



*Univerza v Ljubljani*  
*Fakulteta za **matematiko in fiziko***

*Oddelek za fiziko*

---

## 2. naloga: Trotter-suzuki razcep -1.del

---

POROČILO PRI PREDMETU VIŠJE RAČUNSKE METODE

2016/2017

*Avtor:*

Klemen RAHNE  
28152028

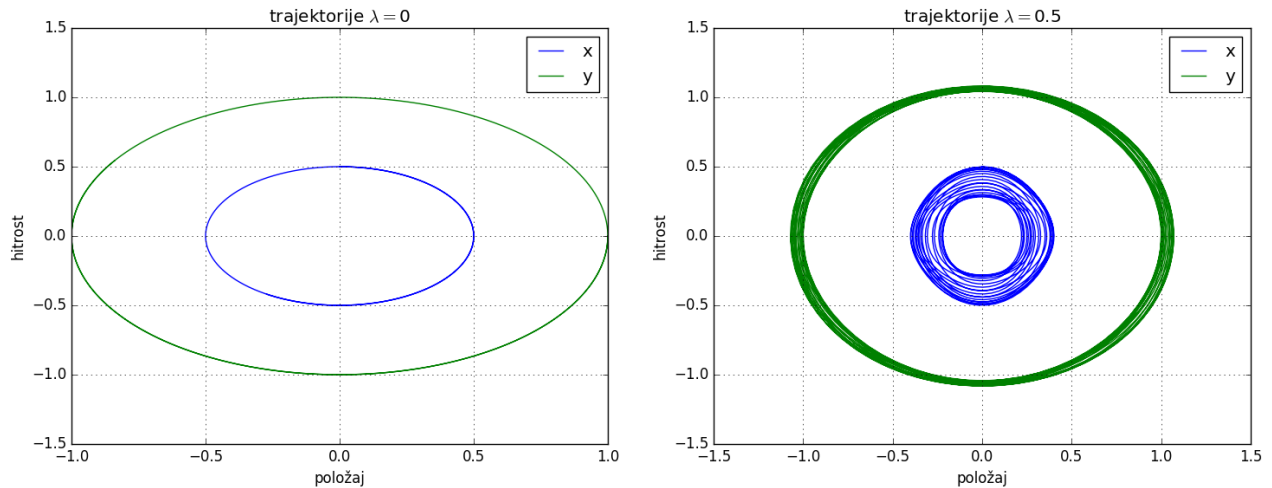
13. marec 2017

# 1 naloga

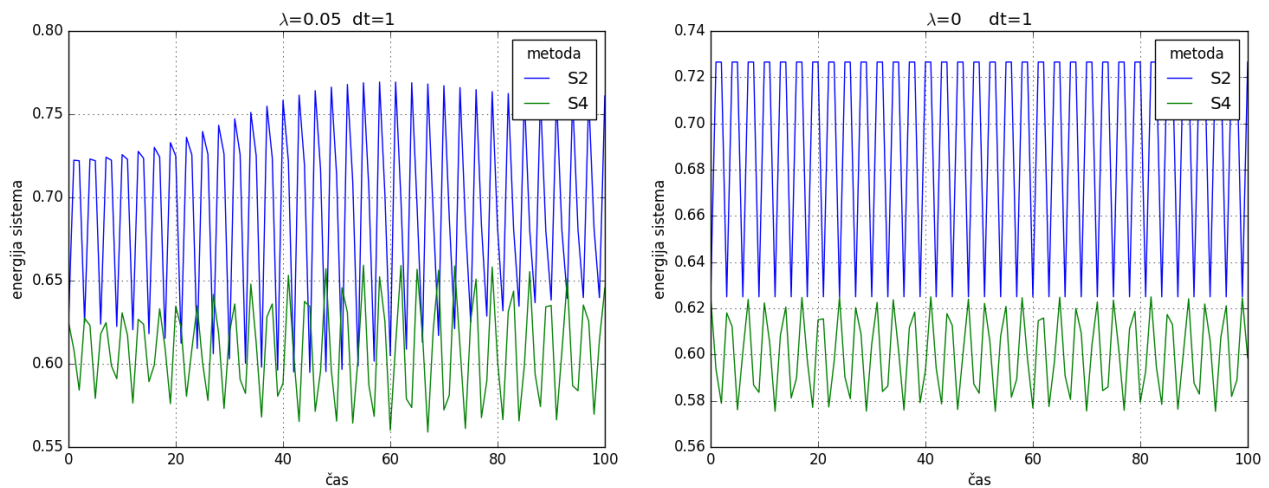
Imamo Hamiltonko  $H$ , ki opisuje delec v harmonskem potencialu v dveh dimenzijah:

$$H = \frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}p_2^2 + \frac{1}{2}q_1^2 + \frac{1}{2}q_2^2 + \lambda q_1^2 q_2^2 \quad (1.1)$$

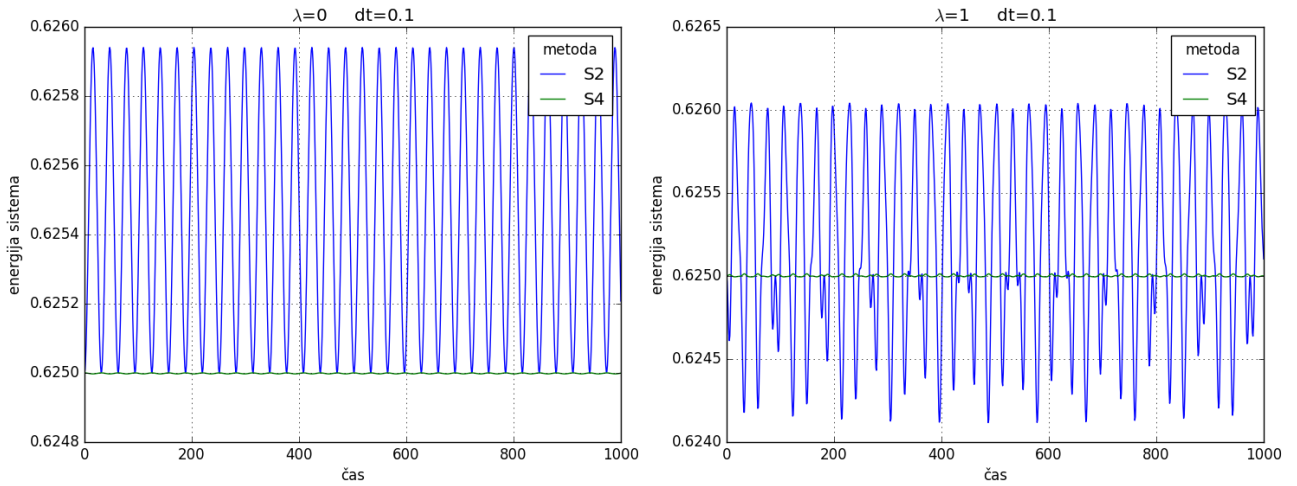
Oglejmo si nekaj trajektorij delcev z različnimi vrednostmi  $\lambda$ . Trajektorije smo reševali s Trotter-Suzuki algoritmom.



Slika 1.1: Značilne trajektorije za Hamiltonko 1.1 z začetnimi pogoji  $(q_1, p_1, q_2, p_2) = (0, \frac{1}{2}, 1, 0)$ . Pri  $\lambda = 0$  se vidi, kot da imamo dva neodvisna harmonska oscilatorja. Z vključitvijo dodatnega člena  $(\lambda q_1^2 q_2^2)$ , se trajektorije v posamezni dimenziji spremenijo.



Slika 1.2: Ohranjanje energije pri dveh različnih metodah-S2 in S4. Opazimo precejšnje oscilacije okoli stacionarne lege, ki pa sta različni od začetne energije. Pri višjih vrednostih  $\lambda$  postane metoda S4 nestabilna.



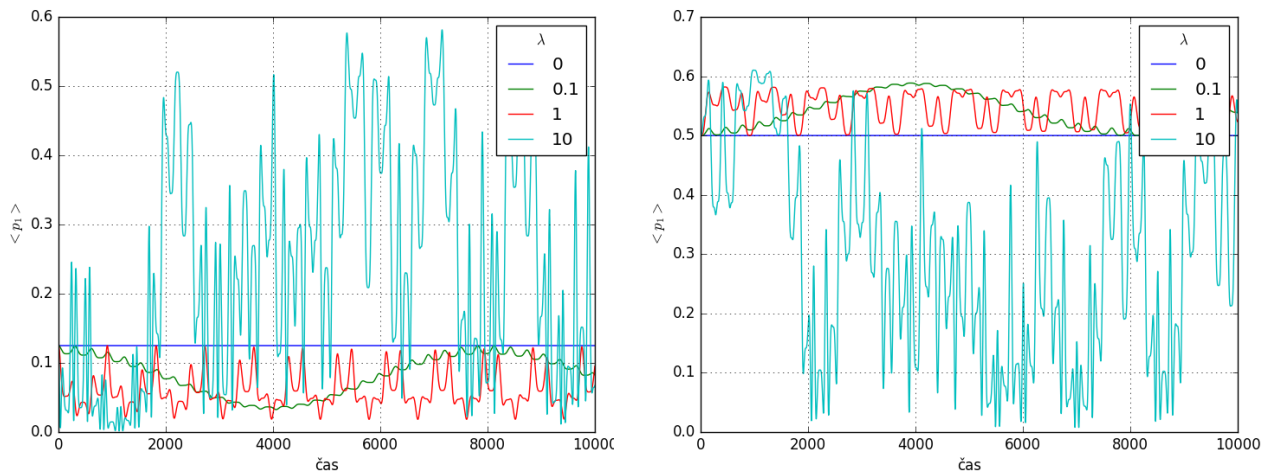
Slika 1.3: Pri manjšanju časovnega intervala se pri metodi S4 oscilacije zmanjšajo na , ter zavzema energijo iz začetnih pogojev. Metoda S2 ponovno oscilira, vendar z manjšo amplitudo. Tudi tokrat ima ta metoda v povprečju večjo energijo od začetne vrednost.

## 2 Ekviparticijski teorem

Ekviparticijski teorem pravi, da se energija sistema v termodinamskem ravnovesju enakomerno porazdeli med vse tipe energij sistema (kinetična, potencialna) in med prostostnimi stopnjami. To bomo preverili z vrednostjo

$$\langle p_i^2 \rangle(t) = \frac{1}{t} \int_0^t p_j^2(t') dt' \quad (2.1)$$

ki predstavlja kinetično energijo v  $i$ ti smeri.



Slika 2.1: Levo:  $\langle p_1^2 \rangle(t)$ , desno:  $\langle p_2^2 \rangle(t)$ . Opazimo, da v primeru večanja parametra  $\lambda$  imamo bolj nepredvidljive vrednosti povprečne vrednosti hitrosti na kvadrat, kar nam nakazuje da se približujemo bolj statističnem opisu gibanja-oz. ekviparticijskem teoremu.