Computational Physics, Aufgabenblatt 9

Kevin Sedlaczek, Mona Kalthoff

Abgabe: 30. Juni 2017

1 Minimierung in 2D

Zunächst soll die Funktion

$$g(\vec{x}) = x^2 + y^2 + x^2 y^2 \tag{1}$$

betrachtet werden, und ein Minimum dieser Funktion in einer Richtung \vec{p} gefunden werden. Dazu werden zunächst drei Startpunkte \vec{x}_0 , \vec{y}_0 und \vec{z}_0 benötigt, die auf der Geraden $\vec{x}_0 + \lambda \cdot p$ liegen, und die die Eigenschaften

- 1. $g(\vec{x}_0) > g(\vec{y}_0)$
- 2. $q(\vec{z}_0) > q(\vec{y}_0)$

aufweisen. Um passende Startwerte zu finden wird so vorgegangen:

- 1. Der Funktion wird ein \vec{x} übergeben, welches als \vec{x}_0 gesetzt wird.
- 2. $\vec{y_0}$ wird auf $\vec{x_0} + \frac{\vec{p}}{|p|}$ gesetzt, und es wird überprüft ob der Funktionswert bei $\vec{y_0}$ größer oder kleiner als bei $\vec{x_0}$ ist. Ist der Wert bei $\vec{y_0}$ größer wird in $-\vec{p}$ Richtung nach einem $\vec{z_0}$ gesucht, dass die oben genannte Bedingung erfüllt. Ist der wert bei $\vec{x_0}$ größer wird in die entgegengesetzte Richtung gesucht.
- 3. In jedem Fall ist wichtig, den Fall abzudecken, in dem die Funktion von oben asymptotisch gegen einen Konstanten Wert geht. In dem Fall kann eventuell in der zunächst eingeschlagenen Richtung kein $\vec{z_0}$ gefunden werden, welches die Bedingungen erfüllt, und es muss in die andere Richtung gesucht werden, auch wenn es dort zunächst bergan geht.
- 4. Die Schrittweite darf nicht zu groß gewählt werden, da lokale Minima sonst leicht überrannt werden. Wir entscheiden uns für den normierten \vec{p} -Vektor.

Sind drei passende Startwerte gefunden, kann die Funktion **Intervallhalbierung** angewandt werden, die jeweils einen der drei Punkte aktualisiert und das Intervall so verkleinert, ohne dass die oben genannten Bedingungen durch die neuen Punkte verletzt werden. Die Iteration wird abgebrochen, wenn sich der Funktionswert bei \vec{x} und \vec{y} um weniger als $eps = 1 \cdot 10^{-12}$ ist.

In **Aufgabenteil a)** wird für den Startwert $\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und den Startvektor $\vec{p} = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$ mittels

dieser Methode ein Minimum bei $\vec{x}_{\min} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ gefunden, wobei $F(\vec{x}_{\min}) = 0$ ist. Für den Startwert $\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ und den gleichen Startvektor $\vec{p} = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$ wird ein Minimum bei $\vec{x}_{\min} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ mit $F(\vec{x}_{\min}) = 1$ gefunden.

In Augabenteil b) wird zunächst die Methode SteepestDescent implementiert, bei der die Suchrichtungen alterniert werden, und ausgehend von einem \vec{x}_0 immer so lange in Richtung des negativen Gradienten (also steilsten Abfalls) gesucht, bis dort ein Minimum erreicht ist und dann der Suchvektor auf den Gradienten in diesem Punkt gesetzt, bis sich die Minima nur noch um weniger als $eps = 1 \cdot 10^{-12}$ unterscheiden. Die gefundenen Minima der Funktion g(x) sind in Abhängigleit des Startwertes in 1 aufgeführt. Das analytisch berechnete Minimum liegt bei $\vec{x}_{\min} = (0,0)^T$ und beträgt $F(\vec{x}_{\min}) = 0$, die gefundenen Minima der Funktion weisen also eine quadratisch geringere Abweichung vom tatsächlichen Wert auf als der Ort des Minimums. Dies ist darauf zurückzuführen, dass es sich um ein quadratisches Minimum handelt. Die Zahl bei Richtungswechsel gibt an, wie häufig die Richtung gewechselt werden muss, bevor Konvergenz vorliegt. Beim zweiten Startwert zeigt sich, dass diese Zahl sehr hoch sein kann wenn \vec{x}_0 ungünstig liegt, da bei Steepest Descent immer rechtwinklig abgebogen wird.

Tabelle 1: Mit **Steepest Descent** berechnete Minima der Funktion g(x) in Abhängigkeit des Startwertes

	$\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 100 \\ 80 \end{pmatrix}$	$\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 100 \\ 100 \end{pmatrix}$
$ec{x}_{ ext{min}}$	$ \begin{pmatrix} -1.35059 \cdot 10^{-07} \\ -1.4418 \cdot 10^{-07} \end{pmatrix} $	$ \begin{pmatrix} -1.4279 \cdot 10^{-07} \\ 3.38513 \cdot 10^{-07} \end{pmatrix} $	$\begin{pmatrix} 2.11799 \cdot 10^{-07} \\ -1.60692 \cdot 10^{-07} \end{pmatrix}$
$g\left(ec{x}_{\min} ight)$	$3.9029 \cdot 10^{-14}$	$1.3498 \cdot 10^{-13}$	$7.06809 \cdot 10^{-14}$
Richtungswechsel	5	313	3

Tabelle 2: Mit Konjugierte Gradienten berechnete Minima der Funktion g(x) in Abhängigkeit des Startwertes

	$\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 1.5\\0 \end{pmatrix}$	$\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 100 \\ 80 \end{pmatrix}$	$\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 100 \\ 100 \end{pmatrix}$
$ec{x}_{ ext{min}}$	$ \begin{pmatrix} -3.35122 \cdot 10^{-7} \\ -2.62414 \cdot 10^{-7} \end{pmatrix} $	$ \begin{pmatrix} 7.19307 \cdot 10^{-8} \\ 4.25424 \cdot 10^{-8} \end{pmatrix} $	$ \begin{pmatrix} 2.11799 \cdot 10^{-7} \\ -1.60692 \cdot 10^{-7} \end{pmatrix} $
$g\left(ec{x}_{\min} ight)$	$1.81168 \cdot 10^{-13}$	$6.98387 \cdot 10^{-15}$	$7.06809 \cdot 10^{-14}$
Richtungswechsel	9	7	3

In Taufgabenteil c) wurden die Minima mittels des konjugierten Gradientenverfahrens berechnet. Nun stehen aufeinander folgende Suchrichtungen nicht mehr zwangsläufig senkrecht aufeinander. Die Ergebnisse sind in Tabelle 2 aufgeführt. Dabei wird deutlich dass die Abweichungen der berechneten Minima sich in der gleichen Größenordnung befinden wie die Minima im Steepest Descent-Verfahren, aber weniger Richtungswechsel notwendig sind um Konvergenz zu erreichen. Dies ist vor allem dann relevant, wenn der Startpunkt weit vom Minimum entfernt ist.

Zuletzt wird in Aufgabenteil d) die Minima der Funktion

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{1 + \frac{e^{-10(xy-3)^2}}{x^2 + y^2}}$$
 (2)

berechnet. Es werden die Startwerte

$$\vec{x}_0 = \left\{ \begin{pmatrix} 1.5\\ 2.3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1.7\\ -1.9 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0.5\\ 0.6 \end{pmatrix} \right\} \tag{3}$$

gewählt und sowohl Steepest Descent als auch Konjugierte Gradienten angewandt. Jeweils führt ausschließlich der erste Startwert zu einem Ergebnis, da die Funktion offensichtlich so flach verläuft, dass der Gradient bei den anderen beiden Startwerten bereits zu Anfang innerhalb der Maschinengenauigkeit Null wird. Für den ersten Startwert liefern die beiden Verfahren die in Tabelle 3 aufgeführten Werte. Die berechneten Minima stimmen näherungsweise überein, jedoch benötigt das Steepest Descent Verfahren mehr als 10-mal so viele Richtungswechel wie die Konjugierten Gradienten. Es bleibt festzuhalten dass beide Verfahren ungeeignet sind, wenn die Funktion deren Minima bestimmt werden soll über weite Teile extrem flach verläuft. Die Existenz weiterer Minima kann in keinem Fall ausgeschlossen werden, beide Verfahren finden ausschließlich lokale Minima.

Tabelle 3: Mit Konjugierte Gradienten und Steepest Descent berechnetes Minimum der Funktion g(x) in für den Startwert $\vec{x}_0 = (1.5, 2.3)^T$

Steepest Descent		Konjugierte Gradienten	
$ec{x}_{ ext{min}}$	$\begin{pmatrix} 1.72695 \\ 1.72745 \end{pmatrix}$	$\binom{1.72721}{1.7272}$	
$F\left(ec{x}_{\min} ight)$	0.8568	0.8568	
Richtungswechsel	153	15	

2 Sanfte Landung

Auf das Raumschiff wirken zwei Kräfte. Einmal die Gravitationskraft, welche gegeben ist durch

$$\frac{\vec{F}_G}{m_R} = -G \cdot \frac{m_E \cdot \vec{r}}{|\vec{r}|^3} \tag{4}$$

und die Kraft durch den Luftwiderstand

$$\frac{\vec{F}_L}{m_R} = -\frac{C_W \cdot A \cdot \rho(h) \cdot |\vec{v}|}{2 \cdot m_R} \cdot \vec{v} \,. \tag{5}$$

Als Konstanten werden die Werte

$$A = 10 m$$
 (Querschnittsfläche des Raumschiffes) (6)

$$m_R = 10000 \, kg \quad \text{(Masse des Raumschiffes)}$$
 (7)

$$m_E = 5.97 \cdot 10^{24} \, kg \quad \text{(Masse der Erde)} \tag{8}$$

$$G = 6.67 \cdot 10^{-11} \frac{m^3}{kq \cdot s} \quad \text{(Gravitationskonstante)}$$
 (9)

$$R_E RDE = 6370000 m$$
 (Radius der Erde) (10)

$$r_0 = R_{ERDE} + 13000 \, m \quad \text{(Ausgangs position in x-Richtung)}$$
 (11)

in den oben genannten Einheiten gewählt. Dann haben wir einen Runge Kutta-Algorithmus 4. Ordnung implementiert, welcher im wesentlichen analog zu dem auf Blatt 3 arbeitet, jedoch die Bewegungsgleichung lediglich so lange integriert, bis der Abstand des Raumschiffes zum Erdmittelpunkt dem Erdradius entspricht. Dann gibt die Funktion den Endvektor zurück. Die Funktionen v_vert und v_norm berechnen für diesen Endvektor jeweils die Vertikalkomponente bzw. die Norm der Geschwindigkeit. v_vert nutzt dabei aus, dass die Vertikalkomponente der Geschwindigkeit gegeben ist durch die Projektion, also das Skalarpodukt, des Geschwindigkeitsvektors auf den normierten Ortsvektor des Raumschiffes. Es werden zwei verschiedene Luftwiderstandsbeiwerte $C_W = 0.2$ und $C_W = 0.1$ untersucht. Die Endgeschwindigkeiten in Abhängigkeit der Ausgangsgeschwindigkeit sind in Abbildung 1 dargestellt. Dabei werden lediglich Ausgangsgeschwindigkeiten untersucht, welche langsamer sind als die Geschwindigkeit $v_0 = 7800 \, \frac{m}{s}$ vor dem Bremsmanöver. Es ist bereits an der Grafik zu erkennen, dass alle Funktionen auf diesem Intervall Minima aufweisen, welche nicht in den Randpunkten liegen, jedoch ausschließlich die Norm der Geschwindigkeit mit dem Luftwiderstandsbeiwert C = 0.1 ein Maximum aufweist, welches nicht bei $v_0 = 0 \, \frac{m}{s}$ liegt.

Zur Bestimmung der Minima und Maxima wird analog zu Blatt 8 die Methode der Intervallhalbierung verwendet, wobei hier lediglich eine eindimensionale Suche notwendig ist. Da außerdem ein Festes Intervall $v_0 \in [0,7800]$ vorliegt, können diese Rand für x_0 und z_0 gewählt werden, und es muss lediglich ein dritter Ausgangspunkt y_0 gefunden werden, dessen Funktionswert kleiner als der der anderen beiden Startwerte ist. Da an Abbildung 1 zu sehen ist, dass die Minima und Maxima, wenn sie denn dann existieren, relativ breit sind wird nach diesem Ausgangswert mit einer vergleichsweise großen Schrittweite von $10 \frac{m}{s}$ gesucht. Die Ergebnisse sind in Abhängigkeit der Schrittweite des Runge-Kutta-Verfahrens in Tabelle 4 dargestellt. Da die kleinere Schrittweite sehr lange Rechenzeiten benötigte haben wir keine kleineren Schrittweiten untersucht. Es ist auffällig, dass die Abweichungen der Startgeschwindigkeiten, für die die Aufschlagsgeschwindigkeit minimal wird, deutlich von einander abweichen, die eigentlichen Geschwindigkeiten beim Aufschlag jedoch relativ geringe Abweichungen von einander zeigen. Die Maxima der Funktionen wurden berechnet indem das Minimum der negativen Funktion gesucht wurde, wir haben also $\operatorname{Max}(f(x)) = \operatorname{Min}(-f(x))$ ausgenutzt. Wegen der langen Rechenzeit haben wir hier außerdem

nur h=0.01 untersucht. Wie schon an der Grafik abgelesen findet auch das Verfahren der Intervallhalbierung das Maximum für alle Funktionen außer v_norm mit $C_w=0.1$ im Randpunkt $v_0=0$. Für v_{norm} mit $C_w=0.1$ liegt das Maximum bei 2271.69 $\frac{m}{s}$ und beträgt 1132.16 $\frac{m}{s}$.

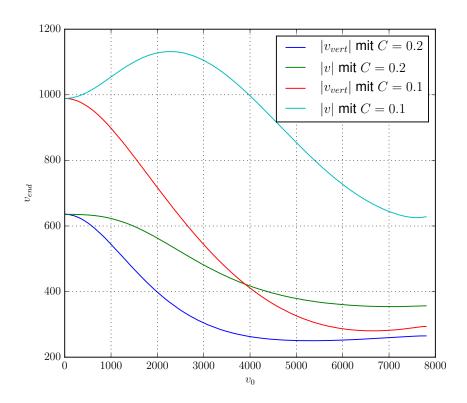


Abbildung 1: Norm und Vertikalkomponente der Geschwindigkeit zum Zeitpunkt des Aufschlagens der Rettungskapsel auf der Erdoberfläche, berechnet mit einem Runge-Kutta-Algorithmus der Schrittweite h=0.01.

Tabelle 4: Minima in Abhängigkeit der Schrittweiten

	h = 0.01	h = 0.01	h = 0.001	h = 0.001
	Minimum	Minimale	Minimum	Minimale
	v_0	Endgeschwindigkeit	v_0	Endgeschwindigkeit
		v_{end}		v_{end}
$\begin{vmatrix} v_{vert} \\ C_W = 0.2 \end{vmatrix}$	$5283.59 \frac{m}{s}$	$250.182 \frac{m}{s}$	$5307.52 \frac{m}{s}$	$250.192 \frac{m}{s}$
$ v_{norm} $ $C_W = 0.2$	$7071.1 \frac{m}{s}$	$354.078 \frac{m}{s}$	$7052.08 \frac{m}{s}$	$354.149 \frac{m}{s}$
$\begin{vmatrix} v_{vert} \\ C_W = 0.1 \end{vmatrix}$	$6635.11 \frac{m}{s}$	$280.334 \frac{m}{s}$	$6650.48 \frac{m}{s}$	$280.345 \frac{m}{s}$
$\begin{vmatrix} v_{norm} \end{vmatrix}$ $C_W = 0.1$	$7641.66 \frac{m}{s}$	$625.392 \frac{m}{s}$	$7603.11 \frac{m}{s}$	$625.469 \frac{m}{s}$