Υπολογιστική φυσική

Φυσικό ΑΠΘ 2024

Θόδωρος Καϊμασίδης 15536

Άσκηση 2:

Στο κομμάτι αυτό αποτυπώνονται τα στάδια του προγράμματος που μελετάει στοχαστικά το φαινόμενο της διάχυσης. Η θερμοδυναμική μας λέει πως δεδομένης τρύπας μεταξύ των δοχείων μας υπάρχει ένας όγκος (3 χωρικές +χρόνος =4, 4-1 =3 διαστάσεις ->όγκος) όπου έχουμε την ροή των σωματιδίων από το Α στο Β διαμέρισμα, ο οποίος όγκος έχει μέσα του όλα τα σωματίδια με τις ταχύτητες και τους προσανατολισμούς που στο επόμενο χρονικό βήμα θα διαπεράσουν το όριο και θα αλλάξουν διαμέρισμα. Η στατιστική μας λέει πως με τα σωματίδια να παίρνουν ομοιόμορφα τυχαίες θέσεις στους όγκους η πιθανότητα μετάβασης (εδώ αφήνουμε μόνο ένα να αλλάζει μεριά) είναι ανάλογη του πλήθους στο κάθε διαμέρισμα. Δεδομένου ότι είναι ανταγωνιστική διαδικασία εύκολα βλέπει κανείς πως μπορούμε καλύτερα να χρησιμοποιήσουμε τον λόγο των πληθυσμών. Σύγκριση γίνεται με το θεωρητικό μοντέλο που, όπως σε όλα τα συστήματα όπου η πιθανότητα-ρυθμός μετάβασης εξαρτάται από το μέγεθος στο προηγούμενο βήμα έχει (αρνητική) εκθετική εξάρτηση.

Στο πρόγραμμα υπάρχουν οι 3 αρχικές συνθήκες με πλήθη 9.000, 12.000 και 120.000, και οι δύο διαφορετικές αρχικές συνθήκες: όλα στο 1 διαμέρισμα αρχικά και μοιρασμένα με συγκεκριμένο λόγο. Τα χρονικά βήματα είναι 100.000.

- Η cpu του υπολογιστή μου είναι:

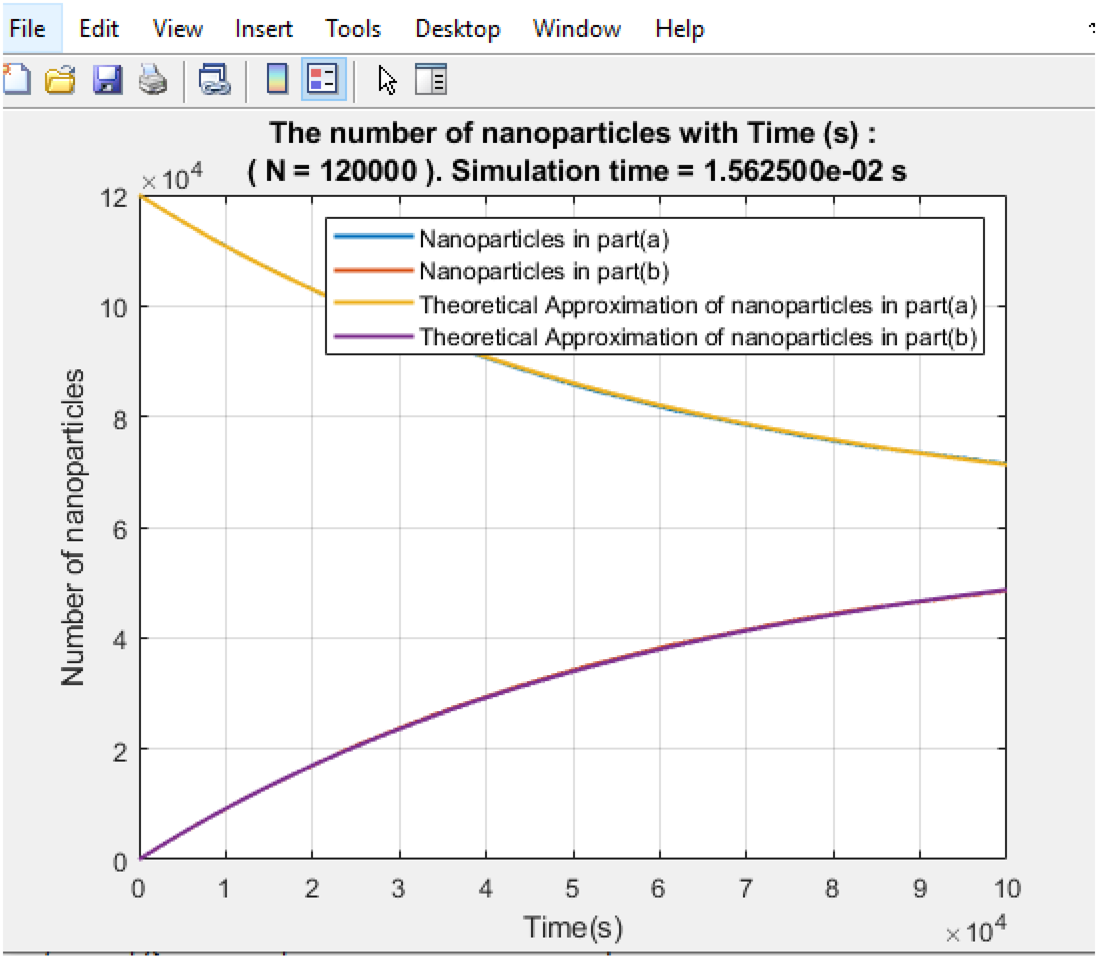
Processor	Intel(R) Core(TM) i7-3770 CPU @ 3.40GHz 3.40 GHz
Installed RAM	8,00 GB (7,88 GB usable)

Έχουμε λοιπόν την πρώτη λούπα, που πραγματοποιεί το πείραμα για τα 3 διαφορετικά πλήθη, και αρχίζουμε να μετράμε χρόνο με την εντολή tic. Ορίζονται τα αρχικά πλήθη, και σε κάθε βήμα θα συγκρίνουμε τον λόγο του πληθυσμού ενός διαμερίσματος με το πλήθος, αν αυτός είναι μεγαλύτερος από έναν τυχαίο αριθμό από το 0 ως το 1 θα έχουμε μείωση του πληθυσμού του κατά 1, και αύξηση του ανταγωνιστικού διαμερίσματος. Αυτό θα πρέπει να μας δίνει στο τέλος μία περίπου κατά $1/\sqrt{n}$ σύγκλιση προς το 50%, δηλαδή στην ισορροπία, μόνος περιοριστικός παράγοντας τα χρονικά βήματα.

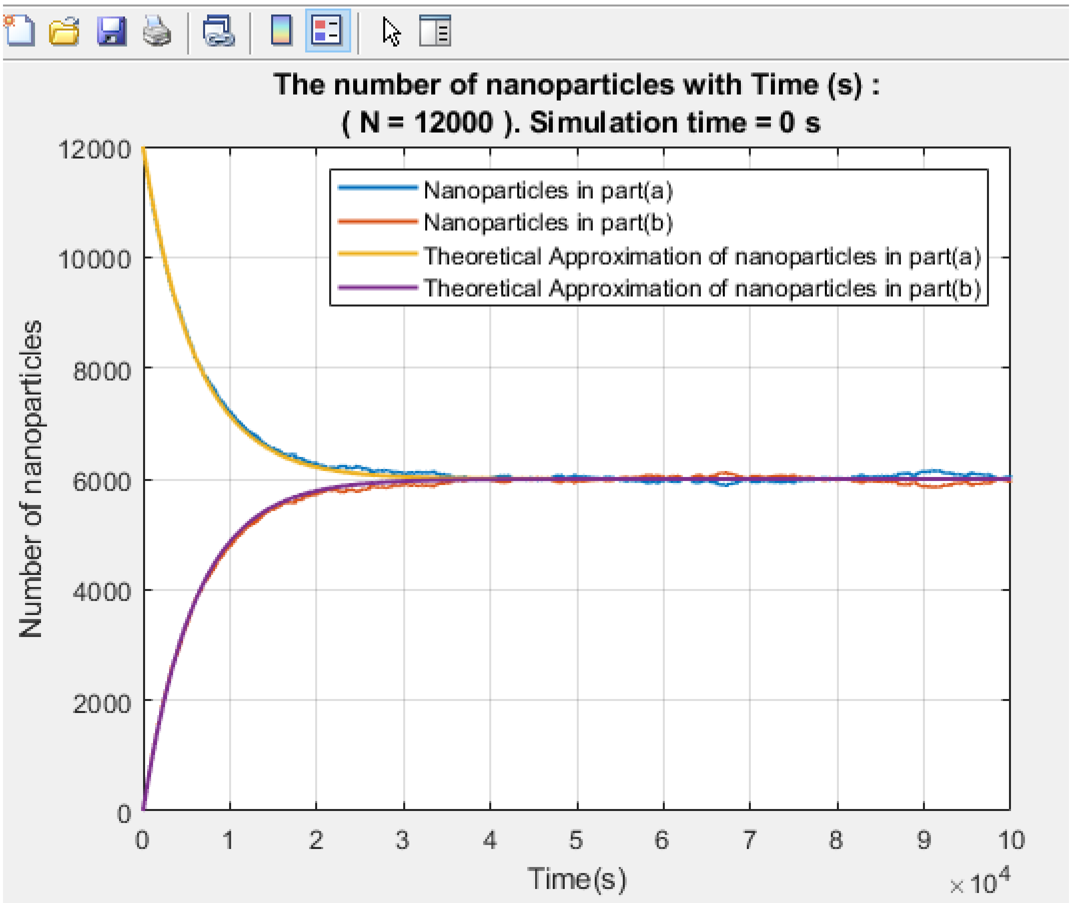
Το μόνο που αλλάζει στην δεύτερη περίπτωση με τους λόγους των πληθυσμών είναι ότι $n_1=\lambda n_2$, δεδομένου ότι $n_1+n_2=N$, θα έχουμε ότι $n_2=N/(1+\lambda)$. λ προκύπτει να είναι ο μικρότερος της μονάδας λόγος του πλήθους των ψηφίων του επιθέτου προς το πλήθος των ψηφίων του ονόματος, ή αντίστροφα.

Ο κώδικας στα αρχεία .m παραθέτω εδώ τα αποτελέσματα.

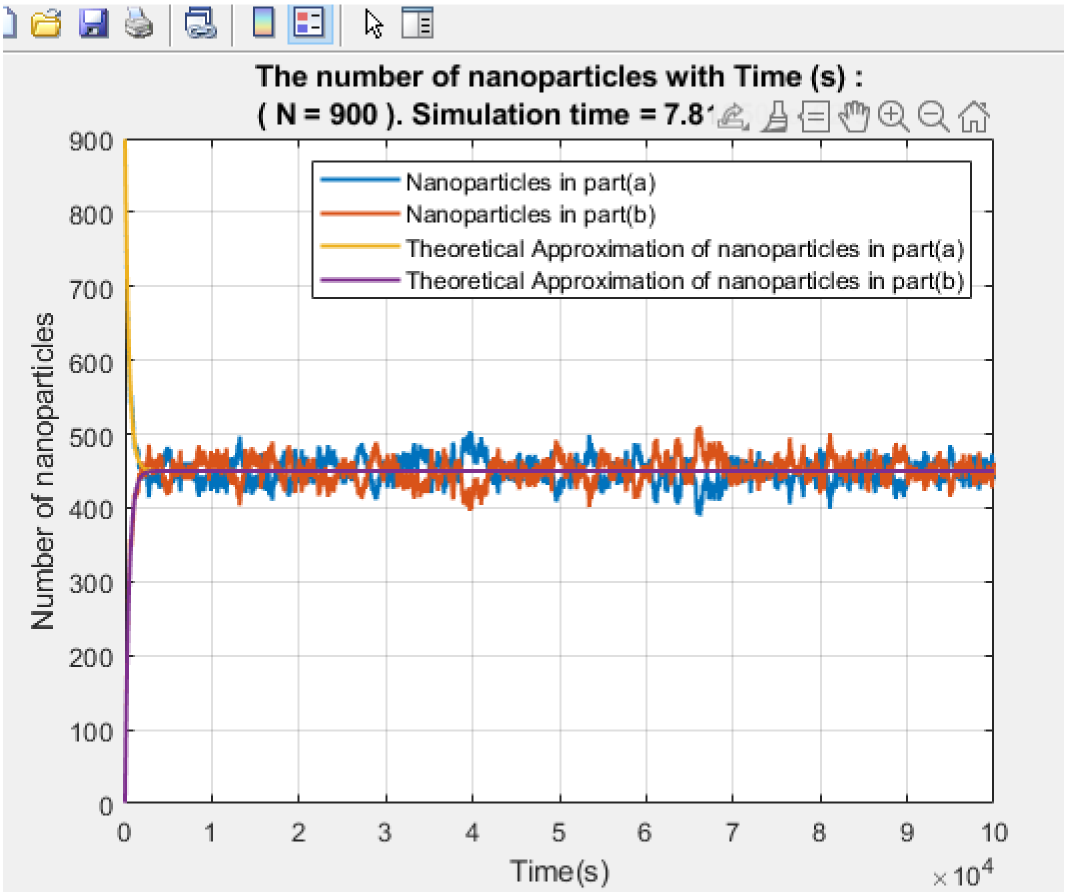
Πρώτο σκέλος:



Εικόνα 1 Η εξέλιξη του πλήθους στο Α και Β, φαίνονται οι επικαλύψεις των θεωρητικών και "πειραματικών"



Εικόνα 2 Το ίδιο για πλήθος 12000.

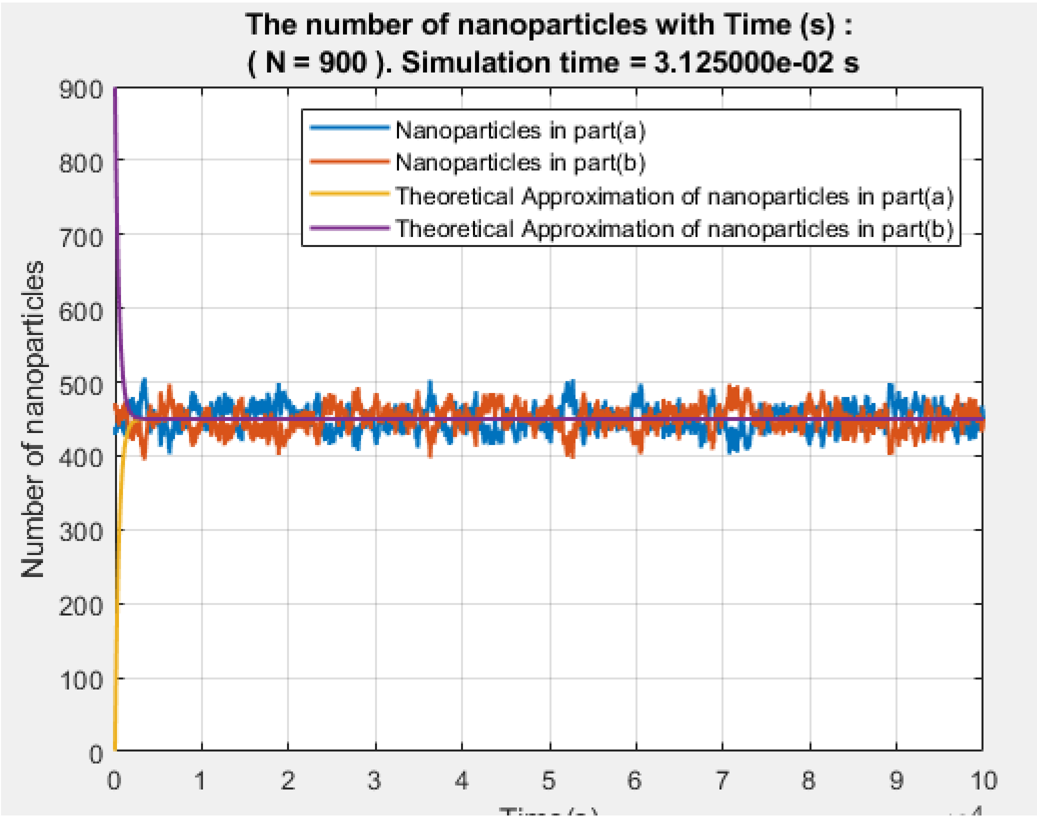


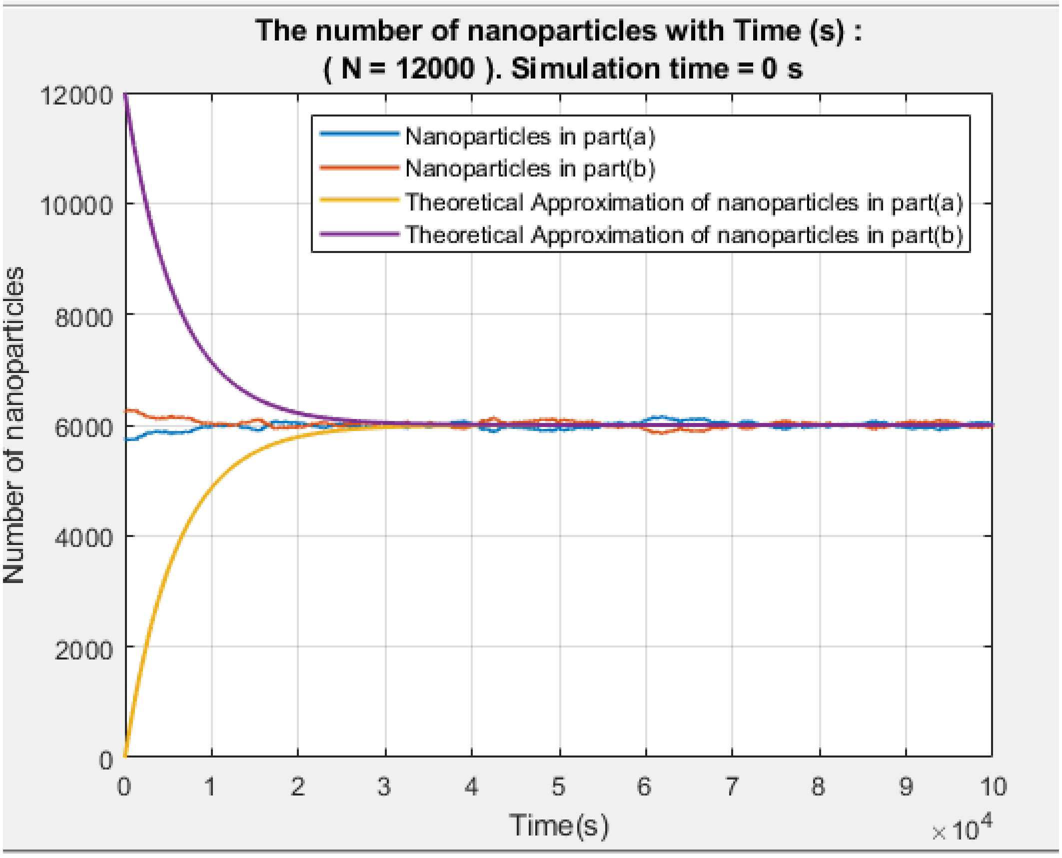
Εικόνα 3 Φαίνεται πως με τα 900 υπάρχουν όχι αγνοήσιμες αποκλίσεις.

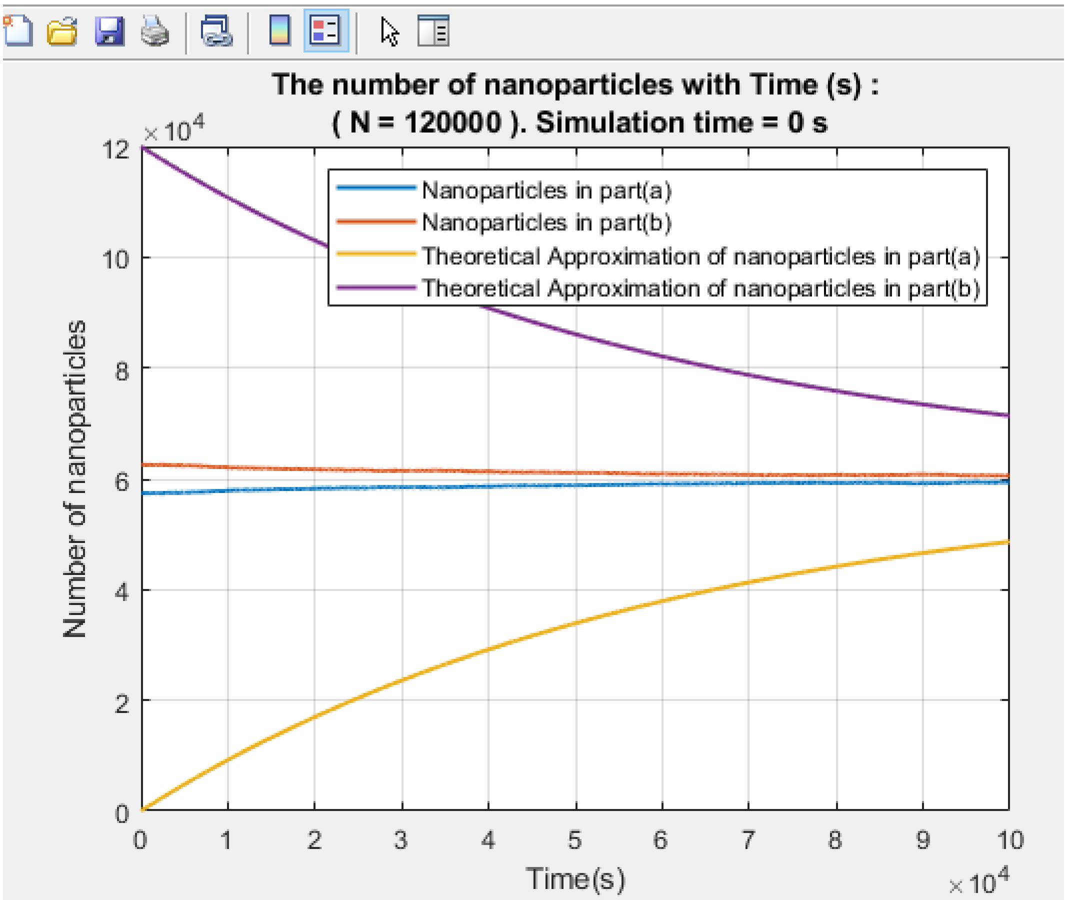
Συμπεραίνουμε πως τα αποτελέσματα ικανοποιούν τις προσδοκίες μας από τη στατιστική φυσική, με το μέγεθος χρειάζεται περισσότερος, αλλά όχι πάνω από αναλογικά περισσότερος χρόνος ηρέμησης, και με το πλήθος των σωματιδίων ανεβαίνει και η επικάλυψη των καμπυλών (δηλαδή έχουμε ομαλά αποτελέσματα).

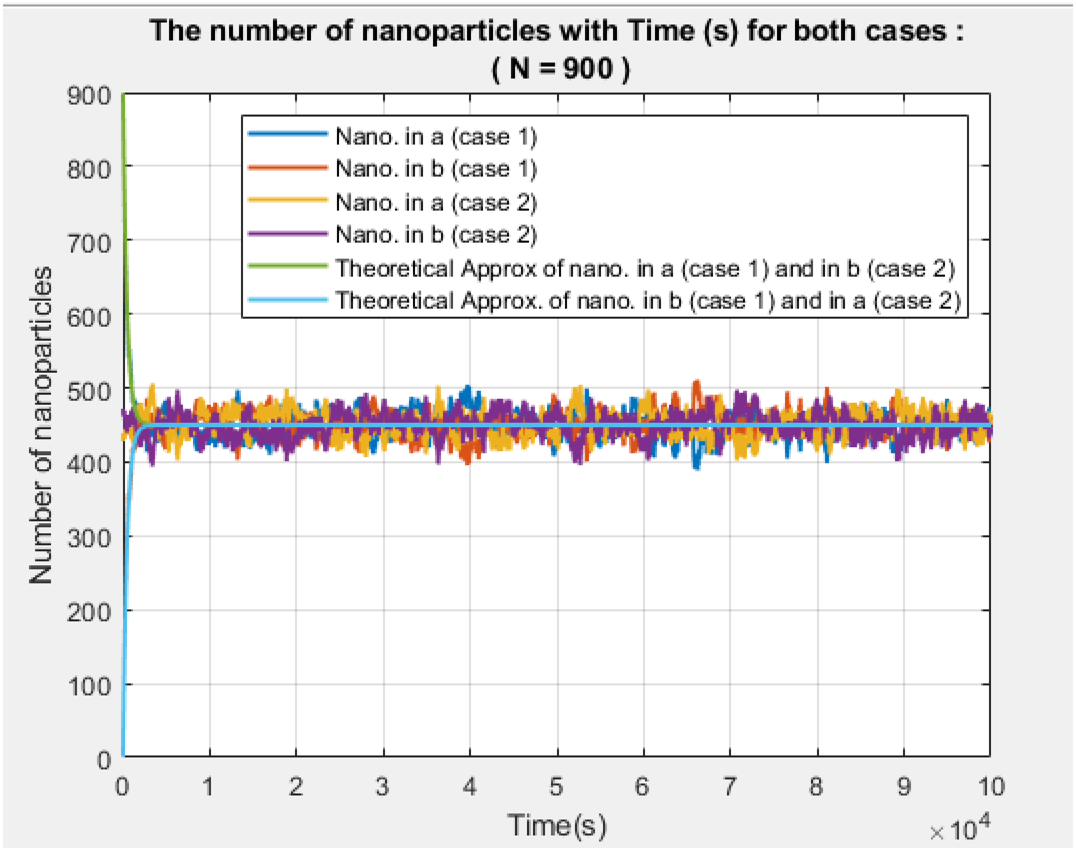
!!Στο αρχείο κώδικα έχω ορίσει σταθερό το όνομα και επίθετο για να μην μετριέται ο χρόνος απάντησης στο χρόνο της προσομοίωσης, και βγαίνει τελικά 1.369s, με cpu Intel i7.

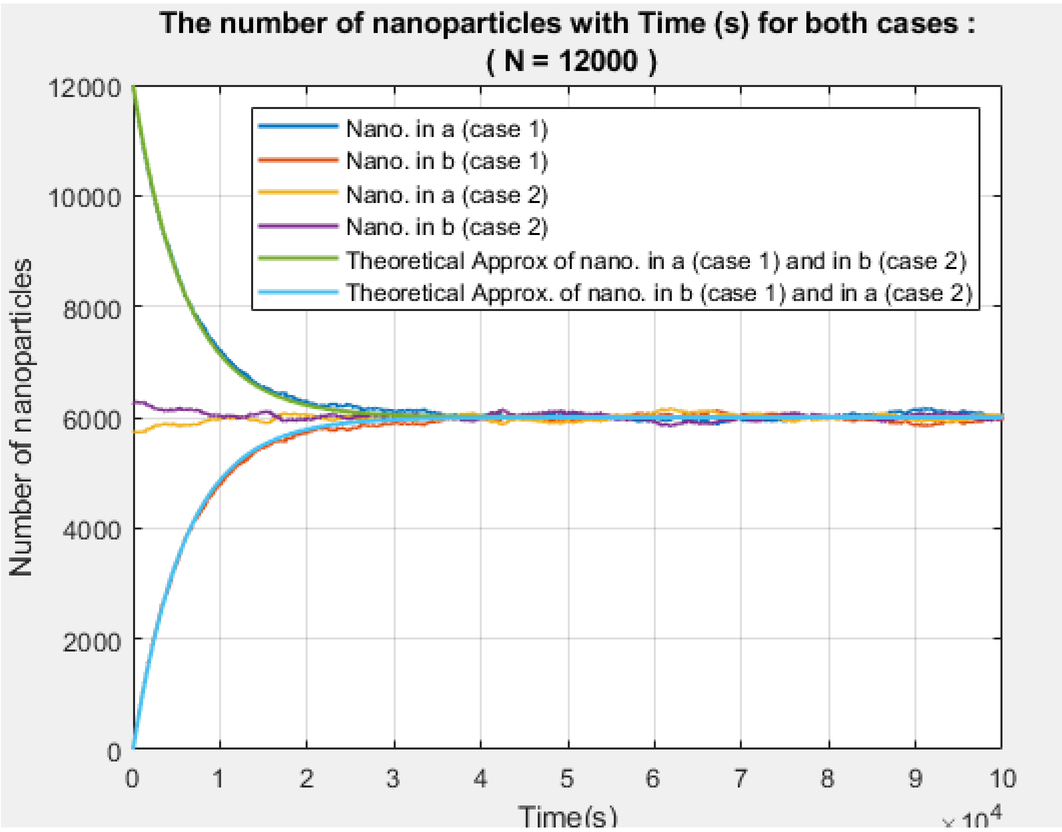
Αντίστοιχα αποτελέσματα για το δεύτερο σκέλος:

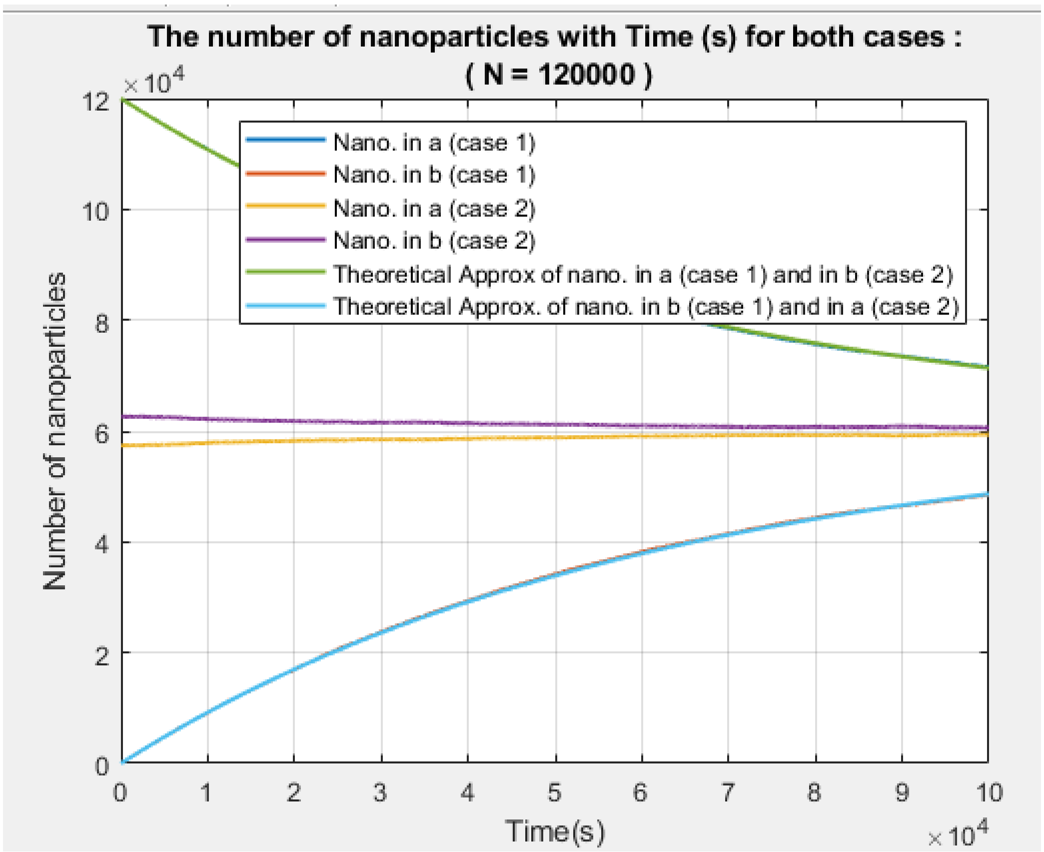



The number of nanoparticles with Time (s) :
(N = 12000). Simulation time = 0 s
Nanoparticles in part(a)
Nanoparticles in part(b)
Theoretical Approximation of nanoparticles in part(a)
Theoretical Approximation of nanoparticles in part(b)
Number of nanoparticles
Time(s)
×10^4


The number of nanoparticles with Time (s) :
(N = 120000). Simulation time = 0 s
×10^4
Nanoparticles in part(a)
Nanoparticles in part(b)
Theoretical Approximation of nanoparticles in part(a)
Theoretical Approximation of nanoparticles in part(b)
Number of nanoparticles
Time(s)
×10^4


The number of nanoparticles with Time (s) for both cases :
(N = 900)
Nano. in a (case 1)
Nano. in b (case 1)
Nano. in a (case 2)
Nano. in b (case 2)
Theoretical Approx of nano. in a (case 1) and in b (case 2)
Theoretical Approx. of nano. in b (case 1) and in a (case 2)
Number of nanoparticles
Time(s)
$\times 10^4$


The number of nanoparticles with Time (s) for both cases :
(N = 12000)
Nano. in a (case 1)
Nano. in b (case 1)
Nano. in a (case 2)
Nano. in b (case 2)
Theoretical Approx of nano. in a (case 1) and in b (case 2)
Theoretical Approx. of nano. in b (case 1) and in a (case 2)
Number of nanoparticles
Time(s)
$\times 10^4$


The number of nanoparticles with Time (s) for both cases :
(N = 120000)
×10^4
Number of nanoparticles
Time(s)
×10^4
Nano. in a (case 1)
Nano. in b (case 1)
Nano. in a (case 2)
Nano. in b (case 2)
Theoretical Approx of nano. in a (case 1) and in b (case 2)
Theoretical Approx. of nano. in b (case 1) and in a (case 2)

.