

Numerična minimizacija

Teodor Jovanovski

28252048

20. oktober 2025

Kazalo

1	Uvod	3
2	Thomsonov problem in razširitev	3
2.1	Opis problema in metoda	3
2.2	Analiza rezultatov	3
2.3	Dodatni problem: Lennard-Jonesov potencial	5
3	Problem optimalne vožnje skozi semafor	5
3.1	Metoda in validacija	5
3.2	Analiza vpliva robnih pogojev	6
4	Zaključek	8

1 Uvod

V tej domači nalogi sem se ukvarjal z numeričnimi minimizacijskimi metodami pri reševanju fizikalnih problemov. Namesto iskanja analitičnih rešitev, ki so pogosto omejene na poenostavljene primere, sem uporabil računalniške algoritme za iskanje stanj z minimalno energijo in optimalnih poti. Tak pristop v splošnem omogoča reševanje bolj kompleksnih in realističnih problemov.

Obravnaval sem dva glavna problema:

1. **Thomsonov problem:** Iskanje optimalne razporeditve nabojev na sferi, ki minimizira njihovo elektrostatično energijo. Kasneje sem problem tudi razširil z Lennard-Jonesovim potencialom.
2. **Problem optimalne vožnje skozi semafor:** Iskanje optimalnega profila hitrosti z metodo časovne diskretizacije in uporabo Lagrangeovih multiplikatorjev za upoštevanje omejitev.

Za numerično minimizacijo sem v Pythonu uporabil funkcije iz knjižnice `SciPy`.

2 Thomsonov problem in razširitev

2.1 Opis problema in metoda

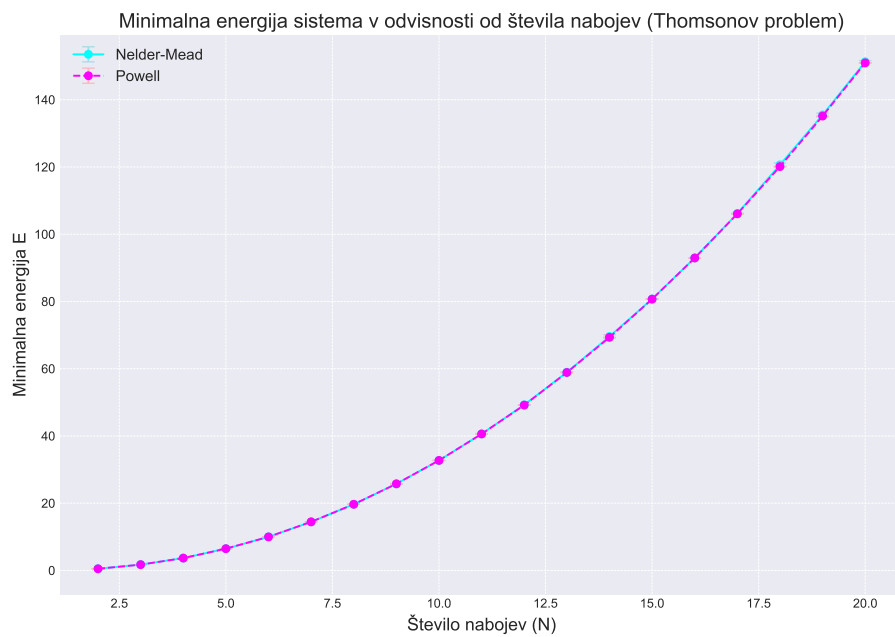
Thomsonov problem sprašuje, kako se bo N enakih točkastih nabojev razporedilo po površini prevodne sfere, da bo skupna elektrostatična potencialna energija sistema minimalna [1]. Energija sistema je v moji rešitvi preprosto vsota prispevkov vsakega para nabojev, ki je obratno sorazmerna z razdaljo med njima:

$$E = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (1)$$

kjer je r_{ij} razdalja med nabojema i in j . Problem sem reševal tako, da sem minimiziral to energijsko funkcijo, pri čemer so bile spremenljivke sferične koordinate (θ_i, ϕ_i) vsakega naboja. Primerjal sem učinkovitost dveh minimizacijskih metod: Nelder-Mead in Powell.

2.2 Analiza rezultatov

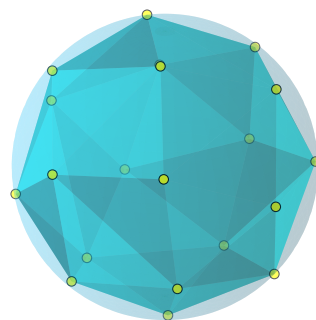
Za vsako število nabojev N (od 2 do 20) sem simulacijo ponovil petkrat, da bi dobil bolj zanesljive rezultate za povprečno minimalno energijo. Na sliki 1 je prikazana odvisnost minimalne energije od števila nabojev.



Slika 1: Odvisnost povprečne minimalne energije od števila nabojev N za Thomsonov problem. Rezultati za metodi Nelder-Mead in Powell so praktično identični.

Obe metodi, Nelder-Mead in Powell, sta našli praktično enake minimalne energije za vse vrednosti N . To nam pove, da sta za ta problem obe metodi enako učinkoviti in zanesljivi pri iskanju globalnega minimuma. Na sliki 2 je prikazana tipična končna razporeditev za $N = 20$ delcev, ki tvori simetrično poliedrsko strukturo. Čeprav so takšni 3D prikazi vizualno zanimivi, je njihova glavna vloga predvsem intuitivna potrditev, da je algoritem konvergiral v "pravoštanje".

Thomsonova razporeditev za $N=20$



Slika 2: Primer končne razporeditve za $N=20$ nabojev, ki minimizira elektrostatično energijo.

2.3 Dodatni problem: Lennard-Jonesov potencial

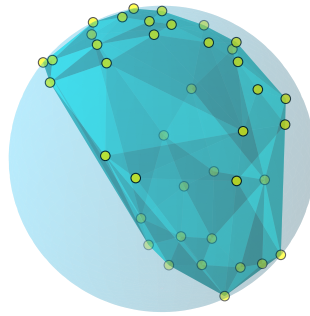
Kot razširitev naloge sem si pogledal, kako se razporeditev spremeni, če namesto elektrostatičnega odboja med delci deluje Lennard-Jonesov potencial [2]. Ta potencial vključuje tako odbojno komponento na kratkih razdaljah kot privlačno komponento na daljših razdaljah:

$$E_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

kjer je σ karakteristična razdalja, pri kateri je potencial enak nič.

Rezultat minimizacije s tem potencialom je prikazan na sliki 3. V nasprotju s Thomsonovim problemom, kjer se delci poskušajo čim bolj razpršiti, privlačna komponenta Lennard-Jonesovega potenciala povzroči, da se delci združujejo v izrazite gruče.

Razporeditev z Lennard-Jonesovim potencialom (N=40, $\sigma=0.6$)



Slika 3: Razporeditev 40 delcev na sferi, ki medsebojno interagirajo z Lennard-Jonesovim potencialom. Opazimo izrazito združevanje v gruče.

3 Problem optimalne vožnje skozi semafor

3.1 Metoda in validacija

Problem optimalne vožnje, ki smo se ga v prvi nalogi lotili analitično, sedaj poskušamo rešiti z numerično minimizacijo. Časovni interval delimo na diskretne korake in iščemo optimalen seznam hitrosti.

Da bi bil model bolj realističen, sem osnovnemu cilju (minimizaciji integrala kvadrata pospeška) dodal dve pomembni omejitvi: zgornjo mejo hitrosti ($y \leq y_{lim}$) in zahtevo po nenegativni hitrosti ($y \geq 0$). Zgornjo mejo sem implementiral z metodo kazni (*penalty method*), kjer sem Lagrangianu dodal eksponentni člen, ki močno naraste, če je omejitev kršena:

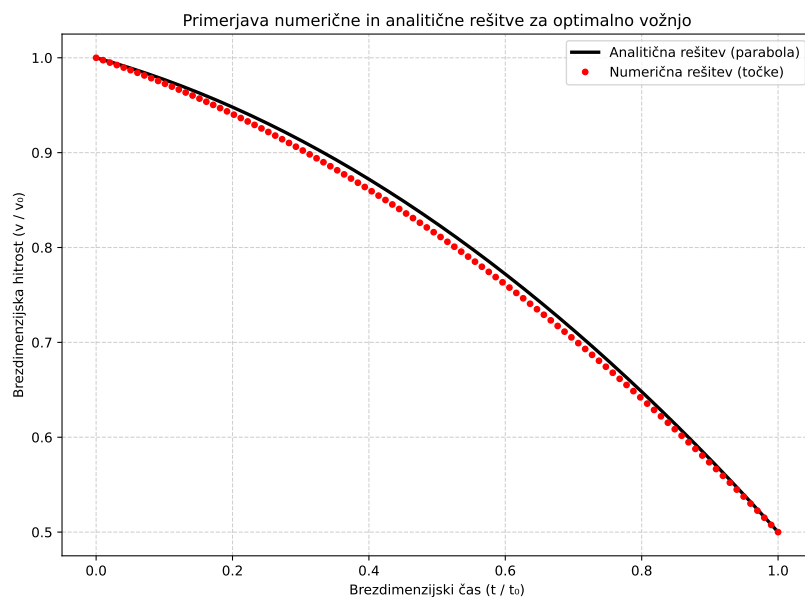
$$P(y) = \exp(\beta \cdot \max(0, y - y_{lim})) - 1 \quad (3)$$

Parameter β določa “ostrino” kazni: višja vrednost pomeni strožjo in bolj nepopustljivo omejitev. Celoten Lagrangian, ki sem ga minimiziral, je torej vsota treh komponent:

$$\mathcal{L} = \underbrace{\int \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 dx}_{\text{Integral pospeška}} - \lambda \cdot \underbrace{\left(\int y(x) dx\right)}_{\text{Prevožena pot}} + \underbrace{\int P(y) dx}_{\text{Kaznovalni člen}} \quad (4)$$

Lagrangeov multiplikator λ sem določil z zunanjo zanko, ki je zagotovila, da je bila končna prevožena pot pravilna. Zahtevo po nenegativnosti ($y \geq 0$) pa sem eksplicitno vključil z uporabo metode L-BFGS-B, ki omogoča neposredno definiranje mej za optimizacijske spremenljivke.

Za validacijo metode sem (brez vključenih omejitev) primerjal numerično rešitev z znano analitično rešitvijo (parabolo), kar je prikazano na sliki 4.



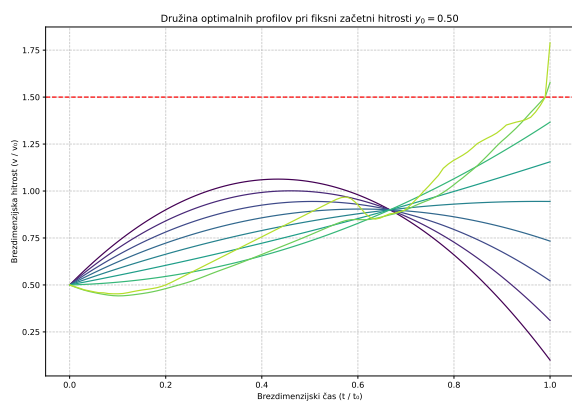
Slika 4: Primerjava numerične rešitve (rdeče točke) z analitično rešitvijo (črna krivulja). Ujemanje je zelo dobro.

Numerična rešitev se odlično ujema z analitično. Opaziti je mogoče majhno, a sistematično odstopanje, kjer so numerične vrednosti nekoliko nižje. To odstopanje je najverjetneje posledica aproksimacije integrala za prevoženo pot s preprosto vsoto $\sum y_i \Delta x$ namesto s kakšno bolj natančno metodo, vendar je razlika zanemarljiva in potrjuje validnost numeričnega pristopa.

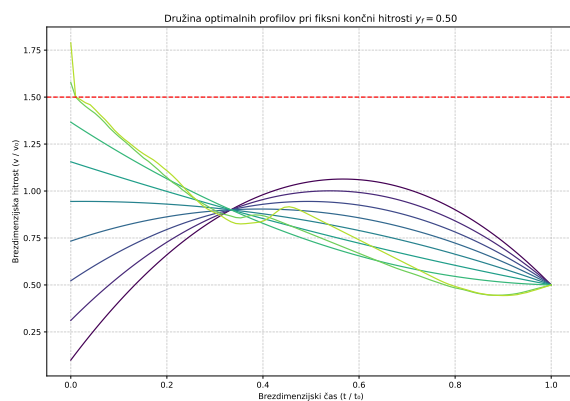
3.2 Analiza vpliva robnih pogojev

Za konec sem si pogledal, kako se optimalni profili spreminjajo ob različnih začetnih in končnih hitrostih. Na sliki 5 je prikazanih šest družin rešitev.

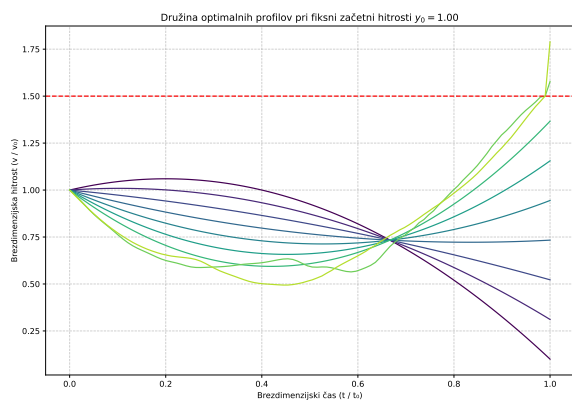
Pri analizi teh grafov opazim pomembno lastnost modela. Pri manj skrajnih robnih pogojih so rešitve gladke parabolične krivulje. Ko pa postanejo robni pogoji bolj zahtevni, se oblika rešitev spremeni. Pri vrednostih $y_f \approx 1.58$ in $y_f \approx 1.79$ rešitve niso več gladke, ampak kažejo linearne odseke in ostre pregibe. To je verjetno posledica konflikta med minimizacijo integrala



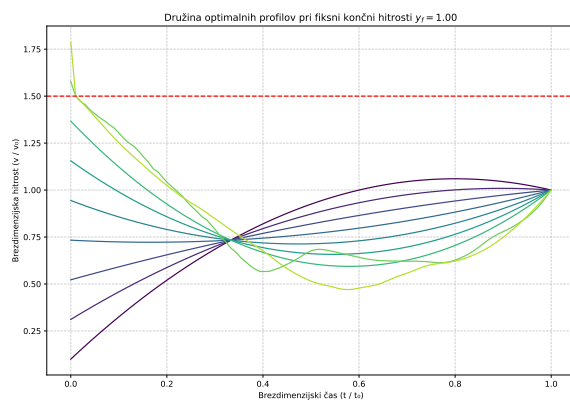
(a) Fiksna $y_0 = 0.5$



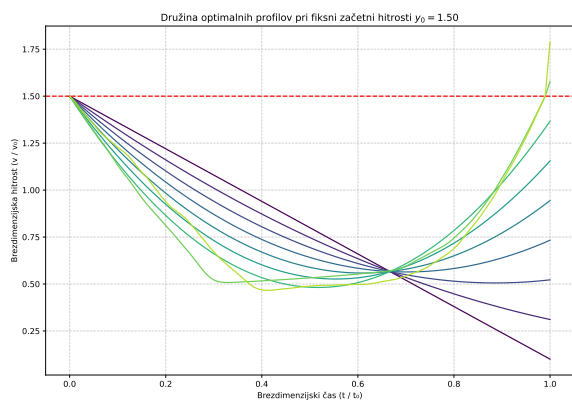
(b) Fiksna $y_f = 0.5$



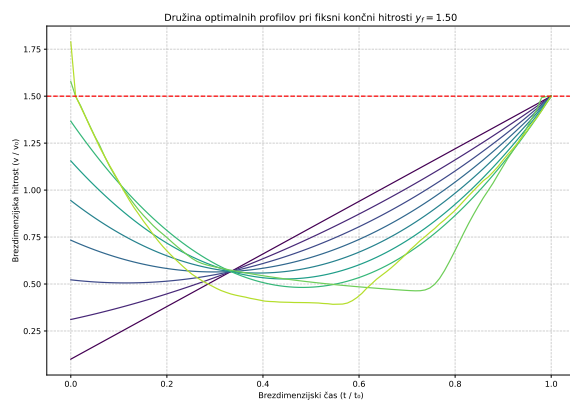
(c) Fiksna $y_0 = 1.0$



(d) Fiksna $y_f = 1.0$



(e) Fiksna $y_0 = 1.5$



(f) Fiksna $y_f = 1.5$

Slika 5: Družine rešitev pri različnih robnih pogojih. Levi stolpec prikazuje primere s fiksno začetno hitrostjo y_0 in variabilno končno hitrostjo y_f . Desni stolpec prikazuje obratno. Barve krivulj ustrezajo vrednosti variabilnega parametra (od temno modre za najnižjo do rumene za najvišjo vrednost). Rdeča črtkana črta označuje omejitev hitrosti $y_{lim} = 1.5$.

pospeška, ki favorizira gladke parabole, in kaznijo za prekoračitev hitrosti $y_{lim} = 1.5$. Linearne, vodoravne regije predstavljajo kompromis, kjer optimizator vozi s konstantno hitrostjo natanko ob omejitvi, da zadosti pogoju o prevoženi poti.

Opaziti je tudi, da nekatere rešitve rahlo presežejo omejitev hitrosti. Ker je kaznovalna funkcija eksponentna in ne neskončna, je to "mehka" omejitev. Optimizator lahko izračuna, da je čeneje "rahlo preseči hitrost in plačati majhno kazen, kot pa narediti izjemno oster ovinek (in s tem močno povečati integral pospeška), da bi ostal točno pod mejo.

Za nekatere robne pogoje, kot je $y_f = 2.0$, algoritem ni našel rešitve. To je fizikalno smiselni rezultat. Pri tako visokih končnih hitrostih je nemogoče prevoziti tako kratko pot, kot je zahtevana ($z_{target} = 0.8$), tudi pri najbolj ekstremnem možnem zaviranju, kjer bi hitrost vmes padla na 0. Ker nobena možna pot ne zadosti pogoju o prevoženi razdalji, zunanja zanka za iskanje Lagrangeovega multiplikatorja ne uspe najti rešitve. Model je torej pravilno identificiral meje fizikalno možnega.

4 Zaključek

Skozi to nalogo sem uporabil metode numerične minimizacije na dva različna fizikalna problema. Pri Thomsonovem problemu sem izvedel, da različni algoritmi vodijo do enakih rešitev, in z razširitvijo na Lennard-Jonesov potencial sem pokazal, kako majhna sprememba interakcije spremeni obnašanje sistema. Pri problemu optimalne vožnje sem uspešno ponovil analitično rešitev z diskretizacijo in pokazal, kako lahko z analizo robnih pogojev odkrijem fizikalne meje modela.

Literatura

- [1] Wikipedia. *Thomson problem*. Dostopno na: https://en.wikipedia.org/wiki/Thomson_problem (Pridobljeno 20. 10. 2025).
- [2] Wikipedia. *Lennard-Jones potential*. Dostopno na: https://en.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones_potential (Pridobljeno 20. 10. 2025).