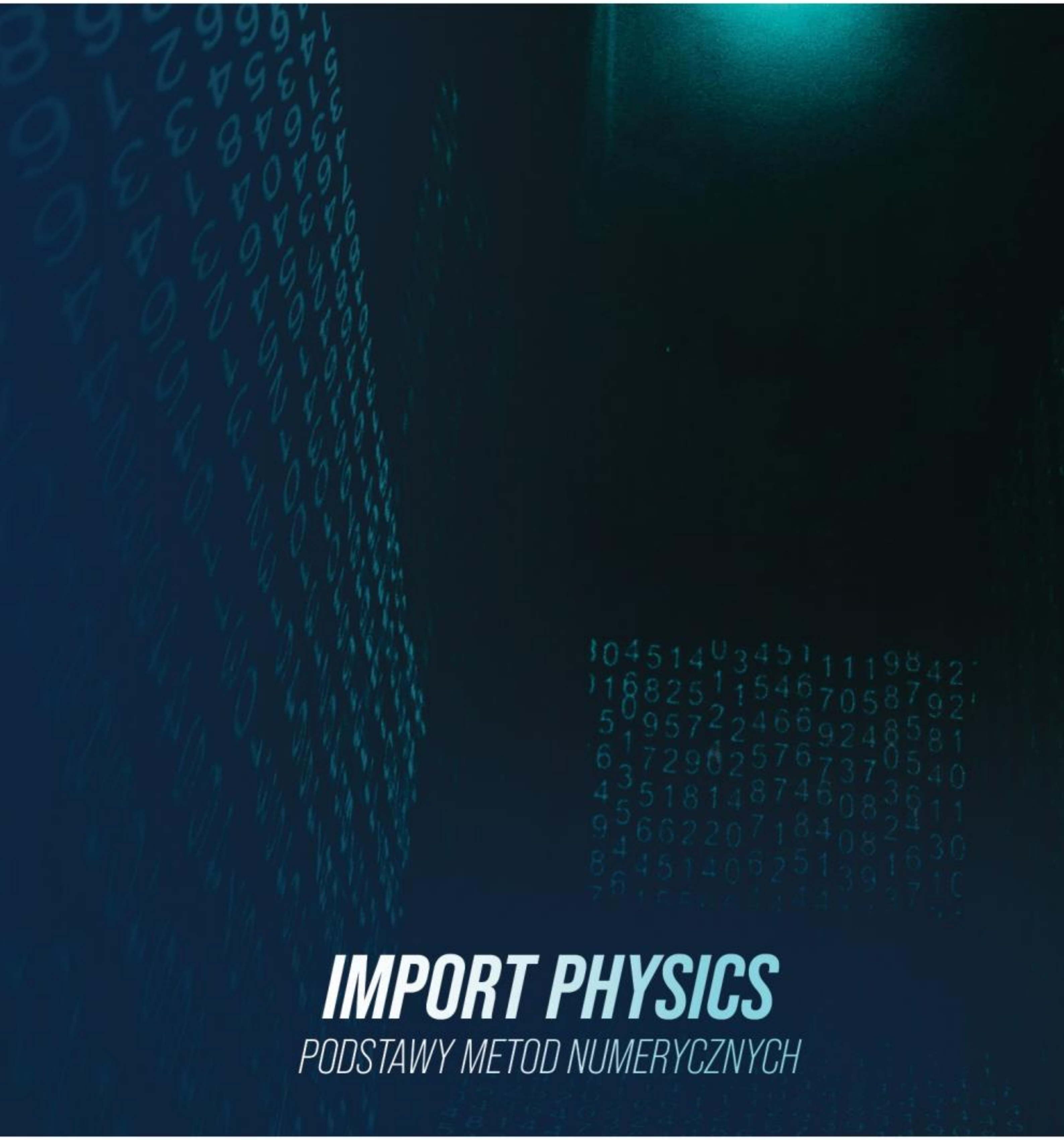
INDEKS W KIESZENI



IMPORT PHYSICS

PODSTAWY METOD NUMERYCZNYCH

FILIP BOJDECKI

INDEKS W KIESZENI

FILIP BOJDECKI

import physics

Podstawy metod numerycznych

WARSZAWA 2024

Wydanie I

Autor: Filip Bojdecki

Projekt graficzny okładki: Justyna Książek

Recenzent: Karol Łukanowski

ISBN: 978-83-969868-8-7

Wydawnictwo Indeks w Kieszeni

IWK MAT sp. z o.o.

www.indekswkieszeni.pl

1 Co łączy zwisającą linę, brachistochronę, mechanikę Lagrange'a i czarne dziury?

1.1 Wstęp

Rozdział ten będzie poświęcony pozornie bardzo prostej sprawie. Będziemy obliczać wartość pewnej całki, a następnie optymalizować jej wartość. Te dwie koncepcyjnie nieskomplikowane czynności połączone razem mają niezwykły potencjał jako narzędzie do tłumaczenia rzeczywistości fizycznej.

Formalnie zagadnienie, którym będziemy się zajmować, nazywa się ekstremalizacją funkcjonału. Ogólnie funkcjonałem nazywa się odwzorowanie, które jako argument przyjmuje funkcję, a zwraca liczbę. W szczególności będziemy się zajmować funkcjonałami o postaci:

$$\mathfrak{F}(x(t)) = \int_{t_0}^{t_1} L(\dot{x}(t), x(t), t)dt, \tag{1}$$

gdzie $\mathfrak{F}$ jest funkcjonałem przyjmującym jako argument funkcję $x(t)$. Funkcję L nazywać będziemy lagrangianem[1]. Lagrangian przyjmuje trzy argumenty: pochodną funkcji dla danego czasu, wartość tej funkcji i czas. Od razu widać, że dla dowolnej rozsądnej postaci funkcji L oraz $x(t)$ wyrażenie to określa po prostu jakąś liczbę. Zatem w istocie odwzorowanie $\mathfrak{F}(\cdot)$ przyjmuje jako argument funkcję, a zwraca liczbę.

Działanie $\mathfrak{F}$ jest jednak na razie dość abstrakcyjne. Spróbujmy podać intuicyjny przykład funkcjonału. Wyobraźmy sobie, że jesteśmy na wycieczce w górach. Chcemy dostać się do schroniska. Przez funckjonał $\mathfrak{F}$ możemy rozumieć odwzorowanie przyjmujące jako argument trasę do schroniska, rozumianą na przykład jako szerokość geograficzna w funkcji długości geograficznej. W kontekście wyrażenia 1, $x(t)$ będzie oznaczać szerokość geograficzną w funkcji długości geograficznej[2]. Dokładna postać funkcji L będzie natomiast zadana[3] przez topografię terenu rozumianą jako wysokość nad poziomem morza w funkcji położenia. Chcemy wszak, aby funkcjonał $\mathfrak{F}$ uwzględniał również drogę pokonywaną w pionie!

Jak znaleźć przy tak sformułowanym problemie najkrótszą drogę do schroniska? Można się w tym celu posłużyć tak zwanym rachunkiem wariacyjnym. Pozwala on napisać warunek konieczny do tego, aby nasza droga była najkrótsza. Warunek ten miałby postać równania różniczkowego. My jednak w tym rozdziale będziemy posługiwali się metodami numerycznymi, aby rozwiązywać tego typu problemy.

[1]Nazwa ta zazwyczaj odnosi się do funkcji L w kontekście mechaniki Lagrange'a, my jednak będziemy używać tej nazwy we wszystkich kontekstach.

[2]Dość nieortodoksynie x oznacza zatem w tym przykładzie szerokość, a t długość geograficzną.

[3]Szczegółowa postać wcale prosta nie będzie. Przykład ten poza tym, że jest intuicyjnie łatwy do zrozumienia, jest dość trudny w szczegółach.

Zamiast przeszukiwać całą przestrzeń funkcji[4] zadowolimy się przeszukaniem jedynie węższej, sparametryzowanej klasy funkcji licząc na to, że właściwa funkcja minimalizująca jest podobna do którejś z funkcji z obranej klasy. Pozwoli to zastąpić szukanie minimów w przestrzeni funkcji przez szukanie minimum w przestrzeni parametrów.

Krótko mówiąc, zamiast szukać ogólnej funkcji $x(t)$, minimalizującej równanie 1, obierzemy na przykład klasę funkcji:

$$x_{a_0,a_1,a_2,a_3}(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3,$$

sparametryzowaną za pomocą liczb $\{a_0, a_1, a_2, a_3\}$. Metodami numerycznymi możemy następnie szukać parametrów, dla których wyrażenie 1 przyjmuje wartośc ekstremalną.

Należy w tym miejscu jednak wyraźnie zaznaczyć, że opisany sposób podejścia do problemu w zasadzie nie ma zastosowań poza celem dydaktycznym. Wynika to z faktu, że istnieją narzędzia analityczne pozwalające zredukować tego typu problemy do równań różniczkowych. Mimo poważnych wad opisane podejście da nam pewien wgląd w kilka ciekawych problemów fizycznych bez zagłębiania się we wspomniane metody analityczne.

1.2 Numeryczne znajdowanie ekstremów funkcji

Istnieje wiele algorytmów realizujących zadania znajdowania ekstremów funkcji. Temat ten jest niezwykle ważny, nie tylko w kontekście fizyki. Na przykład do trenowania sztucznej inteligencji korzysta się właśnie ze sprytnych strategii optymalizacji paramerów.

Niestety, nie ma doskonałej metody służącej do szukania minimów czy maksimów funkcji. Strategie właściwe do jednych problemów nie sprawdzą się przy innych. Zastanówmy się, czego można by oczekiwać od idealnego algorytmu.

Idealny algorytm:

- Byłby szybki, to znaczy szybko zbiegałby do szukanego ekstremum, obliczając wartość funkcji małą liczbę razy;
- Miałby czas działania w niewielkim stopniu zależny od ilości parametrów, za pomocą których odbywa się ekstremalizacja;
- Działałby dla każdej funkcji z ekstremum;
- Zbiegałby do ekstremum niezależnie od wyboru miejsca startu algorytmu;

[4]Funkcji nie dość, że jest nieskończenie wiele, to dodatkowo przestrzeń funkcji ma nieskończwenie wiele wymiarów!

- Pozwalałby w łatwy sposób ograniczyć zbiór przeszukiwanych parametrów poprzez dodanie równań więzów;
- W razie istnienia skończonej ilości ekstremów w badanym przedziale listował wszystkie;
- Nie podawałby punktów podszywających się pod ekstrema (punkty stacjonarne poza maksimum i minimum, na przykład x^3 w $x = 0$);
- Byłby prosty w implementacji.

Wybierając rzeczywisty algorytm, zawsze należy zastanowić się, na jakich cechach tak na prawdę nam zależy.

W tej sekcji skupimy się przede wszystkim na algorytmach posiadających ostatnią cechę, czyli łatwość implementacji, mając dodatkowo na względzie stojącą za nimi prostotę matematyki. W przypadkach, gdy okażą się one zawodne, wykorzystamy dziedzictwo przodków w postaci gotowych implementacji bardzo zaawansowanych algorytmów, dostępnych w licznych bibliotekach Pythona.

Pokrótce opiszemy działanie następujących algorytmów:

1. metoda złotego podziału;
2. zmodyfikowana metoda Newtona;
3. metoda gradientu prostego.

Na koniec wstępu warto wspomnieć, że algorytmy służące do znajdowania minimów funkcji mogą być z powodzeniem użyte do znajdowania maksimów i odwrotnie. Na przykład jeśli chcemy użyć algorytmu minimalizującego do znalezienia maksimum funkcji $f(x)$ można zawsze rozwiązać równoważny problem polegający na znalezieniu minimów funkcji $-f(x)$.

Metoda złotego podziału

Metodę złotego podziału stosuje się do znajdowania minimum funkcji jednej zmiennej. W przypadku, gdy w badanym przedziale argumentów funkcja ma kilka minimów lokalnych, algorytm zbiegnie do któregoś z nich. Największą zaletą metody, poza prostotą, jest jej stabilność. Istotną wadą jest natomiast to, że działa ona jedynie dla funkcji o jednej zmiennej.

Metoda złotego podziału polega na stopniowym zawężaniu przedziału, w którym znajduje się szukane minimum. Do zainicjowania metody potrzebne jest podanie początkowego przedziału. Na rysunku 1 początkowym przedziałem jest odcinek od a do b.

Pierwszym krokiem jest obliczenie c oraz d ze wzorów:

$$c = b - \frac{b-a}{\phi},$$

$$d = a + \frac{b-a}{\phi},$$

gdzie $\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ jest tak zwaną złotą liczbą.

Kolejnym krokiem jest porównanie minimalizowanej funkcji f w c oraz d. Jeśli $f(d) > f(c)$, oznacza to, że minimum znajduje się między a oraz d.W przeciwnym wypadku, jeśli $f(c) > f(d)$, to minimum jest między c i b.

Można by w tym momencie powiedzieć, że mamy nowy, węższy przedział, w którym znajduje się minimum, i użyć go do powtórzenia całej procedury aż do momentu, gdy uznamy, że zawęziliśmy przedział wystarczająco. Specyficzny wybór c oraz d pozwala jednak odrobinę przyspieszyć działanie algorytmu. Okazuje się, że dla tak wybranych wzorów na c i d, żeby obliczyć wartości funkcji w c' oraz d', w następnym kroku wystarczy wywołać funkcję f tylko raz. Dla przypadku $f(d) > f(c)$ zachodzi $c = d'$, natomiast dla $f(c) > f(d)$ zachodzi $d = c'$.

Spróbuj samodzielnie zaimplementować metodę złotego podziału w taki sposób, aby wykorzystywała ona wyżej opisany fakt. Przetestuj ją na prostych funkcjach. W razie problemów bez trudu zdobędziesz gotową implementację w internecie lub prosząc o nią ulubiony model językowy AI.

Zmodyfikowana metoda Newtona

Metoda Newtona zazwyczaj jest wykorzystywana do znajdowania miejsc zerowych funkcji. Da się ją jednak zaadaptować do znajdowania lokalnych minimów. Na początek warto zaznajomić się z jej podstawową wersją.

Celem metody Newtowna jest znalezienie miejsca zerowego funkcji. Do zainicjowania metody potrzebny jest punkt startowy x_0. Za pomocą wartości minimalizowanej funkcji f i jej pochodnej f' w punkcie startowym obliczane jest nowe oszacowanie na miejsce zerowe. Po czym procedura jest zapętlana.

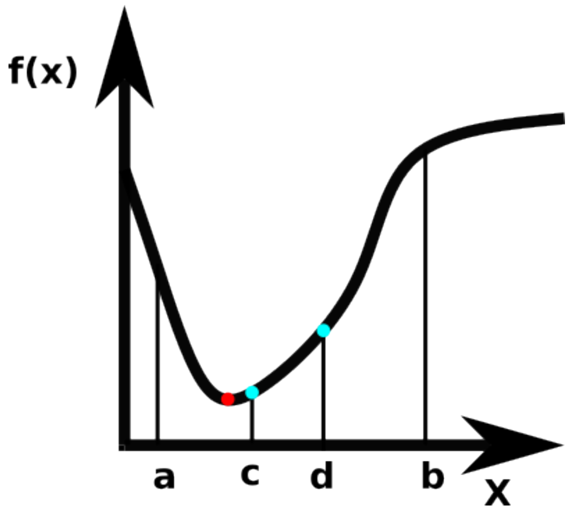
Przyjrzyjmy się rysunkowi 2. Na początku obliczamy $f(x_0)$ i $f'(x_0)$, po czym x_1 wyliczamy ze wzoru:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

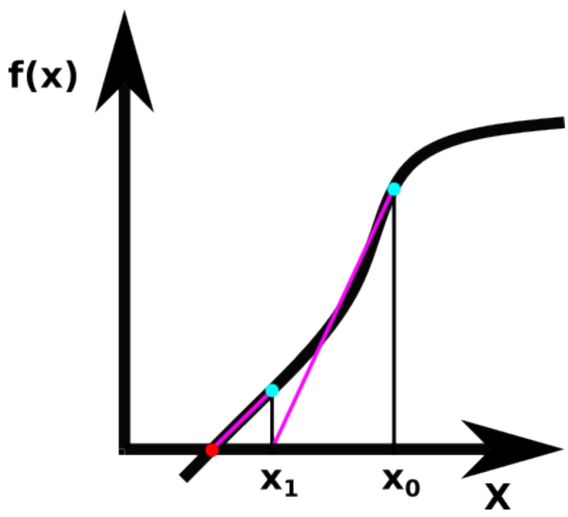
Procedurę można dalej zapętlić tak, że:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Pętlę można zakończyć, gdy $f(x_n) < \epsilon$, gdzie ϵ jest pewną obraną małą liczbą.



Rysunek 1: Ilustracja działania metody złotego podziału. W zadanych przez złoty podział miejscach c oraz d obliczana jest minimalizowana funkcja f. Jeśli $f(d) > f(c)$, oznacza to, że minimum znajduje się między a oraz d. Jeśli $f(c) > f(d)$, to minimum jest między c i b.



Rysunek 2: Ilustracja zastosowania metody Newtona do znajdowania miejsc zerowych.

Import physics. Podstawy metod numerycznych to obowiązkowa lektura dla wszystkich osób przygotowujących się do Olimpiady Fizycznej! Znajdziesz w niej nie tylko **omówienia wielu istotnych zagadnień,** ale również **konkretne narzędzia,** które pozwolą Ci zmierzyć się nawet z najtrudniejszymi poleceniami na Olimpiadzie. Publikacja ta wyróżnia się przejrzystością opracowania materiału merytorycnego, którego zrozumienie ułatwia wprowadzenie wielu przykładów. Jeśli tylko fizyka jest Twoją pasją, to z pewnością nie powinieneś zwlekać!

To świetny poradnik dla licealistów zainteresowanych Olimpiadą Fizyczną oraz osób rozważających studiowanie fizyki. Umiejętnie kieruje czytelnikiem, z jednej strony podsuwając pomysły i dydaktyczne przykłady, z drugiej zaś zostawiając pole do samodzielnego ćwiczenia umiejętności badawczych. Polecam!

Karol Łukanowski, laureat Olimpiady Fizycznej,
doktorant fizyki na Uniwersytecie Warszawskim

Wydawnictwo INDEKS W KIESZENI

Warszawa 2024
ISBN: 978-83-969868-8-7