TK 3 Anum
Optimisasi: Teori dan Aplikasi

Aktivitas 1: Implementasi (20 poin)

Pada aktivitas ini, Anda diminta mengimplementasikan tiga buah metode optimisasi:

- Metode Newton
- Metode Steepest Descent
- Metode Quasi-Newton SR-1.

Metode Newton menerima masukan berupa fungsi f yang ingin diminimalkan, fungsi turunan pertama ∇f, dan juga fungsi Hessian H_f. Metode Steepest Descent dan Quasi-Newton SR-1 masing-masing menerima masukan berupa fungsi f yang ingin diminimalkan dan fungsi turunan pertama ∇f yang ingin diminimalkan, dan untuk menentukan besar langkah α di setiap iterasi gunakan Armijo Backtracking Line Search. Pastikan di dalam implementasi masing-masing method, pengguna dapat menspesifikasi besar konstanta toleransi TOL yang digunakan untuk *stopping criterion* $||\nabla f(x)|| < \text{TOL}$. Perhatikan baik-baik detail implementasi Anda agar algoritma dijalankan dengan efisien, misalnya:

1. Jika butuh menggunakan SPL $Ax = b$, gunakan operasi MATLAB $A\backslash b$
2. Hitung perhitungan matriks dengan matriks/vektor yang tidak perlu; misalnya perhitungan B_k secara eksplisit dalam metode SR-1 tidak pernah dilakukan secara eksplisit karena yang diperlukan adalah p_k-nya saja.

Anda boleh mempelajari implementasi yang ada di internet, namun pastikan bahwa Anda memahami implementasi ketiga algoritma di atas dengan baik sesuai dengan permintaan tugas ini. Jangan lupa cantumkan sumber yang membantu Anda belajar. Jelaskan pula hal-hal baru yang Anda pelajari dari implementasi fungsi di atas.

Aktivitas 2: Eksperimen Teoretis (20 poin)

Pada aktivitas ini, Anda diminta membandingkan kinerja masing-masing metode optimisasi di atas untuk beberapa fungsi tes optimisasi berikut. Optimisasi merupakan topik riset yang selalu aktif karena diaplikasikan di banyak bidang. Untuk itu beberapa fungsi matematis didesain untuk melakukan *benchmarking* metode-metode optimisasi. Contoh-contoh fungsi yang digunakan untuk optimisasi di antaranya dapat ditemukan di halaman ini.

ACKLEY FUNCTION

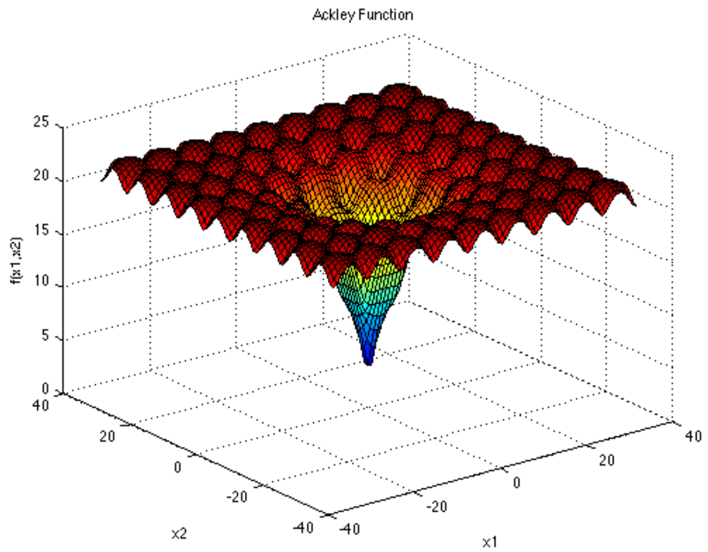
Rumus

$$f(\boldsymbol{x}) = -20\exp\left(-0.2\sqrt{\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} x_i^2}\right) - \exp\left(\frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}\cos(2x_i\pi)\right) + 20 + \exp(1)$$

Dimensi:

d. Ambil $d = 2, 8, 32$.

Visualisasi untuk $d = 2$:



Domain tes:

$x_i \in [-30,30]$ untuk $i = 1, \dots, d$

Minimum global:

$f(\boldsymbol{x}^*) = 0$ saat $\boldsymbol{x}^* = 0$

Periksa apakah masing-masing fungsi di atas konvergen ke minimum global atau tidak untuk berbagai tebakan awal. Anda bisa memilih berbagai kombinasi tebakan awal untuk setiap variabel $x_i \in [a, b]$ dengan $x_i \in \{a, a+h, \dots, a+(n-1)h, b\}$ dengan $h = (b-a)/n$, di mana $n = 20$. Pilih nilai TOL yang cukup baik agar masing-masing method bekerja (jika memungkinkan). Kemudian, bandingkan waktu yang dibutuhkan oleh masing-masing metode optimisasi untuk mencapai konvergensi.

Aktivitas 3: Eksperimen Aplikatif (20 poin)

Fungsi sederhana yang digunakan untuk mendeskripsikan energi potensial antara dua buah atom, diajukan pada tahun 1924, adalah fungsi potensial Lennard-Jones

$$U(r) = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right),$$

di mana $r > 0$ adalah jarak kedua atom dan ε maupun r tergantung pada jenis atom yang berkaitan.

Aktivitas 3.1. (5 poin)

a. Secara matematis, tentukan $r_{\min}$, yaitu nilai r yang membuat U minimal. Nyatakan jawaban Anda dalam σ dan r.
b. Tentukan energi minimum $E_{\min} = U(r_{\min})$ yang mungkin dimiliki oleh kedua atom. Nyatakan jawaban Anda dalam σ dan r.
c. Tunjukkan bahwa U dapat ditulis ulang sebagai

$$U(r) = -E_{\min}\left(\left(\frac{r_{\min}}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_{\min}}{r}\right)^{6}\right).$$

Berdasarkan Aktivitas 1.c., kita dapat melakukan *scaling* pada permasalahan kita dengan mengasumsikan $E_{\min} = -1, r_{\min} = 1$ sehingga sekarang fungsi potensial Lennard-Jones untuk dua atom kita tuliskan sebagai

$$U(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^{6}}.$$

Dalam bidang Molecular Science, atom biasanya dimodelkan sebagai sebuah titik pada ruang tiga-dimensi (x, y, z). Dengan demikian, jika kita memiliki dua buah atom yang berada pada (x_i, y_i, z_i) dan (x_j, y_j, z_j), jarak kedua atom dapat dihitung dengan rumus

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}.$$

Tanpa mengurangi keumuman, karena simetri pada ruang, kita asumsikan atom pertama berada pada posisi $(0,0,0)$ dan atom kedua berada sumbu-z, yaitu pada posisi $(0,0,x_3)$, sementara itu $n-2$ atom lainnya berada pada posisi yang ditentukan oleh $3n-6$ variabel (x_i, y_i, z_i) untuk $i = 3, \dots, n$. $(*)$

Lebih jauh, energi potensial Lennard-Jones untuk n buah atom dihitung dengan menjumlahkan energi potensial Lennard-Jones setiap dua atom:

$$U(\text{atoms}) = \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}^{12}} - \frac{2}{r_{ij}^{6}}.$$

Dengan model ini, posisi ekuilibrium tiga buah atom, yaitu posisi ketiga atom yang meminimalkan energi, adalah saat ketiga atom ini membentuk segitiga sama-sisi dengan panjang sisi 1 dan nilai engeri minimumnya adalah $(-1) + (-1) + (-1) = -3$. Posisi ekuilibrium empat buah atom akan berbentuk limas segitiga sama sisi yang panjang setiap rusuknya sama yaitu 1. Posisi ekuilibrium $n \geq 5$ atom tidak *obvious* dan sulit dideskripsikan sehingga perlu menggunakan metode numerik. Halaman berikut memberikan deskripsi posisi ekuilibrium hingga 150 atom berdasarkan fungsi energi potensial Lennard Jones (namun, tanpa asumsi $(*)$ di atas).

Kelompok Anda diminta mengerjakan aktivitas berikut dengan:

- $n = 5$ jika kelompok Anda terdiri dari 3 anggota atau kurang (atau ada anggota yang tidak kontributif)
- $n = 6$ jika kelompok Anda terdiri dari 4 anggota.

Aktivitas 3.2. (15 poin)
Pada aktivitas ini, Anda diminta melakukan optimisasi numerik dengan metode Newton untuk mencari posisi ekuilibrium dari n atom. Ingat bahwa pada permasalahan ini Anda diminta untuk mengasumsikan atom pertama pada titik $(0,0,0)$ dan atom kedua pada titik $(0,0,z_2)$.

a. Berikan setidaknya sebuah tebakan awal metode Newton yang konvergen ke titik yang menghasilkan energi potensial Lennard-Jones minimum lokal. Justifikasi dengan matriks Hessian bahwa memang ia minimum lokal. Tampilkan hasilnya dan visualisaikan hasil setiap iterasi. Gunakan *command* sphere dan surf pada MATLAB / Octave untuk membantu visualisasi.
b. Apakah hasil pada metode (a) menghasilkan minimum global? Jika ya, bagaimana cara Anda memverifikasinya? Jika tidak, bagaimana strategi Anda untuk mendapatkan hasil iterasinya menghasilkan minimum global?
c. Berikan beberapa contoh tebakan awal metode Newton yang tidak konvergen ke global optimum dengan berbagai alasan. Berikut adalah beberapa contoh alasan tidak konvergennya iterasi ke titik yang menghasilkan global:
   - Nilai TOL yang terlalu kecil / *strict*. Ini bisa diperbaiki dengan membuat TOL sedikit lebih rileks.
   - Terjebak pada titik minimum lokal, namun bukan minimum global.
   - Terjebak pada titik stasioner lain yang bukan minimum lokal.

Molecular science merupakan bidang yang sedang hangat dan akan menjadi sasaran empuk bagi Anda yang memiliki pemahaman tentang optimisasi; dengan model-model energi yang lebih realistis. Salah satu permasalahan penting di bidang ini adalah *protein folding problem*. Protein Data Bank (PDB) https://www.rcsb.org/ memberikan akses ke data dan literatur yang akan membantu Anda memulai langkah untuk riset dalam topik ini.

Selamat Mengerjakan