγαλύτερου καθώς και το σχετικό μέγεθος του μεγαλύτερου cluster* ***μετά το κρίσιμο σημείο*** *σε διπλή λογαριθμική κλίμακα.*