

Ασκήσεις για το μάθημα: “Μέθοδοι προσομοίωσης στην Φυσική υλικών”

(1) Δημιουργείστε ένα πρόγραμμα το οποίο βγάζει τον μέσο όρο από N τυχαίους αριθμούς οι οποίοι λαμβάνονται από μία ομαλή κατανομή τυχαίων αριθμών. Το πρόγραμμα πρέπει να τρέξει για $N=10, 100, 1000, 10000, 100000, 1000000$ τυχαίους αριθμούς. Κάντε την γραφική παράσταση του μέσου όρου ως συνάρτηση του N (όπου καλύτερα ο άξονας N να είναι λογαριθμικός). Περιγράψτε τι συμπεράσματα βγάξετε από τα αποτελέσματα. Ως αρχικό *seed* χρησιμοποιείστε τον αριθμό μητρώου σας (όπως και σε όλα τα επόμενα προβλήματα).

(2) Δημιουργείστε ένα πρόγραμμα το οποίο πραγματοποιεί μία τυχαία διαδρομή για $N=1000$ βήματα, για την περίπτωση συστημάτων (α) 1 διάστασης και (β) 2 διαστάσεων. Το πρόγραμμα πρέπει να υπολογίζει το τετράγωνο της μετατόπισης, R^2 . Τρέξτε το πρόγραμμα για 10000 runs, και βρείτε τον μέσο όρο του R^2 .

(3) Χρησιμοποιείστε το προηγούμενο πρόγραμμα για να προσδιορίσετε το $\langle R^2 \rangle$, αλλά τώρα κάθε 100 βήματα, από 1 μέχρι και το 1000. Βρείτε το μέσο όρο για 10000 runs. Κάντε την γραφική παράσταση των αποτελεσμάτων. Βρείτε με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων την βέλτιστη ευθεία. Σχολιάστε τα αποτελέσματά σας.

(4) Δημιουργείστε ένα πρόγραμμα το οποίο πραγματοποιεί μία τυχαία διαδρομή για $N=1000$ βήματα, σε 1 διάσταση, όπως ακριβώς στο πρόβλημα 2. Υπολογίστε την σχετική απόσταση (R) που διανύεται μετά από τα N βήματα, για 100000 runs. Ακολουθώντας, κάνετε την κατανομή των τιμών του R . Επαναλάβετε το ίδιο για $N=500$ βήματα. Κάνετε την γραφική παράσταση των δύο κατανομών για τις δύο τιμές του N . Τι συμπεράσματα βγάξετε από τις δύο καμπύλες? Τέλος, κάνετε την γραφική παράσταση από την αναλυτική λύση των κατανομών, στο ίδιο γραφήμα.

(5) Δημιουργήστε ένα πλέγμα 2 διαστάσεων μεγέθους πλευράς $L=100$. Τοποθετήστε τυχαία μέσα στο πλέγμα μία οπή (hole). Στην συνέχεια τοποθετήστε τυχαία ένα ηλεκτρόνιο (electron) το οποίο πραγματοποιεί τυχαίο περίπατο (random-walk) μέσα στο πλέγμα. Όταν το ηλεκτρόνιο συναντά την οπή η προσομοίωση σταματά (*e-h recombination*). Αν το ηλεκτρόνιο ύστερα από κάποιον χρόνο τ (electron life-time) δεν έχει βρεί την οπή εξαφανίζεται από το σύστημα και μία νέα προσομοίωση ξεκινάει από την αρχή. Πραγματοποιούμε την παραπάνω διαδικασία για $N=10^4$ φορές. Κατόπιν, υπολογίστε την απόδοση ενός φωτοβολταϊκού το οποίο δουλεύει κάτω από αυτές της συνθήκες (recombined electrons/total electrons). Παρουσιάστε τα αποτελέσματά σας για $\tau = 100, 1000, 10000$. Τι παρατηρείτε;

(6) Δημιουργείστε ένα πλέγμα δυο διαστάσεων σε δύο μεγέθη, 200×200 και 400×400 . Οι θέσεις του πλέγματος θα γίνουν 0 ή 1 με πιθανότητα p να είναι 1 και $(1-p)$ να είναι 0. Ακολουθώντας εφαρμόστε τον αλγόριθμο CMLT ώστε να βρείτε την πλήρη κατανομή των συσσωματωμάτων (clusters). Μεταβάλετε το p από 0.1 ως 0.8 αρχικά με $\Delta p=0.1$, αλλά κοντά στο κρίσιμο σημείο p_c με $\Delta p=0.01$. Έτσι βρείτε το κρίσιμο σημείο p_c . Υπολογίστε την ποσότητα $P_{max}=C_{max}/N^2$, (όπου C_{max} το μέγεθος του μεγαλύτερου συσσωματώματος), ως συνάρτηση του p . Απεικονίστε τα αποτελέσματα σε κοινό διάγραμμα. Τι παρατηρείτε;