

### 13. naloga – Metoda maksimalne entropije in linearna napoved

1. Določi frekvenčni spekter signalov iz datotek `val2.dat`, `val3.dat` in `co2.dat` z metodo maksimalne entropije. V slednji datoteki s koncentracijo CO<sub>2</sub> v zraku upoštevaj splošen (linearen) letni trend. Preizkusi delovanje metode v odvisnosti od števila polov in od gostote prikaza. Pri CO<sub>2</sub> si oglej še njihovo lego. Primerjaj natančnost metode z rezultati, ki jih da FFT ob uporabi filtrov. Sestavi tudi testni signal iz vsote sinusnih členov z bližnjimi frekvencami ter razišči ločljivost metode.
2. Koeficiente metode maksimalne entropije na signalih iz prve naloge uporabi za linearno napoved: koeficiente določi iz prve polovice zapisa signala, drugo polovico pa uporabi za primerjavo z napovedjo. Priporočljivo je majhno število polov. Ugotovi, kako vpliva na napoved šum! Podobno preuči datoteko `borza.dat` in podatke za lunine efemeride v `luna.dat`, oziroma sončni cikel `Wolf_number.dat`.

Preveri, ali so vsi koreni preslikavne funkcije znotraj enotnega kroga, in jih po potrebi preslikaj vanj!

---

Uporabne funkcije iz *Numerical Recipes*: `memcof`, `evlmem`, `zroots`, `fixrts` in `predic`.

## 12. naloga – Spektralna analiza in filtriranje

1. Signaloma s 512 točkami na datotekah `val2.dat` in `val3.dat`<sup>1</sup> določi frekvenčni spekter. Preskusi različne okenske funkcije. Kako se spremeni spekter, če analiziramo krajše intervale (64, 128, ... točk)?

Signal  $u(t)$ , ki prihaja v merilno napravo s prenosno funkcijo  $r(t)$ , se ob dodatku šuma  $n(t)$  preoblikuje v

$$c(t) = u(t) * r(t) + n(t) = s(t) + n(t).$$

Iz izmerjenega časovnega poteka  $c(t)$  bi radi, ob poznavanju odzivne funkcije  $r(t)$  in ob nekaterih predpostavkah o šumu  $n(t)$ , rekonstruirali vpadni signal  $u(t)$ . N. Wiener je predlagal naslednjo rešitev, ki sledi iz minimizacije napake po metodi najmanjših kvadratov<sup>2</sup>. Pred dekonvolucijo je treba transformiranko  $C(f)$  pomnožiti s filtrom,

$$\Phi(f) = \frac{|S(f)|^2}{|S(f)|^2 + |N(f)|^2}.$$

2. S pomočjo Wienerjevega filtra napravi dekonvolucijo signalov na datotekah `signal{0,1,3,4}.dat`. Število točk v posameznem signalu je 512. Na zadnjih treh datotekah je signalu primešan šum. Prenosna funkcija je

$$r(t) = \frac{1}{2\tau} \exp(-|t|/\tau), \quad \tau = 16.$$

V novjšem času se vse bolj uveljavljajo metode vrstičnega odbiranja (*scanning*), pri katerih je slika zabeležena kot 1D signal, dobljen iz točkastega detektorja (n.pr. vrstični elektronski mikroskop). V analitski metodi LA-ICP-MS<sup>3</sup> ima detektorski sistem končen volumen, zato se pri hitrem odbiranju po vrstici vsebina posameznega piksla prenese še k nadaljnjim točkam. S preprostim razdelčnim modelom pokažemo, da je prenosna funkcija takega sistema eksponentna. Z njo lahko izvedemo dekonvolucijo in razmazanje eksaktno odpravimo. Ko se k razmazanju slike primeša še šum, pa lahko motnjo odpravimo le delno, n.pr. z Wienerjevim filtrom.

3. Poskusi očistiti Lincolново podobo, odbrano po stolpcih, ki se v metodi LA-P-MS tradicionalno uporablja za testiranje dekonvolucijskih algoritmov.

Slike `lincoln_L30_N{00,10,30}.pgm` ( $313 \times 256$ ) najdeš na spletni strani predmeta. V zadnjih dveh datotekah je dodan šum. Prenosna funkcija je

$$r(t) = \frac{1}{\tau} \exp(-t/\tau), \quad \tau = 30, t > 0.$$

---

`pgm` format je P2 različica `ppm` formata, ki shranjuje sivine v tekstovni obliki, na začetku pa ima glavo oblike `P2` `x y n`, kjer sta  $x$  in  $y$  dimenziji slike,  $n = 255$  je pa maksimalna vrednost sivine, ki predstavlja belo barvo. Ta format je priporočljiv tudi za izhodne slike, saj ga je enostavno pretvoriti v kateri koli drug format in nazaj s programom `convert` iz paketa `imagemagick`:

```
> convert a.pgm a.png
> convert a.png -compress none a.pgm4
```

S tem se izognemo klicanju knjižnic za kodiranje slikovnih formatov. Pazi, po filtriranju se lahko pojavijo vrednosti, ki ne padejo v območje  $[0, 255]$ . Take presežne vrednosti je treba popraviti pred zapisovanjem izhodne slike.

---

<sup>1</sup><http://predmeti.fmf.uni-lj.si/modelska/podatki/>

<sup>2</sup>gl. *Numerical Recipes*, pogl. 12.6

<sup>3</sup>laser ablation with inductively coupled plasma and mass spectrometry

<sup>4</sup>brez `-compress none` argumenta namesto tekstovnega zapiše binarni format

**11. naloga – Stohastični populacijski modeli**

1. Napravi **statistiko časov izumrtja** za preprosti eksponentni model ( $\beta = 1.0/\text{enota časa}$ ) za majhno ( $N = 25$ ) in veliko ( $N = 250$ ) populacijo. Ali je ta čas odvisen od velikosti časovnega koraka? Primerjaj z modelom, ki vključuje rojstva in smrti ( $\beta_r = 4\beta$ ,  $\beta_s = 5\beta$ )!
2. Za zgornji model poišči **matriko prehodov** in z njo oceni čas izumrtja. Za preprost eksponentni model izumiranja lahko zapišeš enačbe za verjetnostno porazdelitev v odvisnosti od časa. Kako se efektivni odmik te porazdelitve spreminja s časom?
3. V stohastičnem modelu zajci-lisice določi **povprečno življensko dobo** sistema, če začnemo v ravnovesnem stanju. Za boljšo primerjavo med rezultati uporabi stacionarno stanje z 200 zajci in 50 lisicami in razmerje rodnost/smrtost  $5/4$  za zajce in obratno za lisice.

## 10. naloga – Metropolisov algoritem

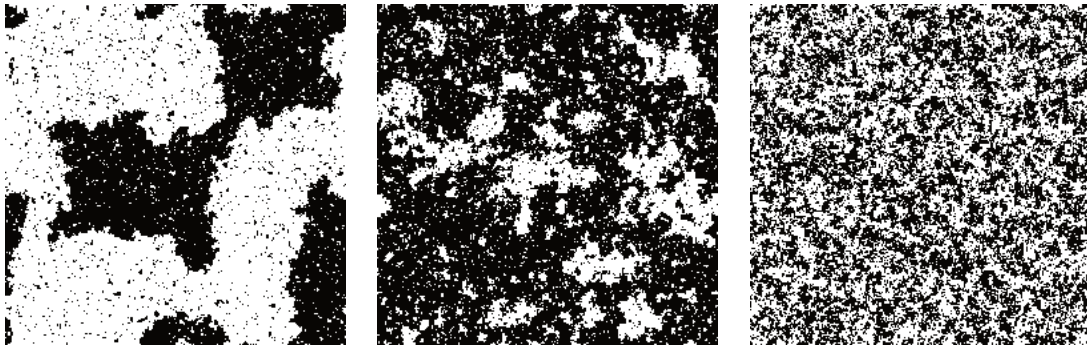
1. **Molekularna verižnica:** 17 členkov dolga nitkasta molekula je obešena za oba konca. Vsak členek se lahko povesi od ničelne lege na poljubnega od 19 nivojev in si s tem zmanjša potencialno energijo za eno enoto na nivo. Če pa s tem prenategne vezi do sosedov, plača s prožnostno energijo, ki je za vsakega sosedu enaka kvadratu razlike v nivojskem številu. Določi ravnovesno energijo v odvisnosti od temperature. Za poteze lahko uporabiš spremembo za en nivo na izbranem slučajnem mestu.

**Isingov model** feromagnetne in antiferomagnetne snovi v dveh dimenzijah v približku dveh stanj opišemo s Hamiltonovim operatorjem

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad J = \pm 1$$

kjer je  $s_i = \pm 1$  in vsota teče le po vezeh  $\langle ij \rangle$  med najbližjimi sosedi. Če ni zunanega polja ( $H = 0$ ), temperatura  $T_c$  faznega prehoda pri feromagnetu zadošča enačbi

$$\sinh \frac{2J}{k_B T_c} = 1 \quad \implies \quad T_c \approx 2.269185 \frac{J}{k_B}.$$



$T < T_c$

$T = T_c$

$T > T_c$

Obnašanje spinske mreže pri različnih temperaturah

2. Določi povprečno energijo  $\langle E \rangle$  in lastno magnetizacijo  $\langle S \rangle$  v odvisnosti od temperature.  $S = \sum_i^N s_i$  je celotna magnetizacija sistema. Oglej si tudi spinsko susceptibilnost in specifično toploto pri različnih jakostih magnetnega polja.

$$\chi = \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{N k_B T} \quad c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N k_B T^2}$$

- \* (neobvezno) Analiziraj zanesljivost Metropolisovega algoritma na **modelu trgovskega potnika**, tako da rezultate primerjaš s točnimi rezultati pri majhnem številu mest. Tablico razdalj lahko kar izžrebaš.

**9. naloga – Integracije z metodo Monte Carlo**

1. Oglej si presek treh medsebojno pravokotnih valjev z enakimi polmeri, katerih osi so poravnane s koordinatnimi osmi. Izračunaj prostornino in vztrajnostni moment dobljenega telesa,
  - če je gostota konstantna,
  - če se gostota spreminja z razdaljo od središča kot  $\rho = (1 - r/r_0)^p$  in je  $r_0$  polmer telesu očrtane krogle,  $r$  pa razdalja od središča telesa. Kakšen učinek ima vrednost parametra  $p$ ?

Oceni natančnost rezultatov.

2. V krogli se rojevajo žarki gama. Njihova povprečna prosta pot v snovi, iz katere je krogla, je enaka radiju krogle. Kolikšen delež fotonov uide iz krogle? Kako se verjetnost pobega spreminja z razmerjem povprečne proste poti in radija krogle?
  3. Model nevtronskega reflektorja: tok nevtronov vpada pravokotno na ploščo, v kateri se nevtroni sipljejo in nič ne absorbirajo, pri čemer je njihova prosta pot enaka polovici debeline plošče. V poenostavljenem modelu privzamemo, da se sipljejo samo naprej in nazaj, in to z enako verjetnostjo. Kakšna je porazdelitev po številu sipanj? Kolikšna je prepustnost reflektorja? Oceni natančnost. Nekoliko bolj realen je model z izotropnim sipanjem. Z njim preveri, koliko so rezultati poenostavljenega modela uporabni.
- \* (*neobvezno*) Določi kotno porazdelitev odbitih in prepuščenih nevtronov ter odvisnost prepustnosti od debeline plošče v modelu z izotropnim sipanjem.

## 8. naloga – Generatorji slučajnih števil

1. Med generatorji gaussovskih slučajnih števil najdemo Box-Mullerjev generator in konvolucijski generator (6 prišteti in 6 odšteti naključnih števil iz intervala  $[0, 1)$ ). Preizkusi oba generatorja s testom Kolmogorov-Smirnova ter  $\chi^2$ -testom. Izvedi teste za različne velikosti vzorcev (100, 1000, 10 000, ...) in primerjaj rezultate. Za oba primera lahko gledaš tudi porazdelitev statistike. Izmeri tudi časovno učinkovitost algoritmov.
2. Pri dipolnem sevanju porazdelitev fotonov po prostorskem kotu ni enakomerna, pač pa je sorazmerna  $\sin^2 \vartheta$ . Sestavi generator naključnih smeri v prostoru in generator dipolnega sevanja ter ju preizkusi. Namesto razdelitve v predalčke lahko spremljaš tudi nekaj osnovnih momentov, npr.  $\langle \cos \vartheta \rangle$ ,  $\langle \cos^2 \vartheta \rangle$  oziroma splošno  $\langle Y_{\ell m} \rangle$  za najnižje krogelne funkcije. S kakšno potenco padajo variacije v momentih, ko povečujemo velikost vzorca?
3. Datoteke `mod_tmxx_yyy.dat`<sup>1</sup> vsebujejo čase oddaje nalog iz Modelske analize (`xx` – letnik 10,11,13,14; `yyy` – številka naloge) v formatu `d:hh:mm`, merjeno od četrtka ob polnoči. Minus v podatkih pripada številki dneva – `-1:20:30` pomeni sredo ob pol devetih zvečer.

S testom Kolmogorov-Smirnova preveri, če so kumulativne porazdelitve za posamezne naloge med seboj statistično enake in če se letniki statistično razlikujejo med seboj. S kolikšno verjetnostjo lahko določimo iz katerega leta prihajajo podatki za izbrano nalogo? Če je potrebno, upoštevaj, da se pogoji za nekatere naloge razlikujejo (novoletni prazniki, zadnja naloga semestra, ...) in jih izloči iz statistike.

---

Za generatorje slučajnih števil lahko uporabiš in med seboj primerjaš vgrajeni generator izbranega programskega jezika, generatorje iz *Numerical Recipes* in druge, bolj sofisticirane generatorje iz numeričnih knjižnic. Preizkusiš lahko tudi druge izvore (psevdo)naključnih števil (`/dev/(u)random`, kompresija, enkripcija podatkov, statični šum, ipd.). Kot primer slabega generatorja lahko izbereš t.i. “kalkulatorski” generator:  $x_{n+1} = \{(x_n + \pi)^5\}$ , kjer  $\{ \}$  pomeni mantiso (lomljeni del) števila.

---

<sup>1</sup>Zapakirano v `mod_times.tar.gz`

## 7. naloga – Razdelčni in nelinearni modeli

1. Farmakološki model iz Naloge 6 lahko razširimo z vpeljavo novega parametra  $p$ ,

$$y = \frac{y_0 x^p}{x^p + a^p}.$$

Modelski parametri sedaj nastopajo nelinearno. Določi vrednosti parametrov  $y_0$ ,  $a$  in  $p$ . Razišči statistično upravičenost dodatnega parametra.

2. Poišči najboljšo vrednost za čistilnost ledvic iz kliničnih podatkov v datoteki `ledvice.dat` z uporabo enorazdelčnega in dvorazdelčnega modela ter primerjaj rezultate. Ali je dodatek aditivne konstante ("ozadje" pri štetju razpadov) statistično upravičen? Poskusiš lahko tudi s funkcijo  $\exp(-\lambda\sqrt{t})$ , ki jo izvedemo iz bolj zapletenih modelov.

Pri dvorazdelčnem modelu lahko za začetni približek vzameš eksponentni konstanti v razmerju 1:10.

Spremenljivka  $t$  v podatkih je čas na sredi vsakega merilnega intervala.

3. Parametre korozije določajo iz  $U$ — $I$  diagrama med kovino in korozivnim elektrolitom. Modelski nastavek lahko v najpreprostejši obliki zapišemo

$$I = I_0 \left[ \exp\left(\frac{U}{U_a}\right) - \exp\left(-\frac{U}{U_c}\right) \right].$$

Določi parametre  $I_0$ ,  $U_a$  in  $U_c$  iz meritev v tabeli. Podatki so v datoteki `korozija.txt`.

Merska napaka v toku je konstantna, napetosti privzamemo za točne. Ujemanje lahko izboljšamo, če dodamo v nastavek še popravek  $U \rightarrow (U - U_0)$ , ker meritve ne gredo točno skozi izhodišče.

---

Izmerke  $y_i$  v točkah  $x_i$  z mersko napako  $\sigma_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , želimo opisati s funkcijo

$$y = y(x, \mathbf{a}).$$

Modelske parametre  $\mathbf{a} = \{a_1, \dots, a_M\}$  določimo tako, da bo funkcional  $\chi^2$  minimalen

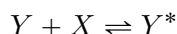
$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - y(x_i, \mathbf{a})}{\sigma_i} \right]^2.$$

Če je funkcijska zveza  $y(x_i, \mathbf{a})$  linearna v parametrih  $\mathbf{a}$ , lahko funkcional minimiziramo bodisi z reševanjem normalnega sistema, razširjenega sistema, ali uporabe katere izmed metod za računanje psevdoinverza pravokotne matrike, kot je na primer razcep *SVD*.

Splošne nelinearne probleme rešujemo z uporabo numeričnih minimizacijskih metod, od katerih je posebej robustna *Levenberg-Marquardtova metoda*. V *Numerical Recipes* je na voljo v funkciji `mrqmin`, ki kliče pomožne rutine `mrqcof`, `gaussj` in `covsrt`. V `scipy.optimize` je treba nastaviti `method='lm'`. Podobno jo lahko izberemo v Mathematici in v matlabu.

## 6. naloga – Luščenje modelskih parametrov: linearni modeli

1. V farmakologiji merijo odziv tkiv na različne reagente. Za večino teh pojavov lahko privzamemo, da gre za reakcijo, kjer spremljamo vezavo molekul reagenta  $X$  na receptorje  $Y$  v tkivu.



V stacionarnem stanju dobimo zvezo

$$y = \frac{y_0 x}{x + a},$$

kjer pomeni  $y_0$  nasičeni odziv tkiva in  $a$  koncentracijo, potrebno za odziv, ki je enak polovici nasičenega.

Iz merskih podatkov v datoteki `farmakoloski.dat`<sup>1</sup> določi parametra  $y_0$  in  $a$ . Napaka v meritvi odziva je v vsem področju enaka trem enotam. Zvezo lahko lineariziramo. Pazi, kako se pri tem transformirajo napake.

2. Podane so meritve toplotne prevodnosti jekla *Armco* v odvisnosti od temperature in moči grelca.

| $T[^\circ\text{F}]$ | $P[\text{W}]$ | $\lambda[\text{Btu/h ft } ^\circ\text{F}]$ | $T[^\circ\text{F}]$ | $P[\text{W}]$ | $\lambda[\text{Btu/h ft } ^\circ\text{F}]$ |
|---------------------|---------------|--|---------------------|---------------|--|
| 100                 | 545           | 41.60                                      | 90                  | 276           | 42.345                                     |
| 161                 | 602           | 37.7875                                    | 149                 | 275           | 39.5375                                    |
| 227                 | 538           | 36.4975                                    | 206                 | 274           | 37.3525                                    |
| 270                 | 550           | 35.785                                     | 247                 | 274           | 36.36                                      |
| 362                 | 522           | 34.53                                      | 352                 | 272           | 33.915                                     |

Merske napake rezultatov, dobljenih pri nižji moči, so 0.28 gornjih enot, tiste pri višji moči pa 0.16. Iz smiselno izbranih začetnih potenc spremenljivk  $T$  in  $P$  sestavi varčni model za meritve  $\lambda$ . Ali je model, ob privzetku gornjih napak, statistično zadosten?

3. Podrobnosti v profilu rentgenskih absorpcijskih robov so odvisne od kemijske okolice elementa. Teorijske napovedi profila še niso dovolj natančne in zanesljive, zato si pri analizah snovi pomagamo s standardi. V datoteki `CdL3_linfit.norm` so zbrani 4 absorpcijski spektri kadmija na robu  $L_3$  iz študije, kako ta kovina učinkuje na rastline. V prvih dveh vzorcih so izolirane celične stene iz krovne plasti in iz sredice listov rastline *C. Thlaspi*, ki je znan hiperakumulator težkih kovin. Zadnja dva spektra sta dobljena na standardih, kompleksih Cd sulfata z glutationom (GSH) in pektinom: v prvem je Cd vezan izključno na žveplo, v drugem na kisik. V listnih vzorcih dopuščamo obe vrsti vezave, vemo pa, da sta prispevka obeh v spektru linearno sestavljena. Določi odstotno razmerje vezi Cd—O in Cd—S v obeh listnih vzorcih.

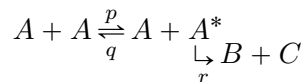
---

<sup>1</sup><http://predmeti.fmf.uni-lj.si/modelska/podatki/>



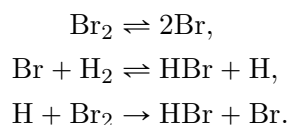
## 5. naloga – Modeli kemijskih reakcij

1. Za model **binarne reakcije**



kjer je  $q/p = 1000$ , integriraj sistem eksaktno in v aproksimaciji stacionarnega stanja za  $r/qA(0) = 10, 1, 0.1$ !

2. Model reakcije  $H_2 + Br_2 \rightleftharpoons 2HBr$  vključuje naslednje stopnje:

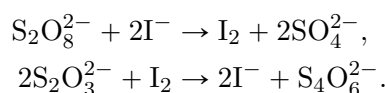


Določi izraz za hitrost reakcije (npr.  $[HBr]$ ) v aproksimaciji stacionarnega stanja in primerjaj z empiričnim izrazom

$$[HBr] = \frac{k[H_2][Br_2]^{1/2}}{m + \frac{[HBr]}{[Br_2]}}.$$

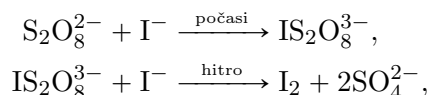
Kako bi najlažje izmeril empirični konstanti  $k$  in  $m$ ? Skiciraj časovne poteke za  $[H_2]/[Br_2] = 100, 1, 0.01$  v začetnem stanju pri  $m = 2.5$ . Ali kaj pomaga, če že v začetno stanje primešamo mnogo  $HBr$ ?

3. **Kemijske ure** so reakcije, ki stečejo s predvidljivim in ponavadi ostrim časovnim zamikom. Primer take reakcije je *jodova ura*, ki v eni izmed izvedb temelji na ravnotežju naslednjih reakcij:

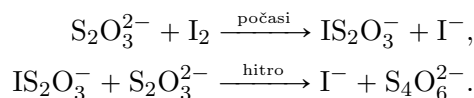


Druga reakcija je bistveno hitrejša od prve, mehanizem merjenja časa pa je enakomerno porabljanje tiosulfata  $S_2O_3^{2-}$ . Če je persulfat  $S_2O_8^{2-}$  v prebitku, lahko za aktivne spremenljivke vzamemo le  $[I^-]$ ,  $[I_2]$  in  $[S_2O_3^{2-}]$ .

Obe zgornji reakciji sta v resnici sosledji dveh binarnih reakcij preko kratkoživega prehodnega stanja. Prva reakcija je sestavljena iz stopenj



druga pa iz stopenj



V približku stacionarnega stanja izpelji kinetični zvezi za obe glavni reakciji. Razišči potek celotne reakcije in odvisnost trajanja reakcije od začetne koncentracije tiosulfata. Za razmerje hitrosti glavnih reakcij vzemi  $\lambda = 1, 10, 100$ .

#### 4. naloga – Populacijski modeli

1. Preuči standardni standardni deterministični **model zajci-lisice** v obliki

$$\begin{aligned}\dot{Z} &= \alpha Z - \beta ZL, \\ \dot{L} &= -\gamma L + \delta ZL.\end{aligned}$$

- Nariši in preišči fazni diagram (brezdimenzijska oblika, zastojne točke, stabilnost ...).
- Oglej si obhodne dobe v odvisnosti od začetnega stanja. Zadošča, da preiščeš stanja, v katerih ima ena komponenta ravnovesno vrednost.

2. Analiziraj fazni portret za **populacijski model laserja** s konstantnim črpanjem.

$$\begin{aligned}\dot{f} &= -Bf + Daf, \\ \dot{a} &= -Ca - Eaf + Q\end{aligned}$$

Določi ravnovesno stanje v odvisnosti od moči črpanja. Kako se s tem parametrom spreminjata frekvenca in karakteristični čas relaksacijskih oscilacij?

3. **Model epidemije:** populacijo razdelimo v tri razrede: (D) zdravi in dovzetni, (B) bolni in kliconosni, (I) imuni: nedovzetni in nekliconosni. Bolezen se širi s stiki med zdravimi in bolnimi. Bolnik preide s konstantno verjetnostjo med imune (ozdravi ali umre).

$$\begin{aligned}\dot{D} &= -\alpha DB \\ \dot{B} &= +\alpha DB - \beta B \\ \dot{I} &= \beta B\end{aligned}$$

V epidemiji nas zanima njen vrh (maksimalno trenutno število obolelih), čas nastopa maksimuma in celotno število obolelih. S cepljenjem lahko vnaprej preselimo določen del populacije med imune. Kako vpliva delež cepljenih na parametre epidemije? Kako se spremeni potek epidemije, če obolele razdeliš na več razredov?

---

Sklopljen sistem linearnih enačb prvega reda  $\dot{y}_i(x) = f_i(x, y_1, \dots, y_N)$  lahko rešujemo s programom `rk4` iz zbirke *Numerical Recipes*, ki uporablja metodo Runge-Kutta 4. reda. V zbirki *GSL* integratorje najdemo v modulu `gsl_odeiv.h`, v Pythonu pa v modulu `scipy.integrate`, kjer ustvarite objekt razreda `ode` in mu tip integratorja nastavite z metodo `set_integrator`.

### 3. naloga – Numerična minimizacija

1. Thomsonov problem: na prevodno kroglo nanesemo  $N$  enakih (klasičnih) nabojev. Kako se razmestijo po površini? Zahtevamo seveda minimum elektrostatične energije. Uporabi katero od minimizacijskih metod, npr. Powellovo ali  $n$ -dimenzionalni simpleks (amebo).
2. Problem optimalne vožnje skozi semafor, ki smo ga spoznali pri nalogi 1, lahko rešujemo tudi z numerično minimizacijo, če časovno skalo diskretiziramo.

Lagrangianu  $\int (dv/dt)^2 dt - \lambda \int v dt$  lahko dodamo omejitev hitrosti v obliki členov  $\exp(\beta(u - u_{\text{lim}}))$ , če hočemo (približno) zagotoviti  $u \leq u_{\text{lim}}$ . Izpolnitev pogoja je toliko ostrejša, kolikor večji  $\beta$  vzamemo. Poskusiš lahko tudi druge omejitvene funkcije, na primer kakšno funkcijo s polom.

Za iskanje Lagrangeovega multiplikatorja lahko uporabiš bisekcijo ali kakšno drugo vgrajeno metodo za iskanje ničel na funkciji  $l(\lambda) = \int v(\lambda, t) dt$ , kjer je  $v(\lambda, t)$  rezultat minimizacije.

---

**Nelinearna minimizacija:** Iščemo minimum funkcije  $f(\vec{r})$  več neodvisnih spremenljivk, ki jih združimo v vektor  $\vec{r}$ . Po najpreprostejši zamisli zaporedoma minimiziramo funkcijo po vsaki spremenljivki, vendar ta postopek praviloma zelo počasi konvergira. Rajši uporabimo bolj zahtevne, vendar hitrejše postopke. Zavedati se moramo, da so koordinate minimalne točke po katerikoli metodi določene samo z natančnostjo  $\sqrt{\epsilon}$ , če je  $\epsilon$  relativna natančnost podajanja vrednosti funkcije  $f$ .

Kratka referenca metod iz *Numerical Recipes*:

- Podprogram `amoeba` implementira Nelder-Mead algoritem. Je preprost za uporabo, zahteva samo podprogram `func` za izračun funkcije  $f$ , je zelo robusten, vendar tudi počasen in približen. Načeloma ga lahko uporabimo tudi za negladke funkcije. Temelji na krčenju hipertetraedra (simpleksa), s katerim objamemo minimum, na področje z velikostjo tolerance.
- Podprogram `powell` predpostavlja zveznost minimizacijske funkcije in terja celo vrsto spremljevalnih procedur (po vrsti najprej minimizacijsko funkcijo `func`, nato `linmin` za 1D minimizacijo, ta pa `f1dim` in `brent`). Metoda določi konjugirane smeri v prostoru, nato pa vzdolž njih ujame minimum. Zato najde rezultat zelo natančno in hitro.
- Še nekoliko hitrejše metode, na primer metodo konjugiranih gradientov Fletcher-Reeves-Polak-Ribiere (`frprmn`) ali metodo s spremenljivo metriko Davidon-Fletcher-Powell (`dfpmin`), uporabimo, kadar lahko podamo tudi odvode funkcije, ki jo minimiziramo. Delujejo podobno Newtonovi metodi za iskanje ničel funkcije.

V zbirki *GSL* je podoben nabor minimizacijskih metod na voljo v modulu `gsl_multimin.h`, v Pythonu pa v modulu `scipy.optimize` s funkcijo `minimize(method='Nelder-Mead'|'Powell'|...)`.

## 2. naloga – Linearno programiranje

Med tipične primere, ki jih lahko učinkovito rešimo z metodami linearnega programiranja, sodi sestavljanje diet za hujšanje, zdravljenje ali športne aktivnosti. Za dani nabor živil določamo njihove količine, pri čemer moramo zadostiti različnim omejitvam. Med drugim moramo zagotoviti priporočene dnevne odmerke mineralov, vitaminov in hranilnih snovi, omejiti pri vnos maščob, ogljikovih hidratov ter telesu škodljivih snovi, hkrati pa zagotoviti, da energijska vrednost ustreza zahtevam posameznika. Vnos vsake izmed hranilnih snovi je linearna funkcija količin živil in je natanko določena z njihovo sestavo. Od vrste diete pa je odvisno, katere parametre omejimo in katere minimiziramo.

1. Datoteka `tabela-zivil.dat` na strani <http://predmeti.fmf.uni-lj.si/modelska/podatki> vsebuje podatke o energijski vrednosti ter vsebnosti maščob, ogljikovih hidratov, proteinov, kalcija in železa v nekaj živilih. Minimiziraj število kalorij, če je priporočen minimalni dnevni vnos 70 g maščob, 310 g ogljikovih hidratov, 50 g proteinov, 1000 mg kalcija ter 18 mg železa. Upoštevaj tudi, da naj dnevni obroki količinsko ne presežejo dveh kilogramov hrane.

Upoštevate lahko še minimalne vnose za vitamin C (60 mg), kalij (3500 mg) in natrij (2400 mg), ki so tudi na voljo v tabeli.

2. Kako se rezultat razlikuje, če zahtevamo minimalno 2000 kcal in namesto energije minimiziramo vnos maščob?
3. Ker rešujemo poenostavljen problem z malo parametri na živilo, so lahko rezultati nerealistični. Lahko z omejitvijo količine posameznih živil v obroku izboljšaš uravnovešenost prehrane?

\* (neobvezno) Poišči cene živil in poskusi namesto kalorij minimizirati ceno. Kako se varčevanje odraža na zdravi prehrani?

---

**Linearno programiranje:** Linearni optimizacijski problem formuliramo kot optimizacijo funkcije

$$f(x_j) = \sum_j a_{0j}x_j = \text{ekstrem}$$

pod pogoji

$$\sum_j a_{ij}x_j \begin{cases} = \\ \leq \\ \geq \end{cases} b_i.$$

Iskane spremenljivke  $x_j$  so v večini paketov privzeto omejene na pozitivne vrednosti.

Rutine za linearno programiranje so v različnih zbirkah med drugim na voljo pod imeni `simplex` (*Numerical Recipes*), `LinearProgramming` (*Mathematica*), `linprog` (*matlab*) in v knjižnici *GLPK*, ki pride tudi s samostojnim programom `glpsol`. Slednji sprejema vrsto različnih formatov za deklaracijo linearnih problemov (na primer `CPLEX LP`).

MODELSKA ANALIZA I  
2016/17

**1. naloga – Model vožnje skozi semafor: variacijska metoda**

Varčno vožnjo lahko definiramo s pogojem, da je pospeševanja in zaviranja čim manj. To lahko dosežemo z minimizacijo kumulativnega kvadrata pospeška. Iščemo optimalni režim vožnje v situaciji, ko poskušamo razdaljo do semaforja prevoziti ravno v trenutku, ko se prižge zelena luč.

1. Prepiši problem v brezdimenzijsko obliko.
2. Variacijski račun daje možnost, da določimo ekstrem tudi brez (enega) robnega pogoja: temu je ekvivalentna zahteva  $d\mathcal{L}/dy = 0$  v drugi robni točki. Kakšna je torej optimalna vožnja pri poljubni končni hitrosti?
3. Kaj dajejo še druge možnosti izbire funkcionala, na primer višje potence absolutne vrednosti pospeška? Zanimiv praktični pomen ima limita, ko gre eksponent proti neskončnosti.
4. Kakšna je pa optimalna vožnja, če poleg pospeška tudi velikost hitrosti omejimo s kvadratičnim členom v funkcionalu? Koliko je zdaj prostih parametrov problema?
5. Zanimiv problem je tudi iskanje periodične rešitve, kjer mora biti končna hitrost enaka začetni. Razišči dobljeno družino rešitev. Kako bi zagotovil zveznost pospeška na periodičnem stiku?