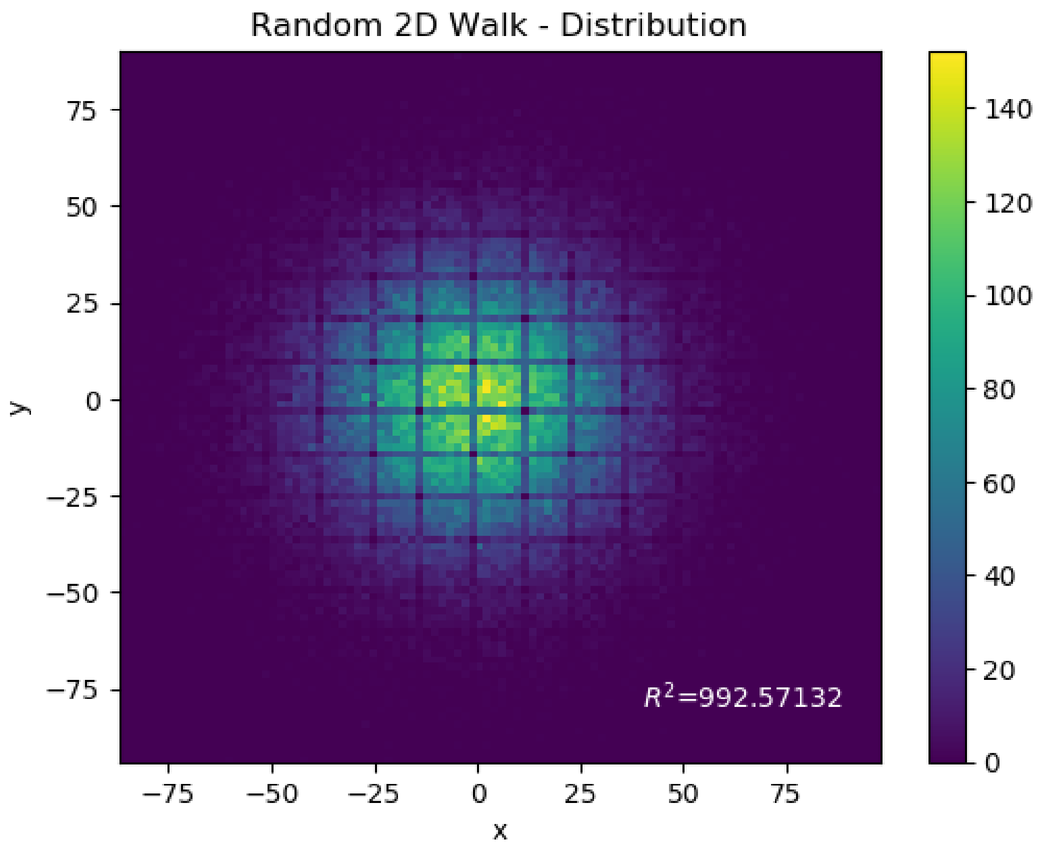
EXERCISES 2a.b, 3 AND 6

Kritikos Emmanuouil
Preparation for thesis

2. Create a program which performs a random walk for $N = 1000$ steps. You will do that for two cases: **(a)** a one dimensional system, **(b)** a two dimensional system. The program should calculate the square displacement R^2. Run the program for 10000 runs and find the mean square displacement, namely $<R^2>$.

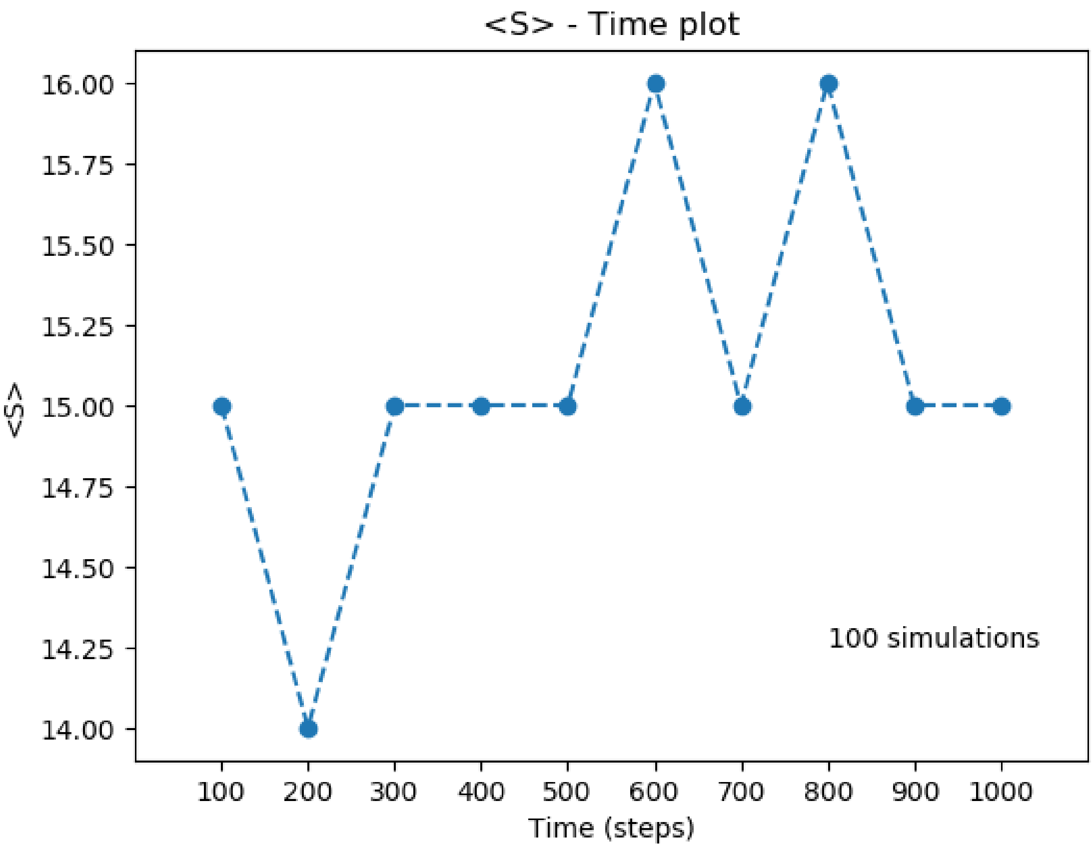
For the second part of this exercise, we create and run our simulation 10000 times. The result is shown in the 2D color-map below:

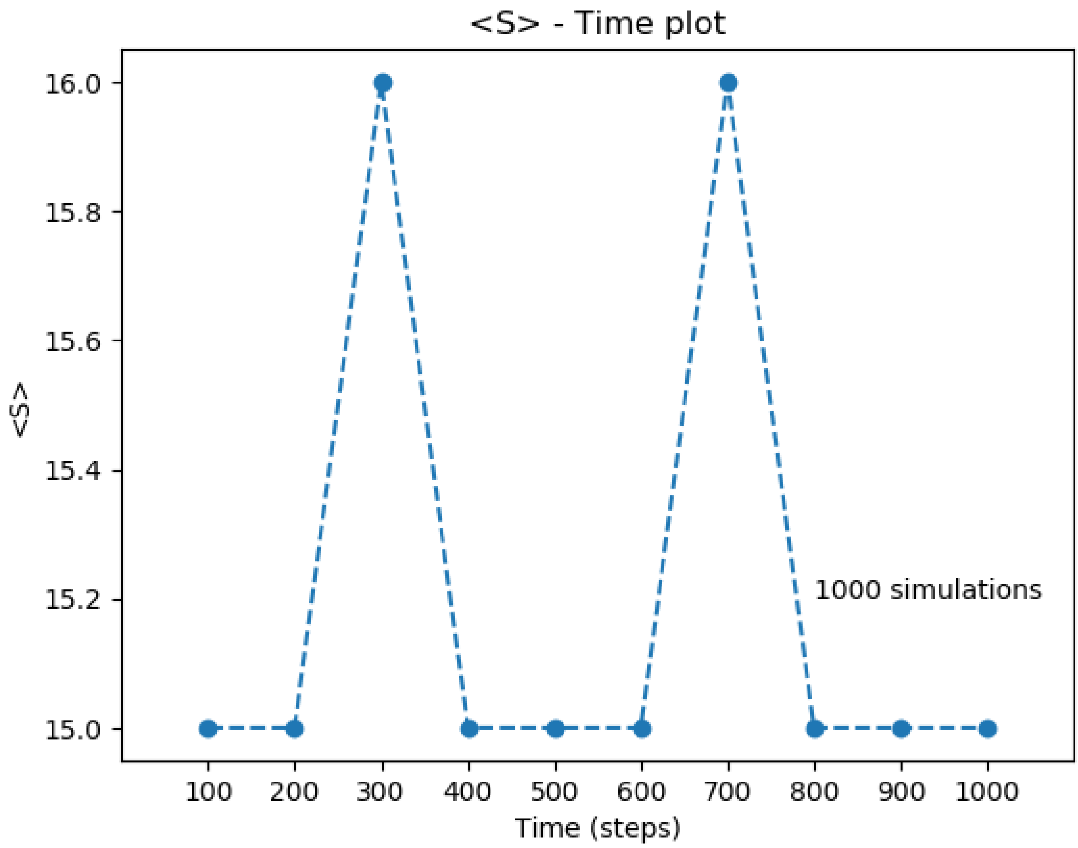


This map representing all the positions in the 2D Random Walk where the particle pass throw. The most-visited positions have yellow-like or green-like color and on the other hand with blue-like or violet-like color are the less-visited positions. The mean square displacement ($<R^2>$) was calculated and shown in the map above.

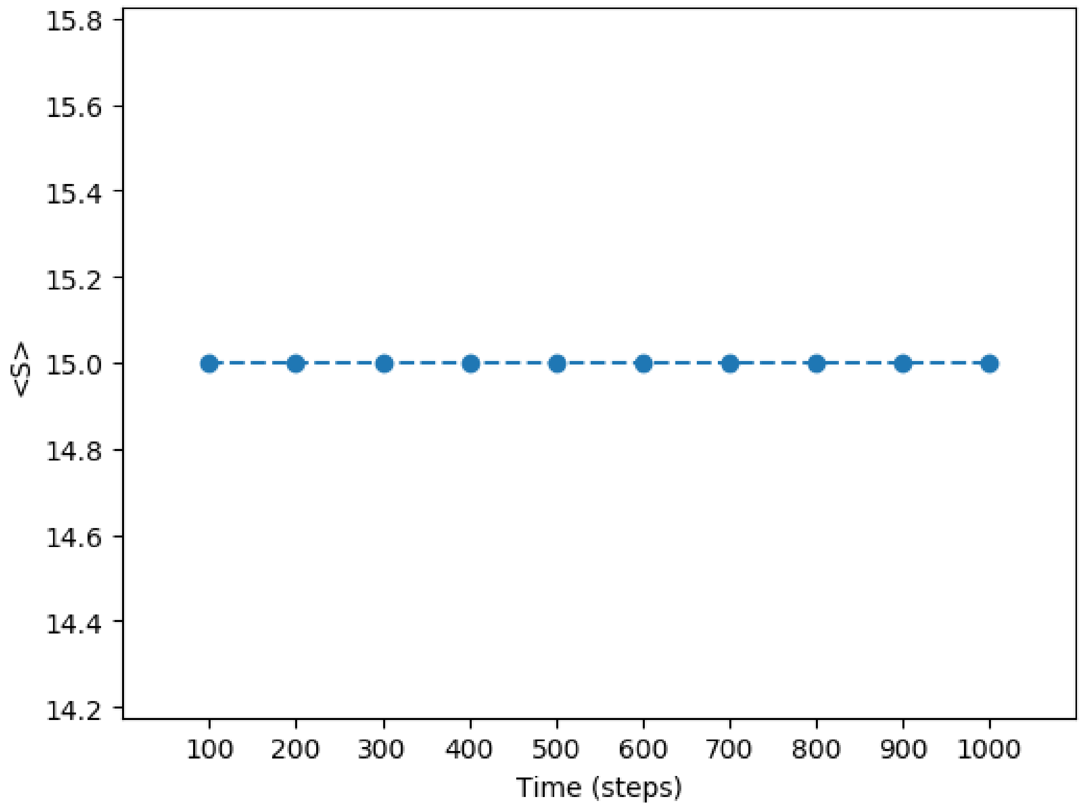
3. Δημιουργείστε ένα πρόγραμμα στο οποίο ένα σωματίδιο θα εκτελεί μια τυχαία διαδρομή για t=1000 βήματα για τις δυο ακόλουθες περιπτώσεις: (α)σε ένα μονοδιάστατο σύστημα (β)σε ένα διδιάστατο σύστημα. Το πρόγραμμα θα πρέπει να υπολογίζει το $\langle S \rangle$ όπου S ο αριθμός των πλεγματικών θέσεων που το σωματίδιο επισκέφτηκε τουλάχιστον μια φορά. Θα πραγματοποιήσετε 10.000 προσομοιώσεις και θα βρείτε 10 σημεία (ένα κάθε 100 βήματα, από 0 μέχρι 1000), τα οποία θα είναι οι μεσοί όροι των 10.000 προσομοιώσεων. Κάνετε την γραφική παράσταση του <S> ως συνάρτηση του χρόνου t.

α) Για αυτό το ερώτημα της άσκησης, σε μονοδιάστατο σύστημα, κατασκευάσαμε την γραφική παράσταση <S> - Χρόνου (εκφρασμένο σε βήματα). Για καλύτερη κατανόηση της συμπεριφοράς-συσχέτισης του <S> με τον χρόνο επιπαραθέτονται παρακάτω εμβόλιμα δύο επιπλέον διαγράμματα για 100 προσομοιώσεις, για 1000 προσομοιώσεις και τέλος για τις ζητούμενες 10.000 προσομοιώσεις.



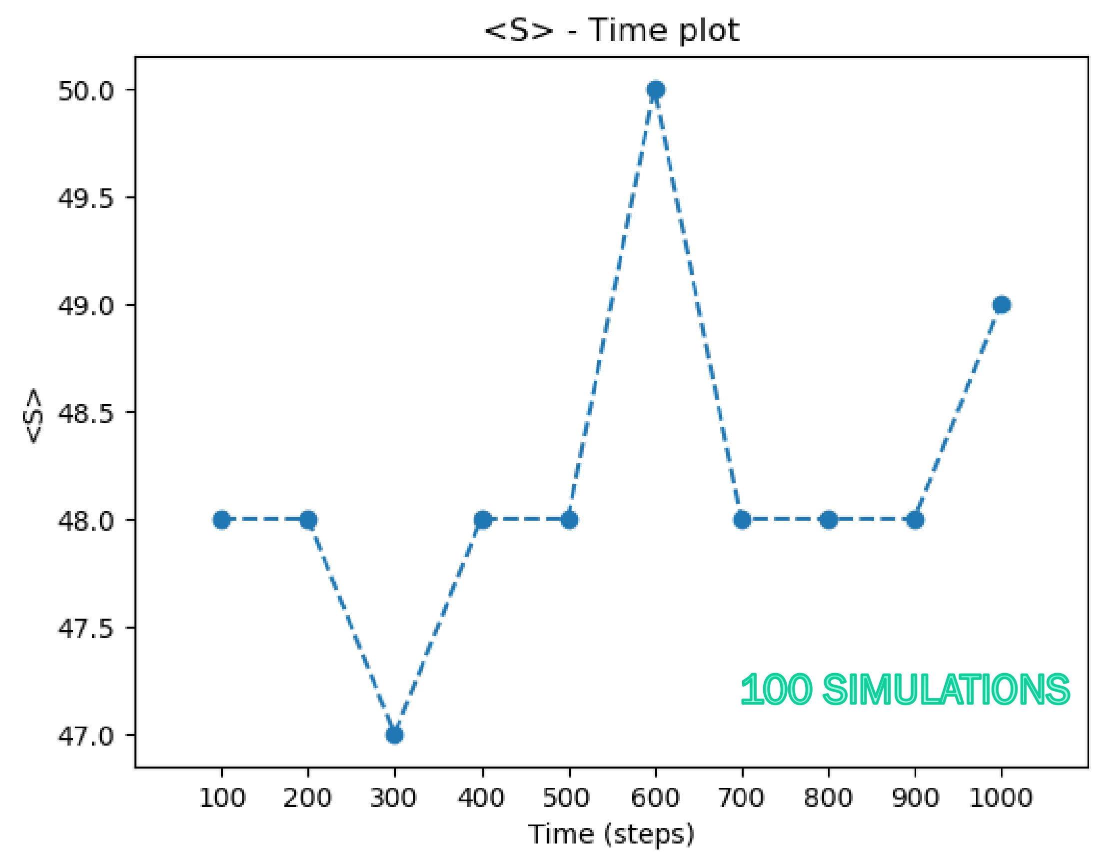


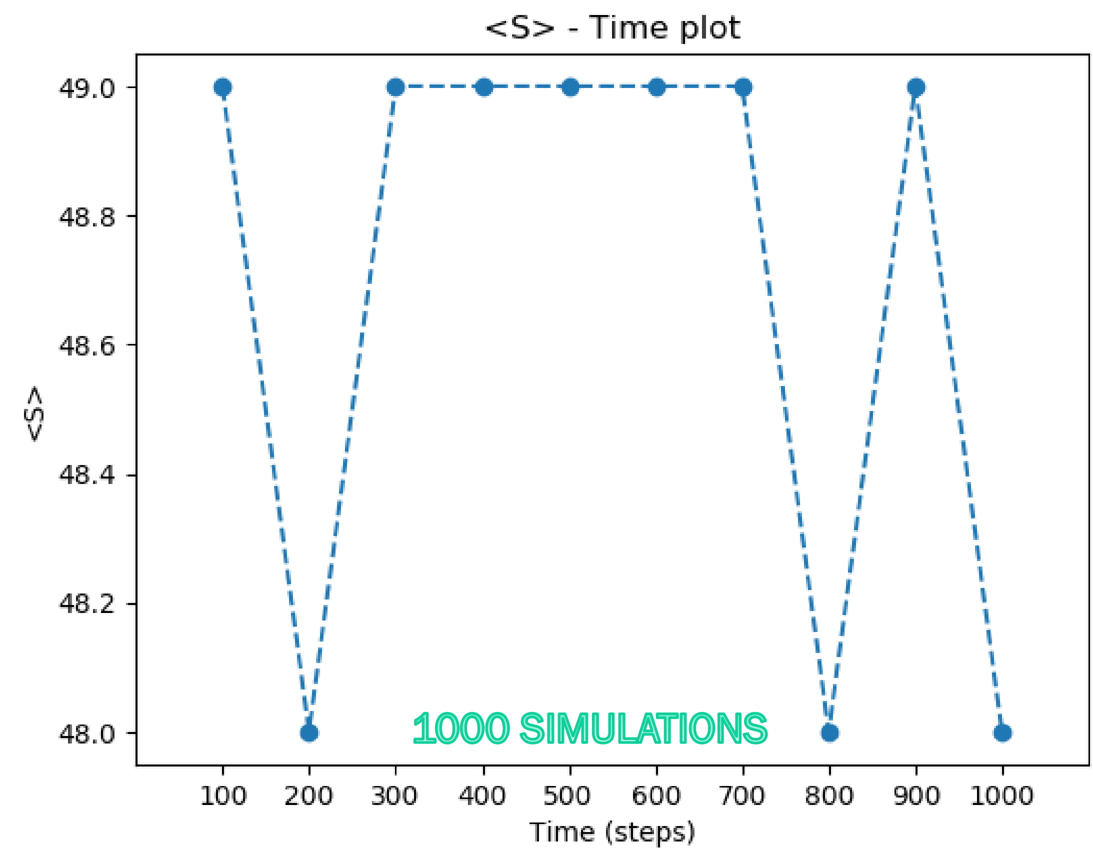
Το ζητούμενο διάγραμμα για 10.000 προσομοιώσεις:



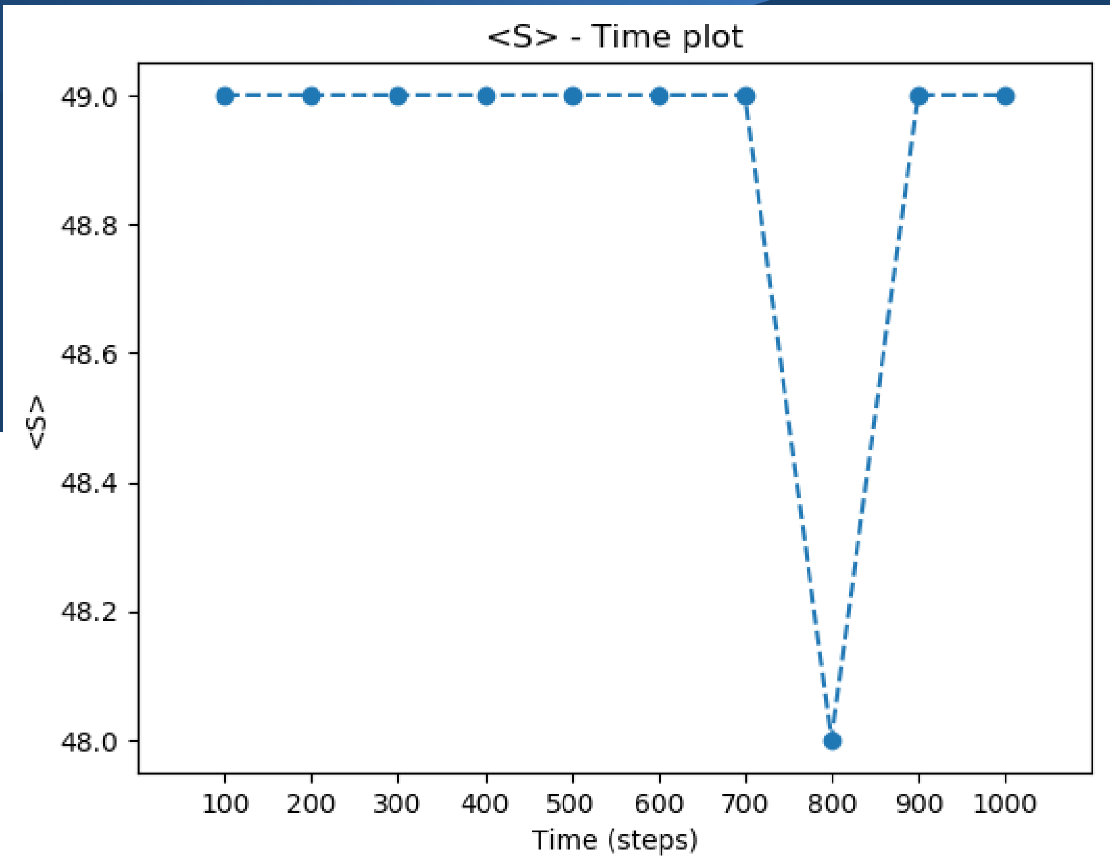
Σ Υ Μ Π Ε Ρ Α Σ Μ Α :
Αυτό που προκύπτει από τα παραπάνω διαγράμματα και κυρίως από το τελευταίο είναι ότι το <S> διατηρείται σταθερό κατά την διάρκεια κίνησης του σωματιδίου στον τυχαίο (μονοδιάστατο αυτόν) περίπατο. Ουσιαστικά αυτό σημαίνει ότι για κάθε 100 βήματα το σωματίδιο «επισκέπτεται» σταθερό αριθμό μοναδικών θέσεων, στο κάθε διάστημα από αυτά τα 100 βήματα.

β) Το ίδιο ακολουθεί και για το 2D τυχαίο περίπατο του σωματιδίου προς μελέτη της συμπεριφοράς του <S>.





Το ζητούμενο διάγραμμα για 10.000 προσομοιώσεις:



Σ Υ Μ Π Ε Ρ Α Σ Μ Α :

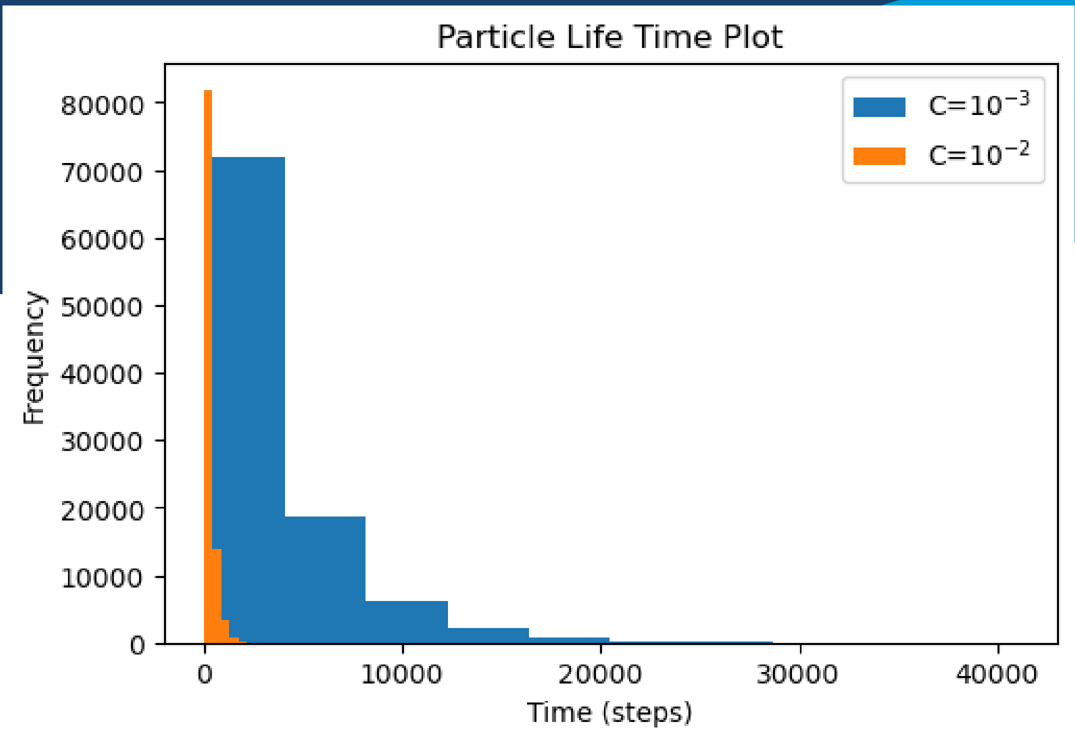
Όπως και στο μονοδιάστατο σύστημα, έτσι κι εδώ στο δισδιάστατο πλέον τυχαίο περίπατο των 1000 συνολικών βημάτων, το σωματίδιο μας διατηρεί σταθερό των αριθμό των μοναδικών θέσεων, από όπου διέρχεται κάθε φορά ανά εκατοντάδα. Πλέον ο αριθμός αυτός είναι πολύ μεγαλύτερος απ' ότι στο μονοδιάστατο κι είναι απόλυτα λογικό μιας και πλέον αυτή η «επιπλέον» διάσταση προσδίδει περισσότερες επιλογές για κίνηση και διαδοχή περισσότερων μοναδικών θέσεων. Μια «ανωμαλία» παρατηρείτε στην $8^{η}$ εκατοντάδα βημάτων όπου το <S> είναι κατά μία μοναδική θέση μικρότερο, αλλά μια και είναι μόλις ±1 θέση διαφορά, δηλαδή αστοχία του 2% , θα μπορούσε ίσως να αποδοθεί σε στατιστικό σφάλμα.

6. Δημιουργείστε ένα πρόγραμμα στο οποίο έχετε ένα πλέγμα 2 διαστάσεων με μέγεθος 500x500. Στο πλέγμα αυτό βάλτε σε τυχαίες θέσεις ένα αριθμό από μόρια παγίδες, τα οποία θα έχουν συγκέντρωση c. Ακολούθως τοποθετείστε 1 σωματίδιο σε μία τυχαία θέση στο πλέγμα, και αφήσετε το σωματίδιο να εκτελέσει μία τυχαία διαδρομή (random walk). Στην διαδρομή αυτή δεν θα βάλετε περιορισμό στον χρόνο, δηλ. δεν θα δηλώσετε ένα συγκεκριμένο αριθμό βημάτων. Η διαδρομή θα σταματά όταν το σωματίδιο τύχει κατά την κίνηση του να πέσει μέσα σε μία παγίδα. Ο χρόνος που χρειάστηκε για να γίνει αυτό είναι ο χρόνος παγίδευσης. Κάνετε 100.000 προσομοιώσεις, κρατείστε τους χρόνους παγίδευσης, και κάνετε την κατανομή των χρόνων αυτών. Προσοχή στις οριακές συνθήκες. Θα πρέπει όταν το σωματίδιο φθάνει στα άκρα του πλέγματος να μην επιτρέπεται να φύγει εκτός πλέγματος, αλλά να παραμείνει μέσα, είτε επιστρέφοντας στην προηγούμενη θέση, είτε να τοποθετείται κυκλικά στην απέναντι πλευρά του πλέγματος. Τρέξτε το πρόγραμμα για $c=10^{-2}$ και $c=10^{-3}$. Βάλτε τις 2 κατανομές στην ίδια γραφική παράσταση και συγκρίνετε τα αποτελέσματα σας με τις θεωρητική προσέγγιση Rosenstock, για την οποία ισχύει:

$$\Phi(t) = (1 - c)^{<S(t)>}$$

όπου $\Phi(t)$ ο χρόνος παγίδευσης και $<S(t)>$ ο μέσος αριθμός των πλεγματικών θέσεων που το σωματίδιο επισκέφτηκε τουλάχιστον μια φορά.

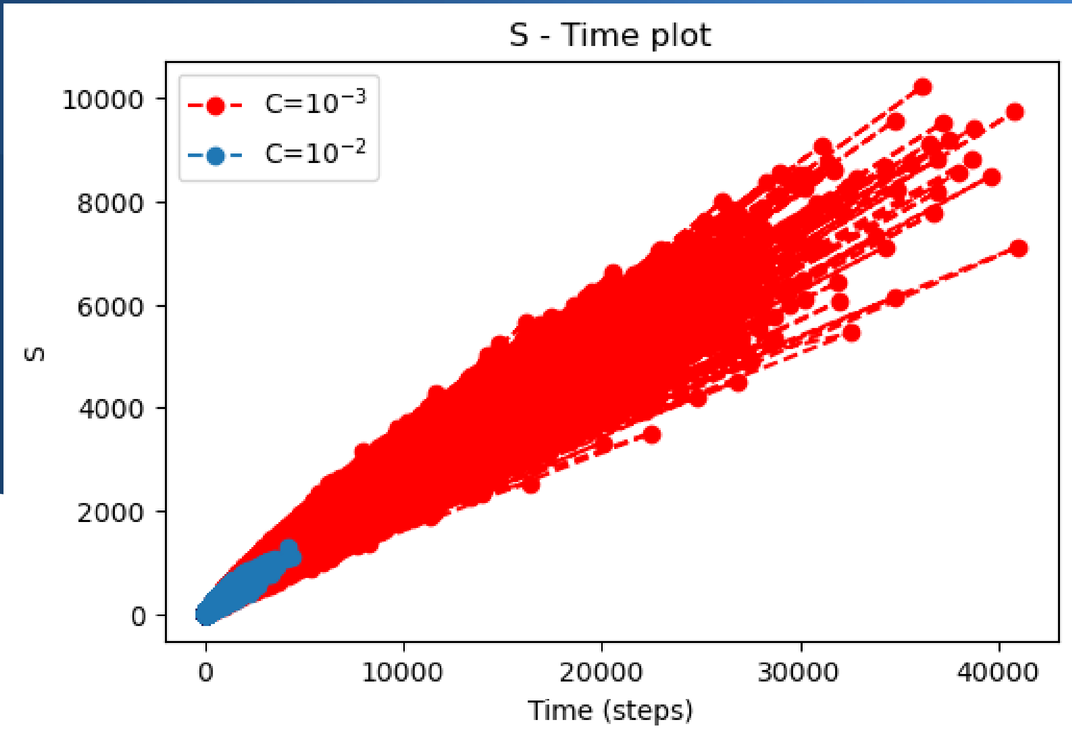
Κατασκευάσαμε λοιπόν ένα διάγραμμα όπου παρουσιάζεται η συχνότητα του «χρόνου ζωής» του σωματιδίου, έως ότου «πέσει» σε μια παγίδα, δηλαδή φαίνεται ποιοι ήταν οι συχνότεροι χρόνοι ζωής (μετρημένοι πάντα σε βήματα του περιπάτου) και πως κατανέμεται η συχνότητα εμφάνισης τους, στις 100.000 προσομοιώσεις, καθώς και την εξάρτηση τους με την συγκέντρωση παγίδων.



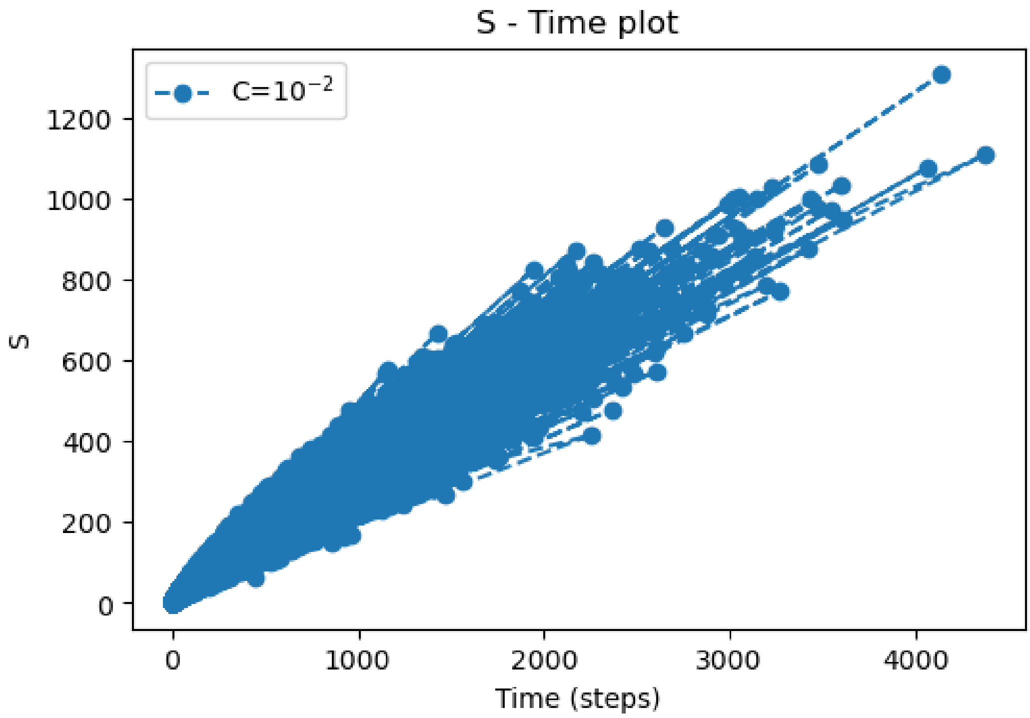
Σ Υ Μ Π Ε Ρ Α Σ Μ Α :

Από το διάγραμμα παραπάνω, αντιλαμβανόμαστε την ολοφάνερη εξάρτηση του χρόνου με την συγκέντρωση των παγίδων στο πλέγμα. Για μεγαλύτερη συγκέντρωση των παγίδων στο δείγμα, βλέπουμε ότι η κατανομή του χρόνου ζωής «στριμώχνεται» αρκετά κοντά στο 0. Αναμενόμενο αυτό το πρώτο συμπέρασμα μιας και σε κατά μια τάξη μεγέθους περισσότερες παγίδες είναι πολύ πιθανότερο να βρεθεί το σωματίδιο σε μια από αυτές, με αποτέλεσμα ο «περίπατος» να τελειώσει πολύ συντομότερα, με πολύ λιγότερα βήματα. Δεύτερη παρατήρηση αποτελεί το γεγονός ότι οι δύο κατανομές αν και εκτείνονται σε διαφορετικούς αριθμούς βημάτων (η πρώτη έχει μια τάξη μεγέθους μεγαλύτερη έκταση από την δεύτερη) μπορεί κανείς να ισχυριστεί ότι αναλογικά μοιάζουν σχηματικά. Αυτό σημαίνει ότι η αναλογία στην συχνότητα εμφάνισης μεταξύ των λιγότερων δυνατών και των περισσότερο δυνατών βημάτων παραμένουν ίδιες και στις δύο περιπτώσεις συγκεντρώσεων (όπως και για τις ενδιάμεσες τιμές τους). Είναι πολύ πιθανότερο να τελειώσει ο περίπατος σε μικρότερο αναλογικά αριθμό βημάτων, απ’ ότι σε μεγαλύτερο ή σε ακόμα μεγαλύτερο αριθμό βημάτων. Η αριθμητική τιμή των βημάτων αυτών εξαρτάται από την συγκέντρωση των παγίδων, αλλά η αναλογία αυτών δείχνει να διατηρείται. Τέλος στην περίπτωση της υψηλότερης συγκέντρωσης παγίδων στο πλέγμα, η συχνότητα λήξης του περιπάτου σε μικρό αριθμό βημάτων ξεπερνάει αριθμητικά την αντίστοιχη συχνότητα για μικρότερη συγκέντρωση παγίδων, όπου σύμφωνα με τα παραπάνω δείχνει κατανοητό.

Μια όμοια συμπεριφορά, όπως και στο ιστόγραμμα της συχνότητας του «χρόνου ζωής» του σωματιδίου, εμφανίζεται (ποσοτικά και αναλογικά) και στην θεωρητική προσέγγιση Rosenstock για το συγκεκριμένο παράδειγμα, όπως παρουσιάζεται παρακάτω.



Ο παραπάνω ισχυρισμός μπορεί να υποστηριχτεί και να οπτικοποιηθεί καλύτερα αν απομονώσουμε για λίγο την περίπτωση υψηλότερης συγκέντρωσης παγίδων σε ένα διάγραμμα.



Όπου εδώ τώρα τα όρια τους <S> δεν ξεπερνούν κατά πολύ τα 1200 κι αντίστοιχα ο χρόνος / αριθμός βημάτων, όχι κατά πολύ τα 4000 σε αντίθεση με τα όρια του προηγούμενου διαγράμματος. Παρατηρώντας έτσι, την μιας τάξης μεγέθους διαφορά μεταξύ τους να γίνεται αισθητή.

Τέλος παρατηρούμε ότι και στις δύο περιπτώσεις συγκεντρώσεων, το εκάστοτε αποτέλεσμα στην θεωρητική προσέγγιση Rosenstock είναι μια οικογένεια ευθειών που προσδίδουν για κάθε μια από τις προσομοιώσεις αναλογική σχέση μεταξύ του <S> του πλήθους δηλαδή μοναδικών θέσεων απ' όπου βρέθηκε το σωματίδιο και του συνολικού αριθμού βημάτων (χρόνου).