

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za matematiko in fiziko



Numerična minimizacija - posplošeni Thomsonov problem

Avtor: Simon Perovnik

Predavatelj: prof. dr. Simon Širca

Asistent: doc. dr. Miha Mihovilovič

Zaključna naloga pri Modelske analizi I

Ljubljana, september 2022

Naloga

S problemom iskanja minimuma dane funkcije se srečamo v različnih kontekstih. V idealnem primeru bi želeli minimum poiskati kar analitično - izračunali bi odvod funkcije in s pogojem, da mora biti ta odvod v ekstremih funkcije enak nič, poiskali minimum (ozioroma maksimum). Dobili bi nabor točk lokalnih minimumov, ko pa bi primerjali še vrednosti funkcije v teh točkah, bi lahko izluščili, kje se nahaja globalni minimum.

Problem se pojavi, ko ne znamo analitično določiti odvoda - pogosto je to povezano z veliko dimenzionalnostjo problema. V takih primerih se poslužujemo numeričnega iskanja minimuma. V nalogi 103 smo že raziskali nekaj metod za minimizacijo, ki so za nas pripravljene znotraj knjižnice **Scipy.optimize** in jih kličemo z ukazom **minimize()**. Takrat smo rešitve vrednotili predvsem po kakovosti končnega rezultata (časovna zahtevnost in hitrost konvergence sta bili sekundarnega pomena) in ugotovili, da nam daje najboljše rezultate metoda Nelder-Mead (ali tudi ameba). Te metode se bomo držali tudi v tej nalogi.

Dober primer problema minimizacije predstavlja Thomsonov problem, ki smo ga v nalogi 103 reševali na sferi in elipsoidu. Tokrat bomo problem nekoliko razširili, ga posplošili. To bomo storili z uvedbo novega prispevka k energiji sistema, poleg meddelčne razdalje bomo minimizirali tudi kot med posameznimi delci.

V nalogi si bomo pogledali, kako se spremeni naš model z uvedbo dodatnega člena in ga primerjali z osnovnim modelom. Zrisali si bomo nekaj rezultatov minimizacij, nato pa nas bo zanimalo, kako se za tak model glede na število elektronov spreminja povprečna parska razdalja med delci, povprečna energija na delec in pa dipolni moment celotnega sistema. Kasneje se bomo za hip ustavili pri analizi odziva modela pri različnih začetnih pogojih. Zanimala nas bo predvsem natančnost in pa hitrost algoritma glede na različne načina določevanja začetnega stanja sistema. Na tej točki si bomo ogledali tudi, kaj se pravzaprav dogaja med samo minimizacijo - pogledali si bomo, kako se spreminjajo lokacije točk nabojev med iskanjem minimuma sistema.

Ob koncu si bomo ogledali še dve nadgradnji našega modela. V prvem primeru bomo problem reševali na površini elipsoida, nato pa ponovno na sferi, a ob prisotnosti zunanjega električne polja.

1 Teoretični uvod

Ko na kroglo nanesemo N točkastih nabojev, se bodo le ti med sabo odbijali. To lahko fizikalno interpretiramo kot težnjo sistema, da minimizira svojo potencialno energijo - v tem primeru elektrostatsko energijo, ki je podana z zvezo

$$\mathbf{E} = \sum_{i < j}^N \frac{e_i e_j \cos^2(\phi_i - \phi_j)}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (1)$$

Opazimo lahko dva prispevka - prispevek zaradi meddelčne razdalje in prispevek zaradi meddelčnega kota. Za potrebe naše naloge, se bomo omejili na primer, ko so si vsi naboji po velikosti enaki $e_i = e_j = e_0$. Pravtako bomo energijo vedno normirali na način

$$\tilde{\mathbf{E}} = \frac{\mathbf{E}}{e_0^2 / (4\pi\epsilon_0)}, \quad (2)$$

saj tako ostane problem še vedno seveda povsem ekvivalenten, hkrati pa nekoliko bolj pregleden, saj lahko pozabimo na konstantne faktorje.

Takšen model bo ob minimizaciji želel delce čim bolj razmakniti med sabo, hkrati pa bo posebno nagrajeval delce, med katerimi bo glede na izhodišče pravi kot, saj bo takrat celoten prispevek k energiji enak 0.

Če torej izpustimo vse konstante, se naš minimizacijski problem poenostavi v minimizacijo

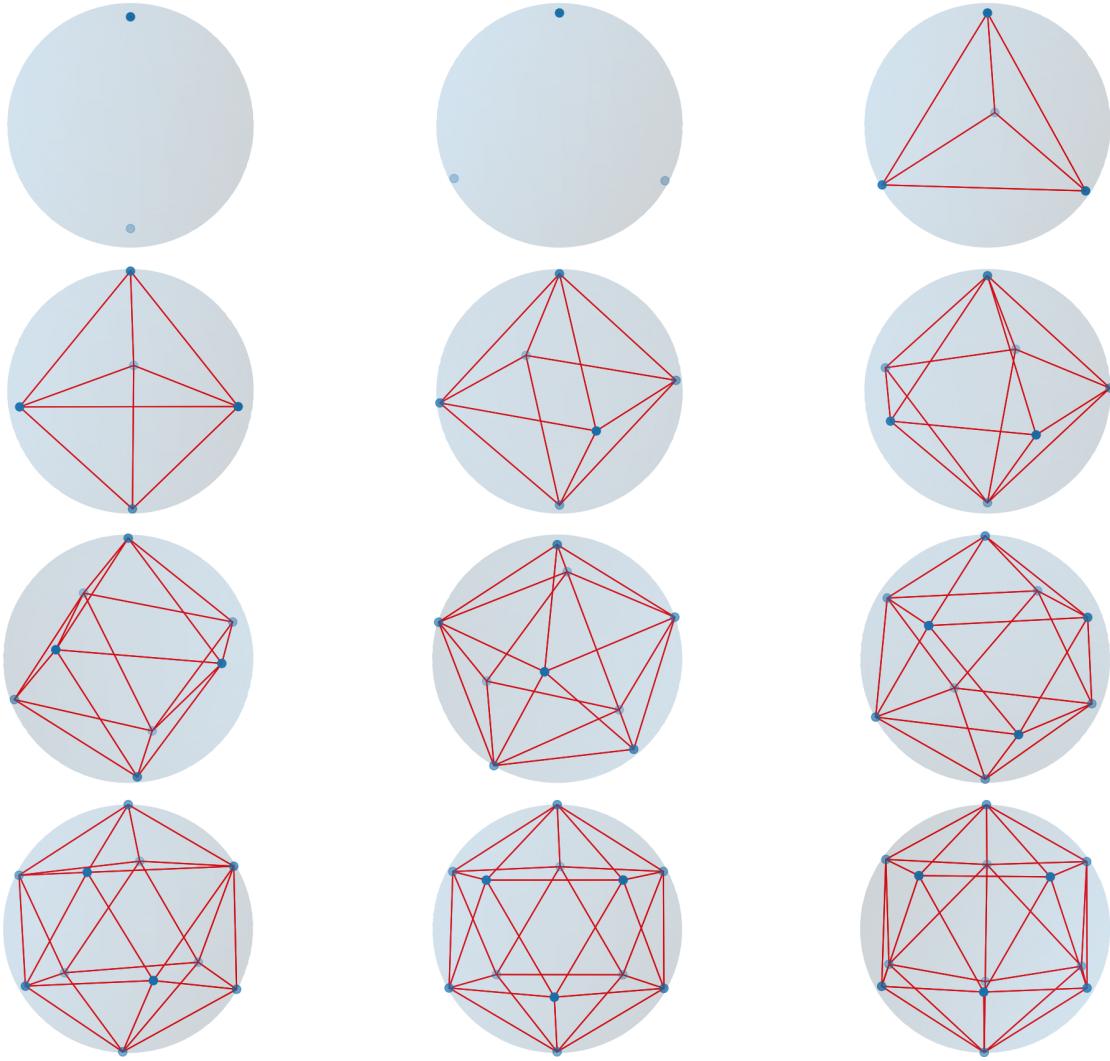
$$\mathbf{E} = \sum_{i < j}^N \frac{\cos^2(\Delta\phi)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \min. \quad (3)$$

Za primer dveh delcev, lahko že v naprej vidimo, da bo energija minimalna, ko bo kot med delcema enak $\pi/2$, saj bo takrat kosinusni člen in z njim celotna energija enaka 0. Podoben scenarij bo najverjetneje možen tudi za tri delce, štirih delcev pa več ne bom mogli razporediti po sferi na način, da bi bili vsi koti med njimi enaki 90° , zato rešitve ne moremo napovedati.

Ker sta si oba prispevka sorodna, saj večanje kota med delcema neizbežno vodi tudi do povečanja meddelčne razdalje in obratno, pričakujemo, da se bo za večje N model obnašal podobno kot osnovni.

2 Posplošen in osnoven Thomsonov problem

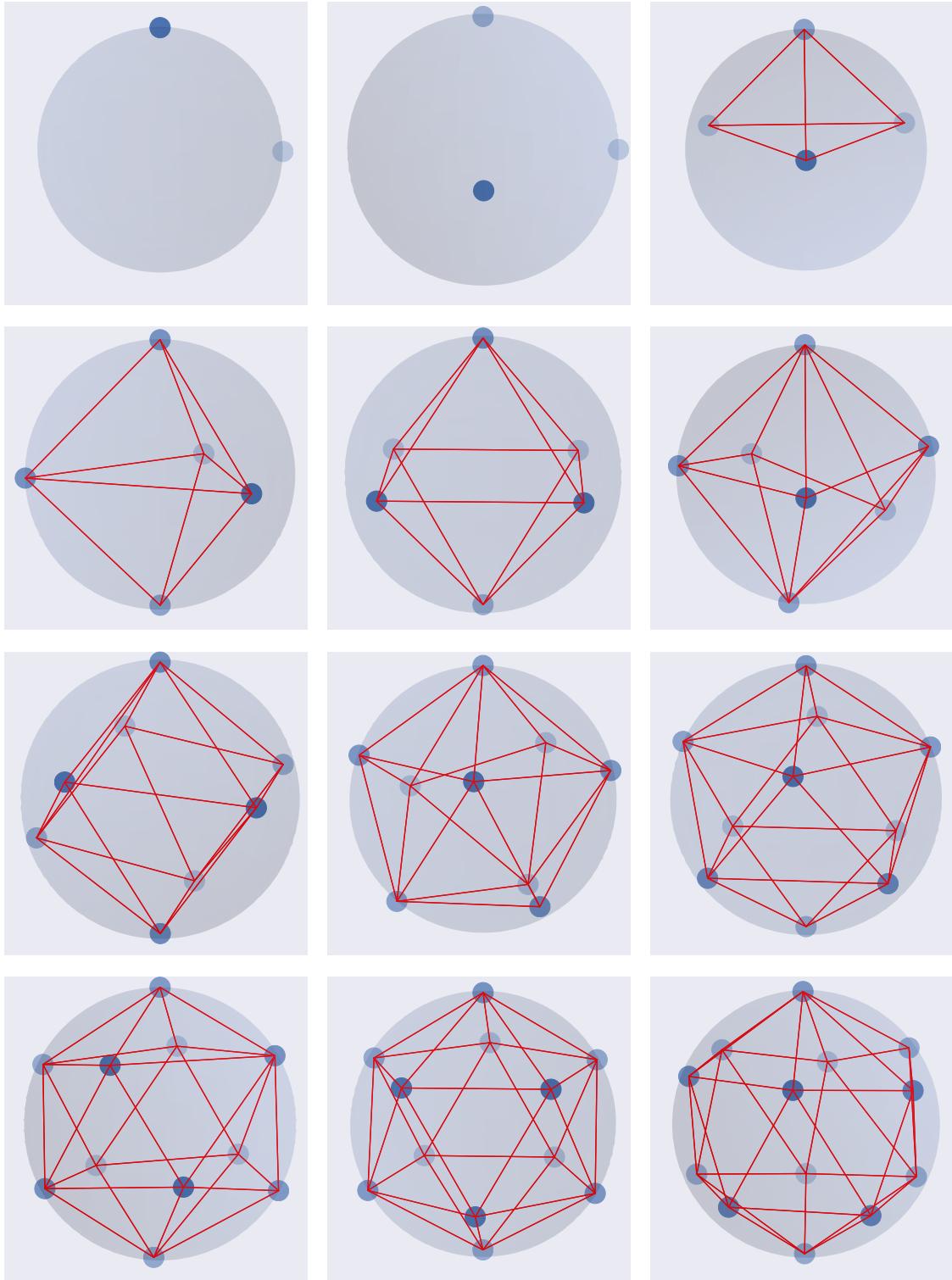
Preden si ogledamo, kakšne rezultate dobimo z novim modelom, si na kratko oglejmo, kakšne so rešitve osnovnega modela.



Slika 1: Rešitve osnovnega Thomsonovega problema z uporabo Nelder-Mead metode za 2 do 13 delcev.

Implementacija posplošenega modela je razmeroma enostavna, saj je vse, kar moramo storiti za nadgradnjo osnovnega, nekoliko dopolniti minimizacijsko funkcijo. Pri vsoti po vseh parih dodamo le še kosinusni člen, pri katerem izračunamo kot med posameznima delcema kar preko skalarnega

produkta $\langle r_i \cdot r_j \rangle = |r_i||r_j| \cos(\Delta\phi) = \cos(\Delta\phi)$, ki se prikladno poenostavi, saj vsi vektorji ležijo na sferi in so zato po velikosti enaki 1.



Slika 2: Rešitve posplošenega Thomsonovega problema z uporabo Nelder-Mead metode za 2 do 13 delcev.

Pravilno smo napovedali konfiguracijo elektronov za primer dveh in treh delcev, ko so se elektroni uredili na način, da so bili vsi meddelčni koti enaki 90° in je bila tako celotna energija sistema enaka 0.

Razporeditev pri $N = 4$ je zelo zanimiva, saj se razlikuje od osnovne rešitve na način, da je napeto telo v obeh primerih enako (tristrana piramida, centrirana okoli izhodišča), a je bilo v tem primeru energijsko ugodnejše delce postaviti nekoliko višje, čeprav so si zdaj bližje, kot so si v osnovni rešitvi.

Primeri med $N = 5$ in $N = 13$ so zelo podobni v obeh primerih, kot smo tudi napovedali v prejšnjem razdelku. Še najbolj poseben je primer s sedmimi elektroni, ki se očitno razlikuje od osnovne rešitve. Obe sta si sicer podobni - na vsakem polu po en delec, v sredini pa so razporejeni delci v obliki petkotnika. V primeru posplošenega problema se je ta petkotnik nekoliko popačil, tako da so meddelčni koti malenkost večji, kot bi bili sicer. Zagotovo so podobno popačene tudi ostale konfiguracije, le da je efekt manjši.

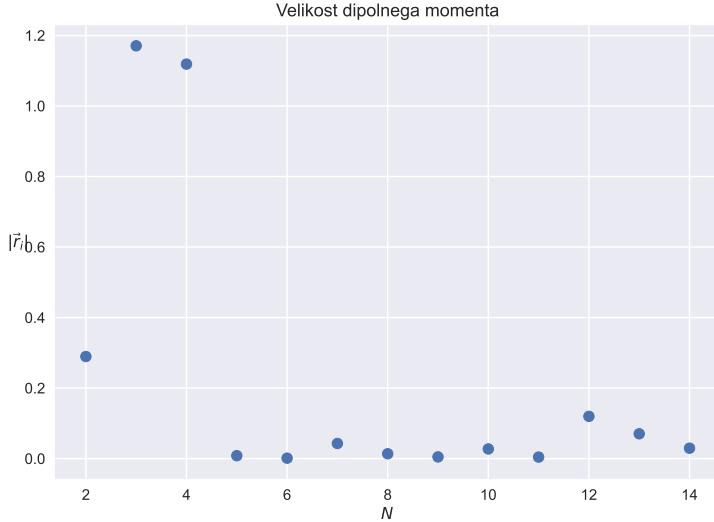
Za večjo število delcev na sferi se izkaže, da ne dobimo več smiselnih rezultatov, saj minimizacija ne uspe dobro.

2.1 Primerjava med modeloma

Zanimivo si je ogledati nekaj za ta model karakterističnih količin, da dobimo nekakšen vpogled, kako se novi model res razlikuje od prejšnjega in kako se obnaša ob povečevanju števila delcev. Raziskali bomo tri količine - povprečna parska razdalja, energija sistema normirana na število delcev v sistemu in pa velikost dipolnega momenta.

$$\begin{aligned} |\tilde{\mathbf{p}}| &= \left| \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \right|, \\ \langle d \rangle &= \frac{1}{(N^2 - N)/2} \sum_{i < j}^N |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \end{aligned} \quad (4)$$

Normirni faktor pred vsoto za povprečno parsko razdaljo predstavlja število vseh različnih parov.

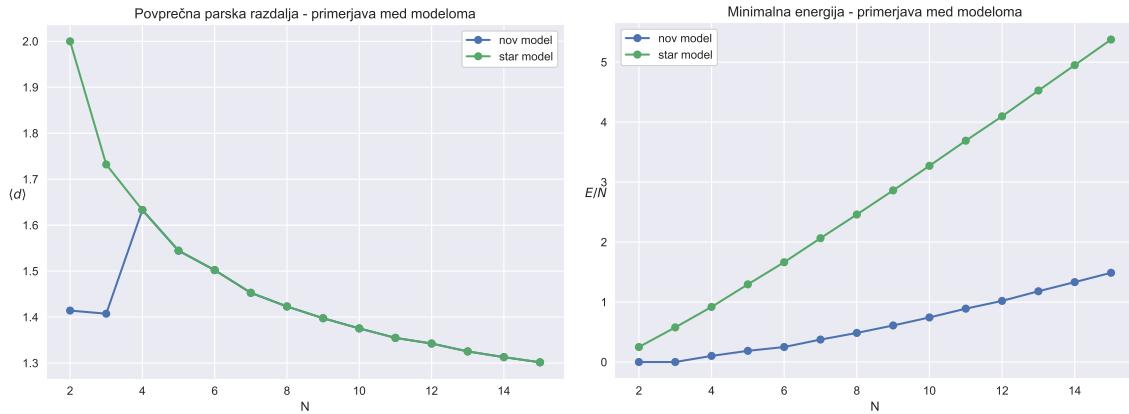


Slika 3: Dipolni moment sistema za različno število delcev (N). Vse točke na grafu predstavljajo povprečje treh neodvisnih simulacij.

Žal nimamo prave reference, da bi lahko preverili, če so dobljeni rezultati pravilni, vseeno pa

lahko premislimo ali so smiselnji. Najbolj zanimiv del predstavlja točke pri $N = 2, 3$ in 4 . Ko imamo samo dva delca dipolni moment sedaj seveda ni enak 0 (kot bi bil v osnovnem modelu), saj pozicija delcev ni nasprotna (glej sliko (2)). Ko dodamo še tretji delec je dipolni moment še večji, saj le-ta ne izniči efekta nobenega izmed preostalih delcev. Pri štirih delcih pa dipolni moment prvič upade, saj se delci sedaj postavijo v nekoliko bolj simetrično postavitev in se efekti vseh ravninskih delcev deloma izničijo.

Višje konfiguracije so po večini zelo simetrične, zaradi česar se prispevki med sabo odštejejo in dobimo majhen dipolni moment. Neničelnost je verjetno posledica numeričnih napak, oziroma ne povsem uspele minimizacije, včasih pa gre za dejansko asimetrijo v konfiguraciji, kar se izraziteje izraža pri višjih N -jih.



Slika 4: Primerjava povprečne parske razdalje med delci v odvisnosti od števila delcev v sistemu (levo) in energije normirane na število delcev (desno) med osnovnim in posplošenim modelom.

Na levem grafu je prikazana odvisnost povprečne parske razdalje med delci od števila vseh delcev v sistemu za oba modela. Pri 'starem' modelu je razdalja najprej največja, ko imamo samo dva delca in se postavita vsak na svoj pol (glej sliko (1)), tako da je razdalja med njima enaka kar dvakratniku radija, torej je enaka 2. Ko v sistem dodajmo več delcev, ta razdalja vseskozi pada, saj delce silimo, da so si vse bolj skupaj. Tudi posplošeni model se v večji meri obnaša zelo podobno, le na začetnem delu opazimo odstopanje. Prvi dve točki bi morali imeti v teoriji enako vrednost, saj so trije delci postavljeni v obliki enakostraničnega trikotnika, katerega stranica je povsem enaka edini meddelčni razdalji, ko imamo v sistemu le dva delca. Odstopanje pripisujem ne povsem uspešni numerični minimizaciji. Ponovno lahko vidimo, kako posplošeni model razmeroma hitro postane zelo podoben osnovnemu. Zanimivo pa je, da se pri štirih delcih modela že praktično ujemata, česar ne bi pričakovali, saj sta si konfiguraciji elektronov tu še bistveno različni. Morda je minimizacijska funkcija v tem primeru konvergirala k rešitvi osnovnega modela, ki je po vrednosti najverjetneje precej blizu rešitvi posplošenega modela.

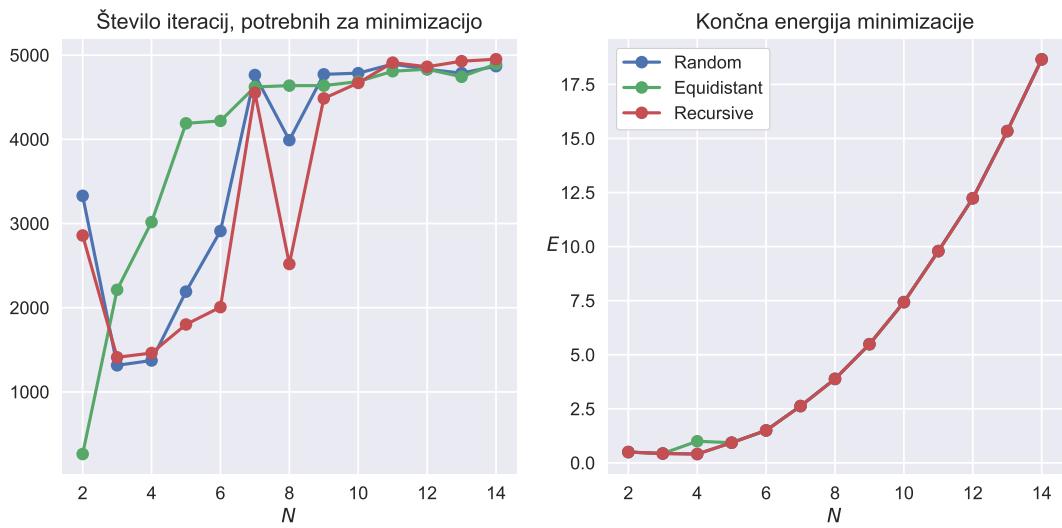
Energija sistema z dodajanjem delcev seveda vseskozi narašča, saj je prisotnih vse več parskih interakcij. S tem, ko sistem povečamo $N \rightarrow N + 1$ smo dobili kar $N - 1$ novih interakcij. Zanimivo je tako gledati energijo normirano na število delcev, ki bi ji lahko interpretirali tudi kot povprečno potencialno energijo posameznega delca. Očitno je, da se bo ta povečevala, saj so delci za večje N vse bolj blizu.

Krivulja posplošenega modela se pričakovanega začne pri 0, saj so takrat, kot že povedano, vsi koti (glede na izhodišče) med delci enaki enaki 90° in je zato energija zaradi kosinusnega člena enaka 0. Nato se vseskozi povečuje, a ne linearno, kot se zgodi pri osnovnem modelu. Dokler konfiguracija ohranja kote med delci razmeroma velike, se energija zaradi faznega člena bistveno zniža. S tem ko imamo v sistemu vse več delcev, se koti zmanjšujejo. Ob dodatku vsakega novega delca se praviloma vsi koti med delci zmanjšajo, zato efekt višanja energije očitno ni linearen, kar lahko vsaj približno potrdimo tudi z metodo ostrega očesa. Efekt je močnejši, če graf rišemo do višjih vrednosti N .

3 Vpliv začetnih pogojev

Med simulacijami je postalno hitro jasno, da je postopek minimizacije močno odvisen od izbranega začetnega stanja. Pogosto lahko to vodi v povsem napačne rešitve (predvsem pri metodah 'Powell', 'CG', 'SLSGP' in drugih), pri metodi Nelder-Mead, ki razmeroma dobro najde globalni minimum tudi za precej zgrešena začetna stanja, pa se to najbolj odraža v časovni zahtevnosti algoritma.

Konstruirali smo tri različne generatorje začetnega stanja modela. Najpreprostejši je bil skoraj povsem stohastične narave, tako da smo zgolj prvi delec postavili na pol, lokacije ostalih delcev pa smo naključno žrebal po sferi. Ker je veliko rešitev osno simetričnih se zdi dobro začeti s stanjem, ki je že blizu tej postavitvi, zato smo naslednji generator osnovali na način, da smo dva delca postavili na oba pola, ostale pa glede na kot ekvidistančno razporedili po ekvatorialni ravnini. Kot tretjo metodo določevanje začetne konfiguracije delcev pa smo izbrali rekurzivno, pri kateri vzamemo rešitev sistema za $N - 1$ delcev (ki smo jo izračunali predhodno) in naključno nekam postavimo novi delec. Ta metoda se zdi smiselna, saj so si sosledne rešitve pogosto precej podobne. Pri rekurzivnem generatorju prvo rešitev pridobimo z 'random' generatorjem.

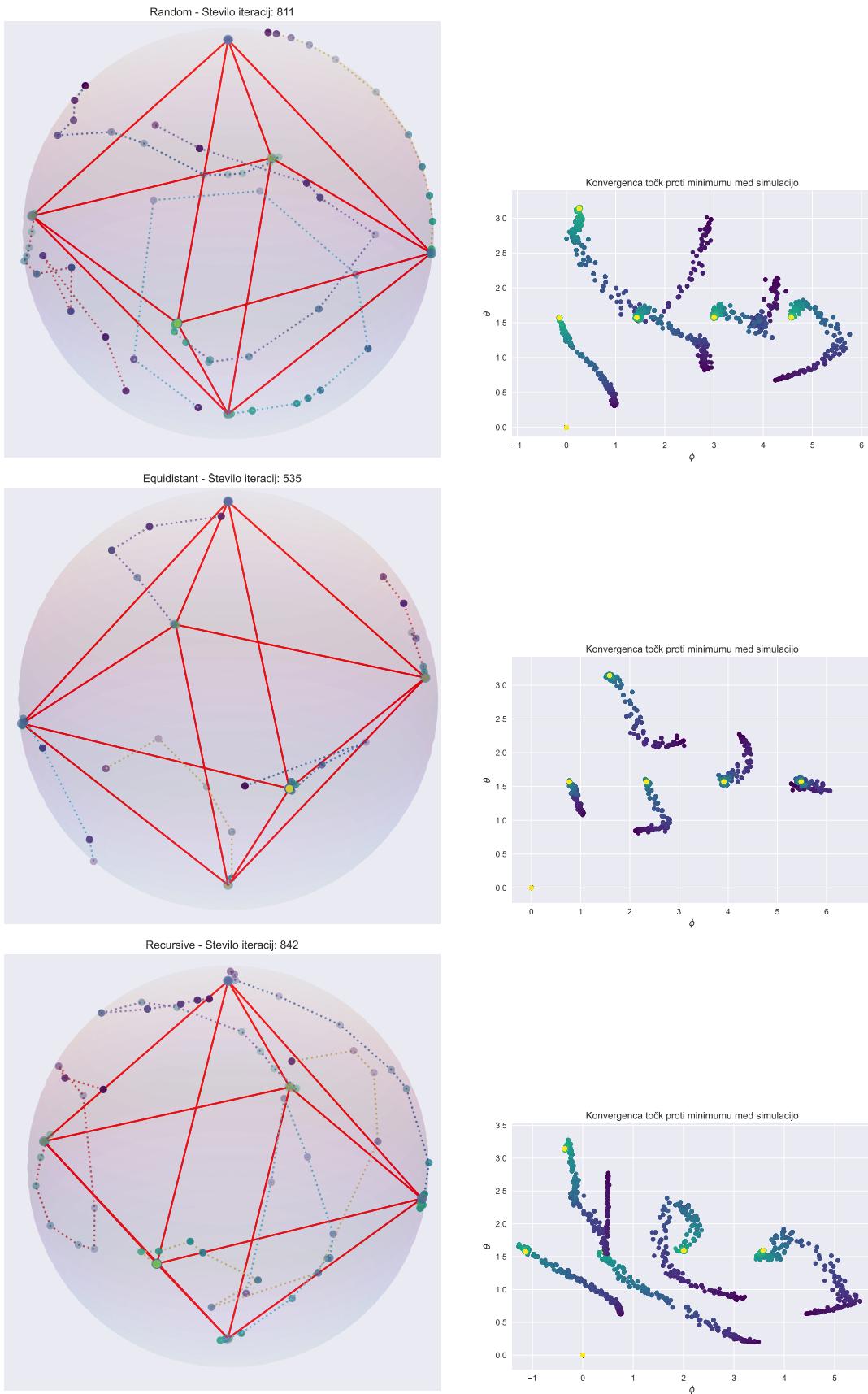


Slika 5: Vpliv različnih metod žrebanja začetnih pogojev na časovno potratnost algoritma (levo) in minimizirane energije simulacij (desno). Vsaka točka predstavlja povprečno število iteracij pri petih neodvisnih simulacijah.

Ob nekaj ponovitvah risanja grafa hitro ugotovimo, da je takšno vzorčenje števila korakov potrebnih za minimizacijo močno stohastičen proces, zaradi česa je težko priti do trdnih zaključkov. Za vtip je nekaj verzij tega grafa prikazanih v dodatku. Kljub vsemu se zdi, da je za majhne vrednosti N metoda žrebanja ekvidistančnih točk manj uspešna in počasneje konvergira h končni rešitvi. V eni ponovitvi simulacije (13) se je izkazalo, da so končne energije najdene s tem generatorjem nekoliko nižje od teh, ki so bile najdene z drugima dvema generatorjema. Za velike N je videti, da dajo vsi generatorji podobne rezultate. Za iskanje minimuma dveh delcev je bil vedno najbolj uspešen generator ekvidistančnega žrebanja, ki je v tem primeru pravzaprav zgolj postavil oba delca na pola.

Zanimivo je, da se pri $N = 4$ ob uporabi ekvidistančnega generatorja pogosto zmotimo in konvergiramo v napačen minimum.

Kot zanimivost si lahko pogledamo nekaj primerov, kako se premikajo delci med iskanjem minimuma ob uporabi različnih generatorjev začetnega stanja. Pogledali si bomo primer, ko je $N = 6$.

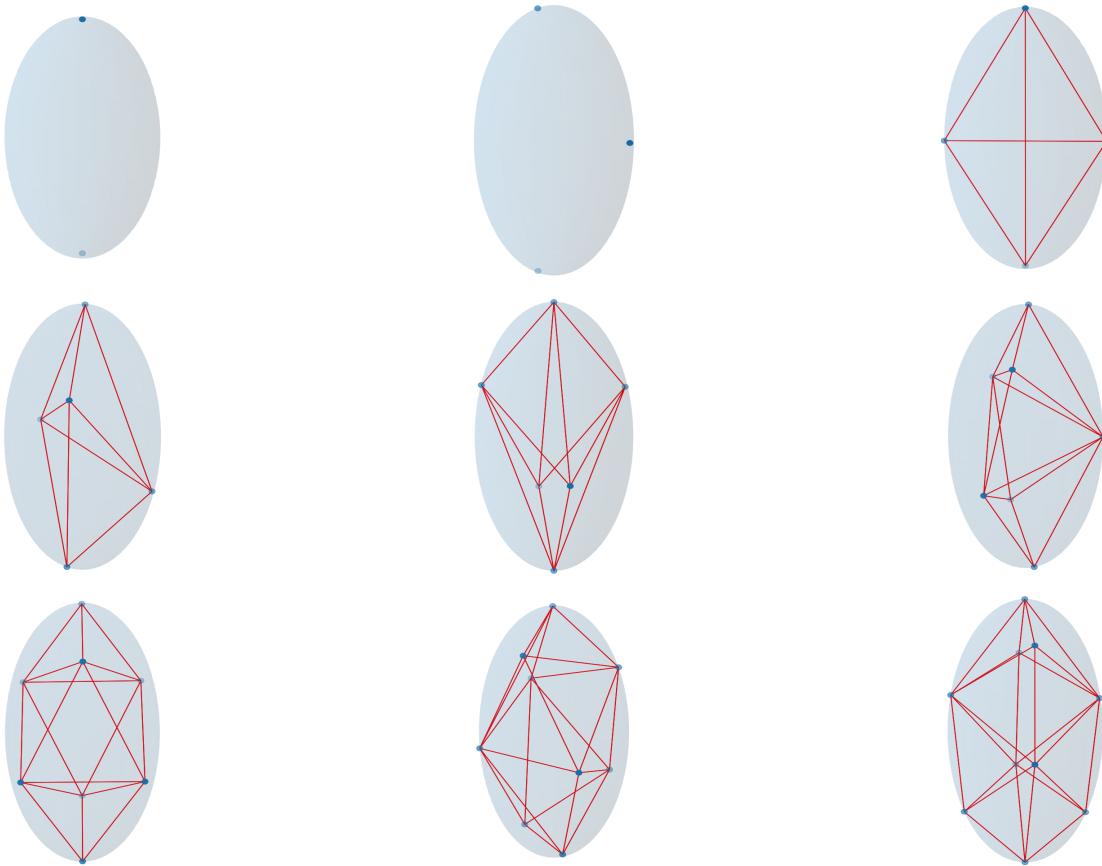


Slika 6: Simulacije minimiziranja energija Thomsonovega problema pri $N = 6$ z različnimi generatorji začetnega stanja. Lokacije istega delca so med seboj povezane s prekinjeno črto

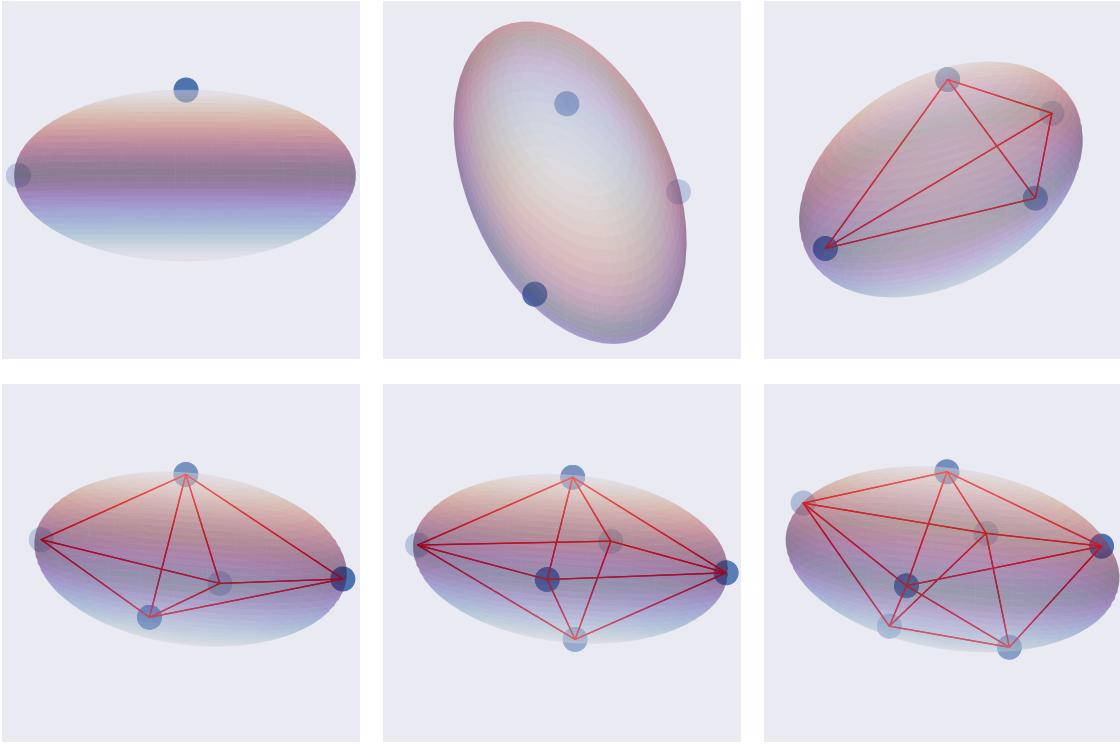
Na levi so prikazane tri simulacije iskanja minimuma z vmesnimi stanji, kjer smo v graf zaradi preglednosti vrisali le vsako 50-to točko. Na desni so prikazani vsi koraki v faznem diagramu. Pravtako je zelo prikladno z barvo zakodirana številka koraka - prvo stanje je vedno prikazano z vijolični, zadnje pa z rumeno. Iz teh podatkov lahko zelo dobro vidimo, kako se večji oziroma pomembnejši (recimo sprememba smeri spremenjanja lokacije) koraki včasih zgodijo hkrati (najlepše vidno na grafu z rekurzivnim generatorjem), ko ravno na meji prehoda barve iz vijolične v modro bistveno spremeni trajektorijo kar nekaj delcev. Na istem grafu (rekurzivnem) lahko opazimo tudi zanimiv efekt, ko nek delec že pristane na točki, ki nastopa v končni konfiguraciji, pa se potem iz nje prestavi, vanjo pa skonvergira drug delec, ki se ji je bližal od spodaj. Zares je neverjetno, kako je modelu 'jasno', da bo prej prišel do končne rešitve, če en delec, ki je že na optimalnem mestu, prestavi na drugo mesto, saj je to hitreje, kot da bi 'čakal', da do tega mesta pride drug delec. Zanimiv efekt opazimo tudi na grafu 'random' generatorja, kjer se delec, ki štarta na sredini in se pomika levo gor praktično prečka položaj delca, ki je že na optimalnem mestu, s čimer se je energija takrat zagotovo bistveno povečala, a to modela ni zmotilo, saj je kmalu za tem našel globalni minimum.

4 Reševanje na površini elipsoida

Podobno, kot smo storili v nalogi 103, bomo tudi posplošeni problem reševali na površini elipsoida. Prav dobrega argumenta, zakaj izberemo prav elipsoid ni, razen tega, da je implementacija enostavna, saj je parametrizacija elipsoida zelo sorodna sferični. Pozorni moramo biti le na postopek računanja kota med delci, saj zdaj radij vektorji do posameznega delca niso več nujno enaki 1. Ker imamo pri vrstah elipsoidov veliko različnih možnosti glede na dolžine polosi in ne bomo mogli vseh analizirati, se bomo osredotočili zgolj na primer, ko so polosi v razmerju $2 : 1 : 1$. Za primerjavo si najprej poglejmo rešitve osnovnega problema.



Slika 7: Rešitve osnovnega Thomsonovega problema na površini elipsoida (razmerja dolžin polosi - $2 : 1 : 1$) z uporabo Nelder-Mead metode za 2 do 10 delcev.



Slika 8: Rešitve posplošenega Thomsonovega problema na elipsoidu (razmerja dolžin polosi - 2:1:1) z uporabo Nelder-Mead metode za 2 do 7 delcev.

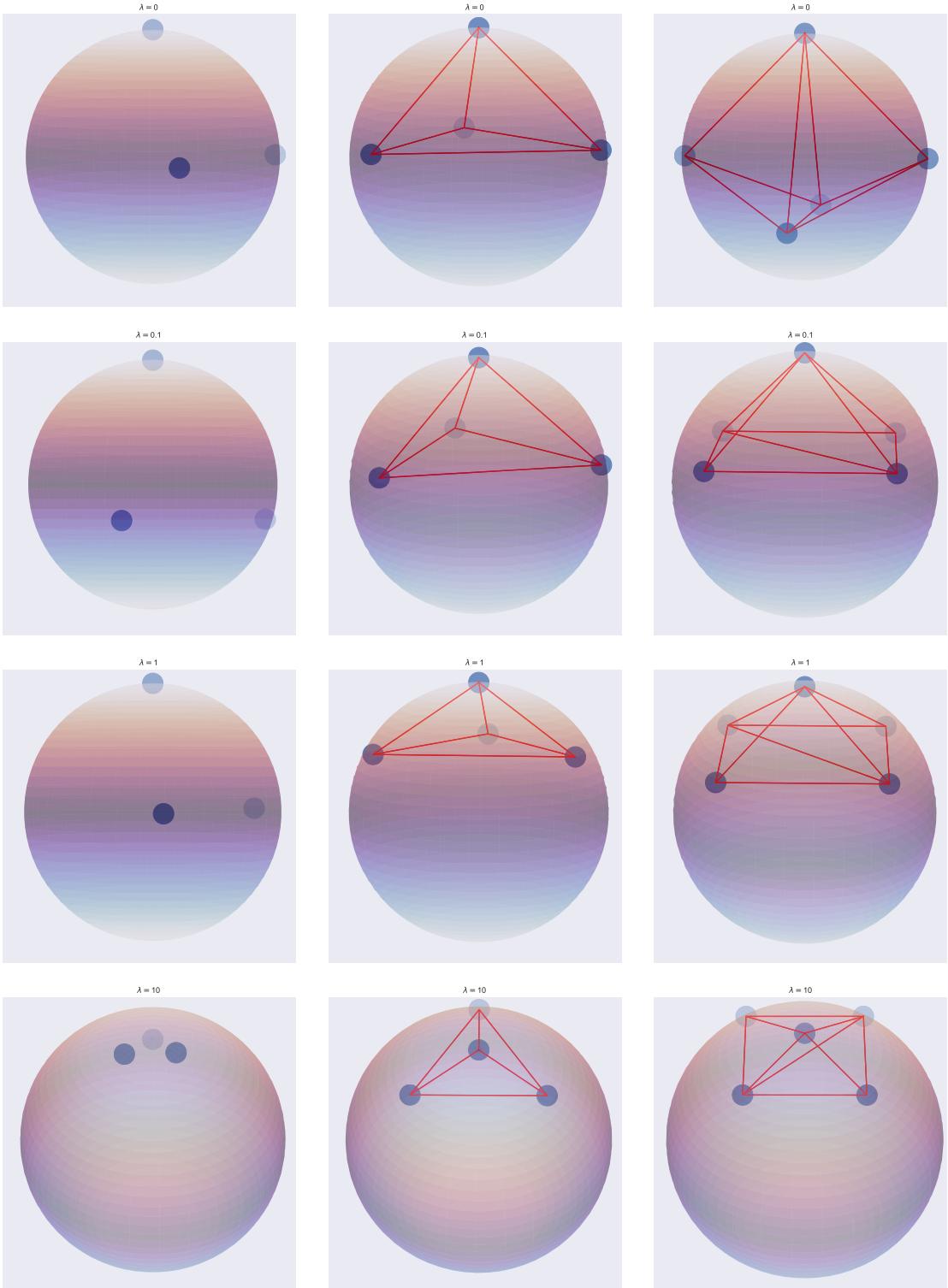
Simulacija na površini elipsoida se izkaže za zelo zanimivo, saj so rešitve bistveno drugačne od teh, ki jih dobimo z osnovnim modelom. Podobno kot pri sferičnih primerih so konfiguracije za nizke N -je povsem podrejene želji, da so meddelčni koti pravi. Razporeditve za $N = 5, 6, 7$ so zelo lepo simetrične in v tem oziru sorodne sferičnim.

5 Prisotnost zunanjega električnega polja

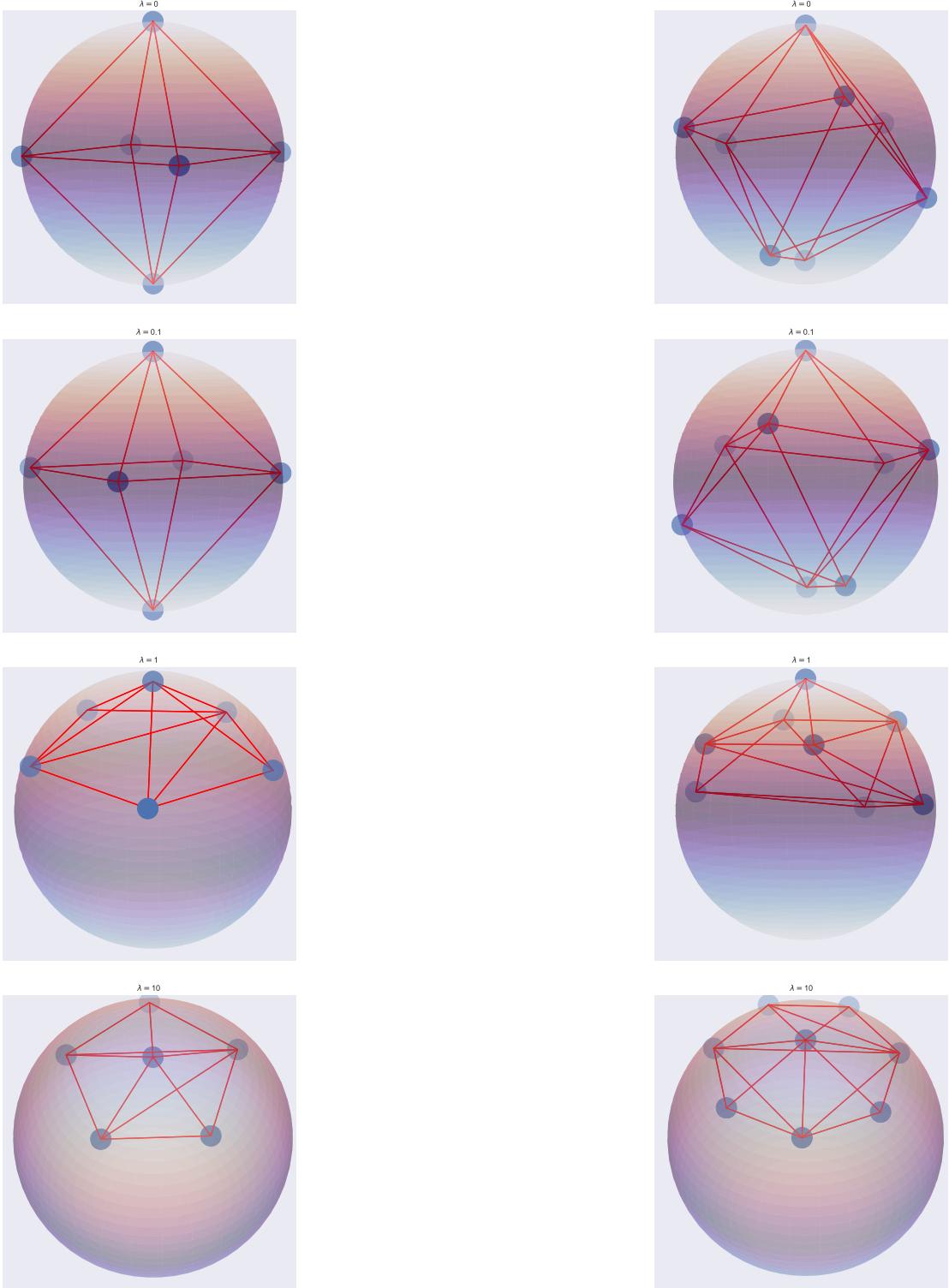
Sistem smo do sedaj vse skozi obravnavali kot izoliran, torej ni bilo nobenih vplivov zunanjega polja. Zanimivo je raziskati, kako se rešitve spremenijo, če postavimo sfero v območje homogenega zunanjega polja z jakostjo λ . Ker seveda velja sferična simetrija bomo vse primere smeri zunanjega polja zaobjeli s primerom, ko kaže polje direktno navzgor. Energija sistema se sedaj spremeni v

$$\mathbf{E} = \sum_{i < j}^N \frac{e_i e_j \cos^2(\phi_i - \phi_j)}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \lambda \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i). \quad (5)$$

Dodatni člen sedaj očitno 'kaznuje' delce, ki se nahajajo na spodnji polobli, saj bo takrat predznak kosinusa negativen in bo zato celoten člen pozitiven prispevec k energiji. Primer je sedaj posebno zanimiv, saj si oba prispevka k energiji nasprotujeta - enega bomo minimizirali, ko bomo vse delce zbrali na polu, drugega pa, ko bomo delce čim bolj razmaknili med sabo (oziroma povečali kot med njimi). Tako rešitve vseskozi predstavljajo nekakšno ravnovesje obeh efektov.



Slika 9: Rešitve posplošenega Thomsonovega problema ob prisotnosti zunanjega električnega polja. V vsaki vrsti so prikazani primeri za $N = 3, 4, 5$, po stolpcu navzdol pa povečujemo jakost polja.



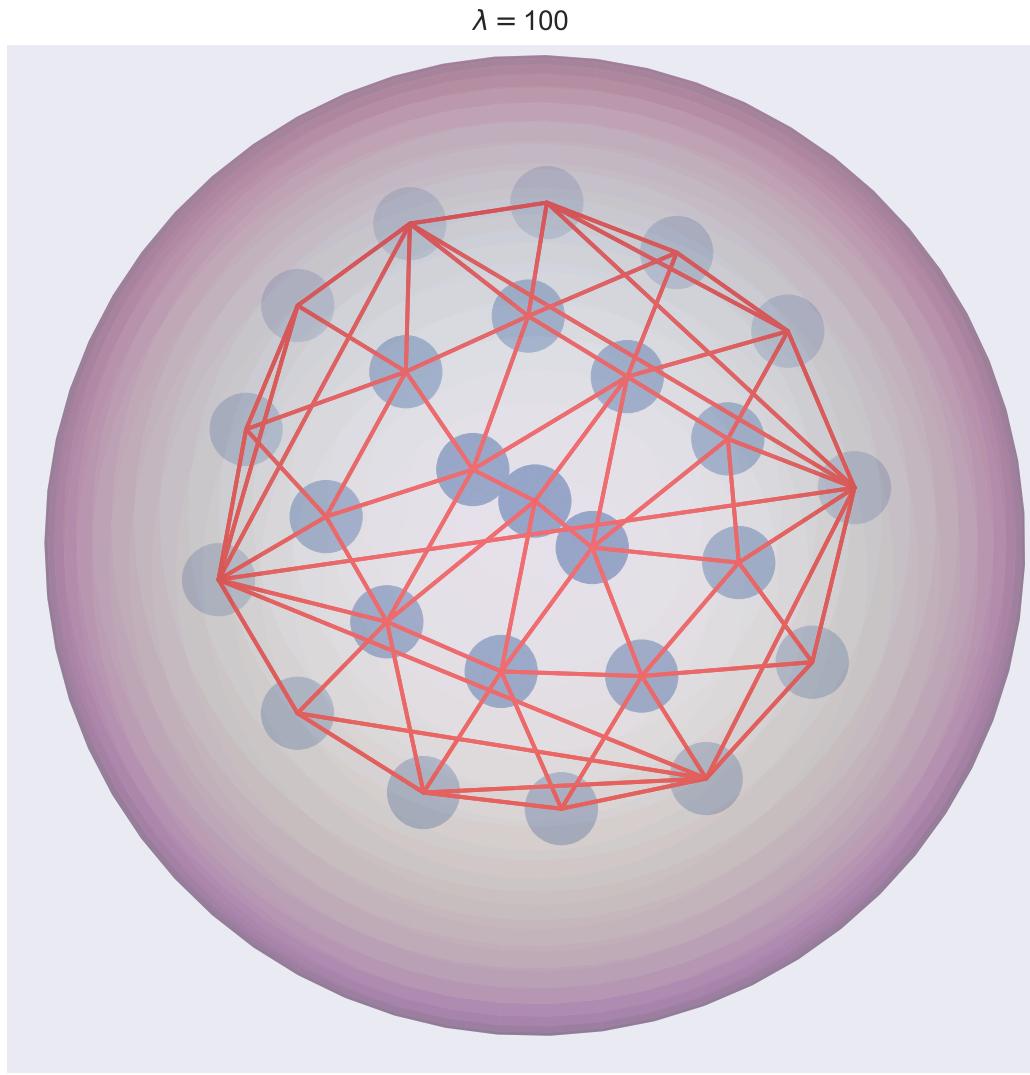
Slika 10: Rešitve posplošenega Thomsonovega problema ob prisotnosti zunanjega električnega polja. V vsaki vrsti so prikazani primeri za $N = 6$ in 8 , po stolpcu navzdol pa povečujemo jakost polja.

Zelo jasno se vidi efekt, kako se s povečevanjem jakosti delci premikajo vse višje po sferi. Kon-

figuracije gredo čez nekaj tipičnih korakov:

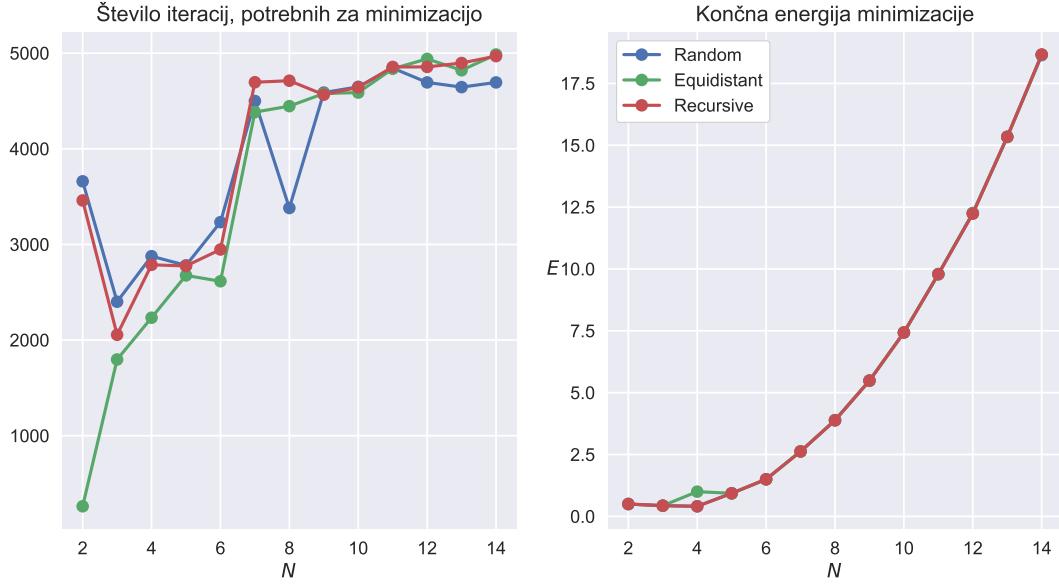
1. Polje ne vpliva bistveno na konfiguracijo.
2. Vsi delci, razen tistega, ki se nahaja na polu, se zberejo na isti ravnini.
3. Ob močnem polju preidemo v praktično povsem planarno konfiguracijo, v kateri se delci okoli pola razporedijo v obliko pravilnega večkotnika, s številom oglišč $N - 1$. Pri velikih jakostih tako rešimo pravzaprav Thomasov problem na krogu, katerega rešitve so seveda pravilni večkotniki.

Zanimivo je, da lahko s takšnim modelom dobimo vsaj na oko lepe rešitve za večje število delcev, česar z drugimi modeli nismo uspeli doseči, saj so bile rešitve vidno precej napačne.

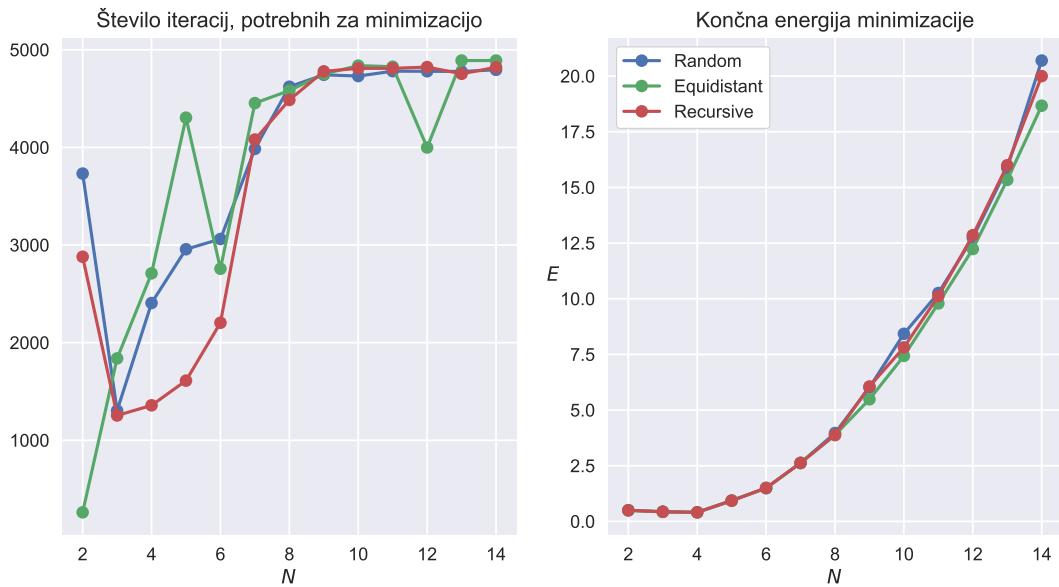


Slika 11: Rešitve posplošenega Thomsonovega problema ob prisotnosti zunanjega električnega polja jakosti $\lambda = 100$ za 25 delcev.

6 Dodatek



Slika 12: Vpliv različnih metod žrebanja začetnih pogojev na časovno potratnost algoritma (levo) in minimizirane energije simulacij (desno). Vsaka točka predstavlja povprečno število iteracij pri petih neodvisnih simulacijah. Druga verzija enakega grafa.



Slika 13: Vpliv različnih metod žrebanja začetnih pogojev na časovno potratnost algoritma (levo) in minimizirane energije simulacij (desno). Vsaka točka predstavlja povprečno število iteracij pri petih neodvisnih simulacijah. Tretja verzija enakega grafa.