2.1 Trotter-Suzukijev razcep: Simplektična integracija

Miha Srdinšek

I. Uvod

Pri tej nalogi sem na podlagi predavanj skonstruiral štiri simplektične integratorje in jih potem med sabo primerjal, ter z njimi preučeval rešitve sistema s Hamiltonjanom podanim kot

$$H = \frac{1}{2}\left(x^2 + y^2 + p_x^2 + p_y^2\right) + \lambda x^2 y^2 \tag{1}$$

za to sem uporabljal integratorje, ki smo jih izpeljali na predavanjih in jih implementiral kot:

II. Metode

- Najprej sem definral funkciji

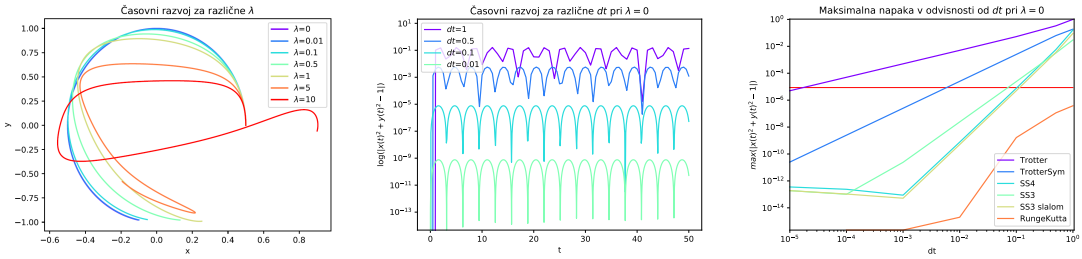
$$e^{\tau\{\bullet,T\}}(\underline{q},\underline{p}) = \left(\underline{q} + \frac{\partial T(\underline{p})}{\partial \underline{p}}\tau, \underline{p}\right) \quad in \quad e^{\tau\{\bullet,V\}}(\underline{q},\underline{p}) = \left(\underline{q}, \underline{p} - \frac{\partial V(\underline{q})}{\partial \underline{q}}\tau\right), \tag{2}$$

  po tem pa sem le pe sledil razcepom, ki smo jih pokazali na predavanjih tako, da sem v vakem časovnem koraku v pravem vrstnem redu klical te funkcije in vanje vstavil prave konstante. Nato sem po koncu vsakega takega zaporedja shranil položaj in ponavljal tako zanko.

- **Metode sem poimenoval kot Trotter-Trotter, TrotterSym-Simetriziran Trotter, SS4-Split-step četrtega reda, SS3-Split-step tretjega reda, SS33-Split-step četrtega reda, ki je zgolj produkt SS3 in konjugiranega SS3.**

- Poincaréjevo prslikavo sem risal tako, da sem pri izbrani energiji in ravnini izbiral preostali dve spremenljivki. Nato sem spremenil integrator, tako da je pri izbranem začetnem pogoju izračunal orbito ampak shranil zgolj točke, ki se nahajajo na poincaréjevi preslikavi. Pri tem sem vsakič ko je orbita prašla ravnino preslikave linearno ekstrapoliral kje se nahaja točka na poincaréjevi preslikavi.

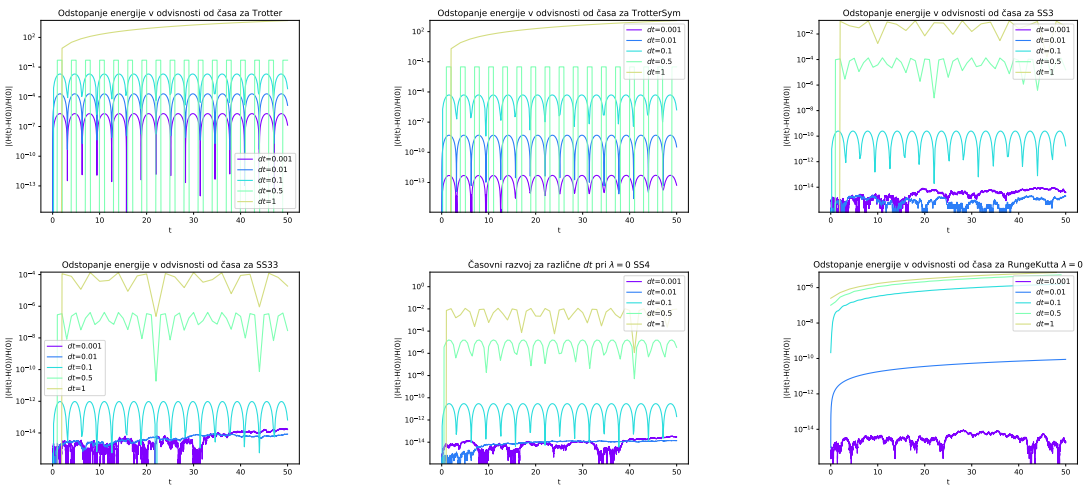
III. Natančnost



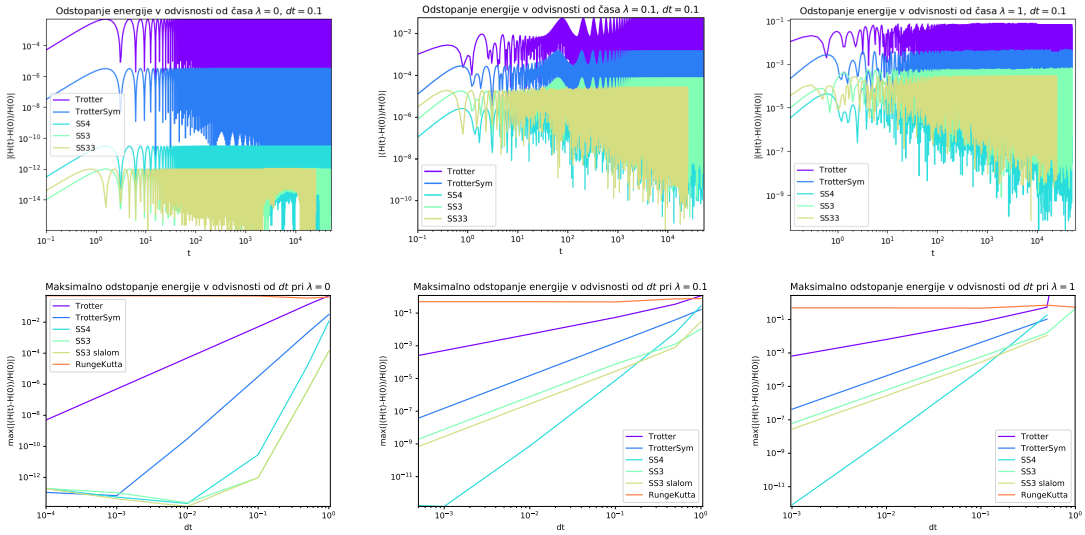
Slika 1: *Slika levo prikazuje kako se orbite spremenijo pri različnem λ. $x_0 = (x = 0.5, y = 0, p_x = 0, p_y = 1)$. Druga slika nam kaže relativno odstopanje od točne rešitve pri metodi SS4 (krožnica) za različne dolžine časovnega koraka. Slika na desni pa nam kaže takšno odstopanje za različne metode, tako, da zabeleži pri vsaki metodi maksimalno odstopanje v času* 500*. To deluje, ker na sredinski sliki vidimo da odstopanje ostaja pri enakem maksimumu.*

Ker sem želel ugotoviti kako natančne metode, sem se spomnil, da v resnici poznam eksaktno rešitev pri $\lambda = 0$, če izberem $x = 1, y = 0, p_x = 0, p_y = 1$. To je namreč krožnica. Zato sem izrisal grafe, kot jih vidimo na sliki. Opazimo torej, da se eksaktnost rešitve rahlo spreminja, najverjetneje oscilira okoli ničle, ne gelde na integrator. Če pa povečamo natančnost, se tudi natančnost rešitve izboljša. Da bi to čim bolj eocenil, sem za vsako metodo pri različnih dt izrisal tak graf in poiskal maksimum. Nato sem vse podatke zbral in jih izrisal na sosednji sliki, ki pa je že precej uporabna in pokaže kakšne so razlike med metodami.

Potem pa sem si pogledal še kaj se dogaja z energijo, kot je predlagal profesor, s čimer sem si lahko ogledal tudi primere z $\lambda \neq 0$. Pri tem se je pogosto zgodilo da mi je katera od metod $SS3$ ali $SS33$ divergira po dolgem času. Zato na slikah, ki sem jih narisal včasih krivulja izgine, kar pomeni, da je tam divergirala. To ne velja za *Trotter* metodi, kjer krivulja izgine, ker sta prepočasni.

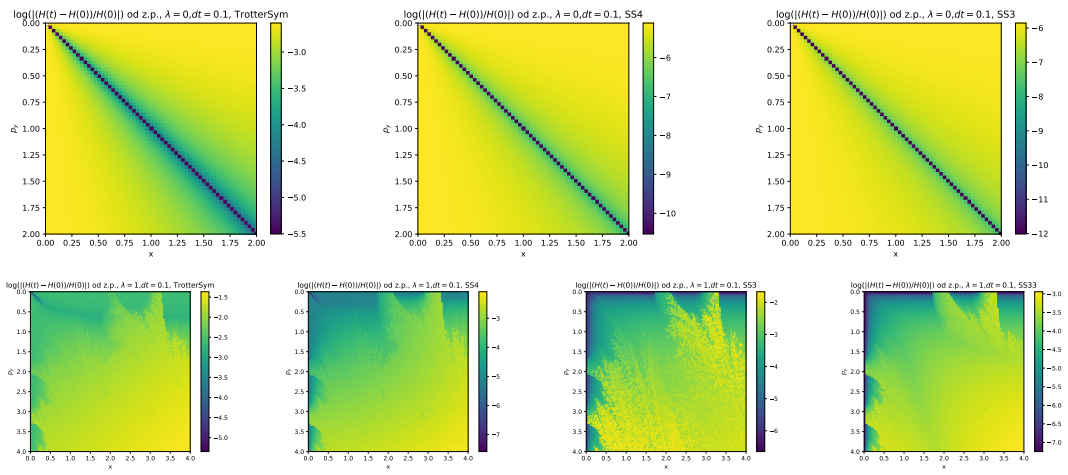


Slika 2: *Slike prikazujejo kakšno je relativno odstopanje energije od začetne energije pri $\lambda = 0$, za različne metode, pri različnih dt. Žal so na osi premajhni napisi, ker sem napako prepozno opazil. Na y osi piše $|(H(t) - H(0))/H(0)|$, x osi pa je čas. $x_0 = (x = 0.5, y = 0, p_x = 0, p_y = 1)$. SS4(četrti red), SS3(tretji red), SS33(Tretji red s slalomom)*



Slika 3: *Slike zgoraj prikazujejo kako se relativno odstopanje energije od začetne energije spreminja s časom pri različnih λ. $dt = 0.1$. Slike spodaj pa prikazujejo maksimalno relativno odstopanje od začetne energije po času 500 v odvisnosti od izbranega dt. Za ta pristop sem se odločil po tem, ko sem na zgornjih slikah opazil, da načeloma vsi integratorji ohranjajo energijo, vendar z različno natančnostjo. S tem opazujemo kolikšna je natančnost integratorja pri izbranem dt. Na y osi piše $|(H(t) - H(0))/H(0)|$*

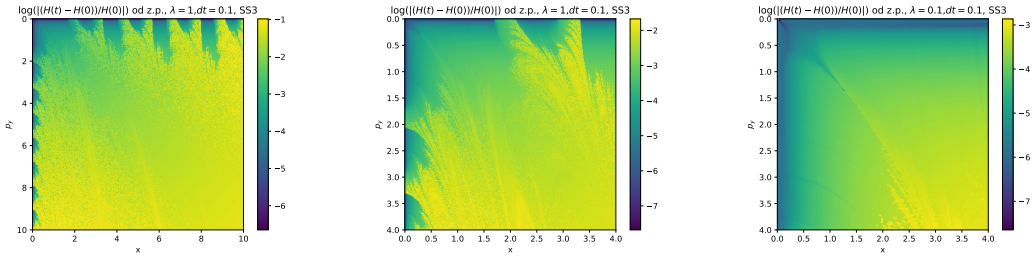
Dodatno vprašanje, ki bi si ga v praksi lahko zastavili je, kako se energija ohranja v različnih delih faznega prostora. Opazili smo že namreč, da so rezultati močno različni za različne λ. Zato sem prečesal čim večji kos faznega prostora tako, da sem fiksiral dva začetna pogoja, dva pa zvezno spreminjal. Spreminjal sem x in p_y in potem na mreži izrisal kolikšno je največje relativno odstopanje od začetne energije za vsak začetni pogoj. S tem sem potem tudi med seboj primerjal metode. Morda bi bilo bolje, da bi pri iskanju začetnih pogojev fiksiral še enrgijo, kot bom to kasneje storil pri poincaréjevi preslikavi.



Slika 4: *Slike zgoraj prikazujejo kako se logaritem maksimalnega relativnega odstopanja energije od začetne energije spreminja z izbiro začetnih pogojev pri $dt = 0.1$ in $t_{max} = 50$. Zgoraj je $\lambda = 0$,spodaj pa je $\lambda = 1$. Začetni pogoji so torej $(x = x, y = 0, p_x = 0, p_y = p_y)$. Smisel tega skupka slik je primerjava med metodami. Preveril sem, da rezultat pri spodnjih slikah ni odvisen od t_{max}, tako da sem izračunal isti graf pri $t_{max} = 200$ in dobil zelo podoben rezultat.*

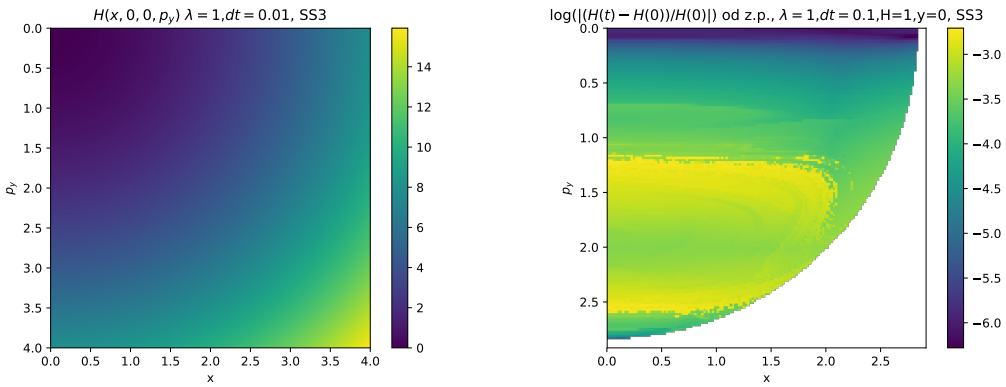
Iz teh slik takoj ugotovimo kar nekaj zanimivosti. Prva sledi iz slik 4 zgoraj. Tam vidimo, da se očitno pri krožnicah ($x = p_y$) energija dosti bolje ohranja. Poleg tega opazimo, da se energija ohranja simetrično glede na zamenjavo x in p_y, kar je smiselno, če se zavedamo, da so to elipse. Nasploh je zanimiva ta gigantska razlika v velikostnih redih med elipsasto in krožni dinamiko.

Kar potem vidimo na spodnjih slikah in na slikah 5 je precej nenavadno. Na mestu bi bilo preveriti pri kakšnih energijah se te orbite nahajajo, da se izključi možnost, da je relativna napaka odvisna od velikosti energije. Ne glede na to, opazimo, da se dista diagonala od krožnice še malo pojavlja, ampak hitro izgine. Vrednost teh grafov je predvsem v primerjavi med metodami. Vidimo, da je metoda SS3 precej občutljiva na začetne pogoje, med tem ko ostale spremembe občutijo zvezno in blago. Čisto iz zanimivosti sem zato izrisal še sliki 5, kjer se na desni sliki zelo lepo vidi, da se pri majhnem λ še vedno ohrani oddtis krožnice. Na sredinski sliki, ki je zgolj izrisana pri večji natančnosti pa se zelo lepo vidi neka notranja struktura tega prostora.



Slika 5: *Isti komentar kot pri sliki 4. Levo in na sredi je $\lambda = 1$, desno pa $\lambda = 0.1$.*

Zato sem se spomnil, da bi moral res za vsak slučaj preveriti, kaj se zgodi, če izrišemo takšno stvar pri izbrani energiji in $y = 0$. Poleg tega sem izrisal kako izgleda $H(0)$, da vidimo, če slučajno pride do česa nenavadnega (recimo, da je kaj narobe z mojo metodo). H nas ne preseneti, preseneti pa nas slika pri konstantni energiji. JE nekaj drugačnega in je precej zanimiva.

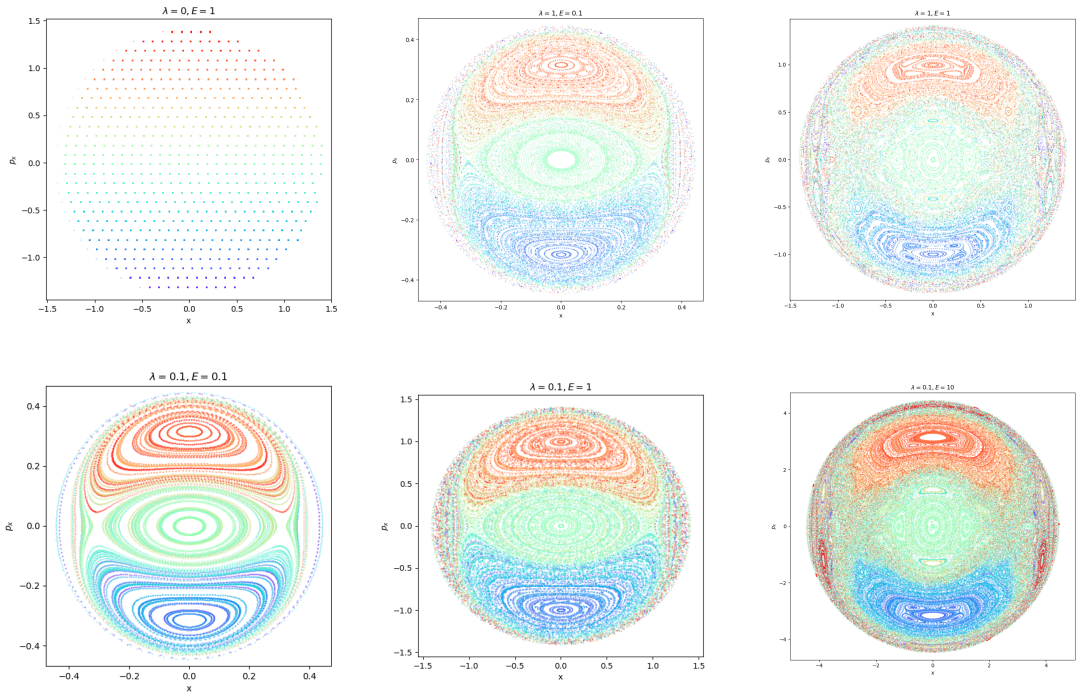


Slika 6: *Za desno sliko isti komentar kot pri sliki 4. Fiksiral sem energijo $H = 1$ in izbral $y = 0$ za začetni pogoj, da preverim če pride do česa nenavadnega. Na levi sliki sem samo prikazal kakšen je $H(0)$ pri zgornjih slikah.*

IV. Poincaréjeva preslikava

Čisto povsem brez nekega razloga, bom že četrtič tekom študija moral risati poincaréjevo preslikvao, zato bom morda rahlo neentuzisastičen. V nalogi ne piše nič v zvezi s tem in sam niti ne vidim zakaj bi to počel, ampak sem se vseeno lotil, ker se mi zdi, da je to nenapisana naloga.

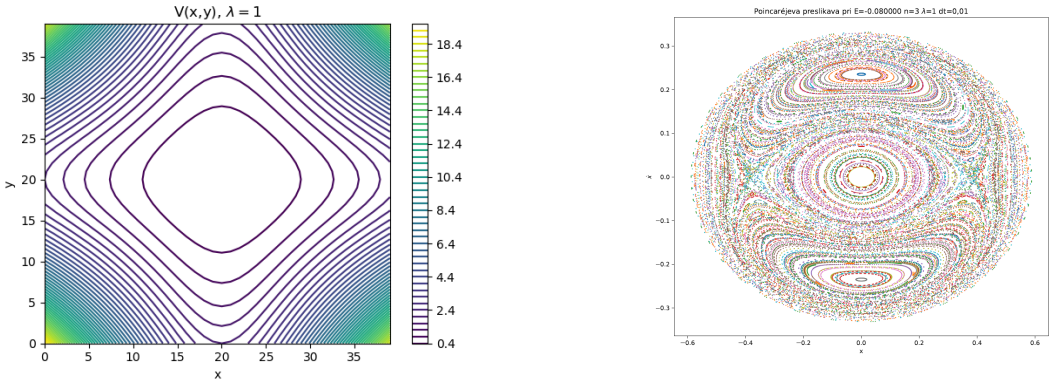
Nezapisani zaključek prejšnjega poglavja je bil zagotovo, da je metoda $SS4$ (četrti red) najboljša metoda, kar je pričakovano glede na to, da je najvišjega reda. Zato sem pri risanju poincaréjevih preslikav uporabil slednjo metodo in barve, ki so izbrane tako, da so vse orbite z isto začetno gibalno količino p_x pobarvane enako. Na tak način lahko lepo sledimo delom faznega prostora.



Slika 7: *To so poincarejeve preslikave nareje s SS4, pri pozitivnih p_y in $y = 0$. Slika levo zgoraj ($\lambda = 0$,E=1), sreda zgoraj ($\lambda = 1$,E=0.1), desno zgoraj ($\lambda = 1$,E=1), levo spodaj ($\lambda = 0.1$,E=0.1), sreda spodaj ($\lambda = 0.1$,E=1), desno spodaj ($\lambda = 0.1$,E=10)*

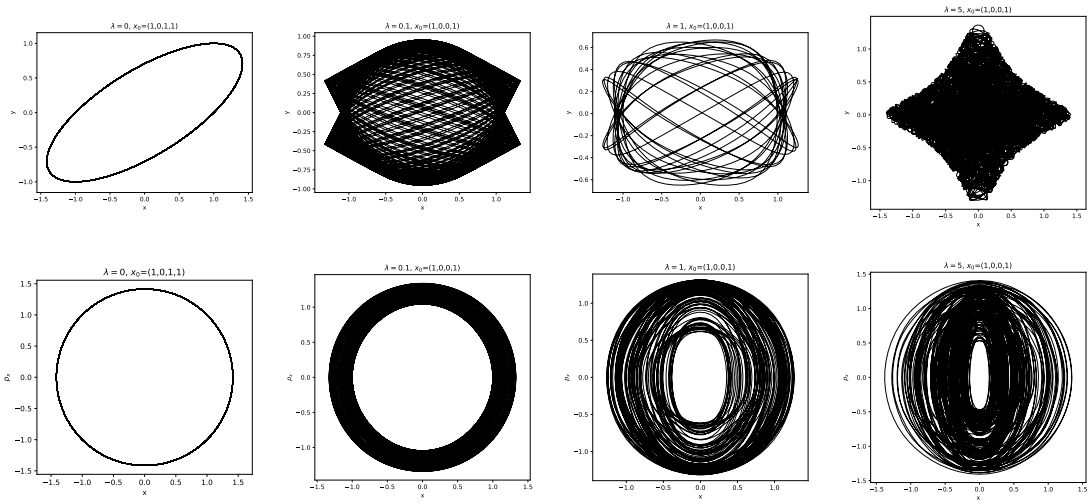
Poincaréjeve preslikave niso preveč natančne, ampak načeloma opazimo, da je preslikava zelo podobna ostalim preslikavam, ki jih dobimo pri podbonih dvodimenzionalnih problemih s centralnim potencialom, ki ima kvadratno simetrijo. To sem opazil šele sedaj, zato sem preveril in izrisal potencial, ki seveda ima kvadratno simetrijo. Poincaréjeva preslikava je namreč dober pokazatelj simetrije potenciala. Potencial izgleda kot prikazano na sliki spodaj. Zrtaven pa sem prilepil še kako izgleda poincaréjva preslikava, če opazujemo delec, ki se giblje po opni obešina na kvadratni okvir.

Potem sem nameraval tudi izrisati par takih orbit, čisto za okus, da vidimo kaj se dogaja. Ugotovil sem, da so te orbite zelo podobne ostalim orbitam, ki jih dobimo pri podobnih potencialih. Periodičnih orbit nisem iskal, a ne dvomim, da so tudi te zelo podobne. Zraven sem risal še kako izgledajo te orbite v drugi ravnini faznega prostora, saj se mi zdi da s tem dosti bolje vidimo kaj stori pertrubacija. Orbite v x, y se namreč močno spremenijo, med tem ko se v faznem prostoru dogajajo manj radikalne spremembe. Zanimivo je opazovati rešitev



Slika 8: *Levo je potencial V(x,y) pri $\lambda = 1$. Desno pa poincaréjeva preslikava delca, kis se giblje po opni pripeti na kvadratni okvir. Vidimo, da simetrija potencaila že napoveduje kakšna bo poincaréjeva preslikava.*

pri veliki λ, kjer se delec dobesedno ujame v nek tak reženj v obliki ekvipotencialnih ploskev potenciala.



Slika 9: *To so orbite pri različnih λ. Prva orbita ima drug začetni pogoj, ker nisem želel da bi bila krog. Zgoraj rišem na oseh y,x, spodaj pa na oseh p_x,x.*

Na isti način lahko potem naredimo video, ki sem ga primarno naredil zato, da bi si lažje predstavljal kaj pomeni povprečje skozi fazni prostor. Želel sem si predstavljati kaj pomeni $\langle p_i \rangle (t)$. Tega sem se lotil tako, da sem naredil mrežo začetnih točk in jih propagiral v času, nato pa ob vsakem času t pogledal položaje vseh točk. Pričakoval sem, da se bodo določene trajektorije zgostile in spet druge razrečile, tako kot to vidimo na poincarejevi presliakvi. Vendar na poincaréjevi preslikavi točke niso ob istem času! Zato me je res zanimalo kako te zgostitve izgledajo. Problem seveda nastopi, ker so trajektorije v štiridimenzionalnem prostoru in je pogled potrebno zreducirati na neko nižjedimenzionalno ravnino. Na tak način sem posnel štiri videoposnetke, ki se mi zdi, da pravzaprav najoblj pašejo ravno v to rubriko. S temi posnetki si lahko predstavljamo vsako piko kot frnikulo, ki smo jo zakotalili po neki opni. Na začetku vzamemo nekaj tisoč frnikul in jih zakotalimo, in gledamo kako se premikajo. Lahko bi se igral z barvami, vendar se mi je zdelo prezakomplicirano. Posnetki imajo naslove $l0p1_x py_o d_t$, $l0p1_x y_o d_t$, $l1_x py_o d_t$, $l1_x y_o d_t$.

V. Ekviparticijski izrek

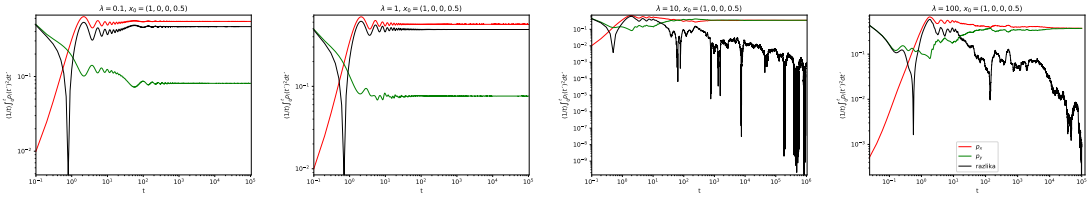
Ekviparticisjki izrek nam pravi, da je v primeru, da je sistem ergodičen, pričakovana vrednost prostostnih stopenj enaka volumnu faznega prostora pri tisti energiji in torej konstantna. To pa pomeni, da mora biti razlika povprečnih vrednosti po času dveh prostostnih stopenj enaka nič.

$$\langle p_j^2 \rangle(t) = \frac{1}{t} \int_0^t p_j^2(t')dt', \qquad j = 1, 2 \tag{3}$$

Naravno bi bilo potem preverjati ergodičnost sistema z zahtevo, da je sistem pri neki energiji ergodičen, če velja

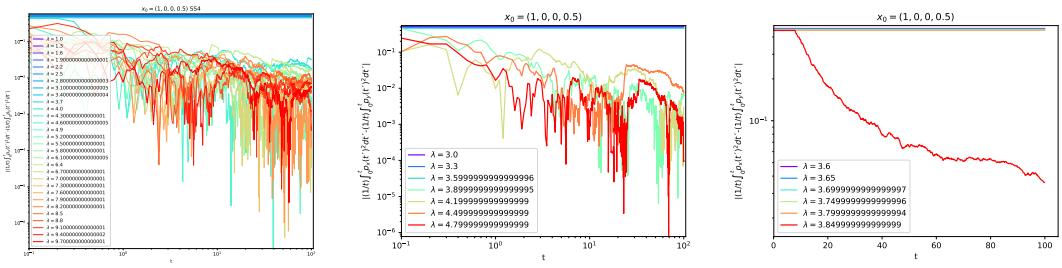
$$\lim_{t\to\infty} \langle p_x^2 \rangle(t) - \langle p_y^2 \rangle(t) = 0. \tag{4}$$

Tako si lahko izberemo neke začetne pogoje in izračunamo to vrednost, ki je lahko različna od nič po dolgem času. Ko nato, zvišujemo λ na neki točki lahko da pade na nič po dolgem času in s tem ugotovimo, da je sistem egodičen. Tako sem izbral neke začetne pogoje, približno take, kot je pisalo v naovilih, pri čemer sem pazil, da energija ostaja enaka kljub spreminjanju λ. Če namreč v začetnem pogoju postavimo, da je ena izmed krajvenih koordiant 0, dobimo energijo, ki je odvisna le od vsote kvadratov štirih komponent. Torej pri isti energiji spreminjamo nek parameter in iščemo λ pri kateri dosežemo ergodičnost. Kar je meni osebno že zanimivo. Ergodičnost je očitno povezana s samim sistemom, s samimi gibalnimi enačbami, in ne samo z energijo. Tak začetni primer vidimo na slikah 10 kjer rdeča in zelena krivulja predstavljata različni komponenti, črna pa njuno razliko.



Slika 10: *To so rezultati integrala 3 pri različnih λ in istih začetnih pogojih. Poleg tega izrisujem še razliko med integrali obeh komponent, kot uporaben test ergodičnosti. rdeča$-p_x$, zelena$-p_y$, črna$-|razlika|$.*

Ta primer na sliki 10 nas prepriča, da bi bilo zanimivo poiskati prav tisti λ pri katerem do tega prehoda pride. Najprej sem ga želel natančno določiti z nekim algoritmom, ki bi s pomočjo bisekcije opazoval zgolj zadnjih nekaj sto točk in ugotavljal kje se nahajajo. Kar me je odvrnilo od tega, je dejstvo, da je kritični λ očitno močno odvisen od začetnih pogojev!

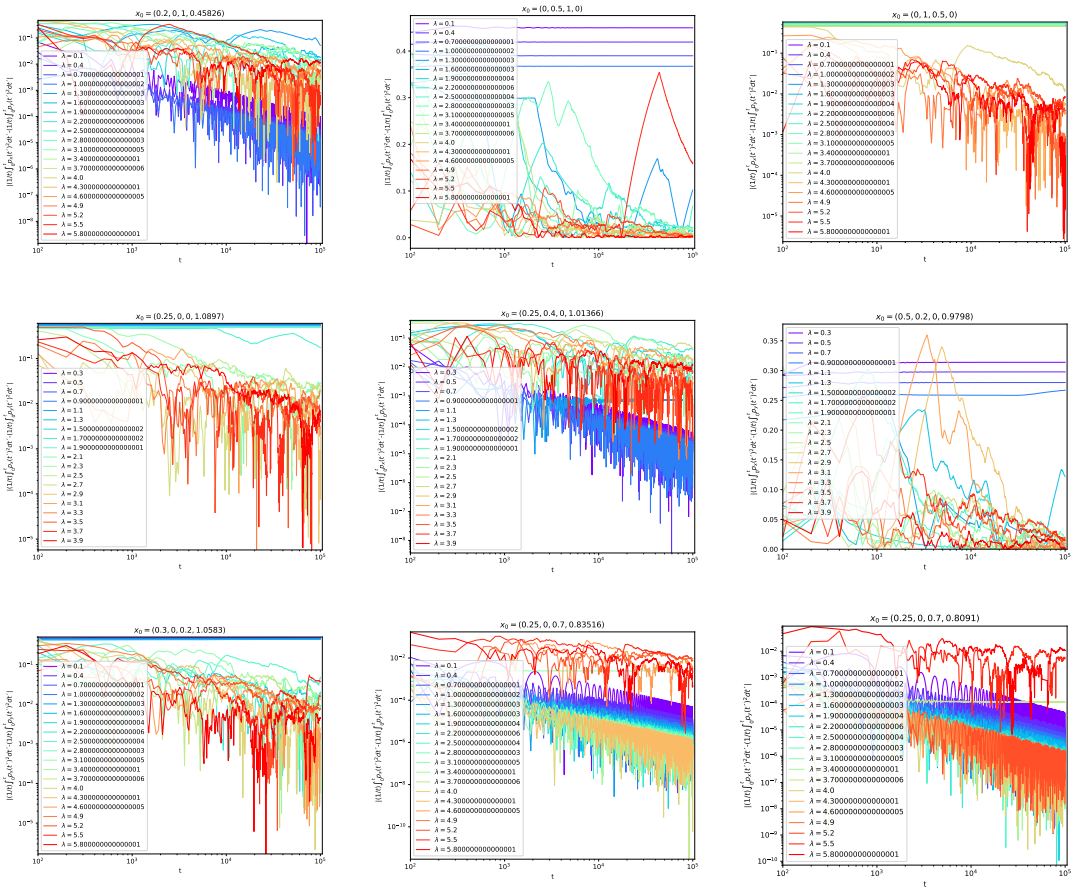


Slika 11: *To so razlike integralov 3 za oba p_i pri različnih λ in istih začetnih pogojih. Na podlagi slike na sredi ocenimo, da je $\lambda \in [3.6, 3.9]$. Zato naredimo sliko desno, kjer vidimo, da je $\lambda \in [3.8, 3.85]$. Čas je na vseh grafih do 10^5, samo vmes sem pozabil spremeniti skalo na grafu, ker sem razredčil točke, da ima slika manj podatkov. $x_0 = (1, 0, 0, 0.5)$*

Zato sem za te izbrane začetne pogoje zgolj narisal slike 11. Na teh slikah pa sem na roke pravzaprav izvajal malo bolj napredno bisekcijo, recimo temu $n - sekcija$. S to metodo sem ugotovil, da se kritični λ pri teh robnih pogojih nahaja pri

$$\lambda \in [3.8, 3.85] \qquad pri \qquad x_0 = (1, 0, 0, 0.5). \tag{5}$$

Ko pa sem se pogovarjal s sošolci sem ugotovil, da smo dobili različne λ. Ugotovil sem, da sem izbral druge začetne pogoje, a pri isiti energiji. To me je potem malce zmedlo, ampak je logično, saj gre tu za stvari ki jih pravzaprav vidimo na poincaréjevi presliakvi. Nekateri torusi razpadejo zelo pozno, spet drugi hitro. Da bi preveril, če gre dejansko za nekaj tagega sem poskušal določiti kritični λ za čim več začetnih pogojev, ki jih lahko dobim pri isti energiji. Ampak preden bi se tega lahko lotil, sem mogal ugotoviti kako izgledajo te konvergence za različne začetne pogoje in s tem namenom izrisal kar nekaj slik. Vidimo jih na slikah 12.



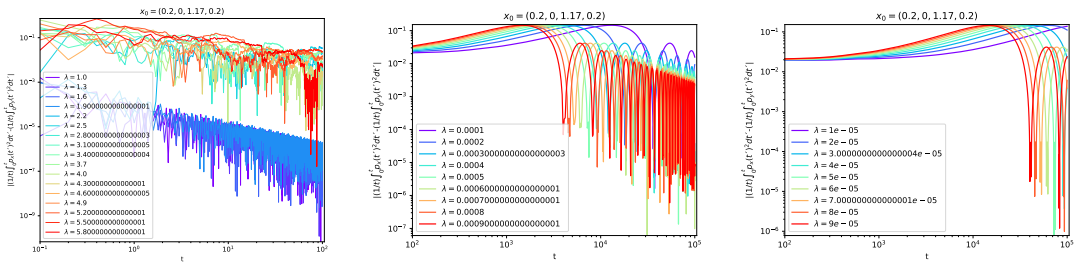
Slika 12: *To so razlike integralov 3 za oba p_i pri različnih λ in istih začetnih pogojih. Vidimo, da je kritični λ na prvi sliki slabo definiran. Na drugi sliki pa vidimo, da $\lambda \in [1.0, 1.3]$, na tretji sliki pa $\lambda \in [3.7, 3.9]$. Na četrti sliki pa med $\lambda = [1.9, 2.1]$. Na peti sliki res težko rečemo kje je kritični λ, med tem ko je na šesti sliki jasno, da je kritični $\lambda \in [0.9, 1.1]$. Na sedmi je kritični $\lambda \in [1.6, 1.9]$. Na osmi in deveti ni dobro definiran. Na vseh slikah je energija* 0.625. *Na zadnji sliki je $p_x = 0.73$.*

Vse te slike prikazujejo enačbo $\langle p_x^2 \rangle(t) - \langle p_y^2 \rangle(t)$ pri začetnih pogojih pri isti energiji $E = 0.625$, a se v odvisnosti od različnih začetnih pogojev erogdičnost teh orbit pojavi pri drugih λ.

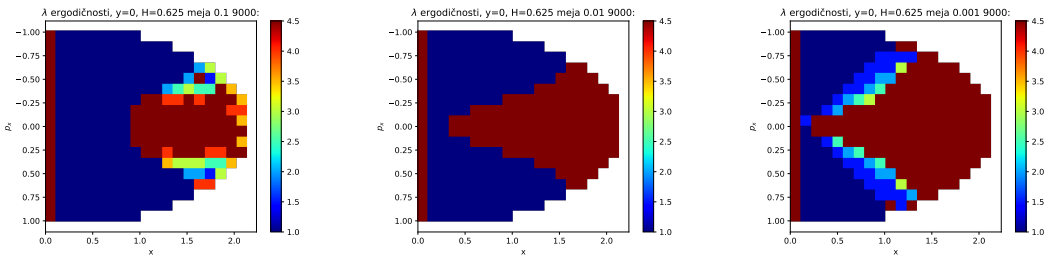
Poglejmo si te vrednosti:

$$\lambda \in [3.8, 3.85] \quad pri \quad x_0 = (1, 0, 0, 0.5), \tag{6}$$
$$\lambda \in [1.0, 1.3] \quad pri \quad x_0 = (0, 0.5, 1, 0), \tag{7}$$
$$\lambda \in [3.7, 4] \quad pri \quad x_0 = (0, 1, 0.5, 0), \tag{8}$$
$$\lambda \in [1.9, 2.1] \quad pri \quad x_0 = (0.25, 0, 0, 1.09), \tag{9}$$
$$\lambda \in [0.9, 1.1] \quad pri \quad x_0 = (0.5, 0.2, 0, 0.98), \tag{10}$$
$$\lambda \in [1.6, 1.9] \quad pri \quad x_0 = (0.3, 0, 0.2, 1.06), \tag{11}$$
$$\lambda \in [??, ??] \quad pri \quad x_0 = (0.2, 0, 1, 0.46), \tag{12}$$
$$\lambda \in [??, ??] \quad pri \quad x_0 = (0.25, 0.4, 0, 1.014), \tag{13}$$
$$\lambda \in [??, ??] \quad pri \quad x_0 = (0.25, 0, 0.7, 0.835), \tag{14}$$
$$\lambda \in [??, ??] \quad pri \quad x_0 = (0.25, 0, 0.73, 0.809). \tag{15}$$

Vrednosti se nahajajo na nekem precej širokem intervalu. Zasedajo vrednosti med 4 in 1. Med tem ko so mene najoblj presenetili rezultati pri katerih vrednsoti sploh ne znam določiti, ker izgleda kot da je sistem ergodičen pri poljublnem lambda. Ne samo to, zdi se da je bolj ergodičen pri majhnih lambdah kot pri velikih. To se zdi izredno nenavadno, zato sem izrisal kako izgleda taka orbita v odvisnosti od λ na posnetku *orbita*1. VIdimo ta se zgodi nek prehod pri cca $\lambda = 2$ v neko na videz bolj ergodično dinamiko. Da ne ostanemo samo rpi videu, si poglejmo za podoben primer pri sicer drugi energiji, kaj se zgodi, če lambdo še bolj zmanjšamo, da bi ugotovili, če se pri neki λ vseeno ergodičnost pokvari. To vidimo na sliki13.



Slika 13: *To so razlike integralov 3 za oba p_i pri različnih λ in istih začetnih pogojih. Vidimo, da je ali ergodičnost prisotna pri precej majhnih lambda, ali pa, da se ergodičnost pojavi pri $\lambda \in [2.2, 1.9]$, ali pa da je ergodičnost, samo različnih stopenj, prisotna ves čas. Možno je tudi, da je pogoj 4 izpolnjen, ni pa ergodičnosti. Tu je $x_0 = (0.2, 0, 1.17, 0.2)$.*



Slika 14: *To so ocenjeni ktirični λ, ki jih dobimo pri izbranem začetnem pogoju. Izrisal sem orbite do časa 10000 in potem opazoval razliko po času 9000. Če je razlika pri neki λ padla pod vrednost "meja", sem zabeležil tisto λ. Osi so narobe. x os je na intervalu $(0, 1)$. Torej, kjer piše vrednost 2 je v resnici vrednost 1 itd. Najvišja vrednost predstavlja območje, kjer metoda na intervalu ni našla kritične λ.*

Ker me je zmotila ta sicer na nek način logična odvisnost od začetnih pogojev, sem se odločil, da bom pri različnih začetnih pogojih poskušal oceniti kritični λ. To se je seveda končalo bolj kot ne jalovo. Pri različnih začetnih pogojih sem poračunal za različne lambde razliko pričakovanih vrednosti v odvisnosti od časa in potem z algoritmom ugotavljal kje naj bi nastopil kritični lambda, tako da sem po dolgem času pogledal kako velika je najvišja vrednost. Najprej sem opazoval $1000 > t > 500$, kasneje pa na intervalu $10000 > t > 9000$. To vidimo na slikah 14. Bolj malo lahko razberemo iz teh slik. Načeloma lahko razberemo hitrost konvergence v odvisnsoti od začentega pogoja. Glavni zaključek je verjetno to, da ne modrem območju metode zelo hitro konvergirajo, na rdečem pa sploh ne oz. k nekim visokim vrednostim. S tem smo dobili nek podatek o tem, kako močno velja pogoj 4 na različnih delih faznega prostora. Kar je še vedno kar zanimivo.

Še vedno pa nismo rešili problema grafov na sliki 13 na katerih je pogoj 4 bolje izpolnjen pri malih λ, kot pri velikih. Pogledali smo si že en posnetek in ugotovili, da se orbite ne spreminjajo takrat ko se spremeni izpoljenost pogoja 4. Zato sem naredil še en posnetek *poincare*2, kjer sem izrisoval poincaréjevo preslikavo v odvisnsoti od λ. Na tej preslikavi sem potem pogledal kje se nahaja pri zelo velikem λ še ohranjen torus, kar je na območju $(x = 0.25, p_x = 0.7)$. Tam sem potem šel še enkrat izračunati izpolnitev pogoja 4 v odvisnosti od λ, kar vidimo na zadnjih dveh slikah spodaj 13. Na teh dveh slikah končno postane jasno kaj se dogaja. Ko je orbita še na torusu sta očitno v nekaterih primerih pričakovani vrednsoti komponent p_x in p_y zelo podobni in zato postopoma razlika pada proti nič. Ko pa na tistem mestu torus razpade, kot v tem primeru (kar vidimo na posnetku), se ta razlika spremeni. Zato sem izrisal dva grafa. Prvi se nahaja malce bolj na robu torusa $(p_x = 0.7)$ in zato ko torus razpada prej zamenja način konvergence, med tem ko je drugi malce bližje centru $(p_x = 0.73)$ in zato zamenja način konvergence pri višjem λ.

Mislim, da nisem ugotovil, da je ergodičnost povezana z razpadom torusov (če ergodičnost deifniramo s pogojem 4), sem pa ugotovil, da se stopnja izpolnjenosti pogoja 4 spremeni če smo v ali izven torusa.