
3. Molekularna dinamika, toplotne kopeli in simulacija neravnovesne termodinamike

MIHA SRDINŠEK

Pri tej nalogi smo poskusili simulirati ireverzibilne makroskopske pojave. Zanima nas namreč, če dejansko lahko dobimo lastnosti kot so temperatura in toplotni tok iz reverzibilnih mikroskopskih pojavov. Enačbe klasične fizike so namreč vse reverzibilne in zelo lepe in enostavne, kako lahko iz tega pride do pojavov kot so temperatura in drugi zakon termodinamike? S tem namenom smo poskusili simulirati enodimenzijsko verigo med dvema neskončnima rezervoarjema, s konstantno temperaturo, ki je z rezervoarjema sklopljena samo preko robnih delcev - torej povsem klasično. Tega smo se lotili na dva načina. Prvi način je tako imenovana Nosé-Hooverjeva metoda, ki je povsem analitična. Za delce, ki so sklopljeni s kopeljo uvedemo poseben parameter ζ , ki jih s povratno zanko fiksira k želeni temperaturi. Enačba je zelo intuitivna in sicer

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{p_j}{m_j}, \quad (1)$$

$$\frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial(V+U)}{\partial q_j} - \delta_{j,L}\zeta_L p_L - \delta_{j,R}\zeta_R p_R, \quad (2)$$

$$\frac{d\zeta_L}{dt} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{p_L^2}{m_L} - T_L \right), \quad (3)$$

$$\frac{d\zeta_R}{dt} = \frac{1}{\tau} \left(\frac{p_R^2}{m_R} - T_R \right). \quad (4)$$

kjer z indeksom R in L mislim robna dva momenta. A v splošnem imamo lahko sklopljenih več delcev in v tem primeru, tudi na njih priklopimo termostat. Te enačbe rešujemo z metodo Runge-Kutta in upamo na najboljše. Važno je da jih zapišemo za poljubni N , ker se sliši zahtevno, ampak se izkaže za precej enostavno. Za ta primer sem napisal svoj Runge-Kutta, saj je bil tako hitrejši od tistega iz knjižnic. Res pa je, da je imel potem konstantni korak, medtem ko ga tisti iz knjižnice `scipy` spreminja tekom integracije.

Druga metoda je Maxwellova kopel, ki pa je res povsem numerična stohastična metoda. Je dosti bolj enostavna. Na vsake toliko časa, ki ga zopet označimo s τ na robovih izžrebamo nov moment z normalno porazdelitvijo z $\mu = 0$ in $\sigma_i = \sqrt{m_i T_i}$. Vse skupaj pa propagiramo

enostavno po prejšnjih enačbah, oziroma z enačbami

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{p_j}{m_j}, \quad (5)$$

$$\frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial(V+U)}{\partial q_j}. \quad (6)$$

Za naš primer kjer vzamemo potencial

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 \quad \text{in} \quad U(x) = \frac{1}{2}x^2 + \lambda x^4, \quad (7)$$

kjer je $V(x)$ potencial sklopitve med sosednjimi delci, $U(x)$ pa potencial samega delca. To pomeni, da imamo Hamiltonjan

$$H = \frac{1}{2} \sum p_j^2 + \sum U(q_j) + \sum V(q_{j+1} - q_j), \quad (8)$$

oziroma

$$\frac{\partial(V+U)}{\partial q_j} = 3q_j + 4\lambda q_j^3 - q_{j-1} - q_{j+1}. \quad (9)$$

Zanimali nas bosta predvsem dve spremenljivki - temperatura in toplotni tok, ki ju izračunamo kot

$$T_i = \frac{\langle p_i^2 \rangle}{m_i}, \quad (10)$$

$$J_i = -\frac{1}{2} \left(V'(q_i - q_{i-1}) + V'(q_{i+1} - q_i) \right) = -\frac{1}{2} (q_{i+1} - q_{i-1}) p_i. \quad (11)$$

Povprečimo enostavno po času, tako da seštejemo vse rezultate in jih delimo s številom dogodkov. Kadar govorim o količinah $\langle T \rangle$ in $\langle J \rangle$, s tem mislim na

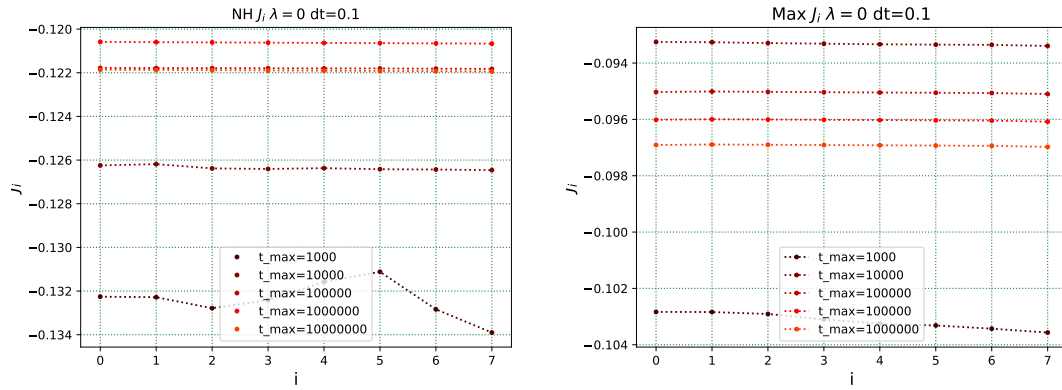
$$\langle A_i \rangle = \frac{1}{N} \sum A_i, \quad (12)$$

kjer je N število delcev, oziroma dimenzija seznama A_i .

I. IZBIRA PARAMETROV

Po tem ko sem najprej spisal oba algoritma, si moramo zdaj ogledati kako sploh uporabljati taka algoritma. Takoj po prvi uporabi mi je postalo jasno, da sta močno občutljiva na izbiro τ . Zato si pogledjmo odvisnost od različnih parametrov.

Najprej bi rad vedel kako se natančnost spreminja z dolžino koraka dt in s časom relaksacije. Ker vemo da J_i pri $\lambda = 0$ ne sme biti odvisen od i , lahko samo opazujemo kako dobro je ta pogoj izpolnjen v odvisnosti od dolžine relaksacije 1. Če v naslovi piše Max gre za maxwellovsko kopel, če piše NH gre za Nosé-Hooverjev model.

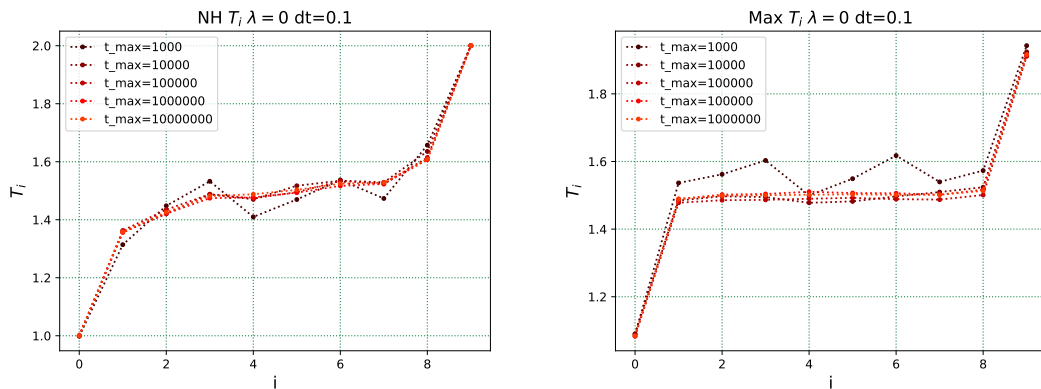


Slika 1: Z obema metodama sem pogledal kako se spreminja J_i v odvisnosti od dolžine relaksacije pri $\lambda = 0$ in $dt = 0.1$. $\tau = 1$.

Še bolj uporabno pa je opazovati T_i v odvisnosti od parametrov. Tak primer vidimo na sliki 2. To je uporabno zato, ker vemo, da mora biti vrednost na sredi $T^* = (T_R + T_L)/2$, zato lahko enostavno izračunamo količino

$$\frac{1}{N} \sum |T_i - T^*|, \quad (13)$$

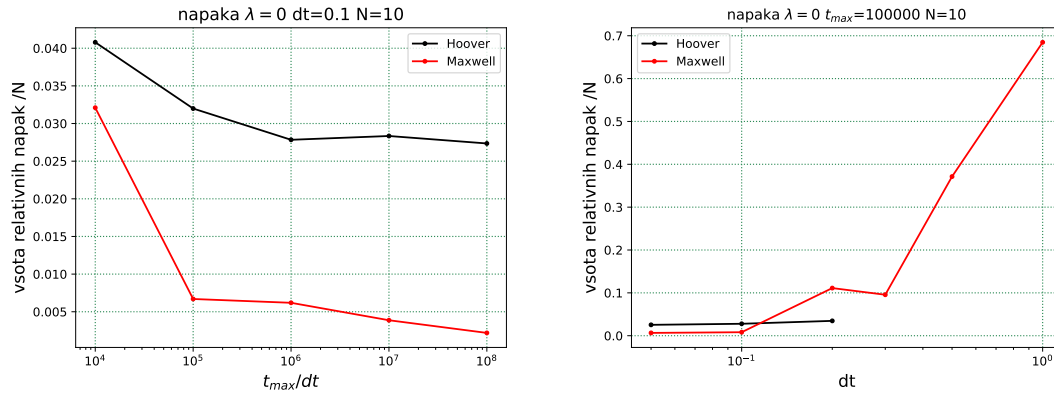
ki je nekakšna komulativna relativna napaka. Če rišemo to, lahko malo bolj zanesljivo ocenimo kako dobri so parametri. To sem izrisal na sliki 3.



Slika 2: Z obema metodama sem pogledal kako se spreminja T_i v odvisnosti od dolžine relaksacije pri $\lambda = 0$ in $dt = 0.1$. $\tau = 1$.

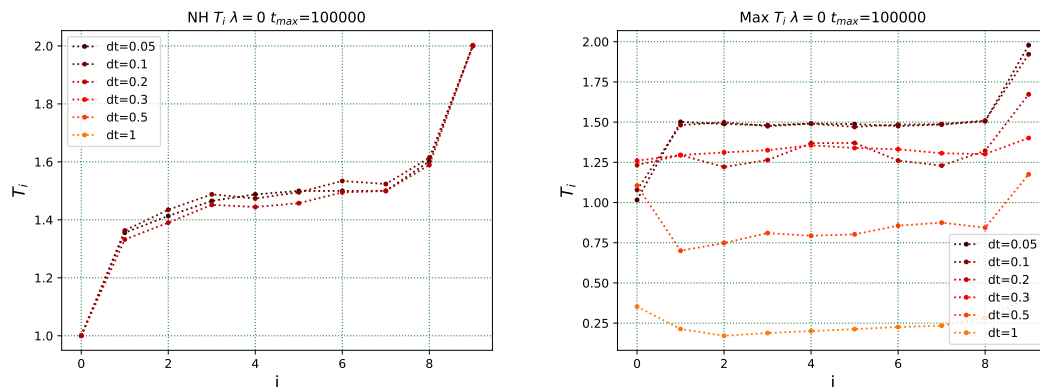
Iz slik se precej dobro vidi da očitno obstaja neka meja po kateri je precej vseeno, koliko časa smo relaksirali. Ko enkrat pridemo čez milijon korakov, se natančnost izboljšuje zelo počasi.

Zato smo kar zadovoljni z deset milijoni. Isto se splača narediti tudi za časovni korak dt , s čimer dobimo 4 in desno komulativno odvisnost prikazano na 3. Za Hooverjev algoritem sem dobil nedovoljeno vrednost, če je bil korak prevelik.



Slika 3: Slika prikazuje kako se normirana komulativna relatiivna napaka spreminja z dolžino relaksacije t_{max} levo in dolžine koraka dt desno. Parametri so $\lambda = 0$, $dt = 0.1$ in $\tau = 1$.

Ne glede na to je tudi tukaj očitno, da obstaja neka meja po kateri dolžina koraka ne vpliva več bistveno. Jaz bi kar za obe metodi vzel $dt = 0.05$, čeprav bi očitno za Hooverja lahko vzel tudi korak 0.2. Zaenkrat torej velja $dt = 0.05$ in koraki= 10^7 (tudi 10^6 je čisto v redu, zato bom pogosto za hitrejši izračun uporabil kar tako število korakov).

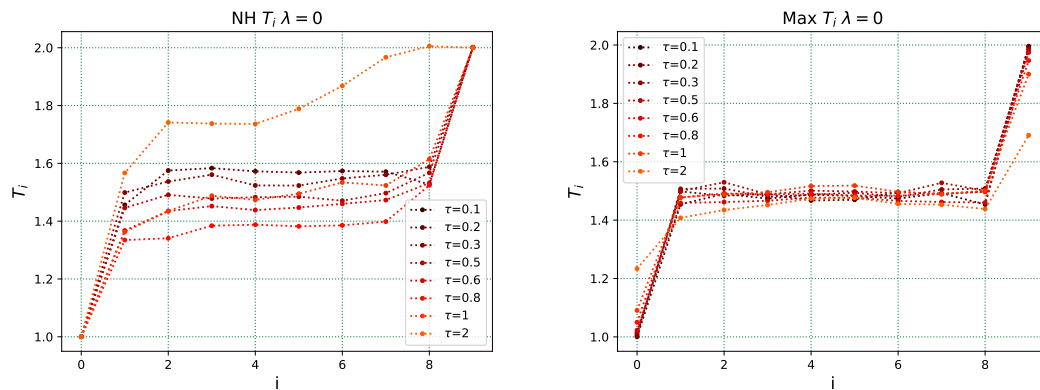


Slika 4: Z obema metodama sem pogledal kako se spreminja T_i v odvisnosti od dolžine časovnega koraka dt pri $\lambda = 0$ in $dt = 0.1$. $\tau = 1$.

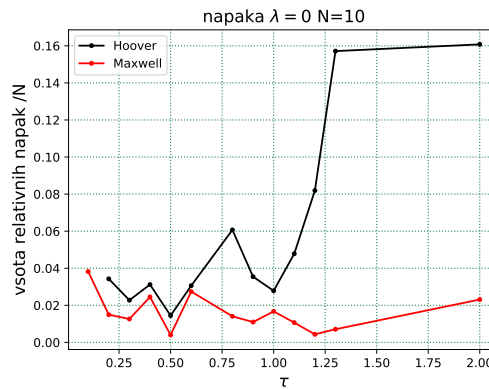
Oboroženi z dobro izbiro dt in t_{max} lahko sedaj ocenimo kakšna je najboljša izbira parametra τ , ki res nenavadno vpliva na rezultate. Pri napačno izbranem τ je algoritme popolnoma neuporaben. Potrebno je biti zelo pazljiv. Iz prvih izkušenj sem približno ocenil območje kjer bi moral biti τ primeren in na tem območju sem preveril kako natančen je v resnici na sliki 6. Poleg tega sem narisal še sliki 5, da vpliv izbire τ primerjam z ostalima izbirama.

Iz konteksta poročila, sem razbral da τ dejansko nastopa v obeh metodah in predstavlja če že ne isto, pa vsaj zelo močno korelirano količino. V Maxwelllovi metodi, sem τ razumel kot čas, ki ga naredimo med dvema resetacijama robnih gibalnih količin.

Nasploh ta primerjava ne razkriva morebitne povezanosti med τ in dt , ampak kar sem želel je enostavno to, da dobro kalibriram mojo metodo. Lahko da obstajajo boljši parametri, a pri izbranih parametrih, ki so tudi časovno ravno prav zahtevni, sem poiskal optimalen τ .



Slika 5: Z obema metodama sem pogledal kako se spreminja T_i v odvisnosti od τ pri $\lambda = 0$ in $dt = 0.1$ korak= 10^6 .



Slika 6

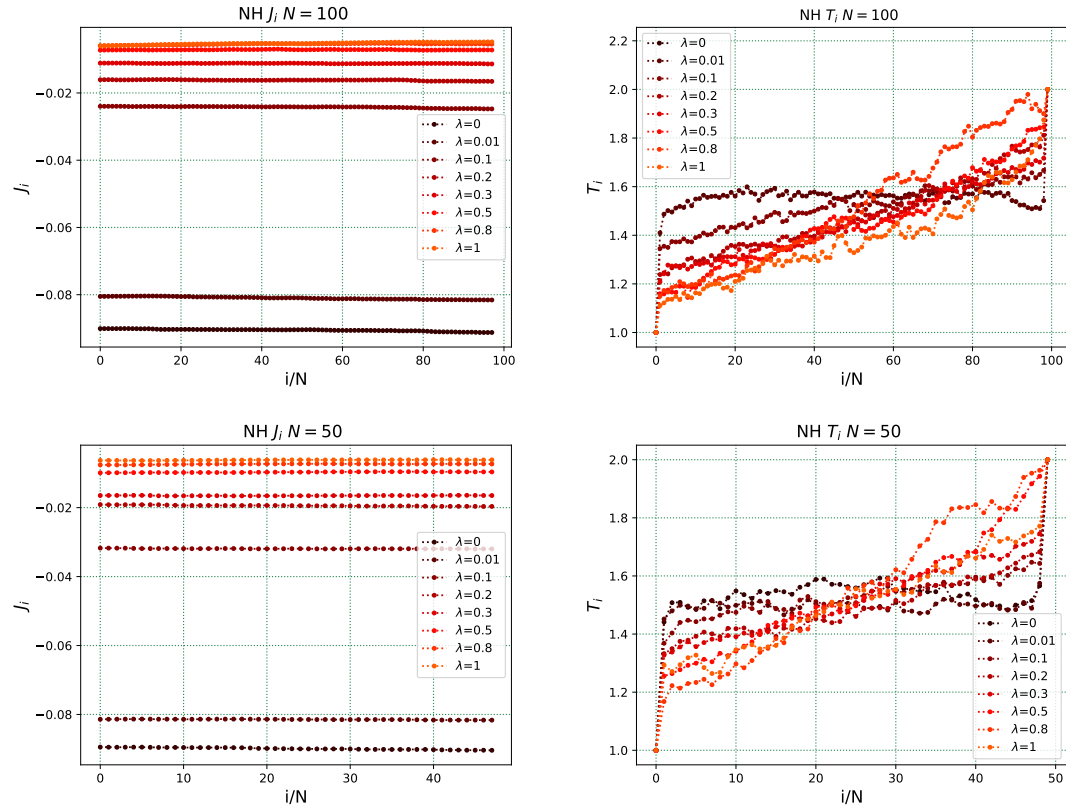
Optimalni τ je torej 0.5. Parametri so potem $dt = 0.05$, korak = 10^{6-7} in $\tau = 0.5$. Pri Maxwelllovskih kopelih se je za še boljšo izbiro izkazalo $dt = 0.03$ pri istem τ .

II. NOSÉ-HOOVERJEV MODEL

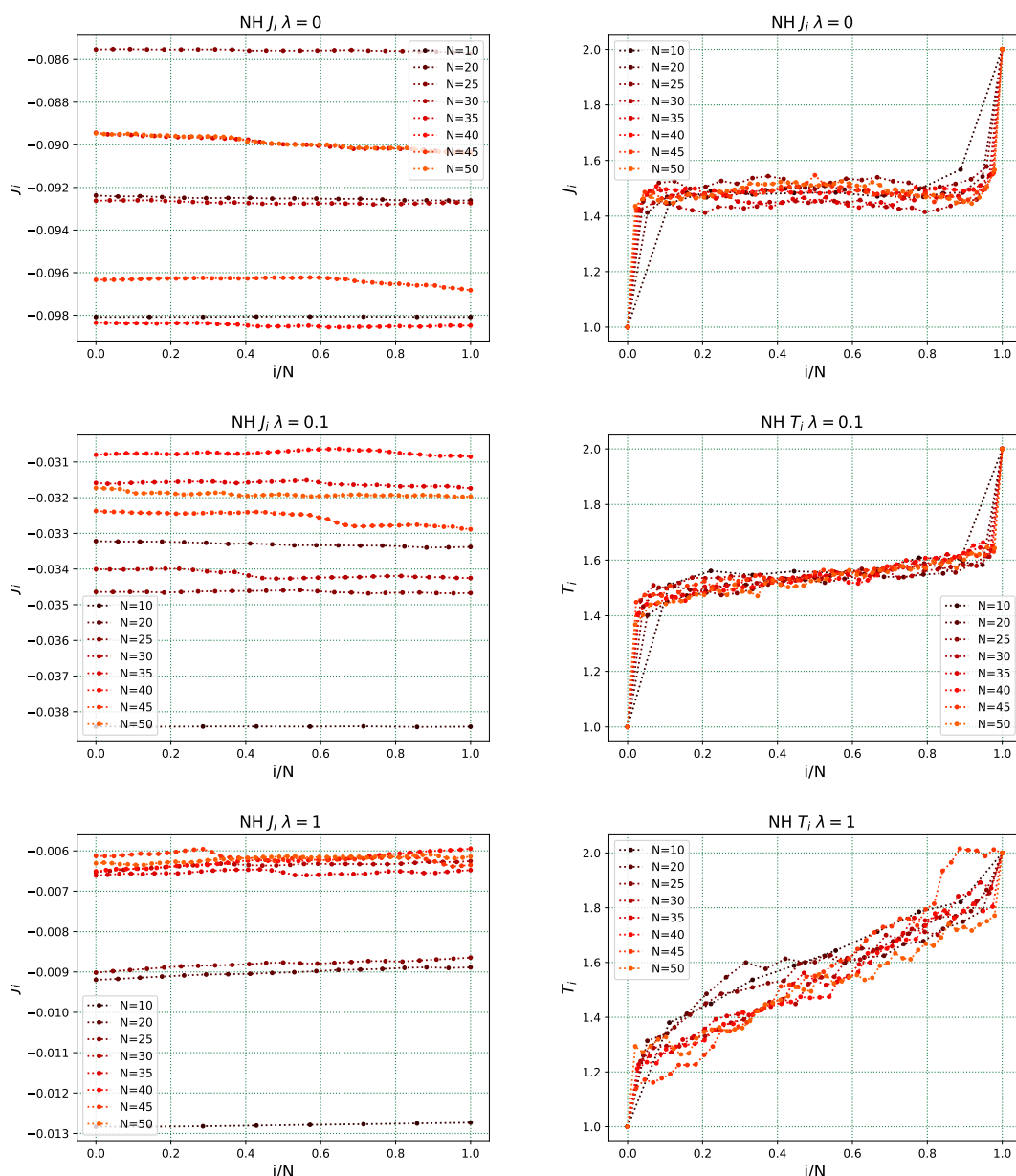
Zanima nas predvsem kako sta opazljivki J in T odvisni od λ in od velikosti sistema. Poglejmo si za začetek pri nekaj velikostih sistema, kako se opazljivki spreminjata v odvisnosti od velikosti potenciala. Potem si bomo ogledali obratno. Praviloma bi morali pri veliki λ (recimo $\lambda = 1$) opaziti, odvisnosti

$$\langle J_j \rangle \approx \kappa \frac{T_R - T_L}{N} \quad \text{in} \quad \langle p_j^2 \rangle \approx T_L + \frac{j-1}{N-1}(T_R - T_L), \quad (14)$$

kar bomo v naslednjih slikah tudi zares opazili. Pri vklopu λ se namreč temperaturni profil začne preoblikovati iz konstantnega v obliko premice.

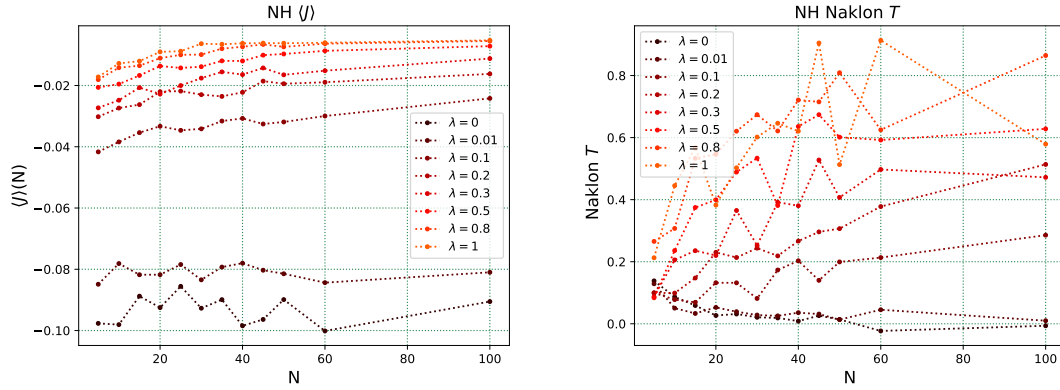


Slika 7: Na slikah sem prikazal odvisnost T_i od λ pri standardnih parametrih. Zgoraj imemo velikost verige $N = 10$ in spodaj $N = 50$.



Slika 8: Na slikah sem prikazal odvisnost T_i od λ pri standardnih parametrih. Zgoraj imemo veliksot verige $N = 10$ in spodaj $N = 50$.

Ti rezultati so precej pričakovani, prikazal pa sem jih tako, da se pri vseh N , delci nahajajo na intervalu od 0 do 1. Od tu dalje res ni več zanimivo opazovati teh krivuljc, bolj bi bilo zanimivo opazovati kako se z λ spreminja povprečna vrednost J_i ali pa naklon T_i . Rezultate tega sem prikazal na slikah 9, kjer opazimo, da se $\langle J \rangle$ res ne spreminja z N pri $\lambda = 0$ in da ima nek očiten trend pri višjih λ . O tem več kasneje, najprej pa bi rad opazoval še odvisnost naklona T_i od N in λ na sliki 9. Že prej smo opazili da vodoravno odvisnost pri $\lambda = 0$ dobimo šele pri večjih N , a zdaj imamo to kvantitativno zapisano. Drugi problem je, da je prileganje premice seveda dosti bolj natančno če imamo večje število točk. Verjetno je to razlog zakaj opazimo nenavadno naraščanje naklona do cca $N = 50$, potem pa precej konstantno odvisnost. Vse kar res lahko razberemo iz tega grafa je to, da pri $\lambda = 0$ naklon stremlje k 0 pri $\lambda > 0$ pa k neki od nič različni vrednosti.



Slika 9: Na sliki levo sem prikazal kako se povprečen J spreminja z N in λ . Na sliki desno sem prikazal kako se naklon premice, ki predstavlja temperaturo spreminja z N in λ . Vepo vidimo, da pri večjem N dobimo bolj vodoravno T_i za $\lambda = 0$. Tu gre za naklon premice $T(i/N)$ in ne $T(i)$, torej na intervalu od nič do ena.

Poglejmo si zdaj če lahko določimo konstanto κ iz predvidene odvisnosti

$$\langle J \rangle \approx \kappa \frac{T_L - T_R}{N}. \quad (15)$$

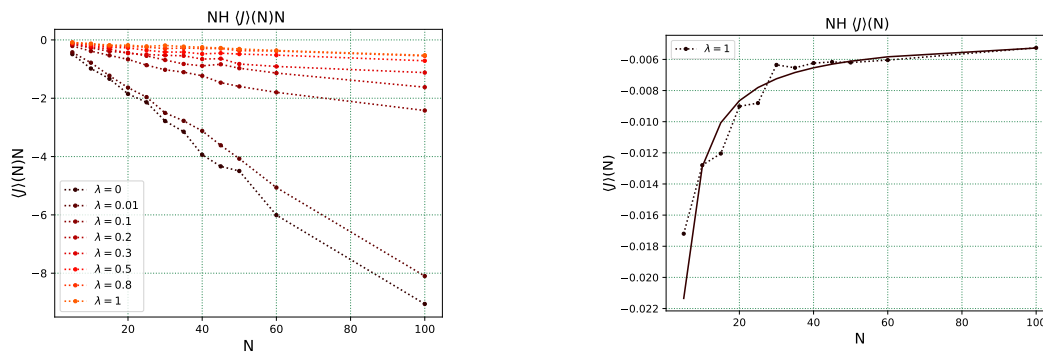
Tak κ sem potem določil iz rezultatov 10. Rezultatu sem prilegal polinom prve stopnje, ker se na levi sliki jasno vidi, da imamo še nek konstantni prispevek in sem ga želel izločiti. Lepo se vidi, da je $\kappa = 0$ pri $\lambda = 0$, saj ima vrednost $\kappa = 0.017$. Pri preostalih krivuljah pa dobimo precej slabe zadetke. Krivulje se večinoma kar dobro prilegajo, a ne moremo pretiravati. Pogledal sem si vsako posebej in zares lep rezultat dobim samo pri $\lambda = 1$, vsi ostalo so v redu, ampak slabši. Tako dobimo

$$\kappa_{\lambda=1} = 0.084, \quad (16)$$

kako izgleda tak rezultat sem prikazana desni sliki 10. Ostale κ , ki sem jih zanemaril so se nahajale na intervalu $(0.11, 0.23)$, s povprečno vrednostjo 0.147. Če sem vključil vse κ pa sem dobil povprečno vrednost

$$\kappa_{average} = 0.16. \quad (17)$$

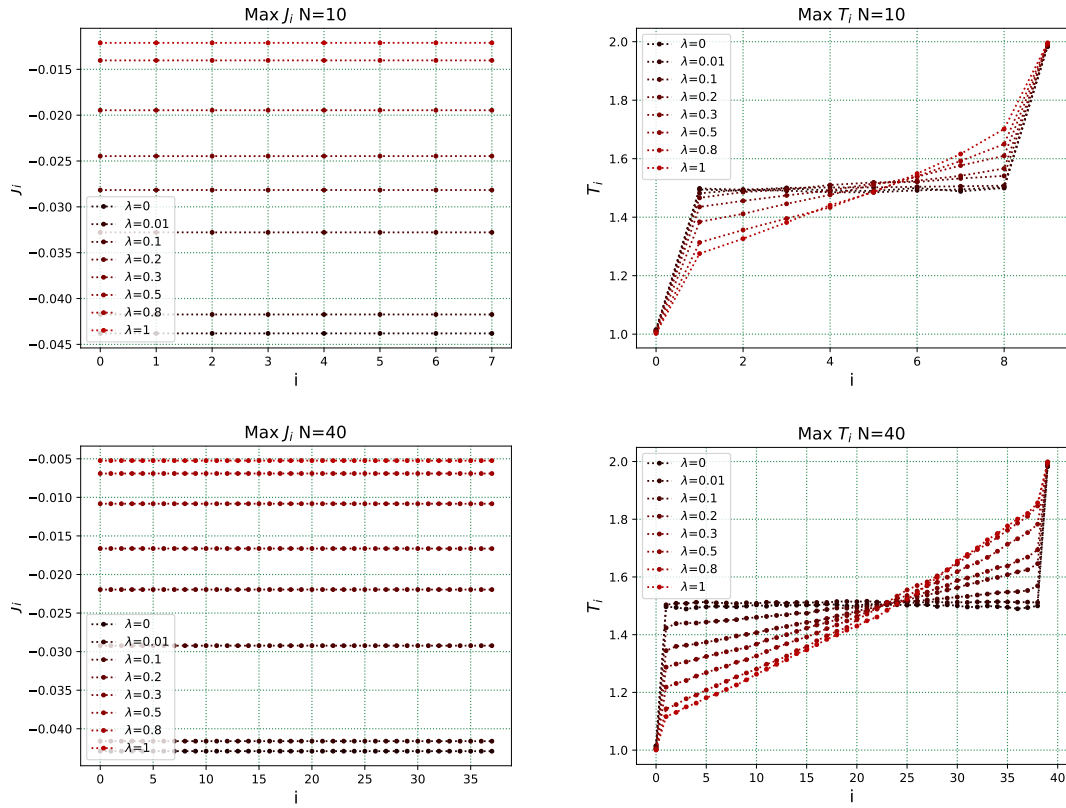
Težko se odločim kateri rezultat je bolj zanesljiv. O tem se bom verjetno lažje odločal, ko bom pridelal te rezultate tudi za Maxwellov model.



Slika 10: Na sliki levo vidimo kako se spreminja $\langle J \rangle(N)N$. Torej $\langle J \rangle$ pomnožen z N . Na to sem potem prilegal polinom prvega reda in s tem dobil koeficient $\kappa(T_L - T_R) = -\kappa$, ker je razlika v temperaturah ravno -1 . Za primer $\lambda = 1$ sem to prikazal na desni sliki.

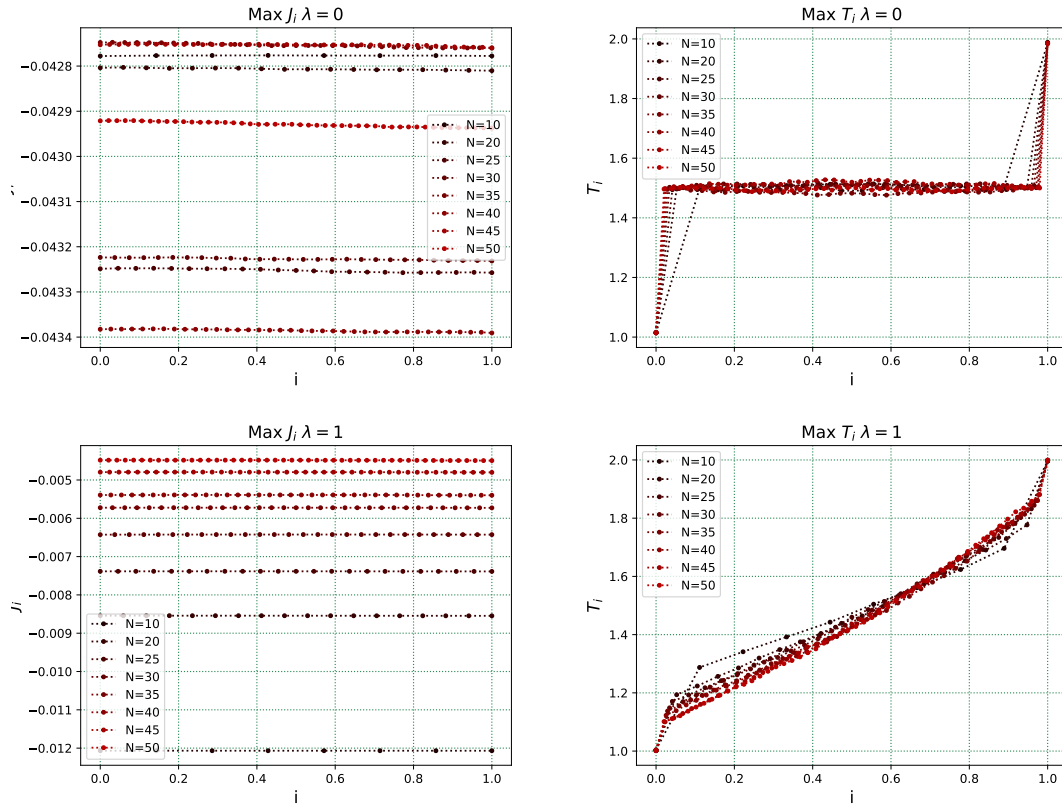
III. MAXWELLSKE KOPELI

Ta algoritem je precej preprostejši za zapisati in hkrati zelo natančen. Iz prejšnjih ugotavljalnj kateri parametri so najboljši, lahko ugibam da bom s to metodo dobil najboljše rezultate. Najprej bom samo ponovil vse kar sem že naredil za Nosé-Hooverjev model, z namenom da med seboj primerjam rezultate.



Slika 11: Na slikah sta prikazana profila T_i in J_i pri različnih λ in istem N .

Slike 11 potrjujejo naše prejšnje rezultate, hkrati pa presenečajo, ker so rešitve tako zelo pravilne. Dobimo res lepe premice, zato si pogledamo še obratno odvisnost na 12. Tudi tukaj vidimo zelo lepo ujemanje s teorijo in bolj natančen rezultat kot pri prvi metodi. A tako kot prej nas tudi tukaj zanimajo predvsem bolj natančni in pregledni rezultati, ki sem jih prikazal na slikah 13. Ti rezultati so res mnogo lepši od tistih, ki smo jih pridelali s prejšnjo metodo. Res kažejo smislene rezultate. Res je zanimivo opazovati kako se spreminja naklon premice.



Slika 12: Na slikah sta prikazana profila T_i in J_i pri različnih N in istem λ .

Iz prileganja teoretične napovedi na 13 pa sem spet potrdil, da je κ pri $\lambda = 0$ skoraj nič, med tem ko je κ pri $\lambda > 0$ κ večja. Tudi tokrat sem zares lepo prileganje dobil šele pri veliki $\lambda = 1$ in tudi pri $\lambda = 0.8$ prileganje ni slabo. Iz teh dveh prileganj lahko razberemo

$$\kappa_{\lambda=1} = 0.122 \quad \text{in} \quad \kappa_{\lambda=0.8} = 0.15. \quad (18)$$

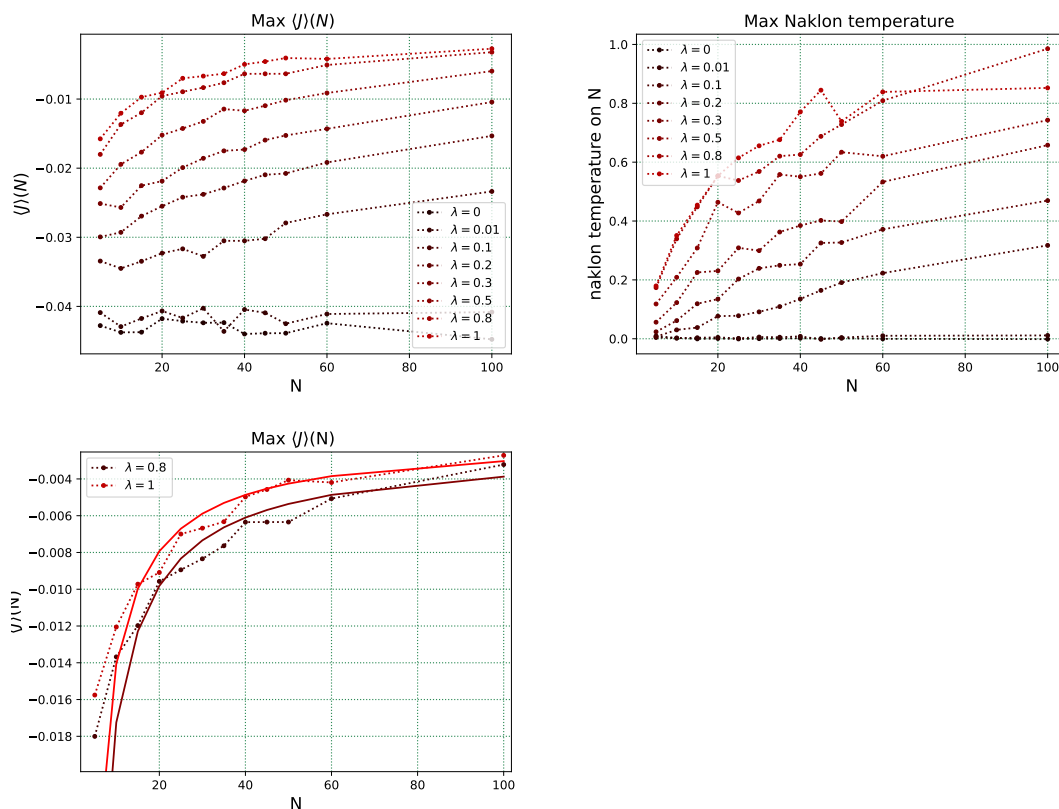
Ostale λ dajejo precej višji κ , ki je v povprečju $\kappa = 0.21$. Če upoštevam vse κ pa dobim povprečni rezultat

$$\kappa_{average} = 0.19. \quad (19)$$

Ker v končni fazi najbolj zaupam rezultatu, ki je nastal z najboljšim prileganjem bi rekel, da je κ , ki ga napoveda metodi

$$\kappa_{N-H} = 0.084 \quad \text{in} \quad \kappa_{Maxwell} = 0.122. \quad (20)$$

Če pa povprečujemo vsepovprek, tako kot sem to v obeh primerih naredil, dobimo različna rezultata, ki ap se med seboj spet razlikujeta za približno isto absolutno vrednost kot ta rezultata. Nasploh so Maxwellovske kopeli napovedale za okoli 0.05 višji κ od Nosé-Hooverjevega modela.



Slika 13: Na levi sliki zgoraj je prikazano kako se povprečen $\langle J \rangle$ pri izbrani λ spreminja s številom delcev. Na sponji sliki sem potem iz zgorne določil κ . Prikazal sem le dva najboljša prileganja. Ostali niso slabi, a jih nisem želel kazati, ker nebi bilo pregledno. Zgoraj desno pa vidimo kako se naklon porazdelitev T_i pri izbranem λ spreminja s številom delcev. Jasno je, da je naklon bolj strm pri večjem λ , pri tem pa neko vlogo igra tudi N , kar je malce nepričakovano, ker je to naklon premice $T(i/N)$ in ne $T(i)$ (torej na intervalu od nič do ena), pri čemer sem delca sklopljena z rezervoarjem zanemarl.

Preveriti velja še kako se κ spreminja, če imamo različni temperaturni gradient. Na tak način dobimo iz 14:

$$\kappa_{1.5} = 0.145 \quad (21)$$

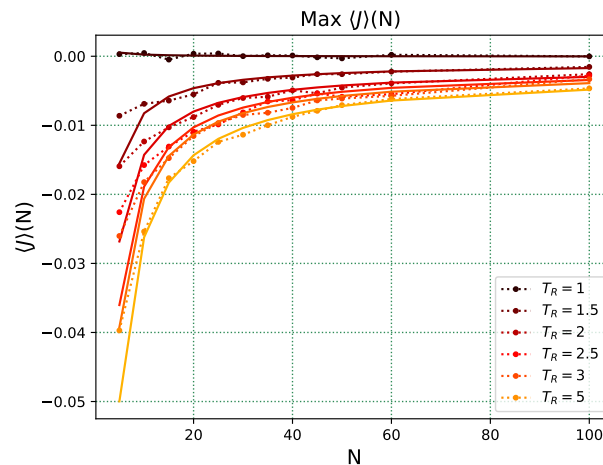
$$\kappa_2 = 0.125 \quad (22)$$

$$\kappa_{2.5} = 0.114 \quad (23)$$

$$\kappa_3 = 0.093 \quad (24)$$

$$\kappa_5 = 0.059. \quad (25)$$

Kar je precej nenavadno. Načeloma je očitno κ ves čas približno ista, a vseeno se očitno spreminja (seveda sem rezultat delil z $T_L - T_R$, da sem dobil te rezultate). Zaključil bi, da temperaturni gradient ima vpliv na κ , a kot smo že prej opazili, te konstante niso ravno najbolj natančne in zato taka ugotovitev ne drži nujno. Že prej smo dobivali vse te vrednosti. Morda je vse samo znotraj napake.



Slika 14: Na tej sliki sem preveril, če lahko izbira temperatur oziroma temperaturnega gradienta vpliva na κ . Na sliki vidimo kako se z N spreminja $\langle J \rangle$ pri različnih temperaturnih gradientih. $T_L = 1$ v vseh primerih. $\lambda = 1$. Opazil sem, da se κ dejansko spreminja z gradientom, kljub temu, da sem upošteval definicijo $\kappa(T_L - T_R)$.

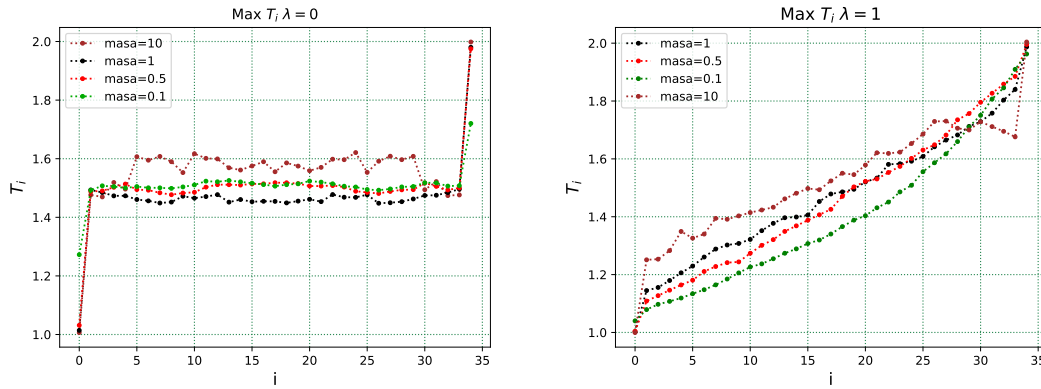
Na koncu si lahko za intuitivno predstavo ogledam še zabavne posnetke, ki sem jih naredil. Pokazal sem kako izgleda dinamika delcev v Maxwellski kopeli. Videe sem naredil za različne λ in N . Ogleda vreden je mislim da predvsem tisti z $N = 100$ in tisti z $N = 10$ (**maxwell-lambda*-N*.mp4**). Prvi zaradi tega, ker se zelo jasno vidi kako je del v stiku s toplejšim rezervoarjem bolj dinamičen, drugi pa zaradi tega, ker so dimenzije dovolj majhne, da res vidimo kako se delci odbijajo med sabo. Pričakoval sem da se bo zelo jasno videlo razliko med $\lambda = 0$ in $\lambda = 1$ ampak nisem prepričan, če se kaj dejansko opazi. Če pozorno gledamo se vidi, da so v priemru $\lambda = 1$ delci malo bolj dinamični.

IV. VPLIV MASE

Sedaj se lahko vprašamo še preostala vprašanja. In sicer, kaj počne parameter, ki smo ga kar nekako pozabili - masa. Masa ima lahko različne vrednosti, lahko pa tudi niso vsi delci enake mase. Masa se pojavlja povsod. Če si pogledamo osnovne enačbe, se pojavljaj na vsakem koraku in so pomembne tudi za izračun končne temperature, saj je otežena z maso kot

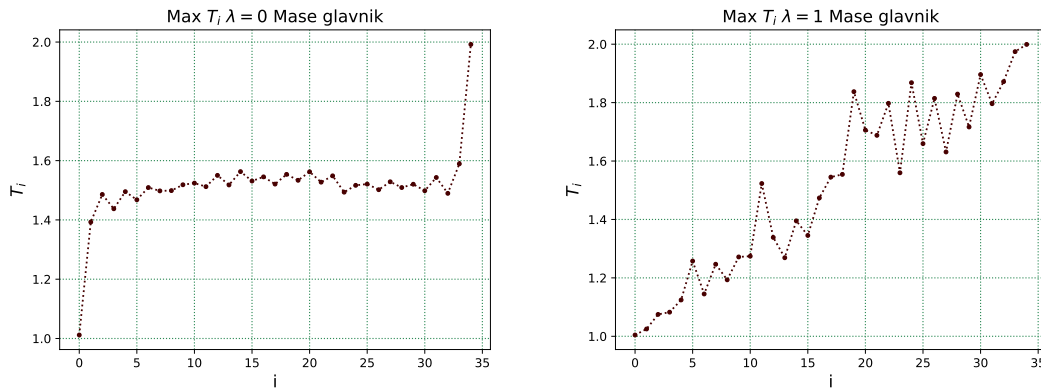
$$T_i = \frac{\langle p_i^2 \rangle}{2m_i}. \quad (26)$$

Poglejmo si nekaj najbolj zanimivih primerov. Nalj osnovno vprašanje je, če slučajno metoda bolje deluje za neko drugo maso, in bi jo morali izbrati tako kot τ ? Rezultate takega eksperimenta vidimo na slikah 15. Očitno manjša masa izboljša natančnost pri $\lambda = 0$ in ne v primeru $\lambda = 1$, kjer se na oko zdi najboljpa masa $m_i = 0.5$. Nasploh bi bilo očitno najboljše izbrati kar maso 0.5, namesto 1, kar sem jaz počel tekom celotnega poročila.



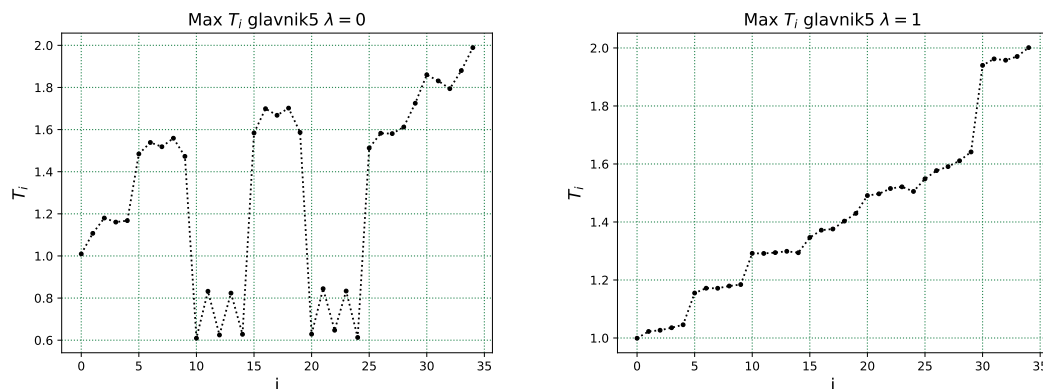
Slika 15: Kako masa vpliva na temperaturni profil? Mase so 0.1, 0.5, 1, 10, Pri $\lambda = 1$ in $\lambda = 0$.

Ampak to ni vse. Lahko si pogldamo tudi kaj se zgodi, če niso vse mase enake. Lahko recimo vzamemo dve masi, ki se menjavata izmenično (kot na sliki 16). Za $\lambda = 0$ dobimo zelo lep sicer rahlo nazobčan rezultat, ampak povprečna vrednost je izvrstna. Problem nastopi pri $\lambda = 1$, saj rezultat že preveč pleže ima pa po drugi strani res lepo obliko. To nas močno navduši - očitno lahko tudi m_i dojemamo kot parameter s katerim lahko izboljšamo metodo.

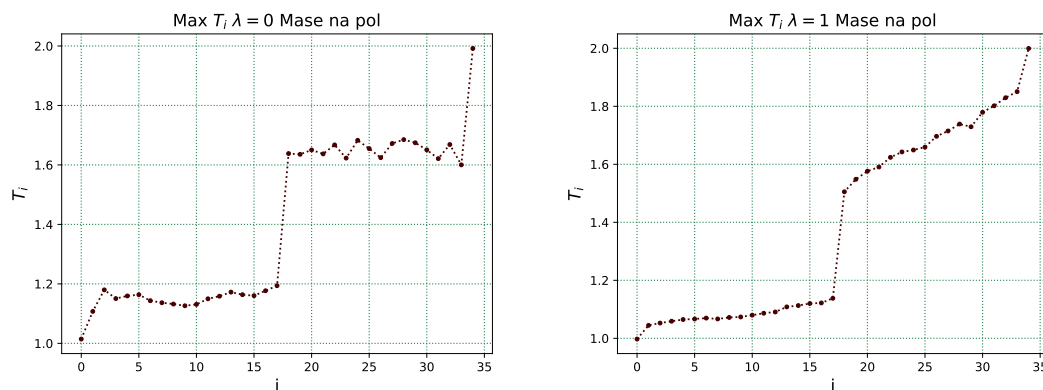


Slika 16: Kaj pa še ima vsak drugi maso 1 in vsi ostali maso 0.5.

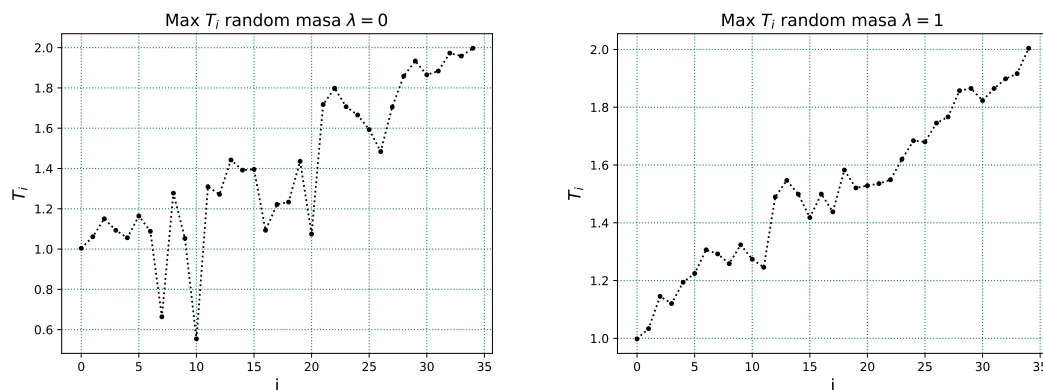
Če si pogledamo 17, kjer imamo glavnik mas, z debelejšimi špicami, tak pristop več ne pomaga. Podobno vidimo tudi pri 18, kjer sem sistem radlil na dva dela z različnimi masami.



Slika 17: Kaj pa če imamo skupinice petih z maso 1 in maso 0.5?



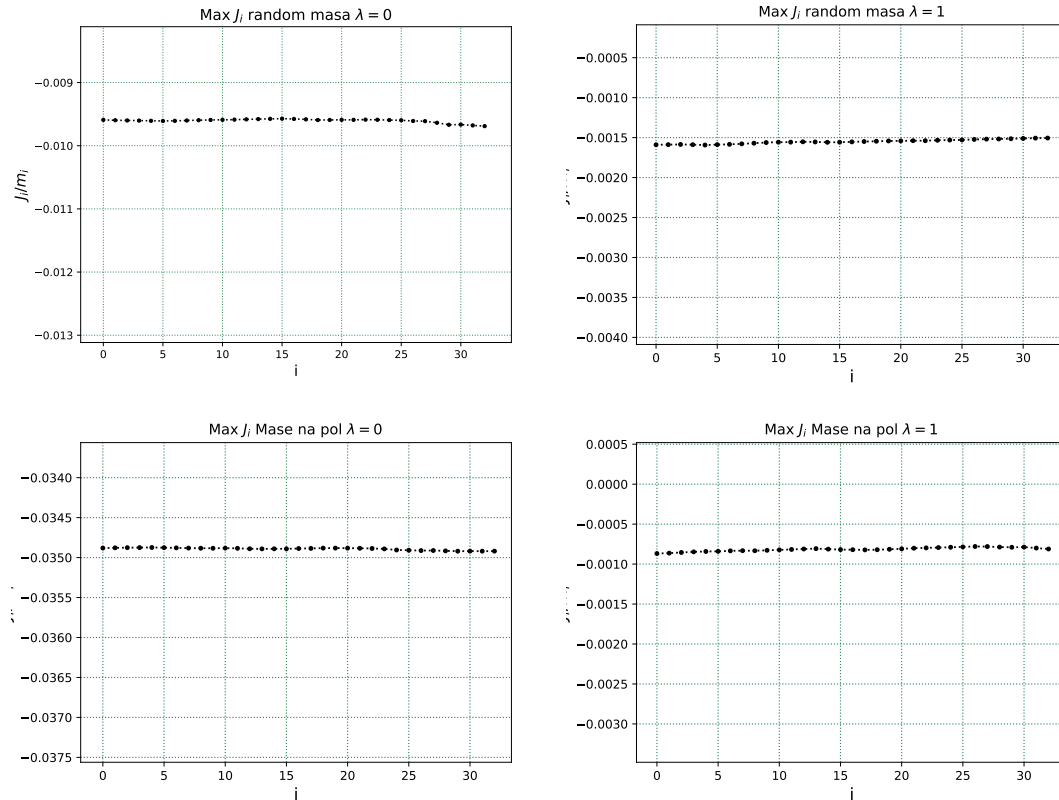
Slika 18: Kaj pa še ima prva polovica delcev maso 1 in druga polovica delcev maso 0.5?



Slika 19: Kaj pa če mase žrebamo z normalno porazdelitvijo $\mu = 0.8$ in $\sigma = 0.2$?

Daleč najboljša metoda za izboljševanje natančnosti, je če vzamemo naključne mase, kar vidimo an sliki 19. Tak način sicer ne deluje dobro pri $\lambda = 0$, a deluje zelo dobro pri $\lambda = 1$.

Naključne mase sem žrebal z normalno porazdelitvijo s povprečjem 0.8 in deviacijo 0.2. Na mestu je preveriti, če s tem močno popačimo J_i in ugotovimo, da ga popolnoma uničimo. Količina J_i/m_i pa ostane nespremenjena in zelo natančna. Sklepam, da je to fizikalno smiselna količina, saj pri J_i pravzaprav govorimo o nekem masnem toku in je zato smiselno maso zdeliti ven.



Slika 20: Kako pa te spremembe mas vplivajo na J_i ? Zgoraj imamo naključno žrebane mase, spodaj pa mase na pol. Na y-oseh piše J_i/m_i . To količino sem risal, ker sem opazil da nam da taka količina pravi rezultat. Poskusil sem tudi ostale (J_i in $J_i m_i$). Rezultat se mi zdi smiseen, saj gre pravzaprav za masni tok in mora zato imeti neko odvisnost od mase, ki jo lahko delimo ven.

V kočni fazi ne vem, če je to dejansko smiselen način za izboljševanje metode. O tem bi moral še precej razmisliti. Moral bi recimo primerjati rezultate, preveriti če je κ odvisna od tega itd. Potem bi moral preveriti, če tak pristop pohitri konvergenco in šele po vsem tem bi lahko zaključil, da se lahko s pravo izbiro zaporedja m_i izboljša metodo.

Nesporno pa je, da se splača vse mase spremeniti iz $m_{i=vse} = 1$ na $m_{i=vse} = 0.5$, tako da bi svetoval, da se tudi konstantno maso obravnava kot parameter, ki se ga izbere za čim boljšo natančnost metode.

V. HIDRODINAMSKI REŽIM

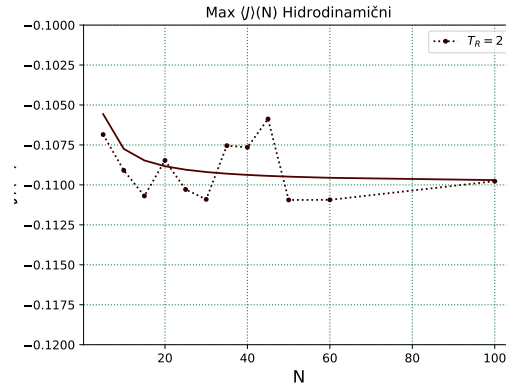
Profesor je na predavanjih omenil hidrodinamski režim, o katerem govorimo, kadar ni prisotne interakcije s substratom, torej $U = 0$. Odločil sem se, da bom na hitro preveril kaj se zgodi v tem primeru, saj sem imel že vso kodo na dlani. Pri naši izbiri potenciala je to zelo nenavaden primer, saj ko na koncu zapišeš enačbe, pravzaprav dobiš skoraj iste enačbe, kot za $\lambda = 0$. Samo v nekaj predfaktorjih se skriva razlika. Edina prispevka k energiji sta torej kinetična energija in potencial V med sosednjimi delci. Dobimo torej

$$\frac{\partial V}{\partial q_i} = 2q_i - q_{i-1} - q_{i+1}, \quad (27)$$

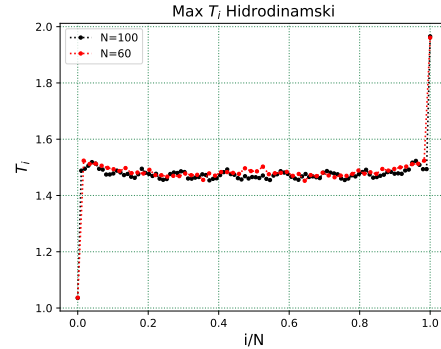
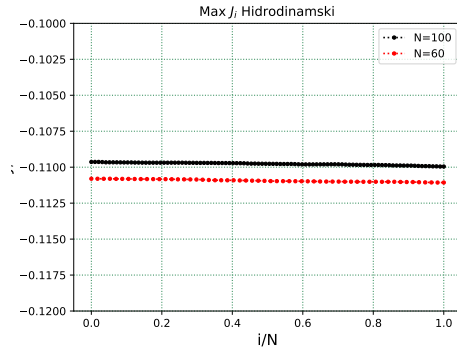
$$\frac{\partial V}{\partial q_R} = q_R - q_{R-1}, \quad (28)$$

$$\frac{\partial V}{\partial q_L} = q_L - q_{L+1}. \quad (29)$$

Ko sem preveril količine, sem ugotovil da je J_i isti kot prej in enako velja tudi za T_i 22. Zato sem si pogledal raje še κ . $\kappa = -0.02$. Kar je dejansko zanimivo je to, da je tok precej večji kot smo ga vajeni pri rezultatu $\lambda = 0$. To bi sicer pričakovali, saj nimamo nikakega "dušenja". Razen tega nisem opazil nekih posebnosti.



Slika 21: Prikazano je kako se povprečni $\langle J \rangle$ spreminja s številom delcev. Masa je konstantna in enaka 1. $\kappa = -0.02$ in je očitno 0.



Slika 22: Izrisani količini T_i in J_i za primer hidrodinamskega režima.