Naboji na ploskvah

Imamo n enakih točkastih nabojev, ki ležijo na (omejeni) implicitno podani ploskvi v $\mathbb{R}^3$

$$f(\mathbf{x}) = 0 \tag{1}$$

kjer je $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ in smo označili $\mathbf{x} = (x, y, z)$. Naboji se med sabo odbijajo, ker pa predpostavljamo, da je ploskev omejena, obstaja ravnovesna lega, kjer je vsota vseh sil na vsak naboj na ploskvi enaka nič (pravzaprav je ravnovesna lega taka, da vsota sil na posamezen naboj deluje v smeri, ki je normalna na ploskev). Radi bi napisali funkcijo, ki za dano ploskev (npr. sfera, elipsoid, torus itd) in število nabojev n izračuna to ravnovesno lego. Število nabojev n pri tem ne bo več kot nekaj deset ali morda sto.

Če označimo položaj i-tega naboja z $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1, \ldots, n$, lahko problem formuliramo kot problem iskanja minimuma skupne potencialne energije

$$V(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n) = \sum_{i \neq j} \frac{1}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \tag{2}$$

(fizikalne enote so tu izbrane tako, da pride izraz v števcih enak 1) pri pogojih

$$f(\mathbf{x}_i) = 0, \quad i = 1, \ldots, n \tag{3}$$

Tak problem imenujemo problem vezanih ekstremov. Klasična metoda za reševanje problema vezanih ekstremov so Lagrangeovi množitelji. Vendar je zaradi neenoličnosti rešitev implementacija numeričnega reševanja tega konkretnega problema s pomočjo Lagrangeovih množiteljev brez dodatnih pogojev ali predpostavk lahko težavna (poleg tega, da Lagrangeovi množitelji niso del učnega načrta).

Zato predlagamo naslednji algoritem, ki je kombinacija gradientne metode in reševanja sistemov nelinearnih enačb (za katere je tu v splošenm najbolj primerna Newtonova metoda):

1. Za dano začetno oz. trenutno konfiguracijo $\mathbf{z}_0 = (\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n)$ ($\mathbf{z}_0$ je torej vektor s $3n$ koordinatami) izračunamo vrednost gradienta potenciala (2) $\mathrm{grad} V(\mathbf{z}_0)$ in sistem premaknemo v smeri nasprotno od gradienta (ker iščemo minimum potenciala)

   $$\mathbf{z}_1 = \mathbf{z}_0 - h \cdot \mathrm{grad} V(\mathbf{z}_0) \tag{4}$$

   za nek majhen korak h. Pri tem ignoriramo pogoje (3), kar pomeni, da se naboji v splošnem pri tem koraku odmaknejo stran od ploskve (1).

2. Nove položaje nabojev, ki jih dobimo po izračunu (4), popravimo tako, da vsak naboj prestavimo nazaj na ploskev (3) v smeri premic, ki so vzporedne vektorjem

   $$\mathbf{n}_i = \mathrm{grad} f(\mathbf{x}_i), \quad i = 1, \ldots, n$$

ki so pravokotne na ploskev (1) (ali skoraj pravotne). Za poseben primer enotske sfere je ta korak možno preprosto izvesti tako, da vektorje $\mathbf{x}_i$ enostavno normiramo. V splošnem pa je potrebno omenjene premice parametrizirati (recimo, da tako parametrizacijo označimo z $\mathbf{r}_i(t)$) in rešiti enačbo

$$f(\mathbf{r}_i(t)) = 0$$

za vsak $i = 1, \ldots, n$, za kar bo zadostovalo že par korakov Newtonove iteracije.

3. Koraka 1. in 2. ponavljamo, dokler se položaji nabojev ne spreminjajo več oz. dokler razlike med položaji pred in po izvedenih korakih 1. in 2. ne postanejo dovolj majhne. Ko pridemo namreč do konfiguracije, kjer se po korakih 1. in 2. položaji nabojev ne spreminjajo več, to pomeni, da pri izračunu koraka (4) naboje porivamo s ploskve le še v smeri normal na ploskev in smo dosegli ravnovesno lego.