

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

MODELSKA ANALIZA I
3. naloga: Numerična minimizacija

Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, oktober 2022

1 Uvod

Pri numerični minimizaciji ali maksimizaciji iščemo minimum ali maksimum funkcije ene ali več spremenljivk

$$f(\mathbf{r}) = \text{ekstrem}, \quad (1)$$

kjer je \mathbf{r} vektor iskanih spremenljivk oz. parametrov. Iskanje rešitev za več kot 3 parametre (dimenzije) postane nepredstavljivo. Algoritmi za minimizacijo potrebujejo začetne vrednosti parametrov, ki sem jih v nalogi izbral naključno. Minimizacijo sem ponovil večkrat, da je algoritem zagotovo našel globalni minimum.

2 Thomsonov problem

Pri Thomsonovem problemu postavimo N enakih nabojev na (enotsko) prevodno kroglo. Zanima nas kako se razporedijo po površini krogle. Njihova končna konfiguracija bo taka, da bo elektrostatska energija minimalna. Iščem torej

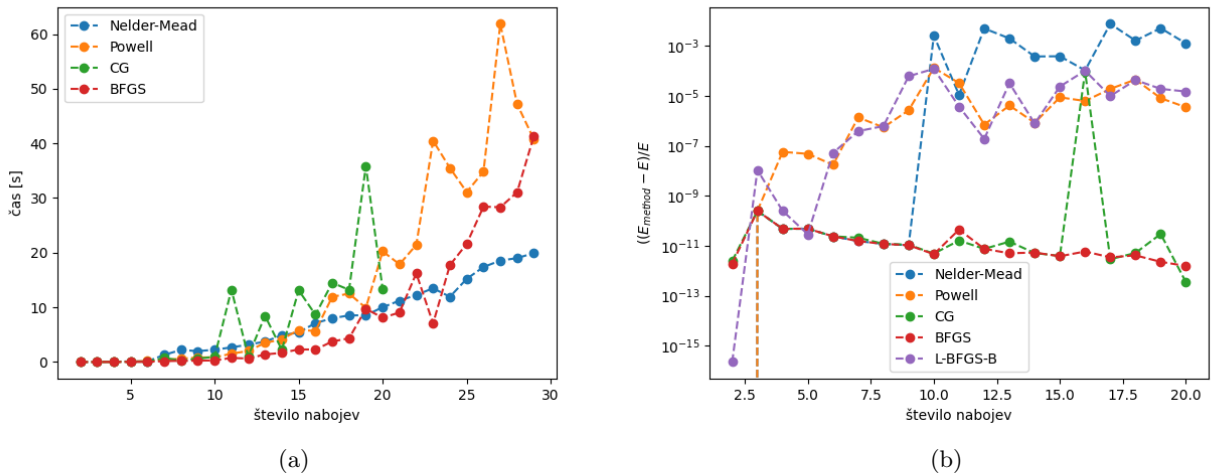
$$E = \sum_{i < j} E_{ij} = \sum_{i < j} \frac{e_i e_j}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \min, \quad (2)$$

kjer \mathbf{r}_i predstavlja lokacijo i -tega naboja in e_i njegov naboj. Enačbo lahko prepišem v brezdimenzijsko obliko

$$\sum_{i < j} \frac{\tilde{e}_i \tilde{e}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \min, \quad (3)$$

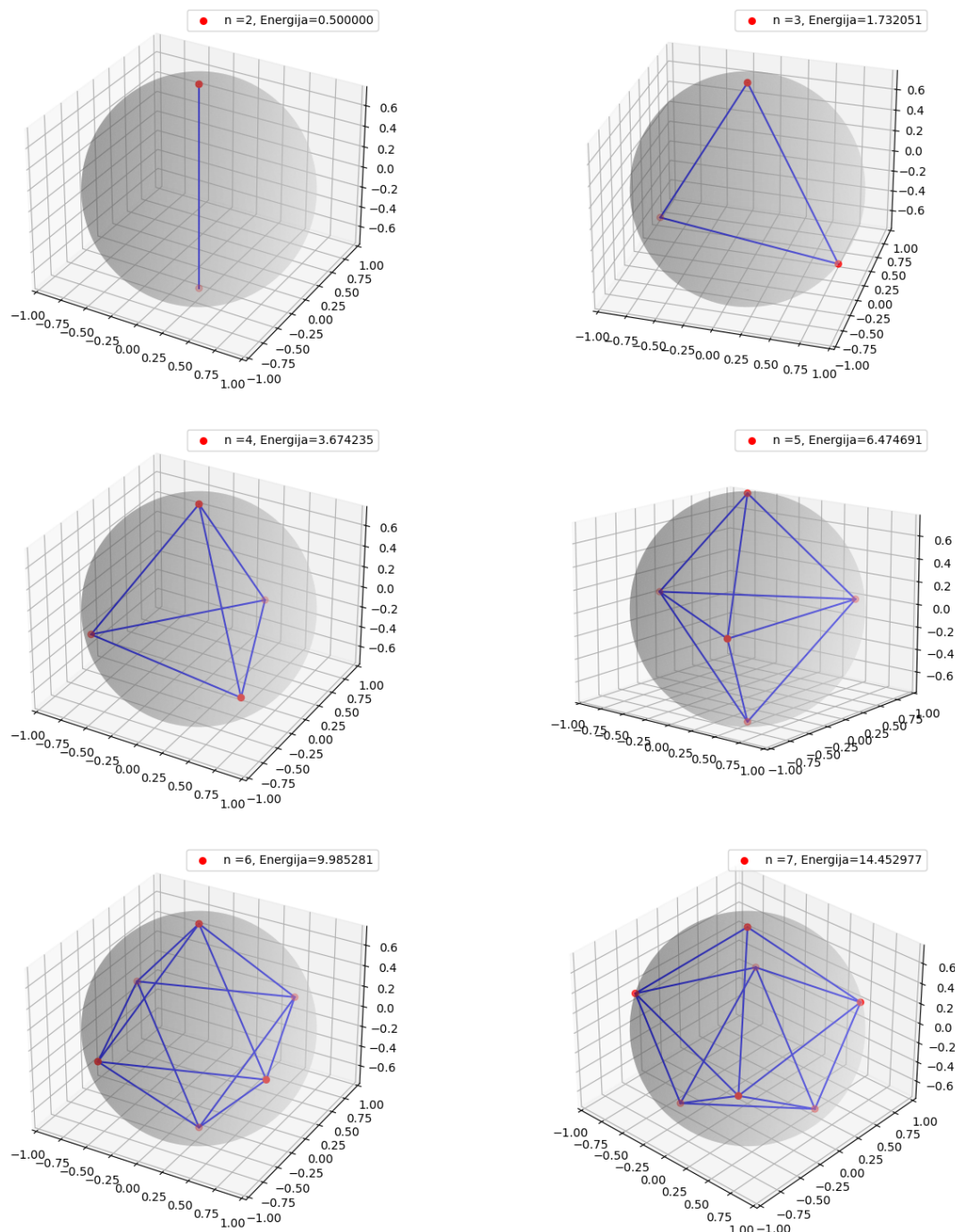
kjer je $\tilde{e}_i = \frac{e_i}{e_0}$ in kjer izberem faktor $\frac{e_0}{4\pi\epsilon_0} = 1$. Ker problem rešujem na enotski krogli, je za določitev položaja naboja potrebno vedeti 2 kota ϑ in φ . Problem lahko še nekoliko bolj poenostavim, če postavim prvi naboj na fiksno mesto $\mathbf{r}_0 = (0, 0, 1)$. Energija je tako funkcija $2(N-1)$ koordinat za N nabojev ($E(\varphi_1, \vartheta_1, \dots, \varphi_{N-1}, \vartheta_{N-1})$).

Problem sem reševal s knjižnico *Scipy* v *Python*. Za minimizacijo problema sem porabil in primerjal med sabo 5 metod: Nelder-Mead, Powell, CG (metoda konjugiranih gradientov), BFGS, L-BFGS-B. Metoda L-BFGS-B je ena izmed različic Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno-ve metode, ki uporablja omejeno količino računalniškega spomina. Določenim metodam lahko, poleg podanih začetnih parametrov, podam tudi odvode funkcije. V primeru, ko ti niso podani, metoda uporabi končne difference za lokalno aproksimacijo odvoda. Odvodov metodam nisem podal. Pogledal sem časovno zahtevnost in natančnost metod (1). Za preverjanje natančnosti sem za referenčne rešitve Thomsonovega problema uporabil podatke o minimalnih energijah iz Wikipedije [1]. Iz primerjave časovne zahtevnosti (1(a)) lahko vidim, da je najhitrejši algoritem



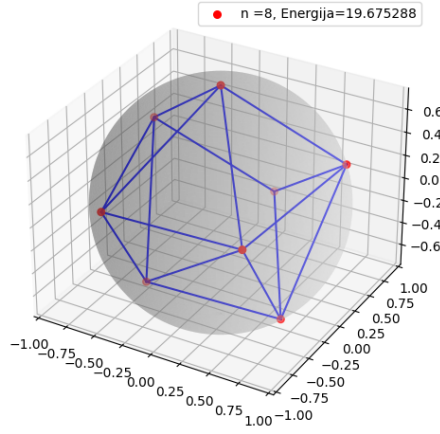
Slika 1: a) Časovna zahtevnost različnih metod za minimizacijo v odvisnosti od števila nabojev na sferi. b) Relativna odstopanja metod od referenčnih vrednosti v odvisnosti od števila nabojev na sferi. E označuje referenčno energijo[1]

Nelder-Mead (ameba), kar je pričakovano, saj je najpreprostejši. Ameba ne potrebuje oziroma računa podanih odvodov za minimizacijo. Ostale metode računajo lokalne odvode. Metodo konjugiranih gradientov sem ustavil pri 20. naboju, saj se je izkazala za časovno najzahtevnejšo, kar pa ne pomeni da je tudi najnatančnejša (1(b)). Pri izračunu natančnosti sem ponovil iskanje minimuma pri vsaki metodi 7 krat. Če bi vzel rezultate po prvi minimizaciji, bi bili ti slabši, saj je pomembno kako so izbrani začetni parametri. Na primer metoda Nelder-Mead ob določeni izbiri parametrov ne najde globalnega minimuma in povzroči večje odstopanje od pravih energij. Za najnatančnejšo metodo se je izkazala BFGS, njena različica L-BFGS-B pa za najmanj natančno. Pogledal sem še končne konfiguracije nabojev do 8 nabojev na sferi (2) Zanimiva



Slika 2: Razporeditev naboja na enotski sferi pri različnem številu nabojev (n).

konfiguracija je pri osmih nabojih na sferi (2), saj se naboji ne postavijo v obliko kocke, kot bi mogoče sprva pričakoval. Nižjo energijo ima konfiguracija, ko kocko torzijsko deformiramo.



Slika 3: Razporeditev naboja na enotski sferi pri osmih nabojih.

3 Dipoli na sferni lupini

(Nisem prepričan, da je to prava rešitev)

Zanimalo me je kako bi se razporedili dipoli po sferi oziroma sferni lupini, ki ima neko končno debelino in je izolirana od okolice. Polje, ki ga ustvarja dipol je

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{3(\mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{p}}{4\pi\epsilon_0 r^3}. \quad (4)$$

Energijo med dvema električnima dipoloma lahko zapišem kot

$$E_{ij} = -\mathbf{p}_i \mathbf{E}_j = \frac{\mathbf{p}_i \mathbf{p}_j - 3(\mathbf{p}_i \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{p}_j \hat{\mathbf{r}}_{ij})}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^3}, \quad (5)$$

kjer je $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$, \mathbf{p}_i dipolni moment, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Energija je sedaj odvisna od razdalje med dipoloma in tudi njihove orientacije. Skupno energijo sistema N dipolov lahko zapišem kot

$$E = \sum_{i < j} E_{ij} = \sum_{i < j} -\mathbf{p}_i \mathbf{E}_j = \sum_{i < j} \frac{\mathbf{p}_i \mathbf{p}_j - 3(\mathbf{p}_i \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{p}_j \hat{\mathbf{r}}_{ij})}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^3}. \quad (6)$$

Enako kot v primeru nabojev lahko zapišem energijo v brezdimenzijski obliki kot

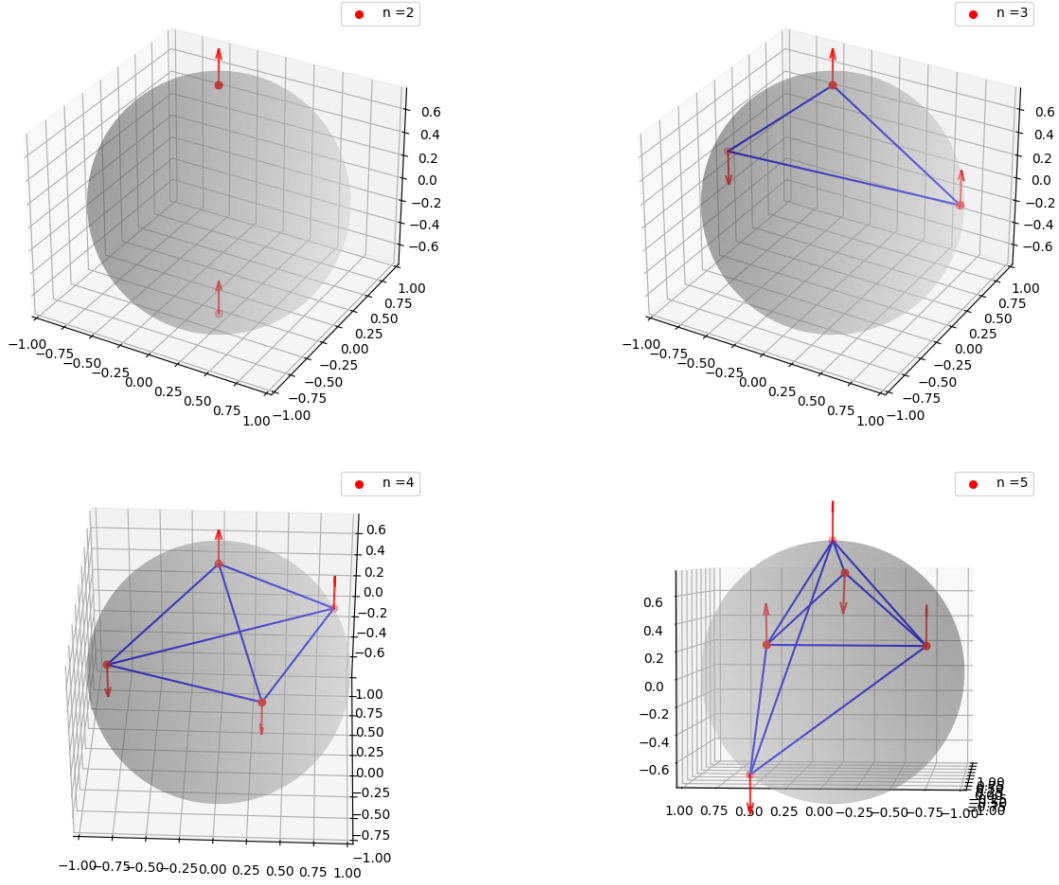
$$E = \sum_{i < j} \frac{\tilde{e}_i \tilde{e}_j \hat{\mathbf{d}}_i \hat{\mathbf{d}}_j - 3\tilde{e}_i \tilde{e}_j (\hat{\mathbf{d}}_i \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\hat{\mathbf{d}}_j \hat{\mathbf{r}}_{ij})}{r_{ij}^3}, \quad (7)$$

kjer sem vzel direktorje \mathbf{d}_i za enotske. Sedaj ima vsak dipol 4 parametre. Kota ϑ , φ , ki določata lokacijo dipola na enotski sferi in kota ϑ_d , φ_d , ki določata orientacijo dipola. Prvi dipol lahko postavim na $\mathbf{r}_0 = (0, 0, 1)$, $\mathbf{d}_0 = (0, 0, 1)$. Energija je sedaj funkcija $4(N-1)$ parametrov za N dipolov, kar privede na reševanje

$$E(\varphi_1, \vartheta_1, \varphi_{1d}, \vartheta_{1d}, \dots, \varphi_{N-1}, \vartheta_{N-1}, \varphi_{(N-1)d}, \vartheta_{(N-1)d}) = \min. \quad (8)$$

Pri minimizaciji energije sem imel kar nekaj težav, saj je edino metoda Nelder-Mead končala uspešno minimizacijo, ampak je dala velike energije ($> \pm 10^3$). Ostale metode na primer BFGS so končale neuspešno, saj naj nebi uspele zagotoviti dane natančnosti, kljub temu, da sem jo zmanjšal. Vseeno sem se po ogledu rezultatov in energij, ki so pri neuspešnih metodah bile manj kot 10^{-3} , določil za slednje rešitve. Pomembna je bila tudi izbira začetnih parametrov, saj sem pri naključni izbiri dobil slabe minimizacije. V ta namen sem vsak začetni dipol nasprotno obrnil ($\hat{\mathbf{d}}_{i0} = (-1)^i \hat{\mathbf{d}}_{00}$), kar je veliko pripomoglo k minimizaciji. Konfiguracije dipolov za različna števila so prikazane na sliki 4.

Konfiguracija za 2 dipola je smiselna, saj na ta način dosežemo najmanjšo energijo. Prav tako imajo ostale nasprotno zasukane dipole in tvorijo deformirane like iz rešitev za monopole (4 in 5 dipolov), kar se mi zdi tudi fizikalno smiselno.



Slika 4: Razporeditev dipolov na enotski sferi pri različnem številu dipolov.

4 Semafor

Nalogo o semaforju iz prve vaje modelske analize lahko rešim tudi na diskreten način. Reševal bom primer, ko imamo eno krajišče gibljivo. Za minimizacijo sem uporabil algoritem BFGS. Interval razdelim na N ekvidistančnih točk $\tilde{t}_0, \dots, \tilde{t}_{N-1}$, ki so razmaknjene za $\delta\tilde{t}$. Na vsakem intervalu imam hitrost $\tilde{v}_i = \tilde{v}(\tilde{t}_i)$. Želim minimizirati funkcional

$$F = \int_0^1 \dot{v}^2(\tilde{t}) d\tilde{t} = \min \quad ,$$

ki ga prepišem v diskretno obliko z uporabo trapezne formule in končnih diferenc.

$$F = \left(\left(\frac{\tilde{v}_1 - \tilde{v}_0}{\delta\tilde{t}} \right)^2 + \dots + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{v}_{N-1} - \tilde{v}_{N-2}}{\delta\tilde{t}} \right)^2 \right) \delta\tilde{t}. \quad (9)$$

Vez

$$Z = \int_0^1 \tilde{v}(\tilde{t}) d\tilde{t} = 1 \quad (10)$$

lahko upoštevam na dva načina.

4.1 Eksaktna vez

Vez lahko diskretiziram

$$Z = \left(\frac{1}{2}\tilde{v}_0 + \tilde{v}_1 + \dots + \frac{1}{2}\tilde{v}_{N-1} \right) \delta\tilde{t} \quad (11)$$

in sedaj iščem minimum funkcionala

$$\tilde{F} = F - \lambda Z = \min \quad . \quad (12)$$

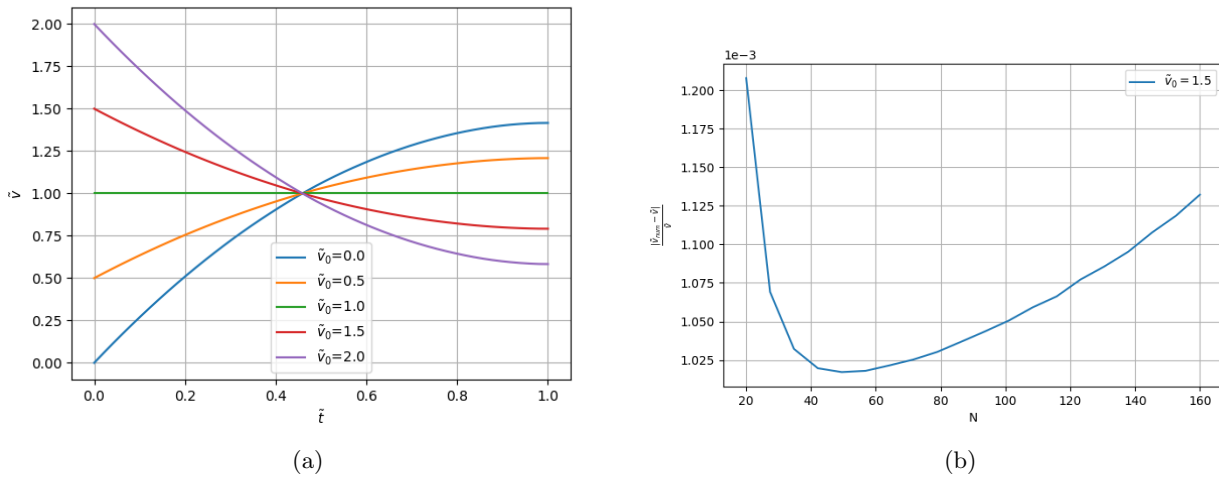
Začetno vrednost hitrosti imam podano, tako je funkcional odvisen od hitrosti v točkah $\tilde{v}_1, \dots, \tilde{v}_{N-1}$ in parametra λ , ki pa ne sme biti minimalen. Z minimizacijo funkcionala \tilde{F} , dobim vektor hitrosti $\tilde{\mathbf{v}}(\lambda)$, ki je odvisen od parametra λ . Sedaj moram poiskati tak λ , da bo veljala vez. To sem naredil z funkcijo *Scipy.optimize.fsolve*, ki poišče ničle funkcije

$$f(\lambda) = Z - 1 = 0, \quad (13)$$

in s tem optimalno λ . Algoritem išče tako $\tilde{\mathbf{v}}(\lambda) = (\tilde{v}_1(\lambda), \dots, \tilde{v}_{N-1}(\lambda))$, da velja zgornja enakost in s tem eksaktna vez. Rezultati so prikazani na sliki 5(a), za različne začetne hitrosti. Primerjal sem tudi relativna odstopanja diskretnega reševanja od analitične rešitve

$$\tilde{v}(t) = -\frac{3}{2}(1 - \tilde{v}_1)\tilde{t}^2 + 3(1 - \tilde{v}_1)\tilde{t} + \tilde{v}_1. \quad (14)$$

Pričakoval bi, da se napaka z drobljenjem intervala manjša. Na sliki 5(b) je razvidno, da se odstopanje manjša do približno $N = 50$, nato pa napaka začne naraščati, kar je precej nenavadno in ne vidim razlogov za to. Mogoče bi moral pogledati za večje število N , če postane napaka res manjša od prvotne ali pa je to samo lokalni minimum.



Slika 5: a) Hitrostni profil pri različnih začetnih hitrostih ob diskretnem reševanju. b) Relativna odstopanja hitrosti od analitične ob vedno večjem drobljenju intervala.

4.2 Približna vez

Drugi način upoštevanja vezi je uvedba funkcionala, ki bo kaznoval neupoštevanje vezi. V ta namen lahko definiram funkcional

$$F_2 = 1 + e^{\kappa(\frac{1}{2}\tilde{v}_0 + \tilde{v}_1 + \dots + \frac{1}{2}\tilde{v}_{N-1} - 1/\delta\tilde{t})}. \quad (15)$$

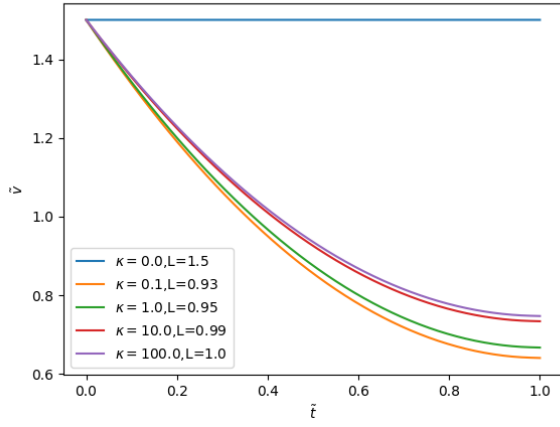
$F_2 = 1$, ko je vez izpolnjena. V primeru ko vez ni izpolnjena in je diskretizirana celotna pot večja od 1, bo odvisno od velikosti parametra κ , funkcional eksponentno narasel, kar bo slabo za minimizacijo. Na ta način bo vez približno veljala. Sedaj rešujem problem

$$F + F_2 = \min. \quad (16)$$

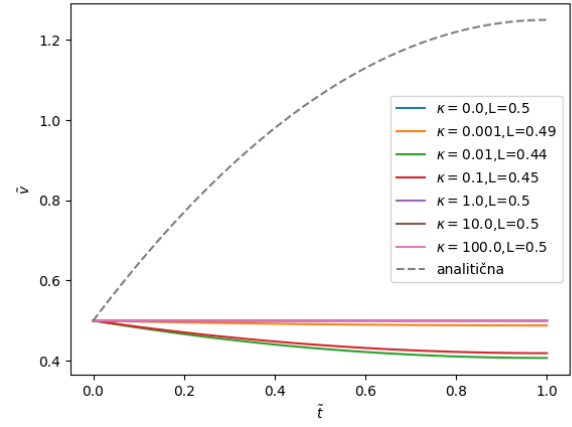
Rešitev je prikazana na sliki 5(a). Težava nastane, ko je diskretizirana pot manjša kot 1, takrat bo funkcional eksponentno padel proti 1 in bo to pomenilo optimalno minimizacijo, čeprav rešitev ni pravilna (slika 6). Takšna oblika funkcionala samo doda omejitve hitrosti. Rešitev za začetne hitrosti $\tilde{v}_0 < 1$ je preprosta. Vse kar moram narediti je pomnožiti eksponent funkcionala F_2 z (-1)

$$\tilde{F}_2 = 1 + e^{\kappa(-(\frac{1}{2}\tilde{v}_0 + \tilde{v}_1 + \dots + \frac{1}{2}\tilde{v}_{N-1}) + 1/\delta\tilde{t})}, \quad (17)$$

na ta način bo funkcional deloval obratno kot v zgornjem primeru. Rešitev je prikazana na sliki 7(a). Zanimivo je tudi pogledati območje, na katerem lahko izpolnimo vez za dana parametra κ in \tilde{v}_0 (slika 7(b)).

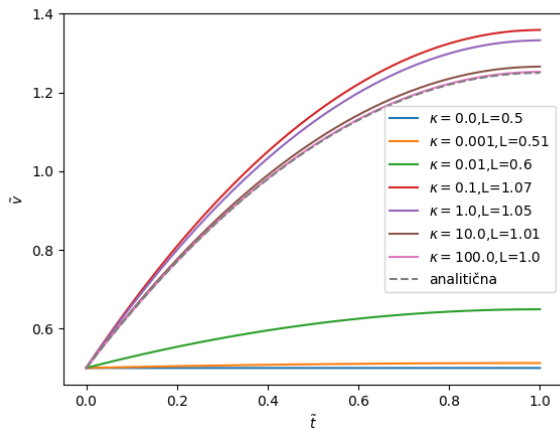


(a)

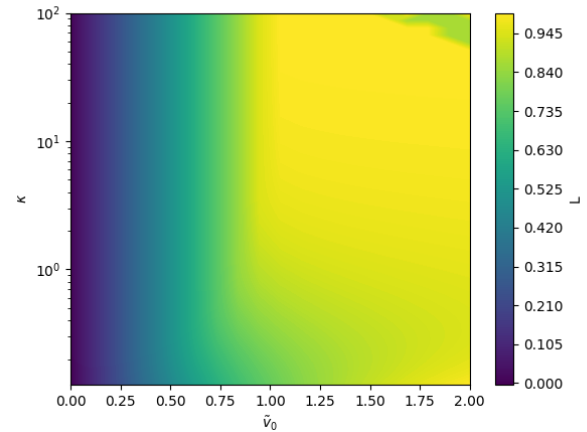


(b)

Slika 6: a) Hitrostni profil v primeru ko uporabimo funkcional F_2 in začetno hitrost $\tilde{v}_0 = 1.5$. b) Hitrostni profil v primeru ko uporabimo funkcional F_2 in začetno hitrost $\tilde{v}_0 = 0.5$.



(a)



(b)

Slika 7: a) Hitrostni profil v primeru ko uporabimo funkcional \tilde{F}_2 in začetno hitrost $\tilde{v}_0 = 0.5$. b) Dolžina poti L v odvisnosti od parametra κ in \tilde{v}_0 .

5 Zaključek

Numerična minimizacija je uporaben postopek za iskanje ravnovesnih stanj sistemov. V nalogi sem primerjal različne metode. Za najnatančnejšo se je izkazala BFGS, za najhitrejšo pa Nelder-Mead. Zanimivo je bilo tudi pogledati razporeditev dipolov na sferni lupini. Pri nalogi Semafor bi bilo mogoče študirati še kakšne druge oblike funkcionala.

Literatura

- [1] Thomson problem. Wikipedia, The Free Encyclopedia. Pridobljeno 25. oktobra 2022, iz https://en.wikipedia.org/wiki/Thomson_problem