



## Modelska Analiza 1

3. naloga

Luka Papež  
28221030

# 1 Naloga - Numerična minimizacija

- Thomsonov problem:** Na prevodno kroglo nanesemo  $N$  enakih (klasičnih) nabojev. Kako se razmestijo po površini? Zahtevamo seveda minimum elektrostatične energije. Primerjaj učinkovitost in natančnost za različne minimizacijske metode, npr. Powellovo ali  $n$ -dimenzionalni simpleks (amebo oz. Nelder–Mead).
- Problem optimalne vožnje skozi semafor:** Problem, ki smo ga spoznali pri nalogi 1, lahko rešujemo tudi z numerično minimizacijo, če časovno skalo diskretiziramo.

Lagrangejanu

$$\int \left( \frac{dv}{dt} \right)^2 dt - \lambda \int v dt$$

lahko dodamo omejitve hitrosti v obliki členov

$$e^{\beta(u-u_{\lim})},$$

če hočemo (približno) zagotoviti  $u \leq u_{\lim}$ . Izpolnitev pogoja je toliko ostrejša, kolikor večji  $\beta$  vzamemo. Poskusil 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 pri izbranem  $\lambda$ . V tem primeru je enakost izpolnjena eksaktno.

## 2 Thomsonov problem

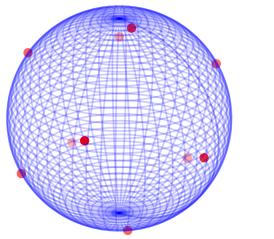
Kot že opisano v nalogi rešujemo Thomsonov problem, pri katerem iščemo minimum elektrostatične energije glede na razporeditev nabojev na sferi. Za problem imamo  $3N$  parameterov z  $N$  vezmi

$$x_n^2 + y_n^2 + z_n^2 = 1,$$

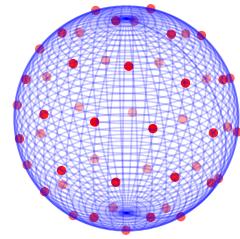
kjer so  $x_n$ ,  $y_n$  in  $z_n$  koordinate  $n$ -tega elektrona. Definiramo še elektrostatično energijo v sistemu

$$E = \sum_{i,j} E_{i,j} = \sum_{i,j > i} \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 \|r_i - r_j\|}.$$

Tak problem minimizacije lahko rešimo z metodo SLSQP, ki je na voljo pod funkcijo `scipy.optimize.minimize`.



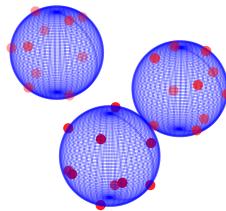
(a) 10 elektronov.



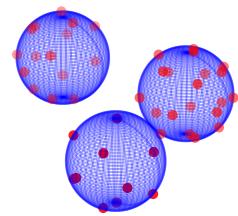
(b) 50 elektronov.

Slika 1: Porazdelitev elektronov na sferi za 10 in 50 elektronov.

Na sliki 1 je razvidno, da algoritem elektrone razporedi po celotni sferi čim bolj homogeno, kar pričakovano predstavlja minimum energije. V nadaljevanju lahko problem še razširimo tako, da v problem uvedemo več krogel in na vsako postavimo določeno število elektronov.



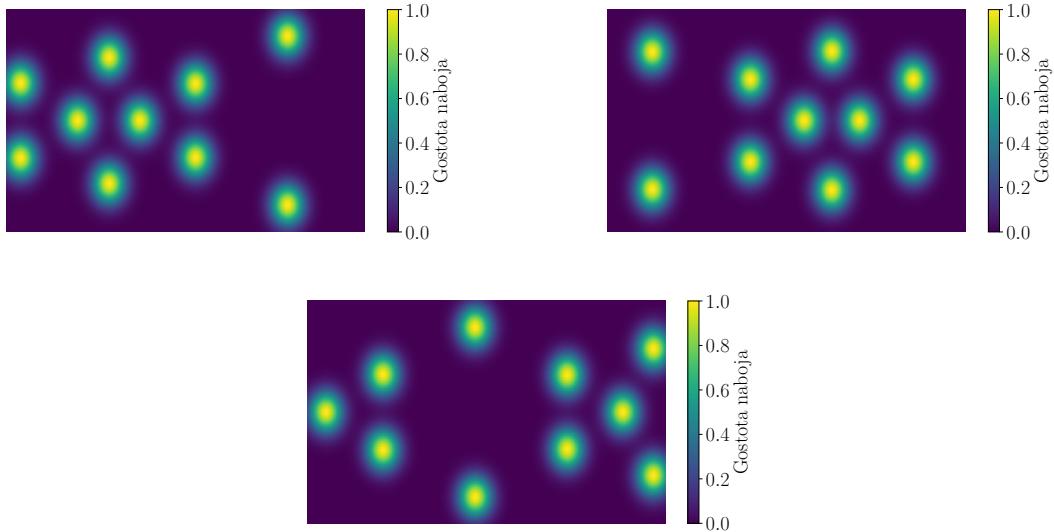
(a) Sfere z 10 elektroni.



(b) Sfere z 10, 15 in 20 elektroni.

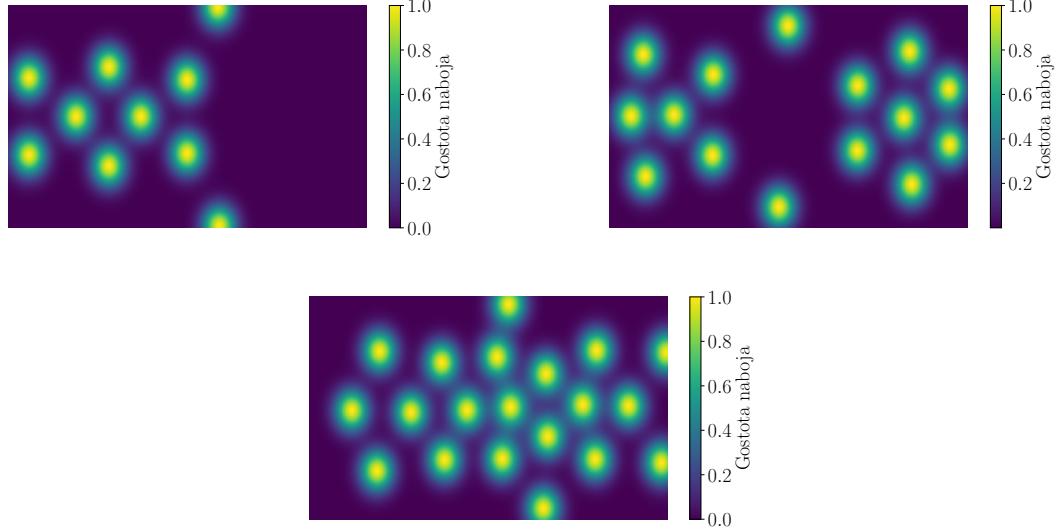
Slika 2: Porazdelitev elektronov na treh enako oddaljenih sferah.

Na sliki 2 tako dobimo razporeditev elektronov na večih sferah. A iz trenutne vizualizacije ne razberemo prav veliko zato projeciramo površino vsake izmed sfer v dve dimenziji in pogledamo razporeditev elektronov. V primeru, kjer imajo vse sfere enako število elektronov na sliki 3, je na vseh sferah enak vzorec, ki je le rahlo zamaknjen glede na relativno pozicijo na drugi dve sferi. Torej v smeri, ki je obrnjena proti drugima dvema sferama se ustvari nekakšna ‘vrzel’ na površini. Na nasprotni strani pa se ustvari vzorec, kjer sta dva elektrona obkrožena s šestimi.



Slika 3: Porazdelitev elektronov na projekcij površin treh enako oddaljenih sfer, kjer imajo vse sfere 10 elektronov.

Na sferah z različnim številom elektronov na sliki 4 so rezultati precej bolj zanimivi. V primeru z 10 elektronov se jasno razbere lok elektronov, ki gre čez ‘pola’ sfere. Pričakovano glede na najmanjše število elektronov pa je ‘vrzel’ elektronov na tej sferi največja. Na sferi s 15 elektronimi je vzorec precej podoben tistemu, ki je nastal v primeru z enakim številom elektronov. Pri sferi z 20 elektronimi pa je ‘vrzel’ elektronov zelo majhna in elektroni razporedijo po večini površine. To je pričakovano, saj je sfera z največ elektronimi tudi energijsko najdražja.



Slika 4: Porazdelitev elektronov na projekcij površin treh enako oddaljenih sfer, kjer imajo sfere 10, 15 in 20 elektronov.

Za primerjavo Powellove in Nelder-Mead minimizacijske metode potrebujemo problem rahlo prepisati, saj ti dve metodi ne podpirata vezi. Koordinate na sferi lahko zapišemo kot

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi, \\y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\z &= r \cos \theta.\end{aligned}$$

Z uporabo prej definiranih vezi radius fiksiramo na  $r = 1$  in tako zmanjšamo število parameterov iz  $3N$  na  $2N$ . Kljub zmanjšanemu številu parametrov pa ta sprememba ni preveč ugodna, saj se računanje elektrostatične energije precej upočasni, zaradi počasnosti operacij sin in cos. Namesto, da ponovimo že rešeno nalogu lahko metodi primerjamo na primeru vijačnice z obročem, ki jo parametriziramo s sledečim

$$\begin{aligned}x &= \cos t + R \cos \phi \cos t - \frac{R}{\sqrt{2}} \sin \phi \sin t, \\y &= \sin t + R \cos \phi \sin t + \frac{R}{\sqrt{2}} \sin \phi \cos t, \\z &= t - \frac{R}{\sqrt{2}} \sin \phi.\end{aligned}$$

Podobno kot pri sferi tudi pri vijačnici z obročem fiksiramo  $R = 0.1$  in imamo  $2N$  parametrov. Da se vijačnica ne nadaljuje v neskončnost imamo dve možnosti pri računanju energije. Ena možnost je, da parameter  $t$  moduliramo po željeni dolžini. Druga možnost pa je, da izven dovoljenih vrednosti energijo nastavimo na neskončno in se tako algoritem izogne tem vrednostim.

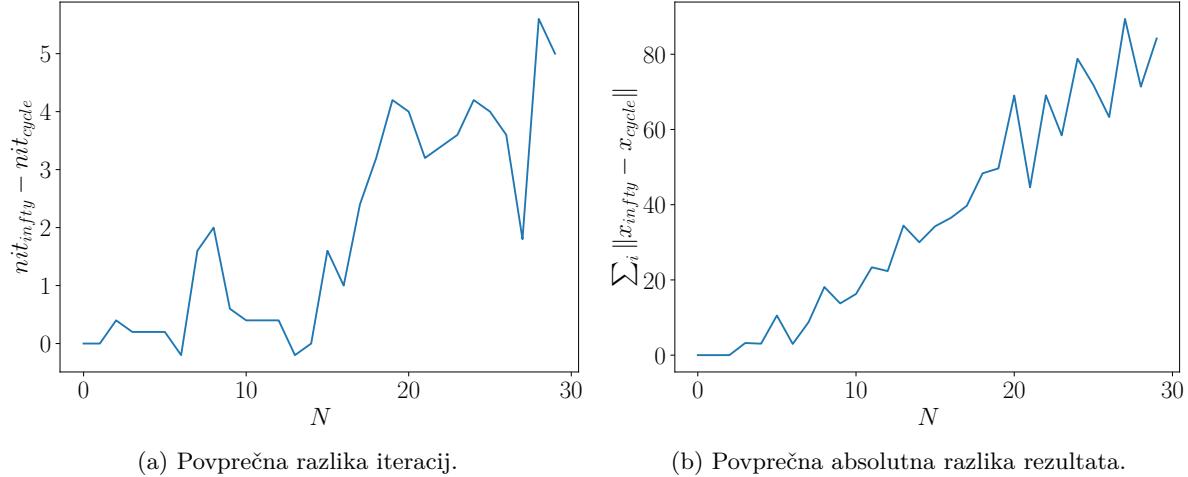


(a) Neskončna energija izven veljavnega območja parameterja  $t$ .

(b) Cikličen parameter  $t$ .

Slika 5: Porazdelitev 30 elektronov na spirali z različnima pristopoma do omejitve parameterja  $t$ .

Na sliki 5 rezultata izgledata precej podobno in ne opazimo večjih razlik. A po bolj podrobni analizi na sliki 6 opazimo, da to ni popolnoma res. Presenetljivo metoda s cikličnostjo potrebuje manj iteracij, da pride do zadovoljive rešitve. Pričakovali bi ravno obratno, saj z neskončno energijo domeno omejimo na manjše območje. Vsota razlik pa se linearno dviguje, to lahko pojasnimo s tem, da za vsak parameter zahtevamo natančnost  $\epsilon$ . Število parametrov pa narašča linearno v odvisnosti od števila elektronov in se tako odvisnost prenese.

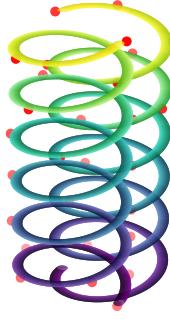


(a) Povprečna razlika iteracij.

(b) Povprečna absolutna razlika rezultata.

Slika 6: Povprečje petih razlik med rezultati metode Powell v odvisnosti od števila elektronov pri uporabi neskončne energije in cikličnosti za omejitev parameterja  $t$ .

Še ena možnost, ki se nam ponuja s cikličnostjo je, da ko parameter  $t$  preide izven dovoljenega območja ga prenesemo na drugo vijačnico z obročem. Slika 7 predstavlja ta rezultat.



Slika 7: Rezultat za dve vijačnici, kjer elektroni na njunem koncu preidejo na drugo.

Spiralo smo začeli risati zato, da bi lahko primerjali medtod **Powell** in **Nelder-Mead**, a kot se je izkazalo na sliki 8 metoda **Nelder-Mead** deluje veliko slabše in počasnejše od metode **Powell**. Za eno vijačnico z obročem metoda vedno uspešno konča, a je tudi ta uspeh precej daleč od idealnega. Pri dveh vijačnicah z obročem pa neuspeh in uspeh izgledata precej bolj podobno kot bi pričakovana rešitev. S tem lahko zaključimo, da je metoda **Powell** za naš problem precej boljša.



(a) Dve vijačnici z obročem ob uspešnem koncu.



(b) Dve vijačnici z obročem ob neuspešnem koncu.



(c) Vijačnica z obročem ob uspešnem koncu.

Slika 8: Rezultati metode Nelder-Mead.

### 3 Optimalna vožnja čez semafor

Problem optimalne vožnje enako kot v prvi nalogi formuliramo z naslednjo funkcijo in vezjo

$$\mathcal{L} = \int_0^1 (\dot{v}^2 - \lambda v) dt \quad 1 = \int_0^1 v dt,$$

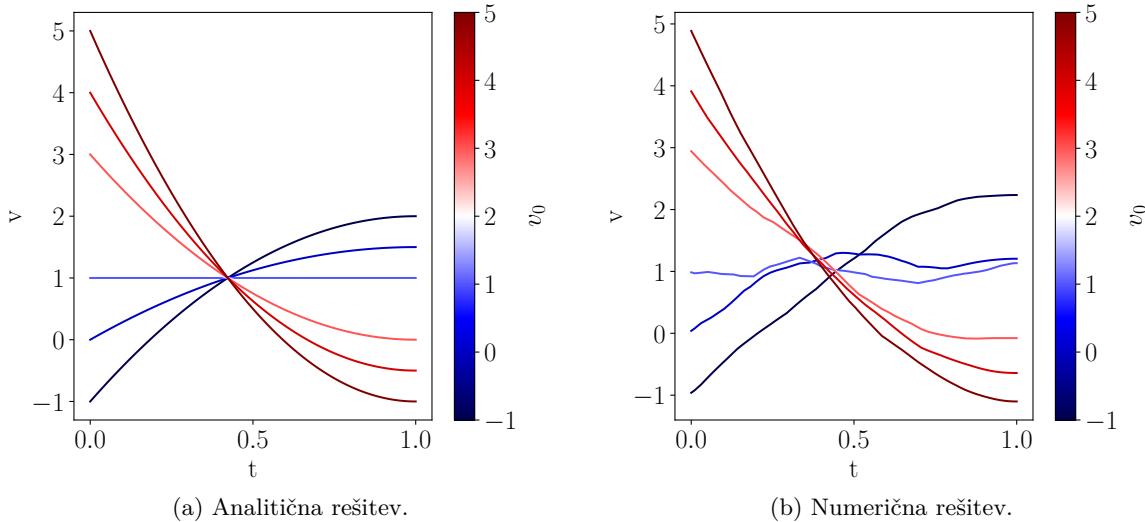
kjer funkcijo  $\mathcal{L}$  minimiziramo. Parametri našega reševanja so hitrost ob različnih časih  $v(t_1), v(t_2) \dots v(t_n)$ . Našo minimizacijsko funkcijo tako prepisemo v diskretno obliko

$$\mathcal{L} = \sum_{i=0}^{n-1} \left( \left( \frac{v_{i+1} - v_i}{dt} \right)^2 - \lambda v_i \right) dt.$$

Da zadostimo vezi pa poiščemo Lagrangeev multiplikator  $\lambda$  z bisekcijo tako, da velja

$$1 = \sum_{i=0}^n v_i dt.$$

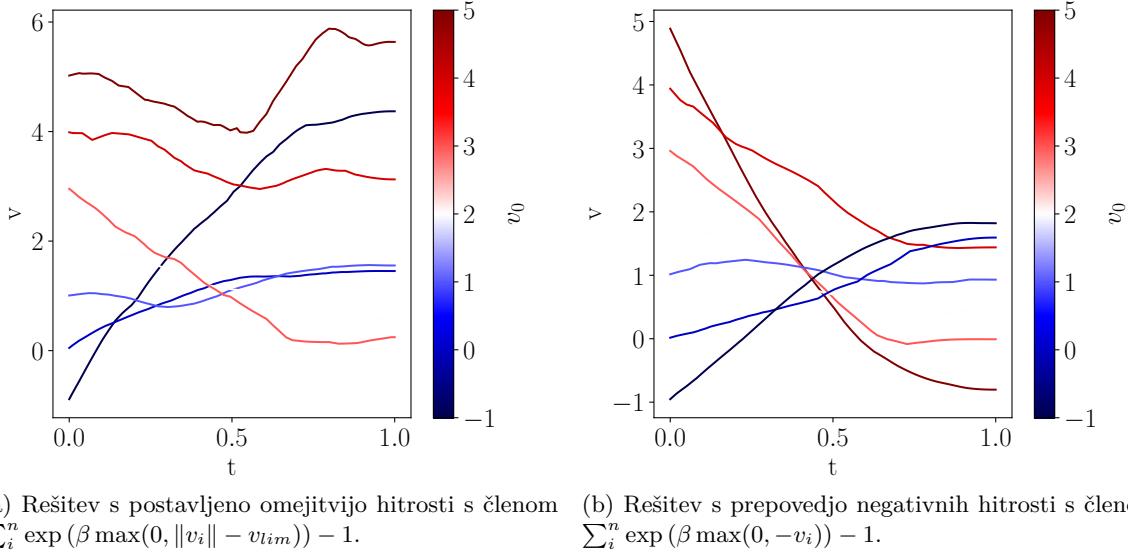
Numerično reševanje na tak način vrne rešitve, ki se približno ujemajo z analitičnimi rešitvami izračunanimi v prvi nalogi. Kot je razvidno na sliki 9 pa je numerična rešitev na veliko točkah rahlo preolomljena kar je posledica premalo kosov časovnega intervala, katerih je bilo v tem primeru 100.



Slika 9: Rešitev problema optimalne vožnje.

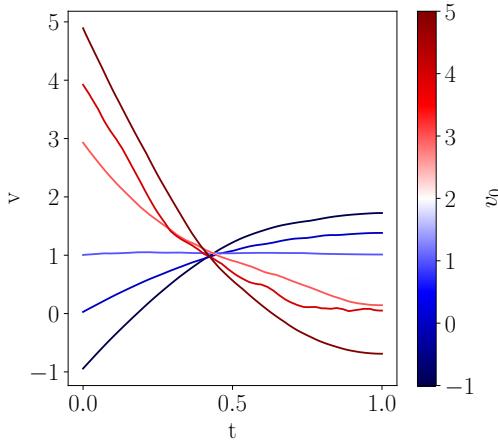
Pri reševanju omejimo še hitrost s členom v funkciji  $\mathcal{L}$  in sicer  $\sum_i^n \exp(\beta \max(0, \|v_i\| - v_{lim})) - 1$ . S čemer poskrbimo, da je funkcija  $\mathcal{L}$  za zelo velike presežke hitrosti tudi zelo velika in zato algoritom izključi rešitve, ki presežejo omejitve. Spomnimo se še, da so rešitve, ki imajo v zadnjem delu negativno hitrost neveljavne, saj ne moremo zapeljati čez semafor in se vrniti ob zeleni luči. Zato lahko alternativno uvedemo člen  $\sum_i^n \exp(\beta \max(0, -v_i)) - 1$ . S tem podobno kot prej dosežemo, da kaznujemo negativne hitrosti in se jim izognemo.

Na sliki 10a, kjer postavimo omejitev hitrosti nam pokaže slabosti takega reševanja. Začetne hitrosti višje od 3 so namreč popolnoma neveljavne rešitve, ki precej prehitro preidejo semafor. Razlog za to leži v tem, da se algoritem za minimizacijo zaradi zelo velikih vrednosti zatakne v lokalnem minimumu in posledično tudi algoritem za bisekcijo s spremenjanjem  $\lambda$  slabo vpliva na vrednost celotne funkcije in tako ne more najti optimuma. Pri reševanju za prepoved negativnih hitrosti na sliki 10b smo to dosegli oziroma skoraj dosegli za vse primere razen  $v_0 = 5$ . A smo podobno kot prej se zataknili v lokalnem minimumu in s tem izgubili pravilnost rešitev.



Slika 10: Rešitev problema optimalne vožnje skozi semafor z dodatnimi členi kot omejitvami.

Reševanje z bisekcijo je precej neučinkovito zato se ji z dodatnim členom lahko poskusimo izogniti. Ta člen sestavimo sledeče  $\exp(\beta((1 - (0.5v_0 + 0.5v_n + \sum_i^{n-1} v_i)dt)^2))$ .



Slika 11: Rešitev problema optimalne vožnje skozi semafor z razdaljo določeno s členom  $\exp(\beta((0.5v_0 + 0.5v_n + \sum_i^{n-1} v_i)dt)^2)$ .

Tako smo na sliki 11 dobili precej podobne rešitve analitičnim. V tabeli 1 preverimo za koliko razdalja odstopa od zahtevane (zahtevamo razdaljo 1). Pričakovano omejitev s tem členom najbolje deluje za začetno hitrost  $v_0 = 1$ , ki mora glede na analitično rešitev ostati enaka čez celotno vožnjo. V splošnem pa odstopanje narašča glede na oddaljenost od te idealne začetne hitrosti.

$v_0$	$1 - (0.5v_0 + 0.5v_n + \sum_i^{n-1} v_i)dt$
-1	0.110
0	0.061
1	-0.033
2	-0.064
3	-0.104
4	-0.144
5	-0.146

Tabela 1: Odstopanje od pričakovane razdalje glede na začetno hitrost  $v_0$ .

## 4 Zaključek

V tej nalogi smo se spoznali z numeričnim reševanjem nelinearnih problemov. Najprej smo si pogledali minimizacijo elektrostatične energije na sferi in vijačnici z obročem. Nato smo se vrnili k problemu iz prve naloge in si pogledali še kako lahko tak problem rešimo numerično namesto analitično. Na podlagi te naloge smo spoznali tudi kako zadostiti vezem z bisekcijo in dodajanjem členov kot kazni v funkcijo, ki jo minimiziramo.