

# 3. naloga - Numerična minimizacija

Matic Debeljak

19. oktober 2020

## 1 Naloga

1. Thomsonov problem: na prevodno kroglo naneseemo  $N$  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).
2. Problem optimalne vožnje skozi semafor, ki smo ga spoznali pri nalogi 1, lahko rešujemo tudi z numerično minimizacijo, če časovno skalo diskretiziramo.

## 2 Rezultati

### 2.1 Thomsonov problem

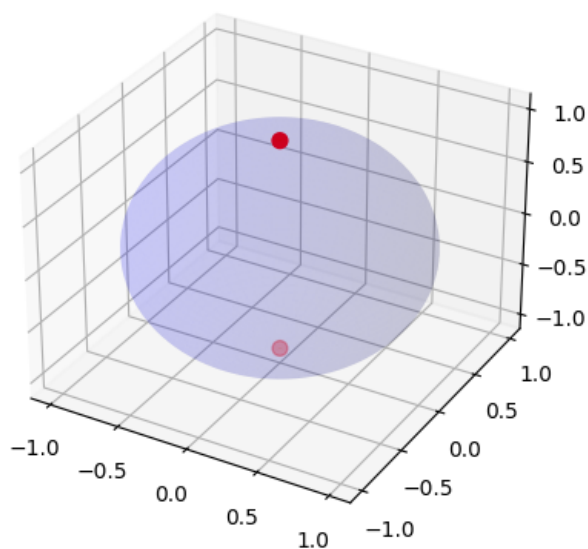
Reševanja sem se lotil z amebo ter Powellovo metodo. Obe metodi sta mi dali podobne rezultate. Ker se rezultati praktično ne razlikujejo bom prikazal samo rezultate, ki sem jih dobil z amebo, v kasnejšem delu poročila pa bom predstavil še kje se te metodi razlikujeta in zakaj verjamem, da ameba deluje bolje kot Powellova metoda.

### 2.1.1 Ameba

Rezultate bom predstavil za različna števila ( $N$ ) elektronov na krogli. Program je torej reševal minimizacijski problem za  $2(N - 1)$  spremenljivk, saj sem en elektron fiksiral. Pri vseh primerih sem rezultate zaokrožil na največ 3 decimalke zaradi lažje preglednosti.

- $N = 2$

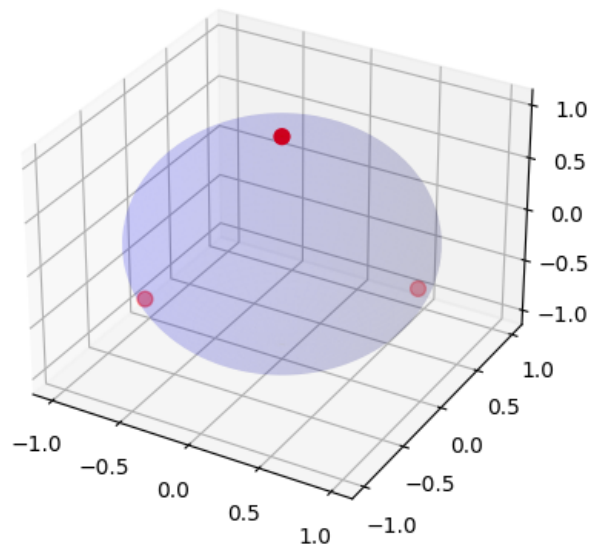
Problem dveh elektronov je dokaj preprost, pričakujemo, da bosta elektrona ravno na nasprotni strani krogle in to nam potrdi tudi program. Elektronom določi koordinate  $T_1 = (0.0, 0.0, 1.0)$  in  $T_2 = (0.0, 0.0, -1.0)$ .



Slika 1: Grafična predstavitev rešitve Thomsonovega problema za  $N = 2$

- $N = 3$

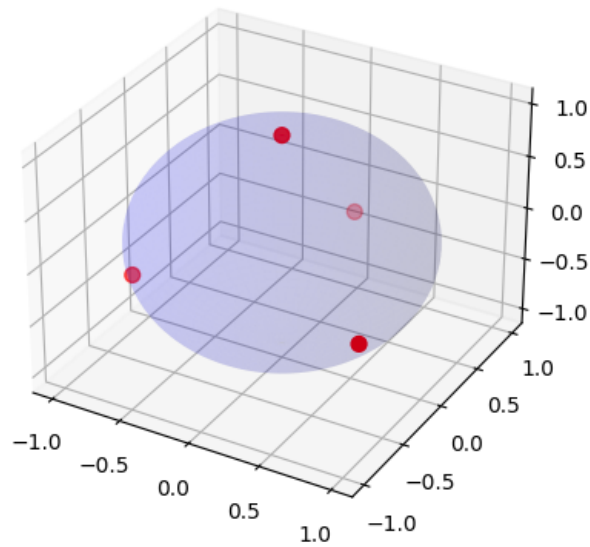
Pri treh elektronih problem postane že težji a vseno pričakujemo, da bo vsak elektron zasedel eno oglišče trikotnika. Program določi koordinate:  $T_1 = (0.0, 0.0, 1.0)$ ,  $T_2 = (0.716, 0.487, -0.5)$  in  $T_3 = (-0.716, -0.487, -0.5)$ .



Slika 2: Grafična predstavitev rešitve Thomsonovega problema za  $N = 3$

- $N = 4$

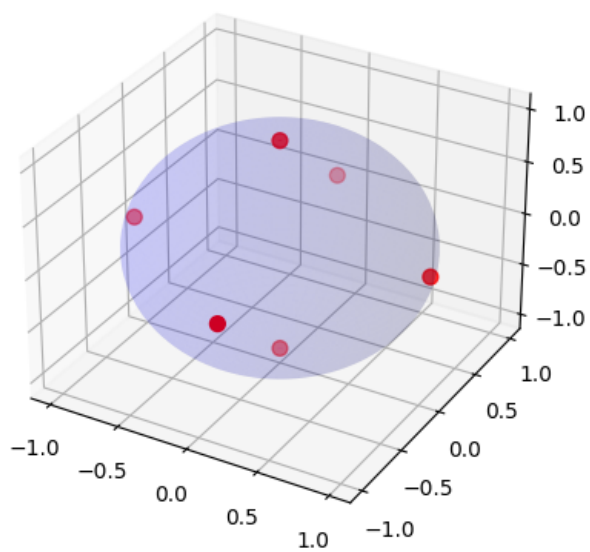
Problem pri večjih  $N$  jih postane težko predstavljiv in osebno si sam težko predstavljam kako naj bi se elektroni razporedili, da bodo zagotovili pogoju minimizacije energije. Predstavljive so zgolj oblike ki jih poznamo že od prej kot je naprimer tetraeder, ki se ga spomnimo iz oblike molekul pri kemiji. Tak rezultat nam da tudi naš program, ki je grafično prikazan na sliki 3.



Slika 3: Grafična predstavitev rešitve Thomsonovega problema za  $N = 8$

- $N = 6$

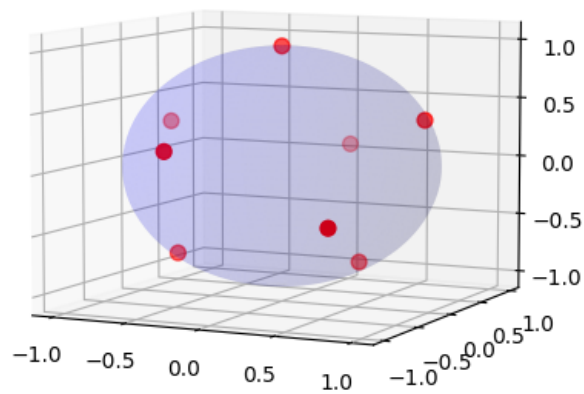
Pri šestih elektronih za rešitev dobimo tudi že iz kemije znano obliko in sicer bipiramidalno.



Slika 4: Grafična predstavitev rešitve Thomsonovega problema za  $N = 6$

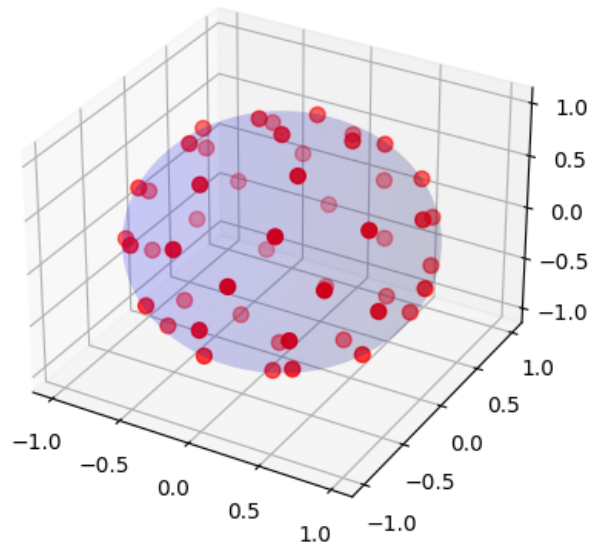
- $N = 8$

Zanimiv primer je tudi 8 elektronov, kjer bi morda pričakovali, da se bodo elektroni razporedili v oglišča kocke, a temu ni tako.



Slika 5: Grafična predstavitev rešitve Thomsonovega problema za  $N = 8$

- $N = 50$  Primeri z večjimi  $N$ ji so zelo nepredstavljeni, prav tako si ne moremo pomagati z nobeno znano obliko. Zato bom prikzal samo še rešitev za  $N = 50$ .



Slika 6: Grafična predstavitev rešitve Thomsonovega problema za  $N = 50$

Pri primerih z obvladljivimi številom elektronov ( $N < 10$ ) lahko opazimo, da če seštejmo vektorje, ki določajo pozicijo elektronov dobimo vektor  $VSOTA = (\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3)$ , kjer so  $\epsilon_i$  majhna števila ( $< 0.01$ ) v velikih primerih celo enaka 0. Fizikalno to pomeni, da ta krogla nima električnega dipolnega momenta, kar se zdi tudi smiselno. Do majhnih napak ( $\epsilon_i$ ) prihaja, saj uporabljamo program za numerično iskanje ekstremov, ki ni eksakten. Z naraščanjem števila elektronov se napaka povečuje ( $N = 17$ :  $VSOTA = (0.028, -0.019, 0.068)$ ,  $N = 50$ :  $VSOTA = (-0.461, 0.921, 0.154)$ ).

### 2.1.2 Ameba in Povellova metoda

Kot sem že omenil sem ocenil, da ameba deluje bolje kot Povellova metoda, to sem določil s premerjavo dolžine vektorjev VSOTA pri obeh metodah. Npr. pri  $N = 6$ :

VSOTA	ameba	Powell
x	$3.1 * 10^{-5}$	$7.1 * 10^{-3}$
y	$-2.8 * 10^{-5}$	$11.1 * 10^{-3}$
z	$-1.2 * 10^{-5}$	$-1.3 * 10^{-3}$
dolžina	$4.3 * 10^{-5}$	$13.2 * 10^{-3}$

Vredno pa je omeniti, da je metodi ameba natančnost hitreje padala z naraščanjem števila elektronov kot Povellovi metodi. Torej je metoda ameba bolje delovala pri manjših  $N$ ih ( $N < 15$ ), v vmesnem območju ( $N \approx 20$ ) sta imeli približno enako napako. Pri večjih številih elektronov, pa je bolje delovala Povellova metoda, a ker so nas zanimali predvsem manjši  $N$ ji, kjer smo si lahko rešitev tudi predstavljali sem delal večinoma z metodo ameba. Še ena pomembna lastnost algoritmov je njihova hitrost in to je še ena kategorija v kateri je zmagala Povellova metoda, saj je bila veliko hitrejša sploh z večanjem  $N$ .

## 2.2 Vožnja skozi semafor

Spomnimo se, da smo pri prvi nalogi minimizirali kvadrat pospeška, če želimo uporabiti numerično minimizacijo, moramo sedaj ta problem diskretizirati:

$$\frac{dv}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{v_i - v_{i-1}}{\Delta t}$$

Integral nadomestimo s trapezno formulo:

$$F = \frac{1}{2} \left( \frac{v_0 - v_{-1}}{\Delta t} \right)^2 + \left( \frac{v_1 - v_0}{\Delta t} \right)^2 + \dots + \frac{1}{2} \left( \frac{v_n - v_{n-1}}{\Delta t} \right)^2$$

Seveda pa moramo upoštevati tudi pogoj, da do semaforja pridemo ravno v času ko se prižge zelena luč:

$$\left( \frac{1}{2}v_0 + v_1 + v_2 + \dots + \frac{1}{2}v_n \right) \Delta t L \quad (1)$$

Pogoje v okviru minimizacije upoštevamo z dodajanjem nove funkcije in nato minimiziramo vsote vseh funkcij. Enačbo (1) sem upošteval tako da sem dodal funkcijo:

$$F_1 = 1 + e^{\kappa_1 \left( \frac{1}{2}v_0 + v_1 + v_2 + \dots + \frac{1}{2}v_n - \frac{L}{\Delta t} \right)}, \quad (2)$$

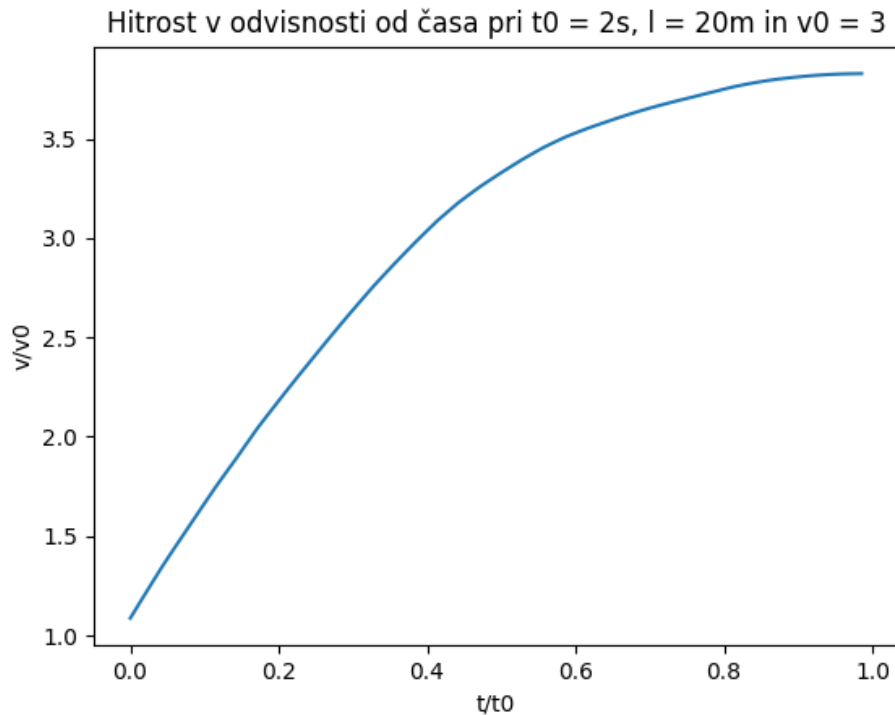


kjer je  $\kappa_1$  koeficient, ki določa koliko "kaznujemo", da voznik prevozi rdečo luč. Enačba (2) upošteva samo dejstvo, da ne želimo prevoziti rdeče luči, ne upošteva pa dejstva, da želimo do semaforja priti ravno v času ko se prižge zelena luč, to dosežemo z dodatkom nove funkcije:

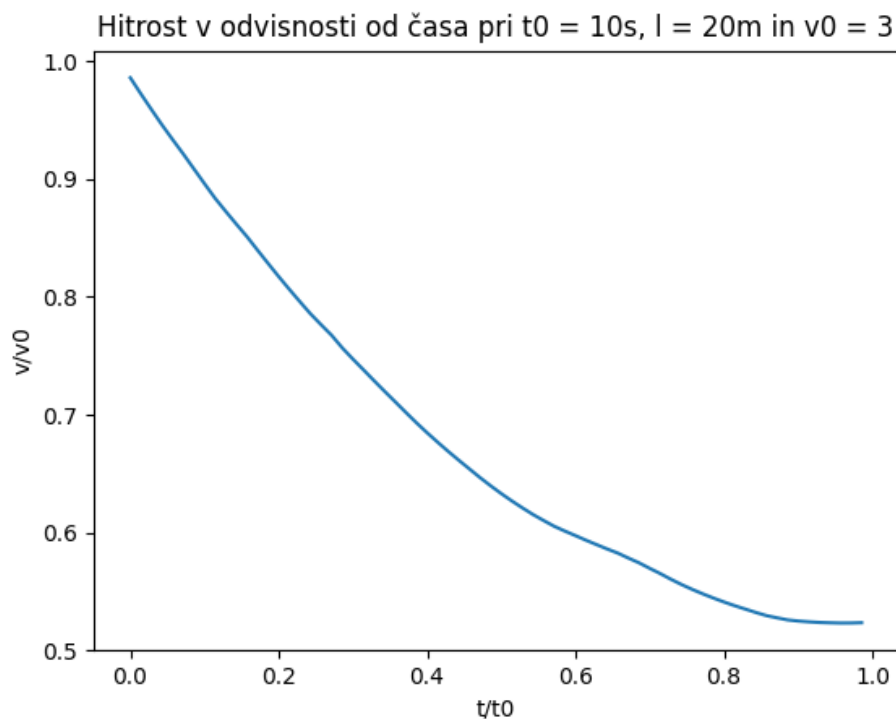
$$F_1 = 1 + e^{\kappa_2 \left( \frac{L}{\Delta t} - \left( \frac{1}{2}v_0 + v_1 + v_2 + \dots + \frac{1}{2}v_n \right) \right)}, \quad (3)$$

kjer je  $\kappa_2$  koeficient, ki določa koliko "kaznujemo", da voznik zamudi začetek zelene luči, logično je, da je  $\kappa_2 < \kappa_1$ , saj je bolje, da zamudimo začetek zelene luči, kot pa da prevozimo rdečo.

Rezultati so podobni, kot pri prvi nalogi. Za različne začetne pogoje, ki potrebujejo zaviranje in pospeševanje so prikazani na slikah 7 in 8.



Slika 7: Graf hitrosti v odvisnosti od časa izračunan z metodo minimizacije Powell



Slika 8: Graf hitrosti v odvisnosti od časa izračunan z metodo minimizacije Powell

### 3 Zaključek

Pri tej nalogi smo se naučili uproabljati programe za numerično minimizacijo, ki je zelo koristno orodje, a predvsem pri vožnji skozi semafor vidimo, da nas pripelje do rezultatov, ki so slabši kot ekzaktne metode.