Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta za *matematiko in fiziko*

Numerična minimizacija

3. naloga pri Modelski Analizi 1

Avtor: Marko Urbanč (28232019)
Predavatelj: prof. dr. Simon Širca
Asistent: doc. dr. Miha Mihovilovič

24.2.2023

Kazalo

1 Uvod

Numerično minimizacijo poznamo tudi pod širšim imenom matematična optimizacija. V zelo preprostih pojmih gre za izbito najbolj primernega elementa iz neke množice, glede na podane kriterije. Običajno je ta množica neka funkcija, ki jo želimo minimizirati. Kriterij pa je podan z neko funkcijo, ki nam pove kako dober je neki element. Če se to sliši zelo podobno kot uvod pri prejšnji nalogi, kjer smo si pogledali Linearno programiranje, je to zato, ker je to v bistvu ista stvar. Razlika je le v tem, da je pri linearnem programiranju funkcija, ki jo minimiziramo linearna, pri numerični minimizaciji pa je ta funkcija lahko poljubna.

Z največjim veseljem bi napisal še kakšen bolj matematičen uvod, ampak to bi pomenilo, da bi se moral spustiti v podrobnosti delovanja posameznih optimizacijskih algoritmov, kar pa je precej obsežna tema, še sploh če bi se želel dotakniti vseh, ki sem jih poskusil, ker jih je res veliko.

Veliko problemov se prevede na optimizacijske probleme, zato je to zelo pomembna tema. Če ne drugega, je dandanes strašno priljubljeno strojno učenje, ki je v bistvu nič drugega kot optimizacija neke funkcije, ki nam pove kako dobro se nek model prilega podatkom. Tu se pojavi poanta, ki sem jo želel (a neuspešno) povedati v prejšnji nalogi. Optimizacija funkcije z npr. 40 parametri je zelo malo. V praksi smo zmožni optimizirati funkcije z več milijoni parametrov in tu se vmeša meni priljubljen High Performance Computing in to da sem želel pri prejšnji nalogi 400k dimenzij. Tukaj sicer ne bomo počeli tega, ne ker ne bi želel, ampak ker žal nisem utegnil.

2 Naloga

Naloga je sestavljena iz dveh delov. Poglejmo:

2.1 Thomsonov problem

Thomsonov problem je problem, kjer želimo najti najboljšo porazdelitev n točk po sferi, tako da bo potencial (lahko si mislimo kot električni potencial) čim manjši. To je v bistvu problem, ki ga rešujemo pri modeliranju atomov. Naloga želi, da za različne metode optimizacije preštudiramo pojav in natančnost rešitev.

2.2 Vožnja skozi semafor

Vrača se primer, ki smo ga imeli za prvo nalogo pri Modelski Analizi 1 z to razliko, da bomo tokrat namesto variacijskega problema reševali optimizacijski problem. Lagrangian je potrebno zapisati v primerni obliki, nato pa lahko uporabimo neko metodo optimizacije, da dobimo rešitev.

3 Opis reševanja

Reševanja sem se, kot je navada, lotil v Pythonu. Za optimizacijo sem uporabil knjižnico `scipy`, ki vsebuje veliko različnih metod za optimizacijo. Poskušal sem tudi z komercialnim solverjem `gurobipy` do katerega sem dobil dostop v kontekstu prejšnje naloge, ampak nisem dosegel željenih rezultatov. Ideja je bila, da bi potem reševanje paraleliziral. Poleg tega sem pa uporabil praktično stalen nabor knjižnic, ki torej `numpy`, `matplotlib`, `pandas` etc.

3.1 Suite of benchmarks

Za primerjavo uspešnosti različnih metod globalne optimizacije sem definiral suito funkcij, ki so posebej patološke oz. primerne za testiranje kvalitete optimizacijskih metod. Funkcije, ki sem jih definiral sem narisal na sliki **??**.

3.2 Thomsonov problem

Najprej sem napisal funkcijo, ki je za dobljene kote θ in ϕ na enotski sferi izračunala potencial. Pri temu sem upošteval, da imamo pravzaprav $m = n - 1$ točk, ker je ena točka fiksna. Njo sem postavil na severni pol. Preostale točke sem porazdelil enakomerno po ekvatorju. Pogledal sem si natančnost različnih metod, ki jih nudi `scipy.optimize.minimize()` pri $m = 1$, kajti to je edini primer za katerega sem se počutil samozavestno, da poznam analitičen odgovor. To pomeni, da sta dva naboja na krogli, kar pomeni, da gre ne fiksirani naboj v drug pol.

4 Rezultati

5 Komentarji in izboljšave

Literatura