

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



Oddelek za fiziko

MODELSKA ANALIZA I

Poročilo zaključne naloge

Jernej CUCEK
28172019

MENTOR: Dr. Simon Čopar
Ljubljana, 2017/2018

1 Thomsonov problem

Povzetek

Pri nalogi rešujem Thomsonov problem z uporabo Metropolisovega algoritma. Sprva je bilo potrebno poiskati razporeditev nabojev na sferi, in sicer takšno, ki poda čim nižjo elektrostatično energijo. Z algoritmom je mogoče preučiti tudi vpliv temperature nanjo. Pri tem opazujemo odvisnost energije, njenih povprečnih kvadratnih odmikov in nekaterih ureditvenih parametrov od temperature sistema s čimer zaznamo fazni prehod sistema zaradi segretja.

1.1 Uvod

Pri Thomsonovem problemu na prevodno kroglo nanesemo neko število enakih (klasičnih) nabojev N_e , pri čemer nas zanima, kako se razmestijo po površini. Diskrete točkaste naboje z $q_i = q_j = 1$ nanašamo na enotsko kroglo z radijem $r_0 = 1$. Elektrostatična energija, ki jo poskušamo minimizirati, se za vsak par računa po enačbi

$$V_{ij}(r) = C \cdot \frac{q_i q_j}{r_{ij}} , \quad (1.1)$$

kjer brez izgube splošnosti nastavimo še $C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 1$. Potencialna energija med vsakim parom enotskih nabojev je tako odvisna le od medsebojne razdalje r_{ij} med njima.

Pri reševanju problema v sferičnih koordinatah položaje na krogli opišemo z dvema koordinatama sferičnega sistema, $\theta \in [0, \pi]$ in $\phi \in [0, 2\pi]$. Razdaljo med pari nabojev pa računamo kot

$$r_{ij} = \sqrt{r_i^2 + r_j^2 - 2r_i r_j (\cos \theta_i \cos \theta_j + \sin \theta_i \sin \theta_j (\cos \phi_i \cos \phi_j + \sin \phi_i \sin \phi_j))} . \quad (1.2)$$

Skupna potencialna energija sistema je tako vsota elektrostatičnih energij vseh parov N nabojev na krogli

$$V_N = \sum_{i < j} V_{ij} = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} . \quad (1.3)$$

Ko želimo poiskati ravovesno stanje takega sistema zahtevamo seveda minimum elektrostatične energije.

Z uporabo Metropolisovega algoritma se naloge lotimo tako, da N_e nabojev na sfero najprej nanesemo naključno. Nato izvajamo premike nabojev in pri vsaki potezi računamo le nastalo spremembo energije ΔV_N . Po premiku naključno izbranega naboja q_i za potezo $\theta_i, \phi_i \rightarrow \theta'_i \phi'_i$ to izvedeno potezo sprejmemo, če je $\Delta V_N < 0$. S tem smo namreč sistem spravili v energijsko ugodnejše stanje. V kolikor pa je $\Delta V_N > 0$ potezo zavrzemo, oziroma če vpeljemo vpliv temperature T , potezo sprejmemo z verjetnostjo $p = e^{-\Delta V_N/T}$. Pri tem naključno nižamo oziroma višamo energijo.

V nadaljevanju so najprej predstavljeni rezultati izračunov minimizacije energije sistema za različna števila N_e . Pri tem delu vse poteze z $\Delta V_N > 0$ zavrzem in rezultate primerjam z vrednostimi povzetimi po viru [2]. V drugem delu računanje začнем s porazdelitvijo nabojev v stanju minimalne energije in v algoritmu $\Delta V_N > 0$ dovolim sprejem potez z verjetnostjo $p = e^{-\Delta V_N/T}$, ter tako opazujem vpliv temperturnih fluktuacij na sistem nabojev. Na ta način se izognem dolgemu "burn in"-u sistema v ravovesno stanje.

Komentar k reševanju

Računanje je izvedeno v Python-u s, kjer sta večino časa v uporabi v knjižnici `numpy` in `scipy` opisani v spletnem viru [3]. Za naključno porazdelitev je uporabljen vgrajeni generator naključnih števil iz modula `random`; natančneje, pri reševanju naloge sta uporabljeni generatorja `np.random.int()` in `np.random.normal()`. Slednji omogoča poljubno izbiro širine normalne porazdelitve po kateri so nato števila generirana. Porazdelitev nabojev, ki ustrezha vrednosti minimalne energije po viru [2] z ujemanjem do devetega decimalnega mesta, sem računal s pomočjo minimizacijske metode modula `scipy.optimize`, ki vsebuje funkcijo `minimize(method='L-BFGS-B')`. Za računanje nekaterih ureditvenih parametrov sistema pa sem se poslužil funkcije `scipy.special.sph_harm()`, ki omogoča računanje vrednosti sferičnih harmonikov. Nazadnje naj omenim, da sem za prikaz rezultatov v obliki grafov in animacij uporabil modula `animation` in `pyplot` iz knjižnice `matplotlib`.

1.2 Iskanje razmestitve nabojev po sferi za V_{min}

Iskanja minimalne energije sem se lotil z naključno izbiro enega od nabojev predhodno naključno razmeščenih po sferi. Naboj sem nato premaknil za kota $d\theta$ in $d\phi$. Slednja sem določil s pomočjo funkcije `np.random.normal(0, σ)`, ki vrne števila porazdeljena po normalni porazdelitvi s širino $σ$ okrog vrednosti 0. Za širino porazdelitve je uporabljena groba ocena razdalje do najbližjega soseda $r \approx \sqrt{8\pi/N\sqrt{3}}$; saj za N delcev lahko rečemo, da je trikotnikov približno $2N$, kar pomeni približno $2\pi/N$ za ploščino $S = r^2\sqrt{3}/4$ enakostraničnega trikotnika. Sledil je izračun energij potrebnih za določitev vrednosti $ΔV_N$ in sicer po enačbi (1.3) za novo in staro konfiguracijo. Pri tem delu naloge sem vse poteze z $ΔV_N > 0$ zavrgel, da bi uspel čim prej doseči minimalno energijo. Da bi konvergenca hitreje stekla, sem enega od nabojev fiksiral z namenom omejiti vrtenje celotne konfiguracije po sferi. Dodatno sem skaliral še širino porazdelitve takrat, ko je bil minimum energije že blizu iskani vrednosti, ter tako dal še večjo prednost žrebu krajših potez oz. manjših popravkov k energiji.

1.2.1 Minimizacija za $N_e = 7$ nabojev brez upoštevanja temperaturnih fluktuacij

Spodaj so predstavljeni izračuni za konfiguracijo z $N_e = 7$ naboji in številom vseh žrebov omejenim na $i = 10^4$. Za začetno širino normalne porazdelitve sem izbral $σ_0 = \sqrt{8\pi/N_e\sqrt{3}}$. Izračunane energije V_N^k za vsako sprejeto k -to potezo sem primerjal z vrednostjo energije $V_N^{[2]}$ iz vira [2] in po dosegu odstopanja za manj kot $|V_N^k - V_N^{[2]}| < 0.01$ vrednost $σ_0$ zmanjšal za velikostni red in tako med konvergenco omogočil žreb krajših premikov k konfiguraciji z minimalno energijo. S tem sem želel pospešiti konvergenco in se izogniti žrebu neuporabnih dolgih skokov.

Tekom konvergencije sem poleg energije sistema računal še povprečne kvadratne odmike energije, spremembo težišča in vrednosti nekaterih višjih multipolnih momentov; slednje kar po sferičnih harmonikih kot $\langle Y_l^m \rangle = \sum_{\phi,\theta} Y_l^m(\phi,\theta)/N_e$, kjer vsota teče po vseh naboljih. Vsota kvadratov m -komponent $Y_l = \sum_m \langle Y_l^m \rangle^2$ za vsak l je invariantna mera, ki se uporablja za kvantifikacijo sferičnih porazdelitev. Vsoto sem po vsaki sprejeti potezi povprečil, da bi iz grafa teh vrednosti mogoče znal prehod med prostorsko urejeno in neurjeneno porazdelitvijo nabojev.

Rezultate izračunov za razporeditvi z $N_e = 7$ naboji predstavljam v nadaljevanju.

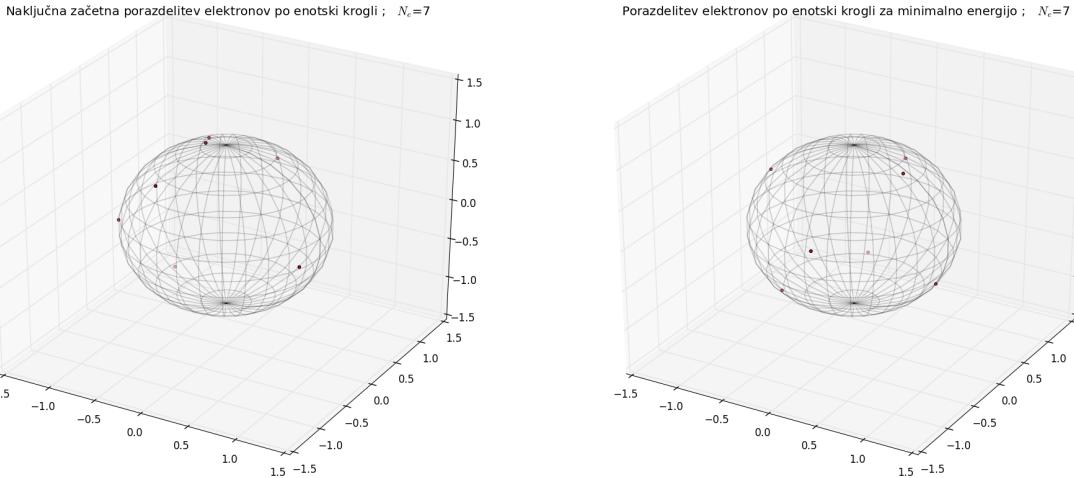
Simetrična konfiguracija 5-strane bipiramide

Računanje pričnemo z naključno razporeditvijo nabojev, ki po $k = 2416$ sprejetih potezah (od 10^4 izvedenih) preide v simetrično konfiguracijo, kot je to razvidno iz slike 1.1.

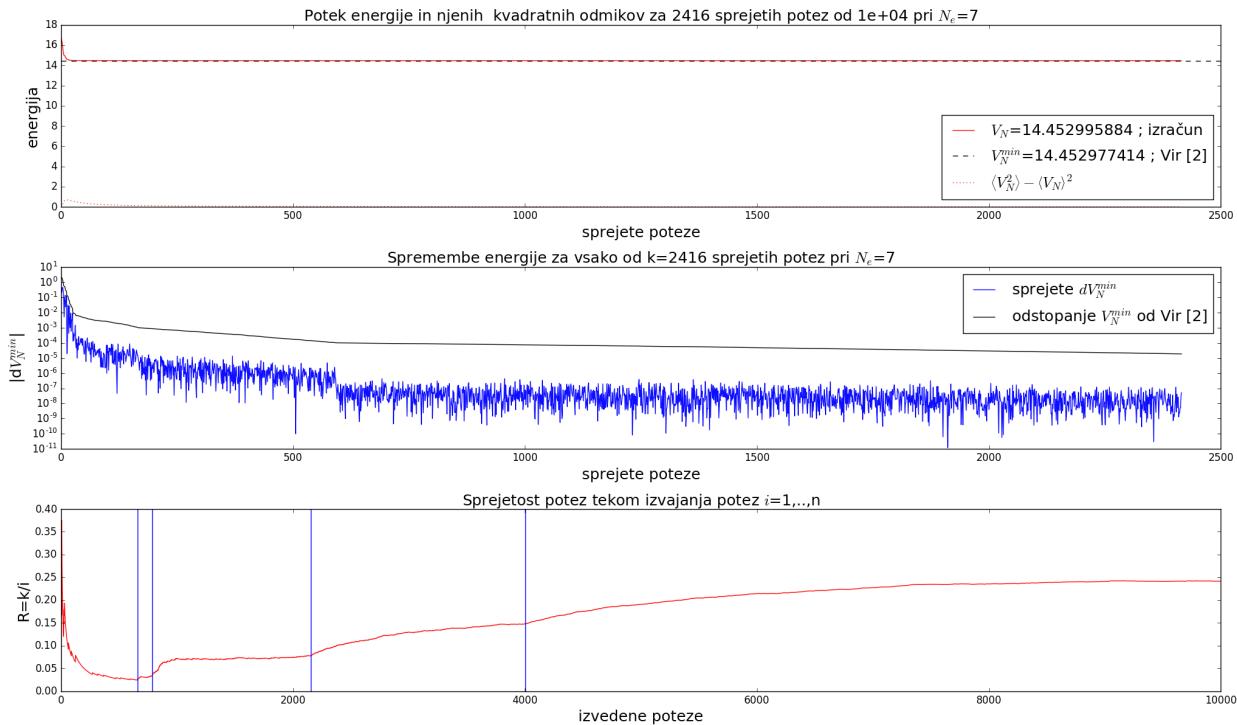
Energije računane tekom minimizacije so prikazane na sliki 1.2. Od tu opazimo, da energija potrebuje nekaj časa, da se približa minimalni, pri tem pa so popravki k minimalni energiji $|dV_N^{min}|$ vedno manjši. Kvadratni odmiki energije sprva narastejo in dosežejo nek maksimum, nato pa tudi ti padejo proti ničli. Sprejetih je tudi vedno manj potez, kar je razvidno iz sprotnegra računanja razmerja $R = i/k$ med izvedenimi in sprejetimi potezami, prikazanega na spodnjem grafu slike 1.2. Ko je doseženo odstopanje za manj kot $|V_N^k - V_N^{[2]}| < 0.1$ (os. vsak naslednji velikostni red) in je $σ$ zmanjšan za desetino, se sprejemanje izvedenih potez poveča, kar potrdi predpostavko, da blizu minimuma krajši skoki postanejo pomembnejši, daljši pa nezaželeni.

Z deset tisoč izvedenimi potezami je doseženo odstopanje $|V_N^k - V_N^{[2]}| \approx 10^{-5}$, s čimer lahko potrdim ustrezno delovanje algoritma, ki ga je potrebno le dopolniti za modeliranje termičnega efekta.

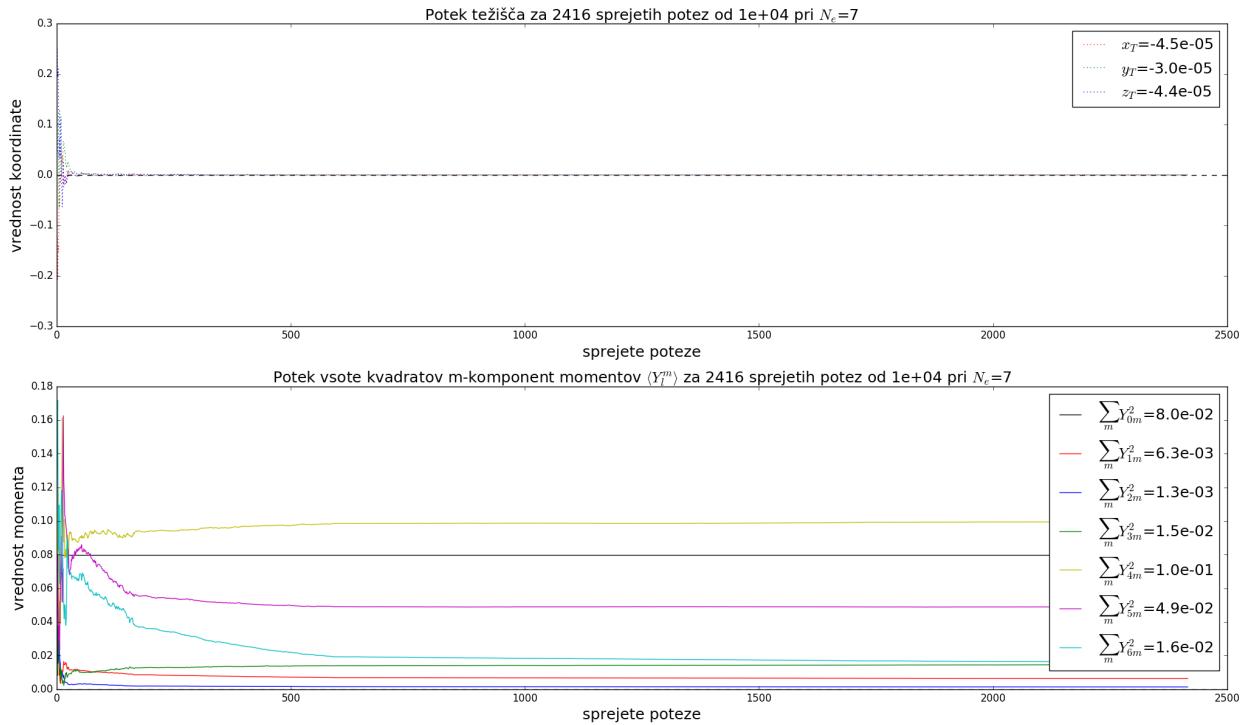
Rezultati vzporednega računanja ureditvenih parametrov, ki so prikazanih na sliki 1.3, prav tako potrdijo intuitivno pričakovanje, da položaj težišče naboja teži k sredini sfere oz. ničelnim vrednostim izhodišča koordinatnega sistema. Vrednosti višjih ureditvenih momentov se po prerazporeditvi nabojev ustalijo pri različnih vrednostih značilnih za stabilno konfiguracijo.



Slika 1.1: Položaji naključno namešenih sedmih nabojev pred minimizacijo (levo), in po minimizaciji z $i = 10^4$ izvedenimi potezami (desno). Videti je, da se dva naboja postavita na diametralna pola, preostali pa se razvrstijo po vmesni ekvatorialni ravnini in tako skupaj tvorijo približek robov 5-strane bipiramide. Animacija poteka sprejemanja potez je dostopna na povezavi *N7_sim_anim*.



Slika 1.2: Vrednost minimizirane elektrostatske energije za $N_e = 7$ po viru [2] in izračuni energije ter njenih povprečnih kvadratnih odmikov po opisani metodi tekom sprejemanja potez minimizacije (zgoraj). Vrednost kvadratnih odmikov v prvih nekaj potezah naraste in nato, ko se energija približa minimalni za nekaj velikostnih redov natančno, spet pada. Odstopanja izračunov od vrednosti iz [2] in absolutne vrednosti sprejetih popravkov k energiji tekom minimizacije (sredina). Razmerje vseh sprejetih in izvedenih potez (spodaj), kjer je z modro barvo označen preklop vrednosti σ na desetino manjšo vrednost. Videti je, da prične po preklopu na manjši σ razmerje R zopet naraščati. Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^4$; od teh je bilo sprejetih $k = 2416$ potez.



Slika 1.3: Vzporedno računane vrednosti ureditvenih parametrov tekom sprejemanja potez. Položaj težišča naboja (levo) teži k ničelnim vrednostim koordinat. Vrednosti višjih momentov (desno) se ustalijo pri različnih vrednostih.

1.3 Vpliv temperature na razmestitve nabojev po sferi za $V(T)$

Za preverjane vpliva temperature sem algoritem za minimizacijo elektrostatične energije sistema le dopolnil. Tokrat nobeden od nabojev ni bil fiksiran, poteze z $\Delta V_N > 0$ pa sem sprejemal z verjetnostjo $p = e^{-\Delta V_N/T}$. Dodatno je tokrat razporeditev nabojev za začetno stanje že ustrezala vrednosti minimalne energije $V_N^{[2]}$ povzete po viru [2].

V nadaljevanju predstavljam rezultate izračunov za razporeditvi z $N_e = 6$ naboji.

1.3.1 Temperaturne fluktuacije za $N_e = 6$ nabojev

Spodaj so predstavljeni izračuni za konfiguracijo z $N_e = 6$ naboji pri temperaturah $T = 0.5$, $T = 10$ in $T = 0.01$ ter številom vseh žrebov omejenim na $i = 10^3$ oziroma $i = 10^4$ za nižjo temperaturo, slednje z namenom zagotovitve boljše statistike sprejetih potez. Širino normalne porazdelitve premikov sem tokrat pustil fiksno z vrednostjo $\sigma_0 = \sqrt{8\pi/N_e\sqrt{3}}$.

Izračunane energije V_N^k za vsako sprejeto k -to potezo pri pogoju $\Delta V_N < 0$ in vsako l -to potezo pri pogoju $p = e^{-\Delta V_N/T}$ sem primerjal z vrednostjo energije $V_N^{[2]}$. Tekom konvergence sem poleg energije sistema računal še spremembo težišča in nekaterih višjih multipolnih momentov.

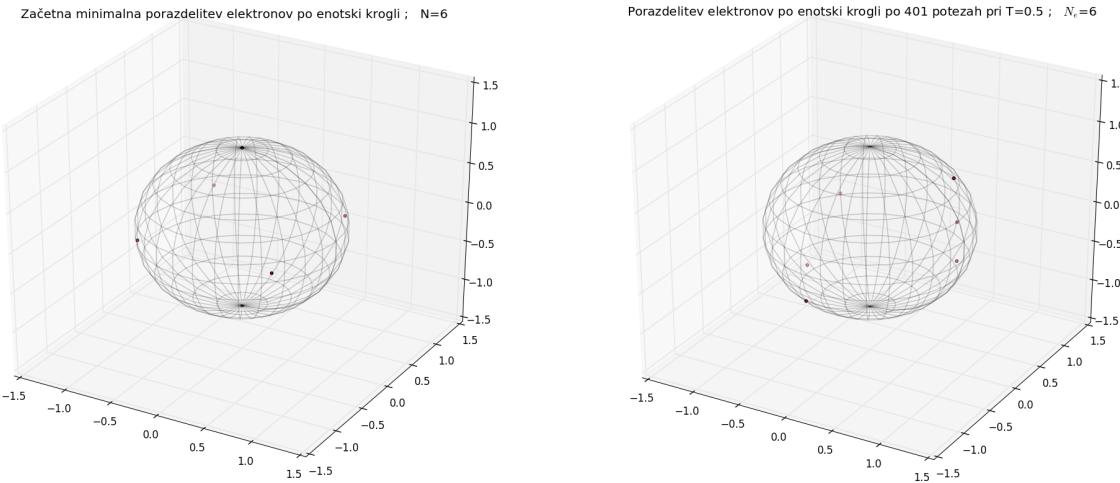
Temperaturne fluktuacije za $T = 0.5$

Slika 1.4 prikazuje položaj nabojev na sferi pred začetkom fluktuacije in po izvedenih vseh potezah. Lepo je razvidna začetna simetrična porazporeditev, ki se po izvedenih 10^3 potezah pokvari. Pri $T = 0.5$ je bilo sprejetih okrog 400 potez. Na sliki 1.5 sta prikazana še histograma normalne porazdelitve velikosti premikov $d\theta$ in $d\phi$ sprejetih potez, ki namigujeta na izvor iz normalne porazdelitve.

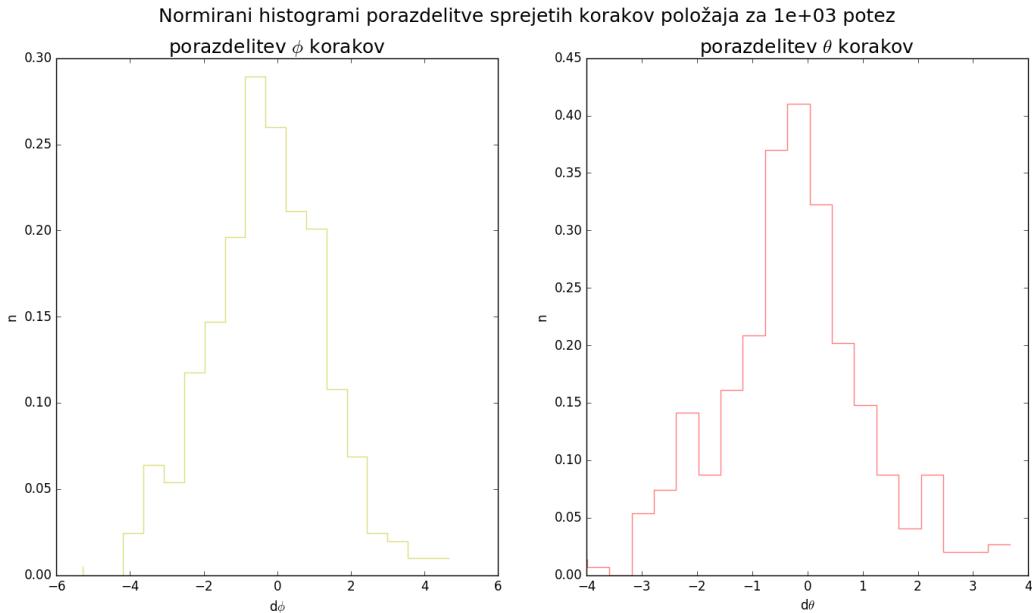
Potek energije in sprejemanja potez je razviden iz slike 1.6. Kmalu po začetku simulacije sistem s sprejemom poteze $p = e^{-\Delta V_N/T}$ pada iz ravovesnega stanja, v katero pa se želi vrniti, a to ni več

stabilen sistem za minimalno energijo. V začetnem delu simulacije kvadratni odmiki energije najbolj narastejo, ko pa prične energija fluktuirati okrog neke vrednosti, se ustalijo tudi njeni kvadratni odmiki. Sprva je precej več potez sprejetih pri pogoju $\Delta V_N > 0$, vendar se sčasoma delež teh izenači s potezami sprejetimi pri pogoju $\Delta V_N < 0$. To je pričakovano, saj premiki pri po odmiku iz minimuma spet pripomorejo k izboljšanju konfiguracije, oba efekta pa nadalje dosežeta neko ravnovesje.

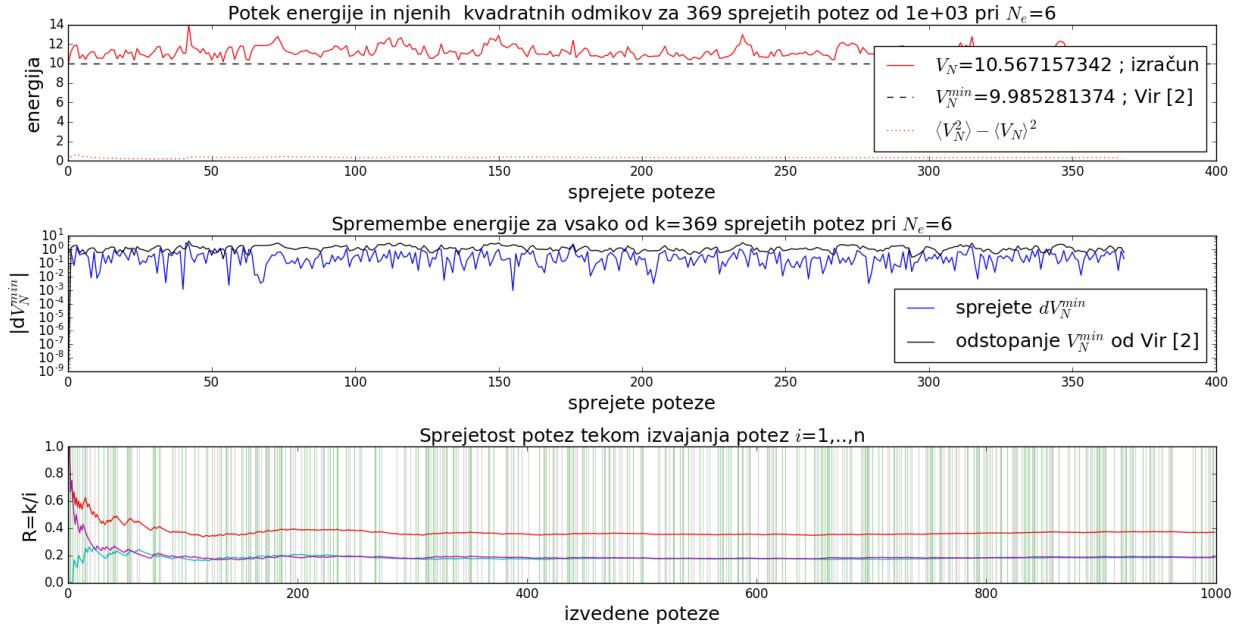
Iz slike 1.7 je razbrati tudi pričakovano fluktuiranje težišča okrog izhodišča ter kaotično spremiščanje ostalih ureditvenih parametrov.



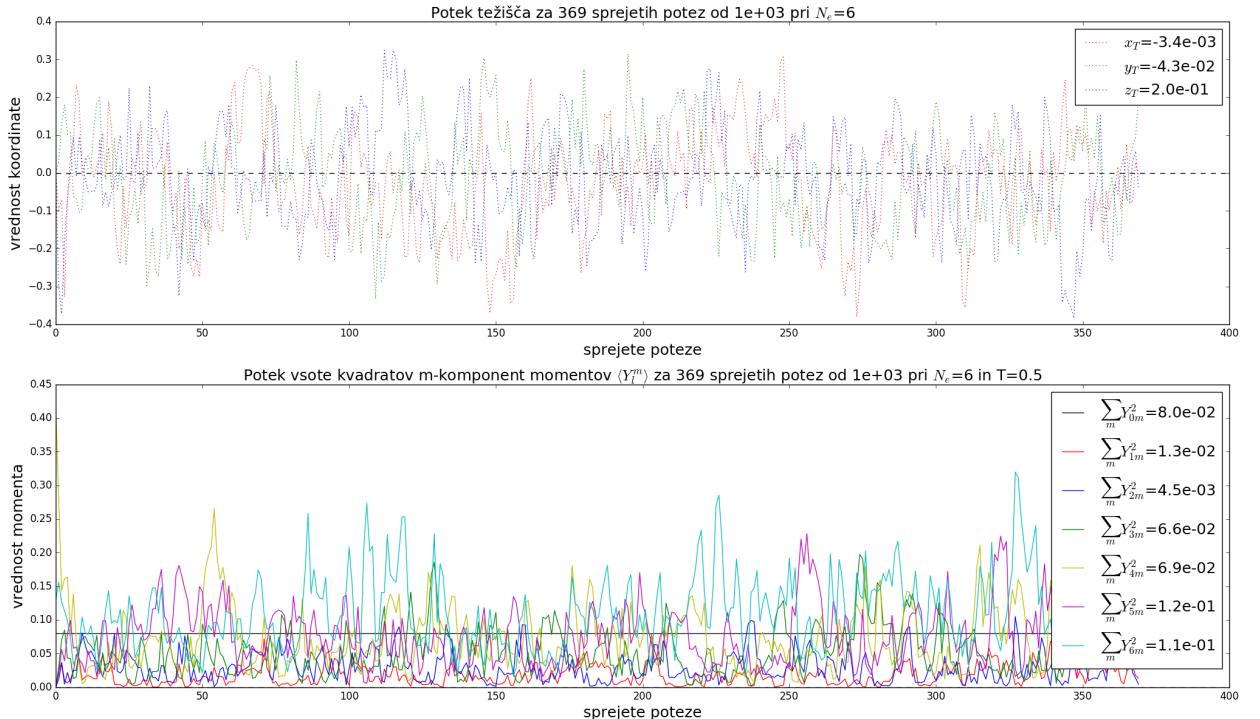
Slika 1.4: Položaji optimalno nanešenih šestih nabojev pred temperaturno fluktuacijo (levo), in po fluktuaciji pri $T = 0.5$ in $i = 10^3$ izvedenimi potezami (desno). Videti je, da se se simetrična konfiguracija pokvari. Animacija primera poteka sprejemanja potez je dostopna na povezavi *N6_T05_sim_anim*.



Slika 1.5: Histograma porazdelitve velikosti premikov $d\theta$ (desno) in $d\phi$ (levo) vseh sprejetih potez. Obe porazdelitvi sta pričakovano blizu normalne.



Slika 1.6: Vrednosti elektrostatske energije za $N_e = 6$ tekom temperaturne fluktuacije (zgoraj). Energija naraste in prične nihat okrog neke ravnovesne vrednosti kjer ob vsakem večjem odstopanju vrednost njenih kvadratnih odmikov naraste. Odstopanje izračunov od vrednosti $V_N^{[2]}$ seveda prav tako naraste, absolutne vrednosti sprejetih popravkov k energiji $|dV_N|$ pa nihajo okrog neke ravnovesne vrednosti (sredina). Razmerje vseh sprejetih in izvedenih potez R ostane blizu vrednosti 0.4 (spodaj). Razmerji K in L potez posameznega sprejemnega pogoja, prikazani na taistem grafu, pa se ujameta pri polovčni vrednosti 0.2. Z zeleno barvo je označen sprejem potez za pogoj $\Delta V_N > 0$, s sivo pa sprejem za pogoj $\Delta V_N < 0$. Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^3$; od teh je bilo sprejetih $k + l = 369$ potez.

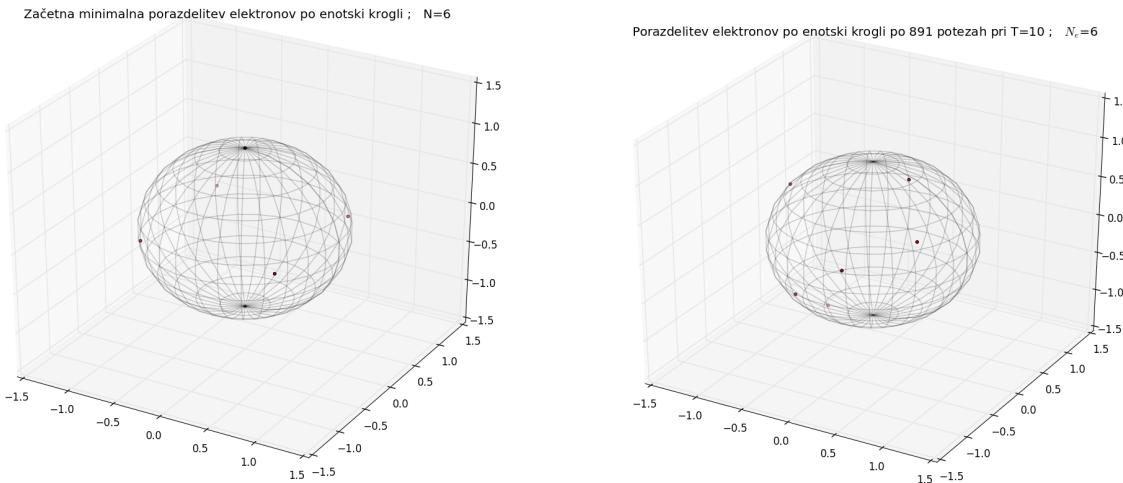


Slika 1.7: Vzporedno računane vrednosti ureditvenih parametrov tekom sprejemanja potez. Položaj težišča naboja pobegne stran od ničelnih vrednosti koordinat (zgoraj). Vrednosti višjih momentov prično fluktuirati (spodaj).

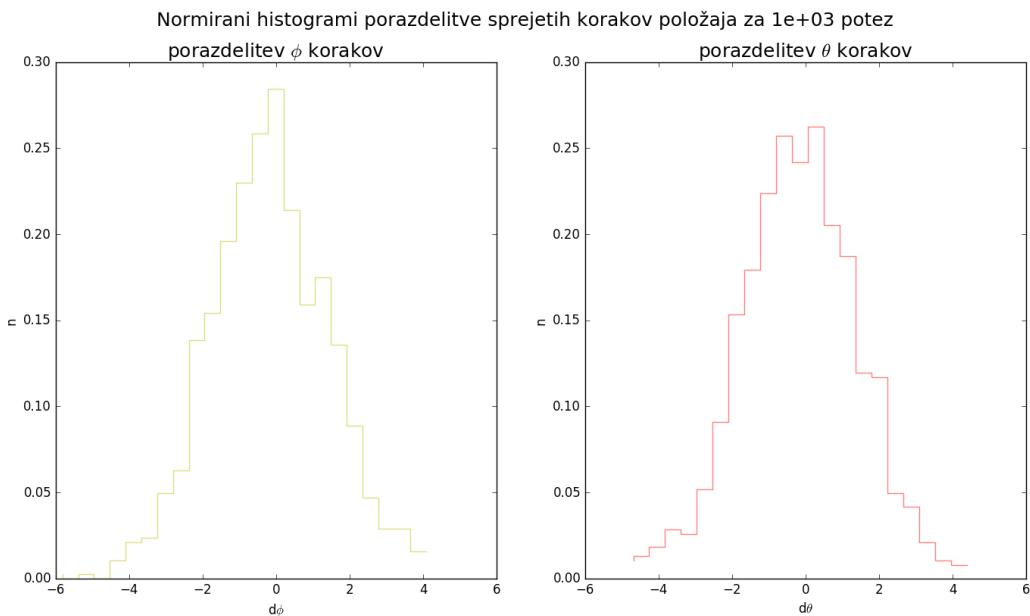
Temperaturne fluktuacije za $T = 10$

Slika 1.8 prikazuje položaj nabojev na sferi pred začetkom fluktuacije in po izvedenih vseh potezah. Pri $T = 10$ je bilo sprejetih okrog 900 potez od 10^3 . Na sliki 1.9 prikazana histograma sta zaradi boljše statistike že bližje normalni porazdelitvi velikosti premikov $d\theta$ in $d\phi$ sprejetih potez.

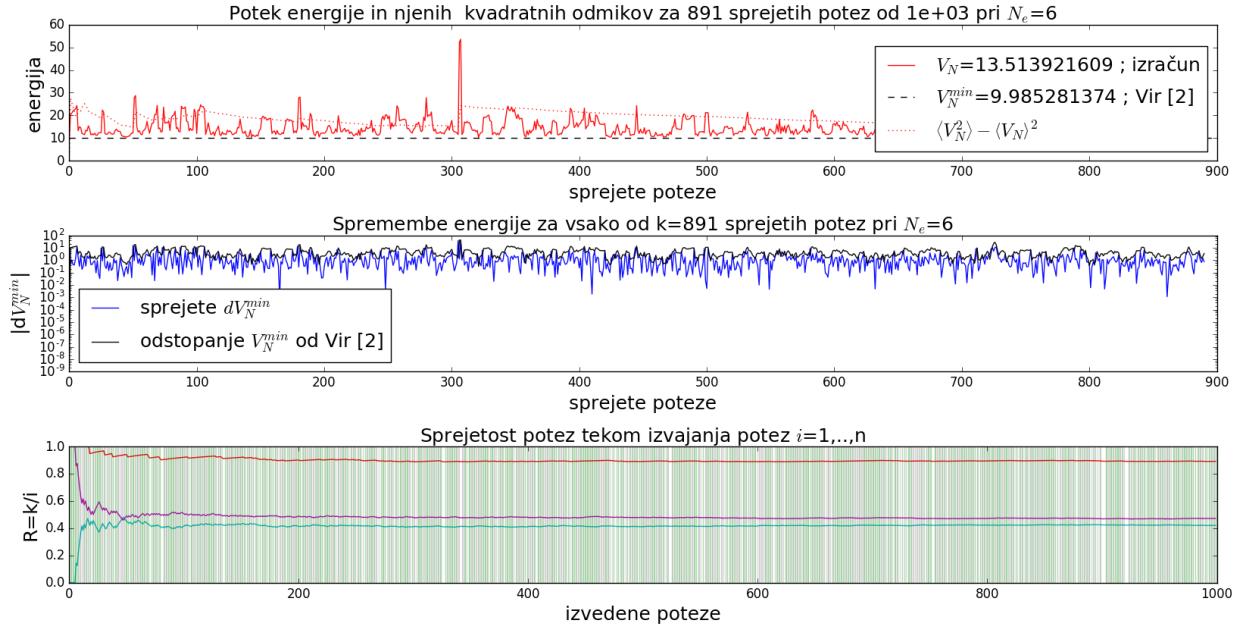
Potek energije in sprejemanja potez je razviden iz slike 1.10. Pri visoki temperaturi energija že zelo močno fluktuirata tem skokom pa sledijo tudi velike vrednosti njeni kvadratnik odmikov. Sprejete so skoraj vse izvedene poteze in ponovno je sprva je precej več potez sprejetih pri pogoju $\Delta V_N > 0$, ta delež pa se hitro izenači s potezami sprejetimi pri pogoju $\Delta V_N < 0$. Iz slike 1.11, ki prikazuje vrednosti ureditvenih momentov, je razbrati pričakovano večje fluktuacije kot pri prejšnjem primeru.



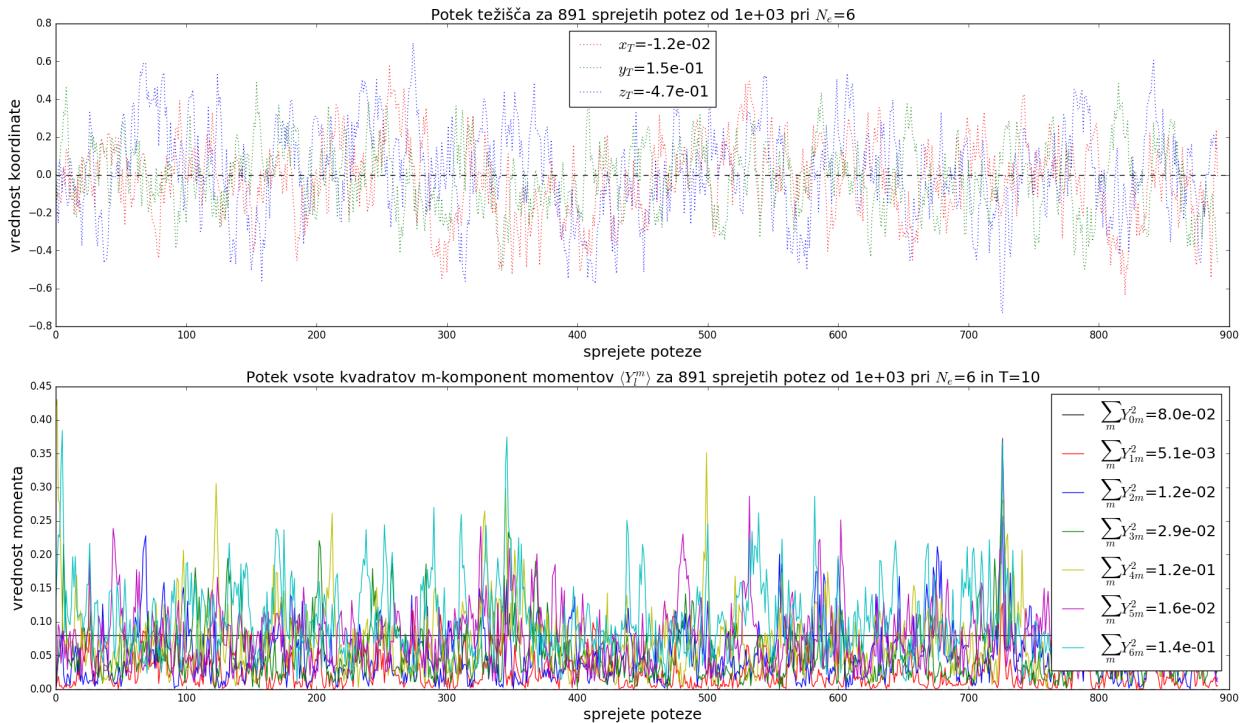
Slika 1.8: Položaji optimalno nanešenih šestih nabojev pred temperaturno fluktuacijo (levo), in po fluktuaciji pri $T = 10$ in $i = 10^3$ izvedenimi potezami (desno). Videti je, da se simetrična konfiguracija pokvari. Animacija primera poteka sprejemanja potez je dostopna na povezavi *N6.T10_sim.anim*.



Slika 1.9: Histograma porazdelitve velikosti premikov $d\theta$ (desno) in $d\phi$ (levo) vseh sprejetih potez. Obe porazdelitvi sta pričakovano blizu normalne.



Slika 1.10: Vrednosti elektrostatske energije za $N_e = 6$ tekom temperaturne fluktuacije (zgoraj). Energijski naraste in prične nihatiti okrog neke ravnovesne vrednosti. Pojavijo se večje fluktuacije katerim sledi vrednost kvadratov odmikov energije. Odstopanje izračunov od vrednosti $V_N^{[2]}$ seveda prav tako naraste, absolutne vrednosti sprejetih popravkov k energiji $|dV_N|$ nihajo okrog neke ravnovesne vrednosti (sredina). Razmerje vseh sprejetih in izvedenih potez R ostane blizu vrednosti 0.9 (spodaj). Razmerji K in L potez posameznega sprejemnega pogoja, prikazani na taistem grafu, pa se ujameta pri polovčni vrednosti 0.45. Z zeleno barvo je označen sprejem potez za pogoj $\Delta V_N > 0$, s sivo pa sprejem za pogoj $\Delta V_N < 0$. Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^3$; od teh je bilo sprejetih $k + l = 891$ potez.



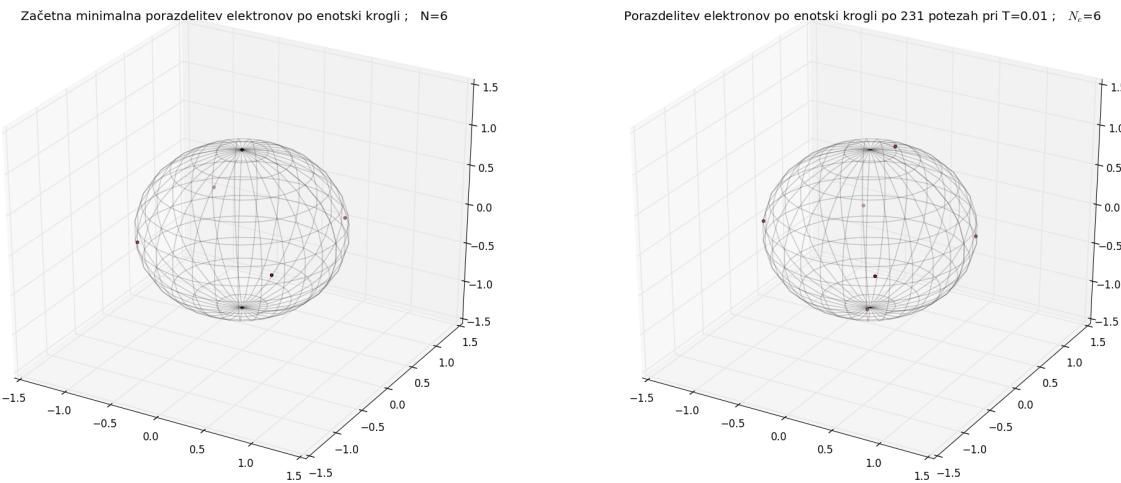
Slika 1.11: Vzporedno računane vrednosti ureditvenih parametrov tekom sprejemanja potez. Položaj težišča naboja (zgoraj) pobegne stran od ničelnih vrednosti koordinat. Vrednosti višjih momentov (spodaj) prično divje fluktuirati.

Temperaturne fluktuacije za $T = 0.01$

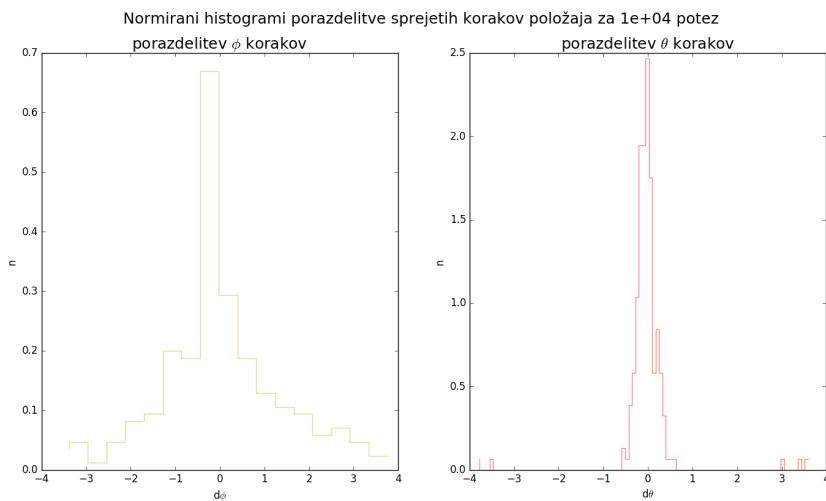
Enako kot pri primeru višje temperature slika 1.12 prikazuje položaj nabojev na sferi pred začetkom fluktuacije in po izvedenih vseh potezah. Lepo razvidna začetna simetrična porazporeditev se tokrat po izvedenih 10^4 potezah le malo pokvari. Pri $T = 0.01$ je bilo sprejetih samo 200 potez. Na sliki 1.13 prikazana histograma porazdelitve velikosti premikov $d\theta$ in $d\phi$ sprejetih potez tokrat kljub slabši statistiki nakazujeta na normalno obliko porazdelitve.

Potek energije in sprejemanja potez je razviden iz slike 1.14. Energija fluktuirati okrog vrednosti, ki je bližje minimalni energiji kot v prejšnjem primeru, njeni kvadratni odmiki pa se ustalijo pri neki konstantni vrednosti. Tudi tokrat je pričakovano sprva precej več potez sprejetih pri pogoju $\Delta V_N > 0$, vendar se delež teh hitreje izenači s potezami sprejetimi pri pogoju $\Delta V_N < 0$.

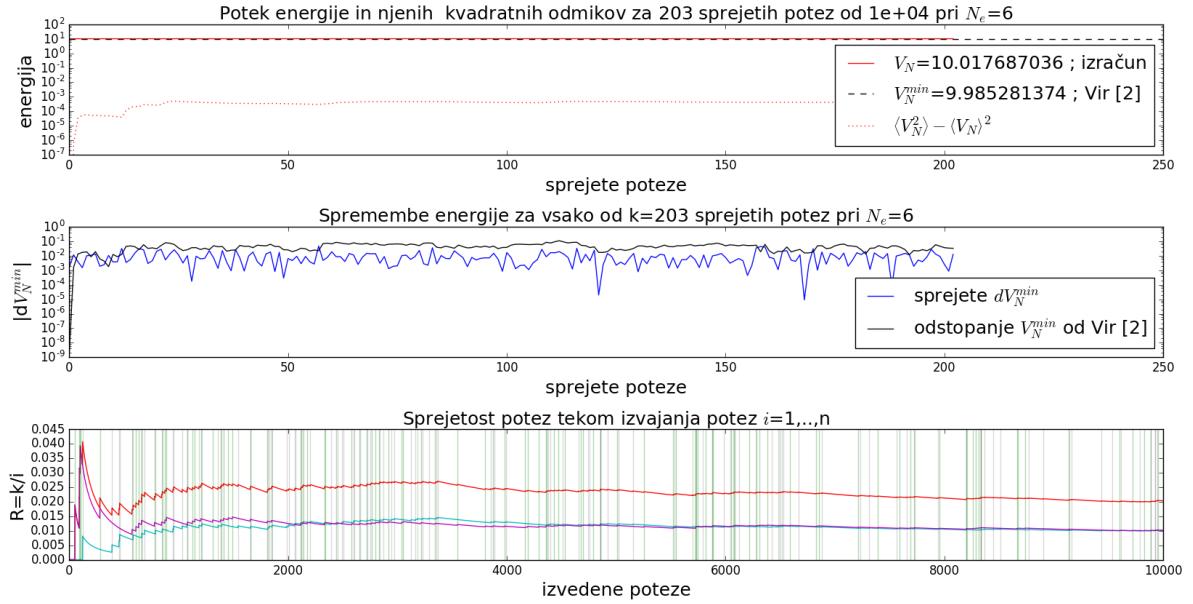
Po že opaženem je iz slike 1.15 moč razbrati pričakovano manjše fluktuiranje težišča okrog izhodišča ter manj divje spreminjanje vrednosti ostalih ureditvenih parametrov.



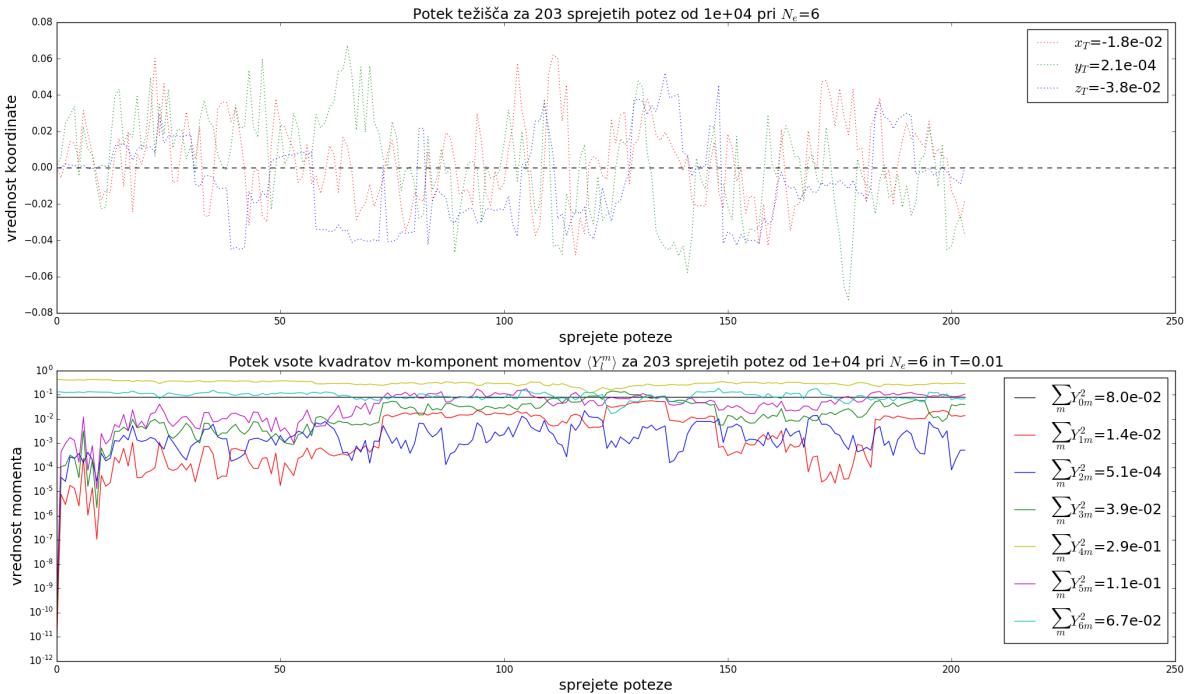
Slika 1.12: Položaji optimalno nanešenih šestih nabojev pred temperaturno fluktuacijo (levo), in po fluktuaciji pri $T = 0.01$ in $i = 10^4$ izvedenimi potezami (desno). Videti je, da se simetrična konfiguracija le malenkost pokvari. Animacija primera poteka sprejemanja potez je dostopna na povezavi [N6_T10 – 4_sim.anim](#).



Slika 1.13: Histograma porazdelitve velikosti premikov $d\theta$ (desno) in $d\phi$ (levo) vseh sprejetih potez. Obe porazdelitvi sta pričakovano blizu normalni, vendar s slabšo statistiko.



Slika 1.14: Vrednosti elektrostatske energije za $N_e = 6$ tekom temperaturne fluktuacije (zgoraj). Energijski in njeni kvadratni odmiki počasi narastejo in prično nihati okrog neke ravnovesne vrednosti. Odstopanje izračunov od vrednosti $V_N^{[2]}$ naraste, absolutne vrednosti sprejetih popravkov k energiji pa pričnejo nihati okrog neke ravnovesne vrednosti (sredina). Razmerje vseh sprejetih in izvedenih potez R se umiri blizu vrednosti 0.2 (spodaj). Razmerji K in L potez posameznega pogoja, prikazani na istem grafu, pa se ujameta pri ravnovesni vrednosti 0.1. Z zeleno barvo je označen sprejem potez za pogoj $\Delta V_N > 0$, sivo pa sprejem za pogoj $\Delta V_N < 0$. Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^4$; od teh je bilo sprejetih le $k + l = 203$ potez.

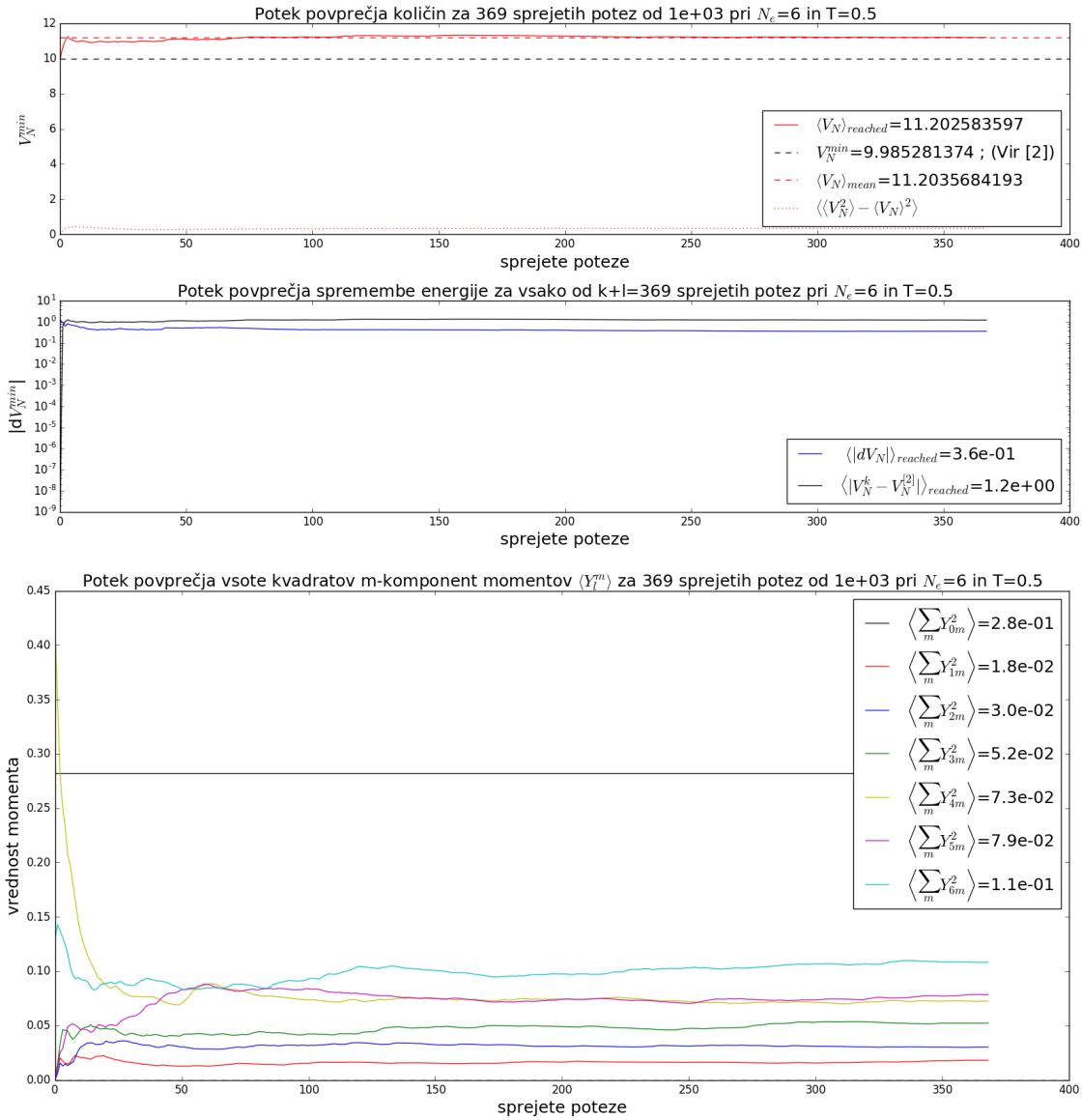


Slika 1.15: Vzporedno računane vrednosti ureditvenih parametrov tekom sprejemanja potez. Položaj težišča naboja (levo) pobegne od ničelnih vrednosti koordinat. Vrednosti višjih momentov (desno) ravno tako fluktuirajo.

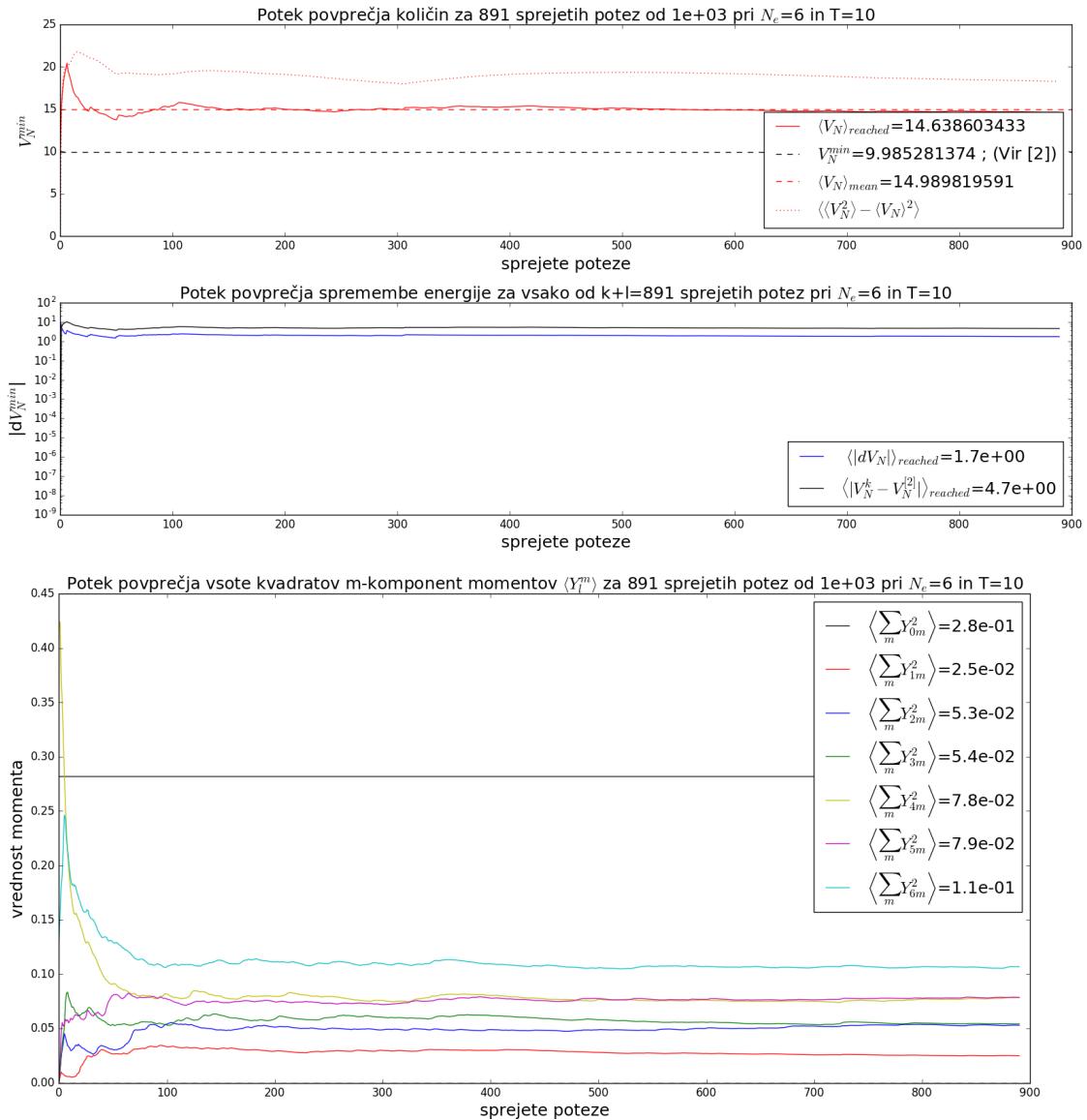
Fluktuacije po širšem temperaturnem območju

Preden si ogledamo vrednosti za širše temperaturno območje, si je vredno ogledati še potek povprečnih vrednosti za konfiguracijo z $N_e = 6$ naboji. To sem storil za primere pri temperaturah $T = 0.01, 0.5$ in 10 . Število vseh žrebov sem omejil na $i = 10^3$ oziroma $i = 10^4$ in s tem dosegel umiritev sistema. Širino normalne porazdelitve premikov sem pustil fiksno $\sigma_0 = \sqrt{8\pi/N_e\sqrt{3}}$.

Rezultati izračunov za oba primera so prikazani na slikah 1.18 - 1.17. Iz slik je razvidno, da povprečna energija konfiguracije in povprečje njenih kvadratnih odmikov sčasoma dosežeta neko bolj ali manj stabilno vrednost. Nižja kot je temperatura, prej se to zgodi. Umiri se seveda tudi odstopanje povprečja izračunov energije od vrednosti $V_N^{[2]}$ in povprečje absolutne vrednosti sprejetih popravkov k energiji. Za nižje temperature so tudi vse vrednosti ureditvenih momentov manjše.



Slika 1.16: Povprečje vrednosti elektrostatske energije in njenih kvadratnih odmikov za $N_e = 6$ tekom temperaturne fluktuacije (zgoraj). Ko energija počasi naraste in prične nihatiti okrog neke ravnovesne vrednosti se tudi povprečji izračunane energije $\langle V_N^{min} \rangle$ in njenih kvadratnih odmikov počasi ustalita. Isto velja za povprečne vrednosti odstopanja izračunov od $V_N^{[2]}$ in povprečje absolutne vrednosti sprejetih popravkov k energiji (sredina). Povprečja vsot kvadratov ureditvenih momentov sprva hitro padajo oziroma narastejo ter se nato gibljejo pri neki konstantni vrednosti (spodaj). Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^4$; od teh je bilo sprejetih $k + l = 369$ potez.



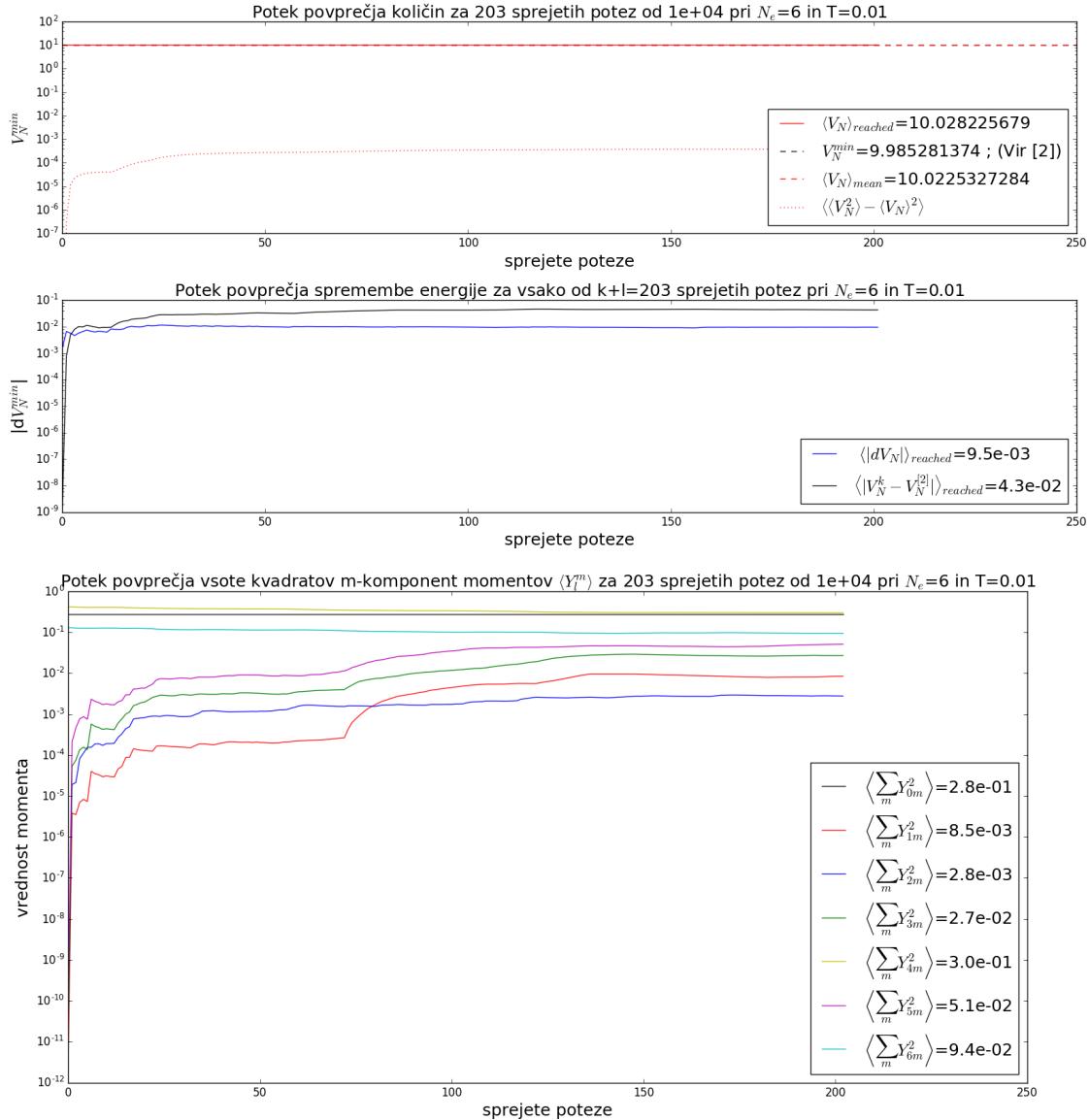
Slika 1.17: Povprečje vrednosti elektrostatske energije in njenih kvadratnih odmikov za $N_e = 6$ tekom temperaturne fluktuacije (zgoraj). Situacija je podobna kot v prejšnjem primeru s tem, da umiritev sistema dosežena po nekaj več izvedenih potezah. Isto velja za povprečne vrednosti odstopanja izračunov od $V_N^{[2]}$ in povprečje absolutne vrednosti sprejetih popravkov k energiji (sredina). Povprečja vsot kvadratov ureditvenih momentov sprva padajo oziroma narastejo ter se ustalijo pri neki konstantni vrednosti (spodaj). Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^3$; od teh je bilo sprejetih $k + l = 891$ potez.

Zanimivo si je torej ogledati ravno temperaturno odvisnost povprečnih vrednosti od sprejetih potez celotenega izračuna. Tu povprečja pri konstantni temperaturi računam za poteze izvedene po tem ko ”burn-in” že mine ter nato vrednosti tekom fluktuacije zajemam le po vsaki deseti potezi.

Odvisnosti povprečij relaksiranih količin od temperature so predstavljene na sliki 1.19. Iz grafov je očitno razvidno pričakovano naraščanje doseženega povprečja energije $\langle V_N^{\min} \rangle_{\text{reached}}$ z večanjem temperature. Prav tako se s temperaturo večajo popravki $\langle dV_N^{\min} \rangle_{\text{reached}}$ in seveda odstopanje od minimalne energije začetnega stanja $\langle |V_N^k - V_N^{[2]}| \rangle_{\text{reached}}$.

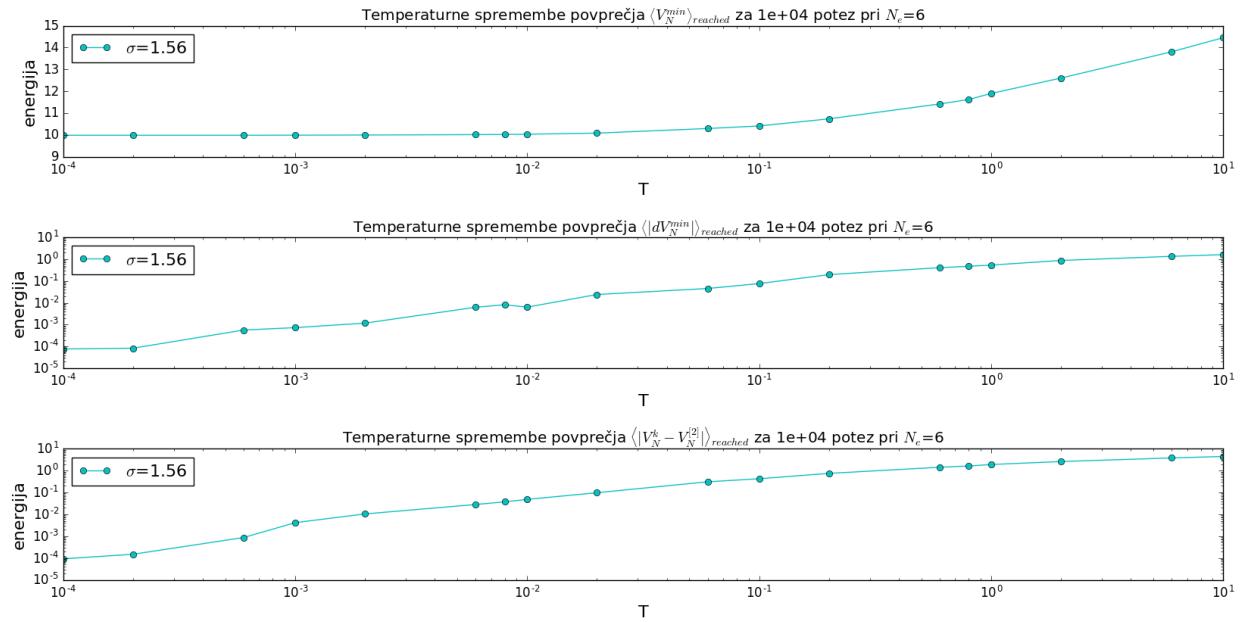
Na sliki 1.20 so prikazani izračuni temperaturnih sprememb povprečnih kvadratnih odmikov energije $\langle V_N^2 \rangle - \langle V_N \rangle^2$, ki sledijo naraščajočemu trendu povprečja energije. Če te vrednosti delimo z $k_B T^{21}$, dobimo specifično toploto C_v . Opazimo, da C_v v temperaturnem območju med $0.001 < T < 1$

¹Kjer brez izgube splošnosti postavimo vrednost Boltzmanove konstante na $k_B = 1$.

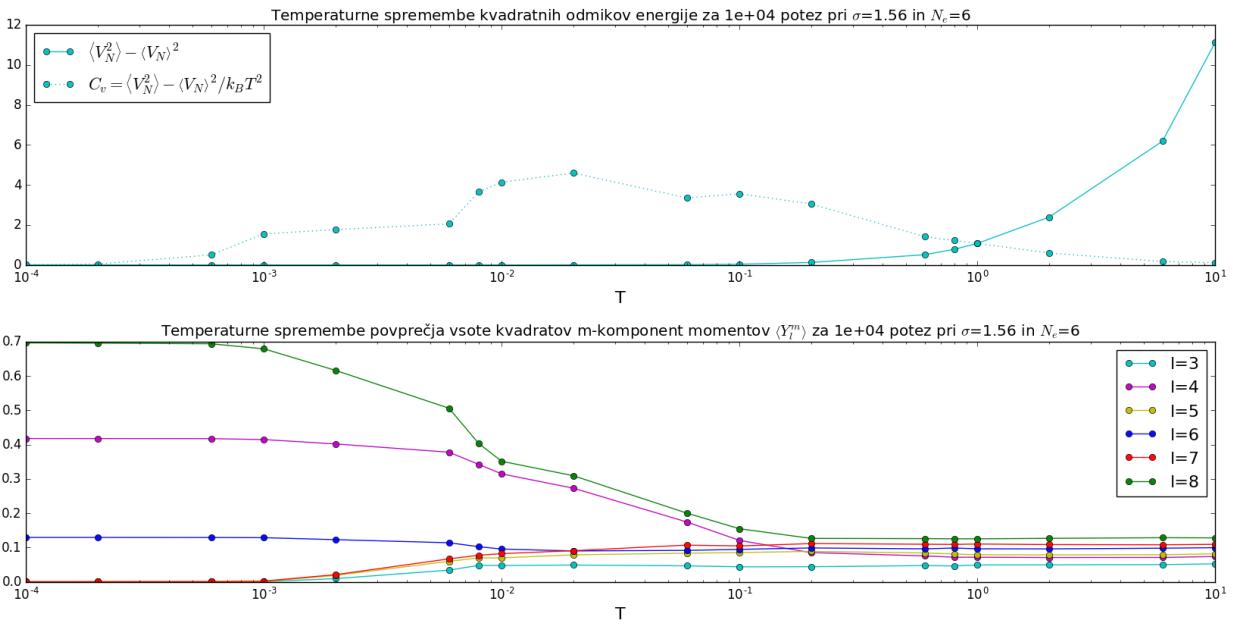


Slika 1.18: Vrednosti povprečij elektrostatske energije in njenih kvadratnih odmikov za $N_e = 6$ tekom temperaturne fluktuacije (zgoraj). Situacija pri nizki temperaturi je podobna, le da so efekti za nekaj velikostnih redov manjši. Isto velja za povprečne vrednosti odstopanja izračunov od $V_N^{[2]}$ in povprečje absolutne vrednosti sprejetih popravkov k energiji (sredina). Povprečja vsot kvadratov ureditvenih momentov se ravno tako ustalijo pri neki konstantni vrednosti (spodaj). Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^4$; od teh je bilo sprejetih $k + l = 203$ potez.

naraste in nato spet pade. Sklepamo lahko, da gre sistem v tem temperaturnem območju skozi fazni prehod, kar potrdi tudi vpogled v vrednosti ureditvenih momentov. Iz izračunov povprečij vsot kvadratov m-komponent momentov $\langle Y_l^m \rangle$ za nekaj izbranih l vidimo, da se tekom naraščanja temperature vrednosti začetne konfiguracije nabojev spremenijo, kar je prikazano na spodnjem grafu slike 1.20. Sprva ničelne vrednosti za lihe l narastejo, neničelne za sode l pa padejo. To lahko razložimo s prehodom konfiguracije nabojev iz urejene v neurejeno strukturo.



Slika 1.19: Vrednosti doseženih povprečnih vrednosti kolčin elektrostatske energije za $N_e = 6$ pri različnih temperaturah in fiksni širini normalne porazdelitve premikov σ_0 . Pri grafu za doseženo povprečno vrednost $\langle V_N^{\min} \rangle_{\text{reached}}$ (zgoraj) je opaziti temperaturno naraščanje. Prav tako se s temperaturo večajo popravki $\langle dV_N^{\min} \rangle_{\text{reached}}$ (sredina) in seveda odstopanje od minimalne energije začetnega stanja $\langle |V_N^k - V_N^{[2]}| \rangle_{\text{reached}}$ (spodaj). Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^4$ za vsako računano točko.



Slika 1.20: Vrednosti doseženih povprečnih vrednosti količin kvadratnih odmikov elektrostatske energije in vrednosti C_v za $k_B = 1$ (zgoraj) ter doseženih povprečij vsot kvadratov ureditvenih momentov (spodaj). Oboje za $N_e = 6$ in fiksni σ_0 tekomp simuliranega segrevanja. Krivulja vrednosti C_v na opazovanem območju doseže nek maksimum. Na območju prehoda čez omenjeni maksimum dosežena povprečja ureditvenih momentov $\langle \sum_m Y_{lm}^2 \rangle_{reached}$ preidejo iz začetnih vrednosti porazdelitve za minimalno elektrostatsko energijo v konstantne vrednosti neurejene strukture porazdelitve nabojev. Izračuni so izvedeni z omejitvijo potez na $i = 10^4$ za vsako računano točko.

Literatura

- [1] Spletne strani z gradivom predmeta, ogled 20.10.2017,
<http://predmeti.fmf.uni-lj.si/modelska>
- [2] Wikipedia "Thomson problem", ogled 27.7.2019,
https://en.wikipedia.org/wiki/Thomson_problem – 12
- [3] spletna stran z opisi knjižnice "SciPy" programskega jezika Python, ogled 27.7.2019,
<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.optimize.minimize.html>