

Simulacija distribucije naelektrisanja na 2D i 3D modelima metodom simuliranog kaljenja

U radu je demonstrirana primena metoda simuliranog kaljenja na problem nalaženja stabilnog rasporeda jednakih tačkastih naelektrisanja na površini diska i u unutrašnjosti lopte. Diskutovana je stabilnost dobijenih konfiguracija naelektrisanja i razmatrano je raspoređivanje naelektrisanja u unutrašnjosti modela. Rezultati rada se u velikoj meri slažu sa rezultatima prethodnih radova u ovoj oblasti.

Uvod

Problem nalaženja ravnotežnog stanja za n jednakih tačkastih naelektrisanja koja se nalaze na provodnoj površini lopte prvi je postavio britanski naučnik Tomson početkom dvadesetog veka (Pérez-Garrido *et al.* 1997). Rešavanje Tomsonovog problema se svodi na nalaženje konfiguracije naelektrisanja za koju će potencijalna elektrostatička energija sistema biti minimalna; drugim rečima, potrebno je minimalizovati energiju sistema kao funkciju koordinata naelektrisanja. Ova energija je data kao suma potencijalnih energija svake naelektrisane čestice pojedinačno, i iznosi:

$$E = \sum_{i=1}^n E_i = kq^2 \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{1}{r_{ij}} = \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{i \neq j \\ j=1}}^n [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{-1/2} \quad (1)$$

gde je k Kulonova konstanta, q naelektrisanje jedne čestice i r_{ij} rastojanje između i -te i j -te čestice (radi

jednostavnosti, uveli smo novi sistem mernih jedinica tako da q i k budu jedinične veličine).

Da bismo izvršili minimizaciju energije sistema i pronašli stabilne konfiguracije koristili smo numerički metod simuliranog kaljenja, koje u svojoj osnovi ima pomeranje čestica vršeno na osnovu verovatnoće njihovog prelaska u novo stanje. Ova verovatnoća je data sa

$$p = \exp\left[-\frac{E}{k_B T}\right] \quad (2)$$

gde je k_B Bolcmanova konstanta a T temperatura na kojoj se sistem nalazi (Mandl 1988). Temperatura je jedna od važnih karakteristika sistema jer kinetička energija čestica, a samim tim i njihova pokretljivost, direktno zavisi od nje.

Postepeno smanjujući temperaturu sistema simuliramo kaljenje, industrijski metod za prevođenje istopljenih metala u čvrsto stanje laganim hlađenjem. Simulirano kaljenje kao metod optimizacije funkcija ima prednost u odnosu na veliki broj drugih metoda u tome što nije potrebno predvideti tok funkcije da bi se ona minimalizovala, kao i u tome što rezultati dobijeni na ovaj način imaju veliku tačnost (MacKeown 1997). Cilj ovog rada bilo je nalaženje stabilnih stanja naelektrisanja koja se kreću u unutrašnjosti lopte i na površini diska korišćenjem metoda simuliranog kaljenja.

Metod simuliranog kaljenja i diskusija dobijenih rezultata

Algoritam koji smo koristili podelili smo na dva dela: inicijalizaciju sistema i proces minimalizacije energije sistema (simulirano kaljenje).

Dorđe Radičević (1988), Niš, Anete Andrejević 9, učenik 1. razreda Gimnazije "Svetozar Marković" u Nišu

MENTOR: Marija Vranić, student Fizičkog fakulteta u Beogradu

Inicijalizacija sistema

Kao početne parametre sistema unosili smo broj naelektrisanja n , maksimalni pomeraj čestice d i faktor promene temperature $F\beta$. Zatim smo za svako naelektrisanje generisali dva slučajna broja ζ_1 i ζ_2 iz intervala $(0, 1)$ i računali polarne koordinate (r, θ) svakog naelektrisanja po formulama:

$$r = \sqrt{\zeta_1} \quad \theta = 2\pi \zeta_2$$

Korišćenjem ovih formula obezbedili smo uniformnu raspodelu naelektrisanja po disku (MacKeown 1997). U slučaju trodimenzionalnog modela, polarne koordinate naelektrisanja smo računali pomoću jednačina:

$$r = \sqrt[3]{\xi_1} \quad \theta = 2\pi \xi_2 \quad \phi = 2\pi \xi_3$$

Početni parametar temperature β , definisan kao $\beta = (k\beta T)^{-1}$, smo računali po formuli:

$$\beta = \frac{n}{E}$$

gde je E početna energija sistema (MacKeown 1997).

Simulirano kaljenje

Algoritam koji smo koristili da bismo našli traženu stabilnu konfiguraciju čestica se zasnivao na nekoliko jednostavnih koraka:

- 1) Vršili smo promenu radijus-vektora odabrane čestice za slučajni vektor intenziteta ne većeg od maksimalnog pomeraja čestice d ;
- 2) Određivali smo da li je nova konfiguracija prihvatljiva po Metropolis kriterijumu (MacKeown 1997);
- 3) Menjali smo parametar temperature množeći ga faktorom $F\beta$ i vraćali se na prvi korak.

Najvažniji deo korišćenog algoritma je bio upravo drugi korak u kome smo određivali prihvatljivost nove konfiguracije čestica. Prihvatljivost smo određivali Metropolis algoritmom koji je po formulama (1) i (2) računao odnos verovatnoća nalaženja sistema u starom i novom stanju. Ukoliko je ovaj odnos bio veći od slučajnog broja iz intervala $[0, 1]$ čestica bi ostajala u novom stanju, a u suprotnom bi se čestica vraćala na svoje staro mesto. Zbog ovakvog određivanja prihvatljivosti mogli smo da izbegnemo

zaustavljanje u lokalnim minimumima energije čija bi posledica bilo dobijanje metastabilnih konačnih konfiguracija; naime, iako je naš cilj bila minimalizacija energije, nismo uvek stremili ka što je moguće manjoj energiji već smo dozvoljavali i njene blage poraste. Tako je i u stvarnom životu: da bismo našli put koji vodi ka najnižoj dolini, ponekad moramo preći i neku uzbrdicu (MacKeown 1997).

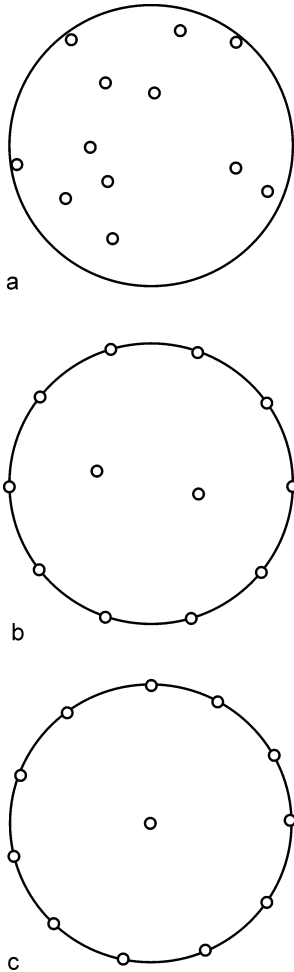
Modifikacije algoritma simuliranog kaljenja

Kako bismo što uspešnije izbegli zarobljavanje u lokalnim energijskim minimumima, izvršili smo izvesne modifikacije osnovnog algoritma, vodeći računa o tome da karakteristike metoda ostanu nepromenjene. Posle inicijalizacije sistema vršili smo 20 probnih iteracija i brojali koliko je pomeraja ostvareno; ukoliko je u manje od 80% iteracija izvršeno pomeranje čestice, povećavali smo početnu temperaturu sistema množenjem parametra β sa dva i ponavljali probne iteracije sve dok nije bio izvršen dovoljan broj pomeraja. Na ovaj način smo modifikovali početnu temperaturu kako ona ne bi bila previše niska, jer u tom slučaju čestice ne bi imale dovoljno veliku energiju da prevaziđu visoke energetske barijere koje razdvajaju minimume. Pored toga, za istu početnu konfiguraciju proces kaljenja smo ponavljali po deset puta i kao konačno rešenje uzimali ono sa najmanjom krajnjom energijom.

Rezultati i diskusija

U simulaciji smo deset puta vršili po tri hiljade poziva Metropolis algoritma koji je u jednom pozivu jednom obrađivao svaku od n čestica. Faktor promene temperature iznosio je $F\beta = 1.25$, a maksimalni pomeraj čestica $d = 0.01$. Na slici 1 su prikazane konfiguracije dobijene za 12 naelektrisanja na disku. Iz dobijenih rezultata smo zaključili da čestice teže da se rasporede po koncentričnim krugovima na površini diska, dok su se u trodimenzionalnom slučaju čestice uvek raspoređivale po površini lopte.

Na slici 2 je data zavisnost energije dvodimenzionalnog sistema od vremena, tj. od broja iteracija. Sa ovog grafika se vidi da je energija sistema u jednom trenutku dostigla konstantnu vrednost – sistem je dospao u stabilno stanje. Međutim, čak i u stabilnom stanju postojaće fluktuacije energije, što se može videti na slici 3.

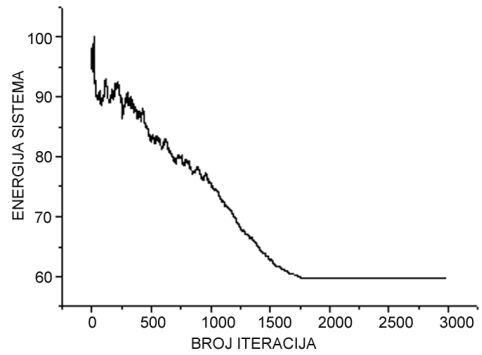


Slika 1.
Rasporedi 12 naelektrisanja na disku:
a – slučajni početni položaj; b – metastabilno konačno stanje; c – stabilno konačno stanje

Figure 1.
12-charge configurations on a disc: a – random starting position; b – metastable final state; c – stable final state

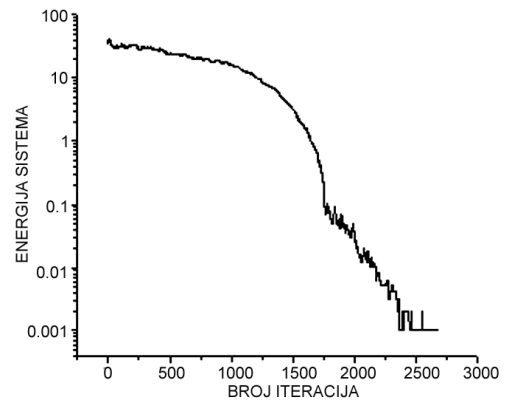
Na slici 4 je prikazana zavisnost energije trodimenzionalnog sistema od vremena; energija će se u ovom slučaju ponašati na isti način kao i u slučaju naelektrisanja na disku.

Podrobnije smo razmotrili dobijeni raspored dvanaest naelektrisanja na disku. U ovom slučaju su se često javljala dva konačna stanja, jedno u kome su se u unutrašnjosti diska nalazile dve čestice (slika



Slika 2.
Zavisnost energije sistema 12 čestica na disku od vremena, odnosno od broja iteracija

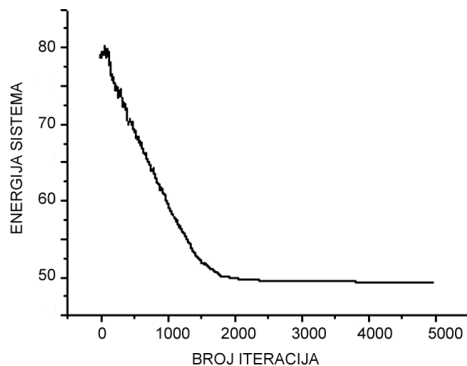
Figure 2. The energy of a 12-particle system as a function of time (2D case)



Slika 3.
Razlika trenutne i krajnje vrednosti energije sistema u zavisnosti od broja iteracija (lin-log varijanta)

Figure 3.
The difference of current and final energy as a function of time in lin-log scaling (2D case)

1b), i drugo, gde se u unutrašnjosti nalazila samo jedna čestica (slika 1c). Da bi se odredilo koje od dva stanja je ravnotežno, uporedili smo njihove energije vođeni idejom da je ono stanje koje poseduje manju energiju stabilnije. Energija konfiguracije sa dve čestice u unutrašnjosti bila je $E_1 = 60.722$, a konfiguracije sa jednom česticom u sredini $E = 60.691$. Prema tome, stanje koje ima jednu česticu u sredini je bilo stabilnije i prihvatili smo ga kao



Slika 4.
Zavisnost energije sistema 12 čestica u lopti od broja iteracija

Figure 4.
The energy of a 12-particle system as a function of time (3D case)

konačno. Relativna razlika konačnih energija je u ovom slučaju iznosila 0.05%, te smo zbog veoma male razlike između ove dve vrednosti kao rezultat često dobijali sistem u metastabilnom stanju (slika 1b): iako sistem posle simulacije dostiže energiju koja je veoma bliska energiji ravnotežnog stanja, on ne mora obavezno da se nalazi u najstabilnijem mogućem stanju – simulirano kaljenje kao cilj ima samo minimalizaciju energije sistema, ne obavezno i nalaženje konfiguracije koja odgovara globalnom minimumu.

Zaključak

Demonstrirali smo primenu metoda simuliranog kaljenja na rešavanje konkretnog fizičkog problema – distribucije naelektrisanih čestica na površini diska i u unutrašnjosti lopte. Dalji rad na projektu bi se bavio preciznim određivanjem faktora promene temperature, koji je u ovom radu bila jedina veličina koju ni na koji način nismo modifikovali kako bi što bolje odgovarala trenutnom energijskom stanju sistema. U daljem istraživanju je potrebno ispitati i ove mogućnosti i ustanoviti koji od navedenih načina promene temperature daje najbolje rezultate. Takođe, u ovom radu se nismo bavili aktuelnom temom vezanom za Thomsonov problem – ispitivanjem simetrije dobijenih stabilnih stanja, što svakako predstavlja osnovu za dalji rad na problemu.

Literatura

Hardin R. H. *et al.* 1994. Minimal Energy Arrangements of Points on a Sphere. Dostupno na <http://www.research.att.com/čnjas/electrons>

Lazarević N., Bajković B. 2001. *Matematika: formule, obrasci, definicije*. Beograd: Zavod za udžbenike i nastavna sredstva

MacKeown P. 1997. *Stochastic Simulations in Physics*. Singapore: Springer publishers

Mandl F. 1988. *Statistical Physics*. Manchester: University of Manchester, Faculty of Science, Department for Physics

Pérez-Garrido A., Dodgson M. J. W, Moore M. A. 1997. Influence of Dislocations on Thomson's Problem. Dostupno na http://arxiv.org/PS_cache/cond-mat/pdf/9701/9701090.pdf

Djordje Radičević

Simulation of Charge Distribution in Two- and Three-Dimensional Models Using the Simulated Annealing Algorithm

The application of the simulated annealing algorithm on the distribution of equal charges on a disc and in a sphere has been demonstrated in this paper. In the basis of the simulated annealing method, which was used to minimize the potential electrostatic energy of the system of charges and to therefore find its stable configuration, was the Metropolis algorithm, which calculated the probability of charge movement from one point to a nearby, randomly selected one.

The change of the energy of the system was monitored, and the obtained results are presented on graphs 1 and 3 for two- and three-dimensional models, respectively. The fluctuations of the energy of the two-dimensional system are shown on graph 2. Furthermore, the distribution of charges inside the disc is discussed and from the results it was concluded that the charges tend to arrange themselves in concentric circles on the disc. The results obtained in this paper coincide well with the results of other papers that have dealt with same or similar subjects. ☺