Nelinearna minimizacija

Miha Čančula

21. oktober 2011

1 Orodja

Nalogo sem reševal s prostim programom `GNU Octave`, ki za nelinearno optimizacijo ponuja funkcijo `sqp`.

2 Thompsonov problem

Položaj diskretnih točkastih nabojev na krogli lahko opišemo z dvema koordinatama, $\vartheta \in [0, \pi]$ in $\varphi \in [0, 2\pi]$. Potencialna energija takih nabojev je odvisna le od medsebojne razdalje, zato moramo najprej izraziti razdaljo med dvema nabojema z njunima koordinatama. Kot med dvema točkama izračunamo kot skalarni produkt med njunima krajevnima vektorjema in znasa

$$\cos\alpha_{ij} = \cos(\varphi_i - \varphi_j)\sin\vartheta_i\sin\vartheta_j + \cos\vartheta_i\cos\vartheta_j \tag{1}$$

dejansko razdaljo med točkama pa po kosinusnem izreku

$$d_{ij} = \sqrt{2R^2(1-\cos\alpha_{ij})} \tag{2}$$

Skupna potencialna energija sistema je vsota potencialnih energij vseh parov nabitih delcev na krogli

$$E = E_0 \sum_{i<j} \frac{\sqrt{2R^2}}{d_{ij}} = E_0 \sum_{i<j} \left[1 - \cos(\varphi_i - \varphi_j)\sin\vartheta_i\sin\vartheta_j - \cos\vartheta_i\cos\vartheta_j\right]^{-1/2} \tag{3}$$

Ker multiplikativna konstanta v energiji ne spremeni optimalne razporeditve nabojev po krogli, lahko izraz pretvorim v brezdimenzijske enote. Energija $E_0 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}$ nas bo zanimala le, če bomo želeli izračunati vrednosti energije v minimumu, ne pa samega položaja minimuma.

$$y = \sum_{i<j} \left[1 - \cos(\varphi_i - \varphi_j)\sin\vartheta_i\sin\vartheta_j - \cos\vartheta_i\cos\vartheta_j\right]^{-1/2} \tag{4}$$

Brez izgube splošnosti lahko fiksiramo tri koordinate: $\vartheta_1 = 0$, $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = 0$. Na ta način preprečimo vrtenje okrog krogle med reševanje, hkrati pa pospešimo reševanje, saj zmanjšamo število prostostnih stopenj. Za problem z N naboji nam ostane $2N - 3$ prostih koordinat.