01-04-2024

Υπολογιστική Φυσική Στερεάς Κατάστασης

Problem 1

Haka Kevin

Υπολογισμός μέσης τιμής τυχαίων αριθμών από ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα $[0, 1]$ για διαφορετικό πλήθος αριθμών. Όπως μπορούμε να δούμε από το ημιλογαριθμικό διάγραμμα παρακάτω (Figure 1), η πραγματική τιμή (0.5), προσεγγίζεται με ακόμη μεγαλύτερη ακρίβεια όσο αυξάνει το πλήθος των τυχαίων αριθμών.

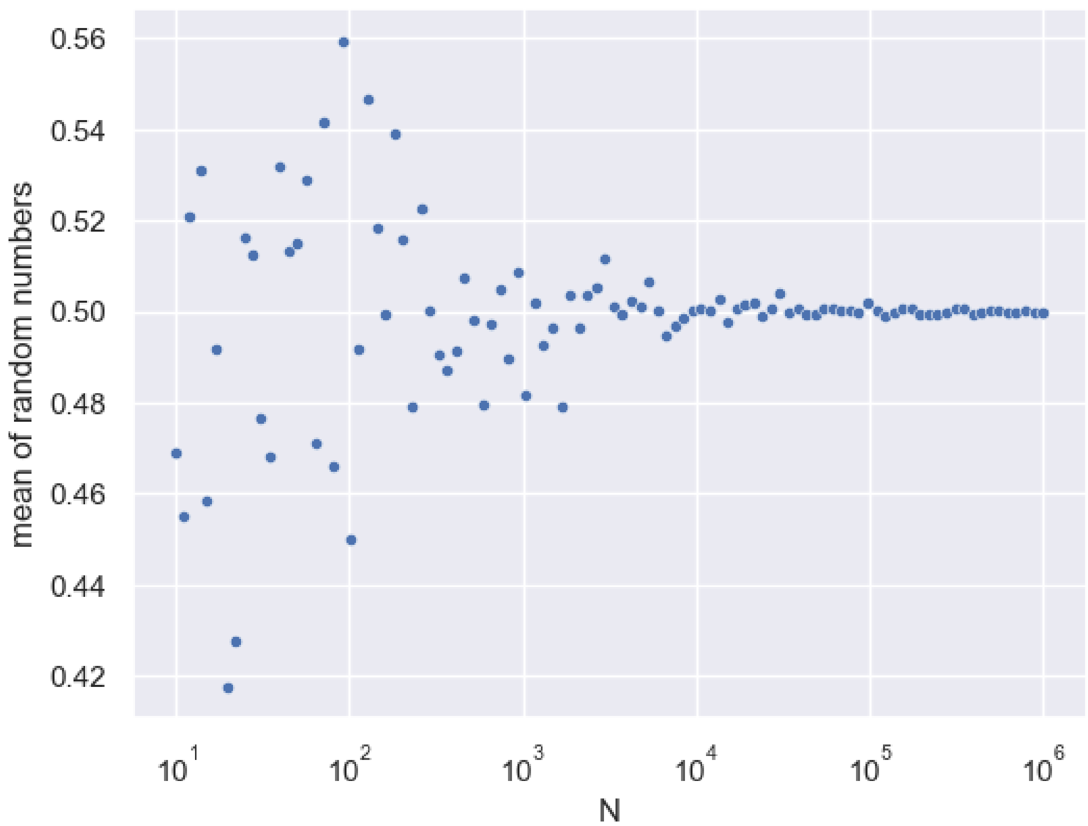

Figure 1 Διάγραμμα μέσης τιμής τυχαίων αριθμών από ομοιόμορφη κατανομή συνάρτηση του πλήθους των τυχαίων αριθμών (100 σημεία).

Στο επόμενο ζητούμενο, προσομοιώνουμε μια τυχαία διαδρομή σε μια και δυο διαστάσεις οπού, υπολογίζουμε την μέση μετατόπιση στο τετράγωνο από την αρχική θέση μετά από 1000 βήματα. Τα αποτελέσματα όπως φαίνονται παρακάτω, είναι πολύ κοντά στο 1000 που είναι ο αριθμός των βημάτων. Η ακρίβεια είναι ακόμη καλύτερη εάν αυξήσουμε τον αριθμώ τον προσομοιώσεων. Συνεπώς, συμπεραίνουμε πως η μετατόπιση στο τετράγωνο είναι ίση με τον αριθμό των βημάτων τουλάχιστον στις μια και δυο διαστάσεις.

Random Walk
1D - R^2 = 1010.7528
2D - R^2 = 997.0124

Ως συνέχεια του προηγουμένου ζητήματος θα εκτελέσουμε ένα υπολογιστικό πείραμα που θα μας επιβεβαίωση τα προηγουμένως λεχθέντα, δηλαδή, την γραμμική σχέση του R^2 με τον αριθμό των βημάτων N. Για να το πέτυχουμε αυτό, θα κάνουμε το ίδιο με πριν αλλά αντί να περνούμε μόνο την τελική μετατόπιση στο τετράγωνο του περίπατου, θα πάρουμε και άλλες αποστάσεις κατά την διάρκεια του περίπατου, και στη συνέχεια θα εφαρμόσουμε ελάχιστα τετράγωνα για να βρούμε την γραμμική σχέση που ακολουθεί ή και όχι. Όπως μπορούμε να δούμε από το παρακάτω διάγραμμα (Figure 2) τα δεδομένα μας ακολουθούν όντως γραμμική σχέση και οι δυο σχεδιασμένες ευθείες δίνονται παρακάτω, όπου βλέπουμε ότι οι κλήσεις των ευθειών είναι σχεδόν μονάδα που επιβεβαιώνει την σχέση $R^2 = N$. Η όποια μικρή απόκλιση της κλίσης από την μονάδα, όπως και το σημείο τομής του άξονα y για x=0 από το μηδέν είναι στα όρια του στατιστικού σφάλματος και βελτιώνονται με αύξηση του αριθμού των προσομοιώσεων.

1D - y = 0.999*x - 0.909
2D - y = 0.995*x + 1.386

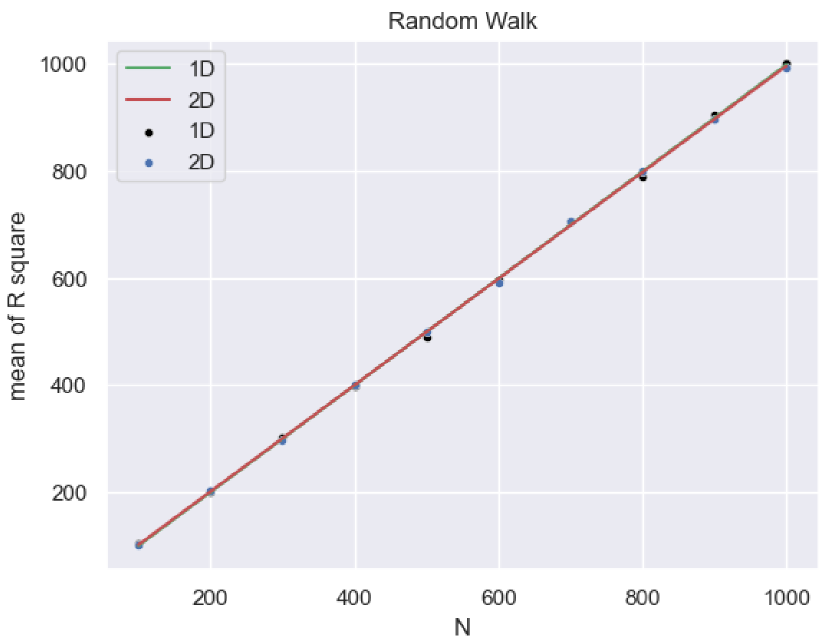

Figure 2 Διάγραμμα της μέσης μετατόπισης στο τετράγωνο τυχαίου περίπατου συνάρτηση του αριθμού των βημάτων για μια και δυο διαστάσεις. Στο διάγραμμα έχουν σχεδιαστεί και οι ευθείες ελαχίστων τετραγώνων για τα δεδομένα.

Στην συνέχεια θα προσπαθήσουμε να βρούμε την κατανομή της μετατόπισης που ακολουθεί ένας τυχαίος περίπατος στην μια διάσταση, και πως ο αριθμός των βημάτων επηρεάζει την κατανομή. Για να το πετύχουμε αυτό, τρέχουμε πολλές προσομοιώσεις τυχαίων περιπάτων και φτιάχνουμε τα ιστογράμματα τους. Κάνουμε το ίδιο για δυο διαφορετικούς αριθμούς βημάτων 1000 και 2000 αντίστοιχα. Όπως μπορούμε να διαπιστώσουμε και από τα ιστογράμματα στο παρακάτω διάγραμμα (Figure 3), επιβεβαιώνονται τα αναλυτικά αποτελέσματα δηλαδή ότι, οι κατανομή της μετατόπισης τουλάχιστον στη μια διάσταση ακολουθεί γκαουσιανή κατανομή με διακύμανση ίση με την τιμή του βήματος ($\sigma^2 = N$).

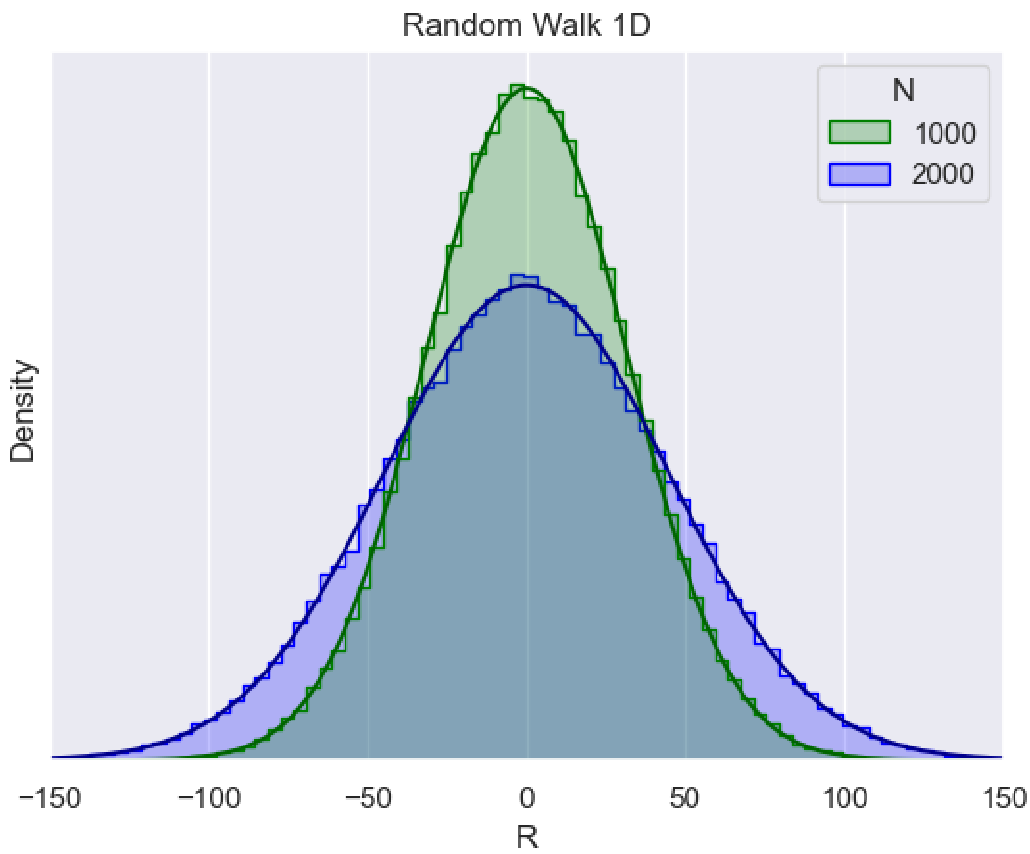

Figure 3 Ιστογράμματα κατανομής μετατόπισης τυχαίων περιπάτων από την αρχική θέση σε μια διάσταση με 1000 (πράσινο) και 2000 (μπλε) βήματα αντίστοιχα, όπως και οι θεωρητικές γκαουσιανές κατανομές των μετατοπίσεων.

Στην συνέχεια καλούμαστε να υπολογίσουμε μια καινούρια ποσότητα που είναι ο αριθμός των διαφορετικών κόμβων ("περιοχών") που επισκέπτεται ο τυχαίος περιπατητής συνάρτηση του συνολικού αριθμού βημάτων που θα κάνει. Όπως και στα προηγούμενα θα υπολογίσουμε την μέση τιμή αυτής της ποσότητας μετά από πολλές προσομοιώσεις για μια, δυο και τρεις διαστάσεις. Παρατηρούμε στο παρακάτω διάγραμμα (Figure 4) τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με σημεία, όπως και τις αναλυτικές λύσεις με καμπύλες. Με μια πρώτη ματιά φαίνεται τα αποτελέσματα να μην συμφωνούν στο εκατό της εκατό. Αλλά, στην πραγματικότητα υπάρχουν δυο αιτίες που εξηγούν πάρα πολύ καλά αυτή την μικρή σχετικά απόκλιση. Ο πρώτος λόγος είναι ότι η αναλυτικές λύσεις είναι ακριβής μόνο ασυμπτωτικά στο άπειρο, αυτό σημαίνει πως για μικρά N όπως έχουμε εμείς, τα αποτελέσματα είναι προσεγγιστικά και αναμενόταν ένα μικρό σφάλμα. Ο δεύτερος λόγος που έρχεται να συμπληρώσει τον πρώτο, είναι πως οι λύσεις δεν είναι σε κλειστή μορφή αλλά είναι απειροσειρές, πράγμα που σημαίνει πως δεν μπορούμε να έχουμε όλους τους ορούς του αθροίσματος. Στην περίπτωση μας οι καμπύλες είναι πρώτης τάξης προσεγγίσεις, δηλαδή, έχουμε μόνο τον πρώτο όρο από τις εκφράσεις. Εάν κρατάγαμε μερικούς ακόμα όρους δυο ή τρεις για παράδειγμα, η ακρίβεια θα βελτιωνόταν δραματικά ακόμα και για μικρά N και πιθανόν η διαφορά πειραματικών – θεωρητικών αποτελεσμάτων να μην ήταν εύκολα διακριτή με το μάτι. Είναι σημαντικό να σημειωθεί, επειδή το διάγραμμα είναι παραπλανητικό, πως οι σχέσεις εν γένει δεν είναι γραμμικές και η όποια τέτοια εντύπωση οφείλεται στο ότι το διάστημα τον N τιμών που έχουμε, δεν είναι αντιπροσωπευτικό της πραγματικότητας.

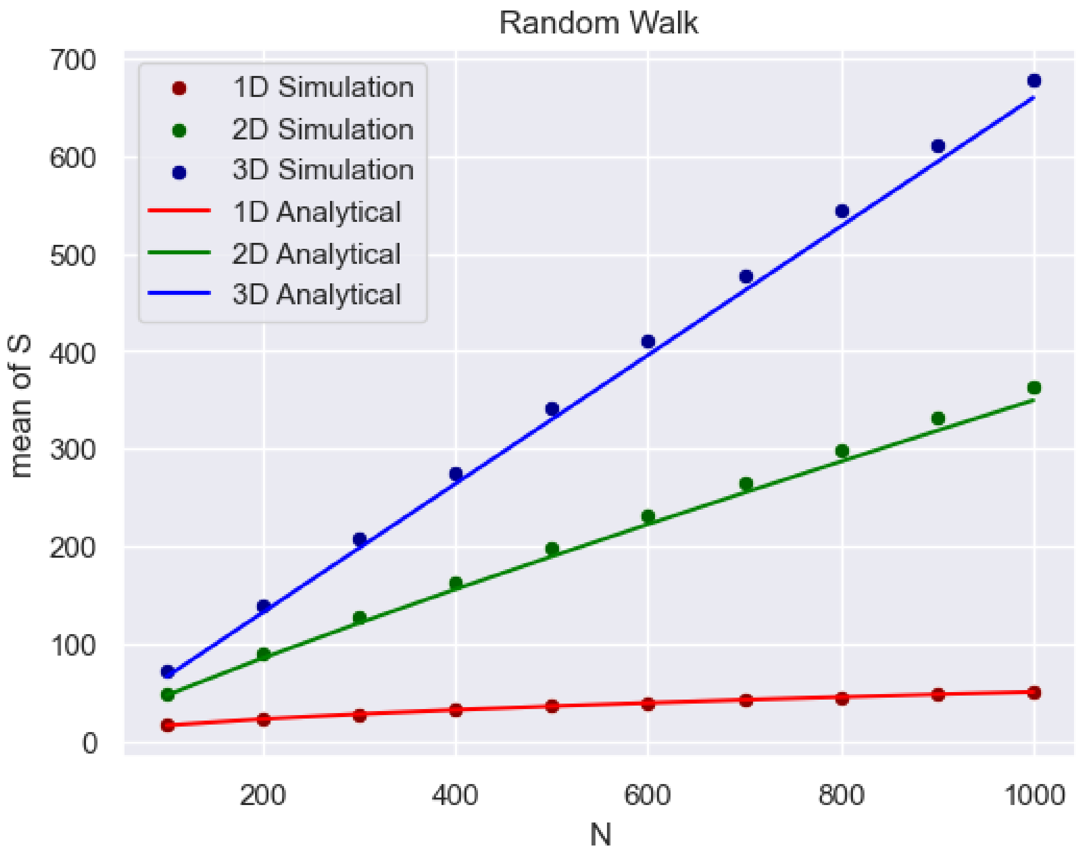

Figure 4 Διάγραμμα μέσου αριθμούς επισκέψεων καινούριων κόμβων για μια, δυο και τρεις διαστάσεις ως συνάρτηση των συνολικών βημάτων. Καθώς και οι αναλυτικές λύσεις για την κάθε διάσταση.

Στη τελευταίο ζητούμενο αυτής της εργασίας, θα μελετήσουμε τον χρόνο (αριθμό βημάτων) που χρειάζεται ένα τυχαίο περίπατο μέχρι να πέσει πάνω σε μια παγίδα. Σε αυτές τις προσομοιώσεις εκτελούμε τυχαίους περιπάτους σε ένα πλέγμα πεπερασμένων διαστάσεων με περιοδικές συνθήκες όπου υπάρχουν παγίδες. Από τα δεδομένα που θα εξάγουμε θα μελετήσουμε και μια παρόμοια έννοια που είναι η πιθανότητα επιβίωσης. Όπως μπορούμε να δούμε από τα παρακάτω διάγραμμα (Figure 5), η κατανομή του χρόνου παγίδευσης στο ημιλογαριθμικό διάγραμμα (στον άξονα) φαίνεται να είναι γραμμικά μειούμενο πέρα ίσως από πολύ μικρούς χρόνους. Δεδομένου αυτού είναι πολύ πιθανό η σχέση του χρόνου παγίδευσης με τον χρόνο να μπορεί να προσεγγισθεί με εκθετική συνάρτηση τουλάχιστον για μεγάλους χρόνους.

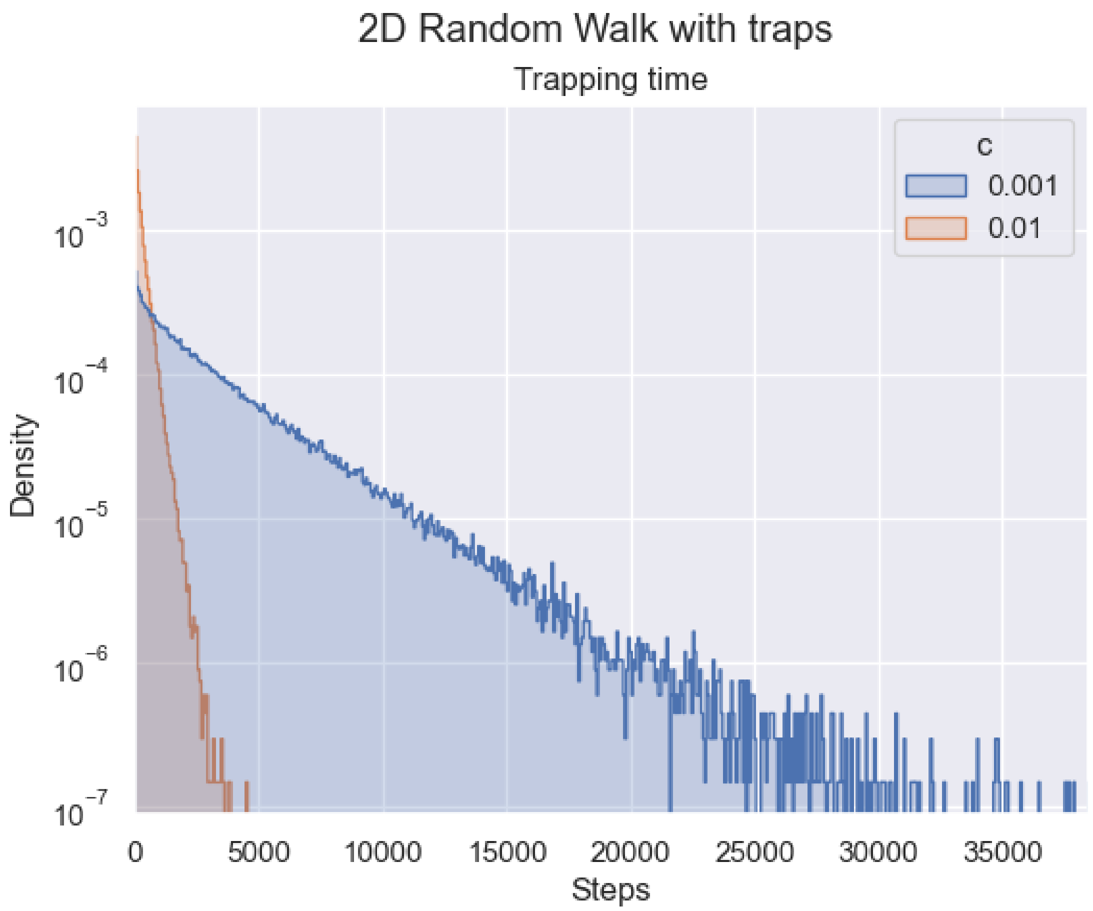

Figure 5 Ιστόγραμμα σε ημιλογαριθμικό κλίμακα κατανομής χρόνου (αριθμός βημάτων) παγίδευσης για συγκεντρώσεις παγίδων 1% και 0.1% των κόμβων του πλέγματος, σε πλέγμα 500x500.

Ομοίως και στο διάγραμμα (Figure 6), η πιθανότητα επιβίωσης είναι γραμμική σε ημιλογαριθμικό διάγραμμα ως προς τον y άξονα, συνεπώς, υπάρχει εκθετική σχέση. Πράγμα που επιβεβαιώνεται και στο διάγραμμα, από την θεωρητική προσέγγιση του Rosenstock, όπου τα αποτέλεσμα της προσομοίωσης εφάπτονται αρκετά καλά δεδομένου του ότι χρησιμοποιήσαμε μιας πρώτης τάξης προσέγγιση για τον υπολογισμό του εκθέτη στην σχέση του Rosenstock.

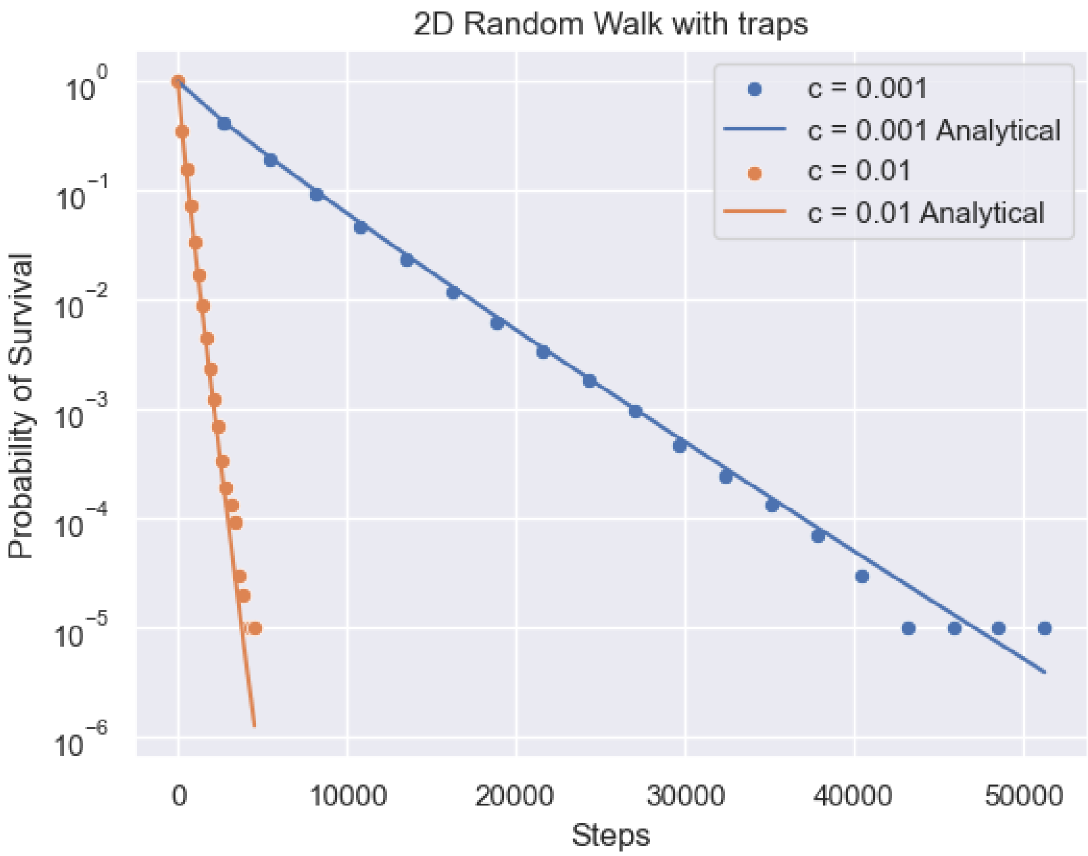

Figure 6 Ημιλογαριθμικό διάγραμμα πιθανότητας επιβίωσης ως συνάρτηση του χρόνου (αριθμός βημάτων) για πλέγμα 500x500 με 1% και 0.1% συγκέντρωση παγίδων στο πλέγμα. Καθώς και οι αναλυτικές προσεγγιστικές λύσεις του Rosenstock.