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

3. naloga
Numerična minimizacija

Miha Srdinšek

Povzetek

1. Thomsonov problem: na prevodno kroglo nanesemo N enakih (klasičnih) nabojev. Kako se razvrstijo po površini? Zahtevamo seveda minimum elektrostatične energije. Uporabi katero od minimizacijskih metod, npr. Powellovo ali n-dimenzionalni simpleks (amebo).

2. Problem optimalne vožnje skozi semafor, ki smo ga spoznali pri nalogi 1, lahko rešujemo tudi z numerično minimizacijo, če časovno skalo diskretiziramo.

I. Thomsonov problem

V drugi nalogi sem se naučili uporabljati paket Anaconda za izrisovanje grafov. Tega paketa se poslužimo tudi tokrat.

V nalogi si želimo minimizirati elektrostatično energijo med naboji. Pri tej energiji se bodo namreč v naravi znašli elektroni. Elektrostatično energijo zapišemo kar kot

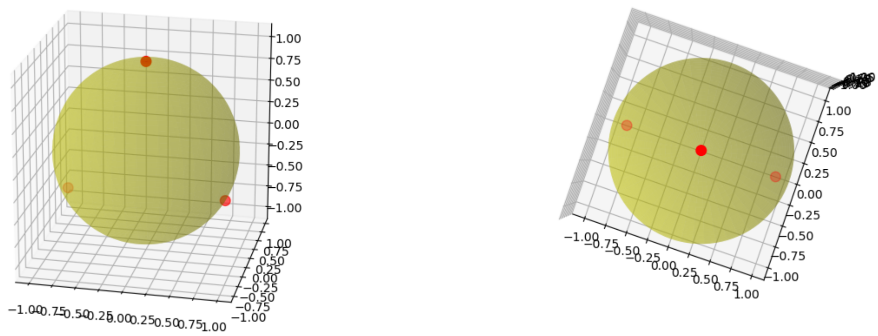
$$E = \sum_{i,j>i} E_{i,j} = \sum_{i,j>i} \frac{e_o^2}{4\pi\epsilon_o \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|}, \tag{1}$$

pri čermer konstante v ulomku kar zanemarimo. V kasnejšem problemu bomo obdržali člen e_o^2, a konstante spodaj ne prispevajo k optimalni porazdelitvi. Tako precej zapleteno vsoto lahko v *pythonu* zapišemo s for zankami kot je prikazano spodaj

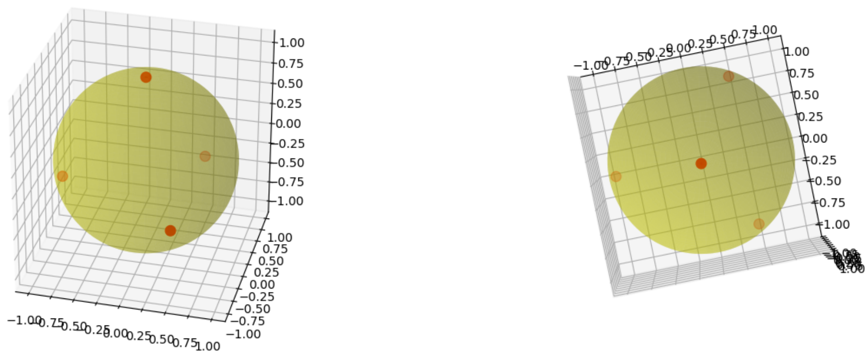
Listing 1: *Python example*

```
#uporabil bom kota th in fi
def x(th,fi):
return math.sin(th)*math.cos(fi)
def y(th,fi):
return math.sin(th)*math.sin(fi)
def z(th):
return math.cos(th)

def ulomek(th1,th2,fi1,fi2):
return 1/(math.sqrt((x(th1,fi1)-x(th2,fi2))**2+
+(y(th1,fi1)-y(th2,fi2))**2+(z(th1)-z(th2))**2))

# th bodo sodi parametri, med tem ko bodo fi lihi parametri
# parametri nastopajo v parih, kjer se par zacne s sodim
clenom in mu sledi lihi clen
def f(par,*args):
n=args[0]+3
return ulomek(0,par[0],0,0)+
+sum(ulomek(0,par[2*(j-2)+1],0,par[2*(j-2)+2])
for j in range (n//2) if j>1)+
+sum(ulomek(par[0],par[2*(j-2)+1],0,par[2*(j-2)+2])
for j in range (n//2) if j>1)+
+sum(sum(
ulomek(par[2*(i-2)+1],par[2*(j-2)+1],par[2*(i-2)+2],par[2*(j-2)+2])
for j in range(n//2) if j > i) for i in range(n//2) if i>1)
```

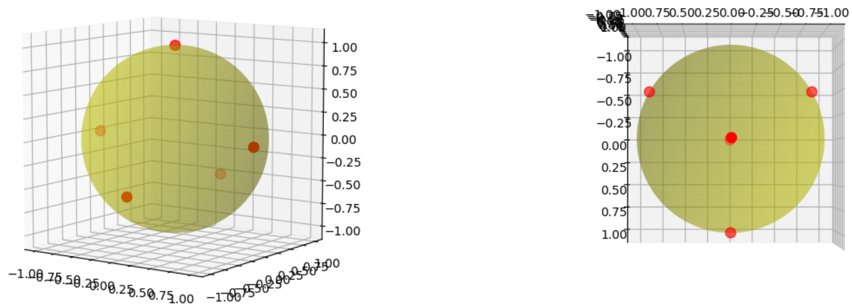
Pri tem moram omeniti, da sem skoraj identično kodo seveda napisal takoj, v nekaj minutah. A ni delovala. Z njo sem se ukvarjal dva cela popoldneva in iskal napako. V noči na tretji dan sem jo našel. Namesto $>$ sem povsod napisal $>>$, kar ima povsem drug pomen. To omenjam, da bo imelo vsaj kakšen smisel, da sem toliko časa zapravil na tako enostavni nalogi. Dalje sem potem klical funkcijo, ki je v navodilu predlagana in ugotovil, da za večje število elektronov metoda *Powell* deluje bolje od ostalih, zato sem nadalje izrisoval z njo. Rezultati so prikazani na naslednjih straneh.



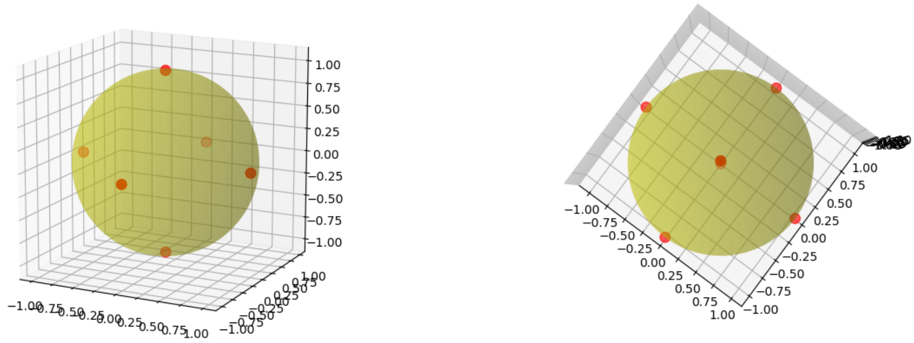
Slika 1: *Za tri elektrone.*



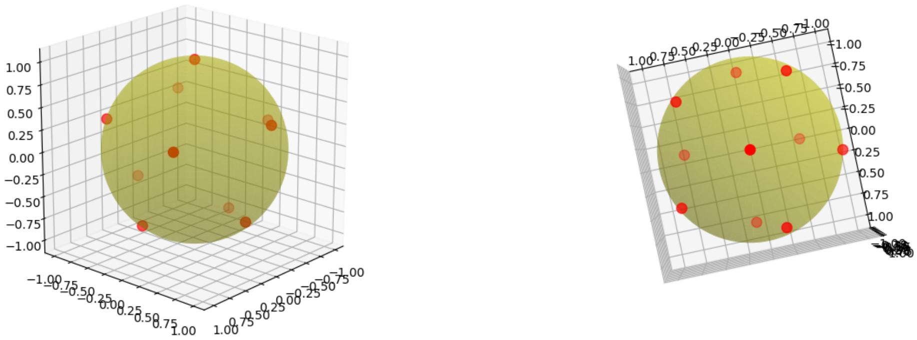
Slika 2: *Za štiri elektrone.*



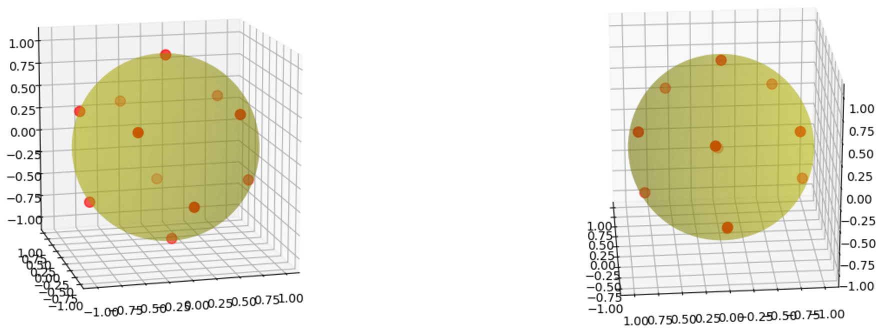
Slika 3: *Za pet elektronov.*



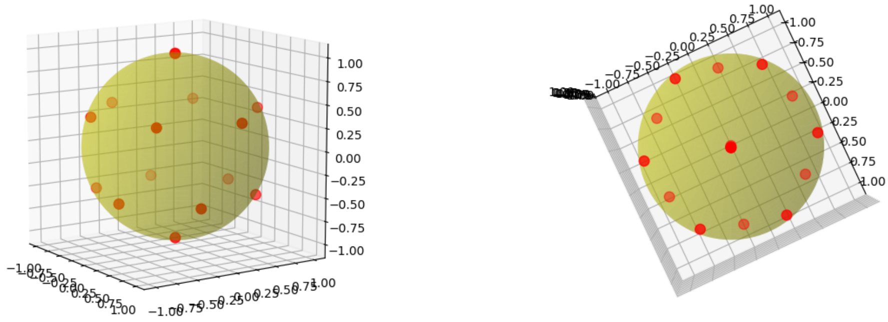
Slika 4: *Za šest elektronov.*



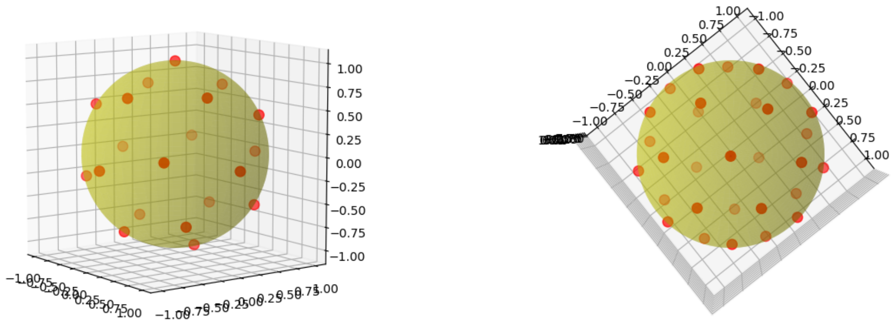
Slika 5: *Za deset elektronov.*



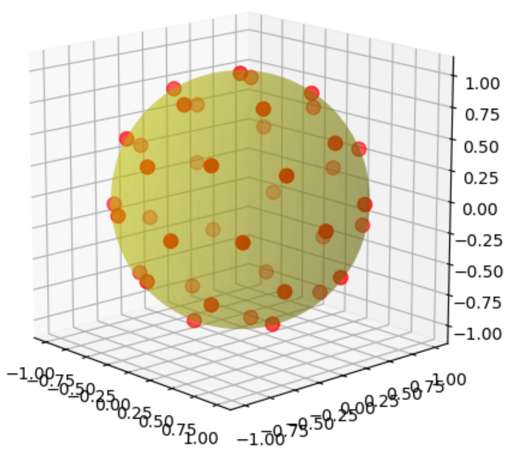
Slika 6: *Za enajst elektronov.*



Slika 7: *Za petnajst elektronov.*



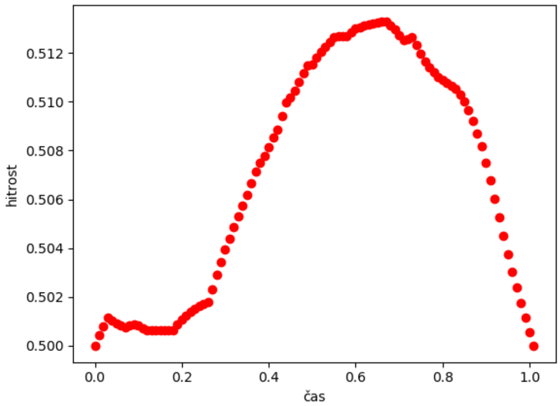
Slika 8: *Levo za dvajset in desno za trideset elektronov*



Slika 9: *Za štirideset elektronov*

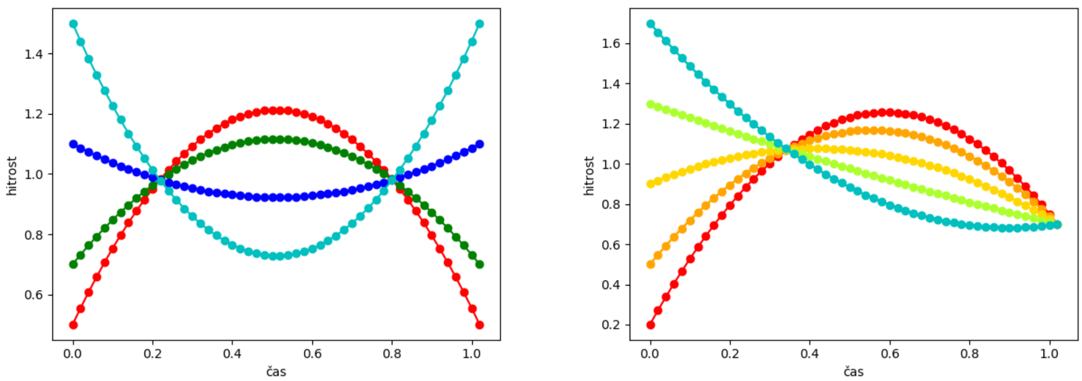
II. Vožnja skozi semafor

Zanima nas, kako bi numerično rešili problem opisan v prvi nalogi, ki smo jo dobili v prvem semestru modelske analize 1. Tega sem se sam lotil na povsem enostaven način in nisem uporabil bolj žapletenih"metod numeričnega integriranja. Funkcijo sem le razdelil na neko število intervalov in seštel ploščino pod temi integrali. Na enak način sem definiral tudi odvode, kot $\frac{\triangle x}{\triangle y}$. Tako sem zapisal dolgo funkcijo, ki je vsebovala vse integrale in vezi omenjene v prvi nalogi, to funkcijo pa sem potem z metodami uporabljenimi tudi v prvi nalogi, minimiziral. Vezi sem poleg tega še utežil, tako da sem jih napisal v kakšno funkcijo. Vez za opravljeno pot, sem recimo zapisal v eksponent. Ko sem tako izračunal in izrisal prvi primer s periodičnim robnim pogojem in le zahtevo v eksponentu, da je celotna prepotovana razdalja manjša ali enaka enoti sem dobil rezultat prikazan na sliki 10. To je sicer precej pričakovani rezultat, saj



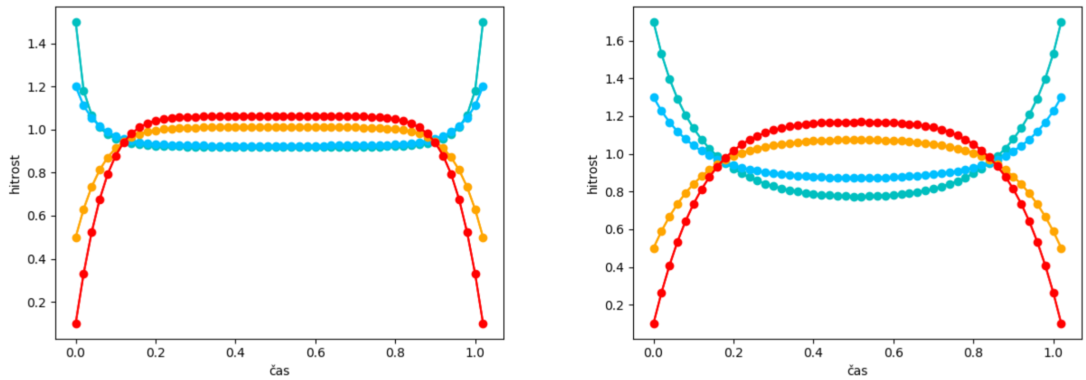
Slika 10: *Prvi, precej neuspešen primer.*

eksponent nima ovire v potovanju navzdol in zato sicer lahko dosegamo omejitve prepotovane poti navzgor, ampak nimamo nobenega nadzora pri omejitvah navzgor. To rešimo tako, da uporabimo funkcijo, ki ima minimum pri enačaju. Taka funkcija je recimo e^{x^2}, za še večjo ostrino bi lahko uporabili celo gamma funkcijo. A ker so rezultati res lepi, se v to niti nisem spuščal. Rešitve so prikazane na slikah 11. Pogledamo si lahko še kako bi v numeričnem načinu



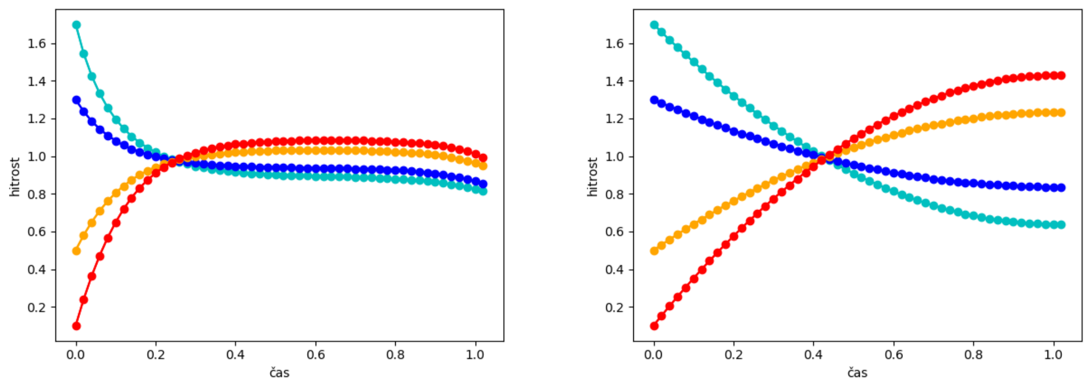
Slika 11: *Rešitvi pri kvadrirani vezi za omejitev dolžine v eksponentu. Levo rešitev s periodičnimi robnimi pogoji, desno pa s fiksno končno hitrostjo.*

izgledalo omejevanje hitrosti. Samo napisali bi dolgo vsoto eksponentov, od katerih bi vsak v argumentu nosil razliko med hitrostjo na neki točki in maksimalno dovoljeno hitrostjo. Cel eksponent pa bi potem še utežili z nako konstanto. Na tak način dobimo rezultate prikazane na slikah 12. Ker smo pri prvi nalogi obravnavali tudi primer s prostimi robnimi pogoji si lahko



Slika 12: *Rešitvi, če omejimo tudi hitrost z najvišjo hitrostjo* 1.1*. Levo je prikazana utež* 5*, desno pa utež* 2*.Utež je konstanta s katero množimo razliko v argumentu eksponenta.*

pogledamo tudi take rešitve. Do takih rešitev seveda pridemo tako, da le spustimo končni robni pogoj in pustimo programu da krivuljo optimizira. Tako dobimo rezultate prikazane na sliki 13. Na levi sliki 13 nas še posebej preseneti nek čudaški zavoj na koncu. Sam v svojo



Slika 13: *Rešitvi za prost končni robni pogoj. Levo je rešitev, če ohranimo omejitev hitrosti* 1.1 *z utežjo* 2*, desno pa je primer, ko nimamo omejitve hitrosti.*

metodo ne dvomim kaj dosti, saj je vrnila res lepe rezultate, zato opozarjam na ta zavoj kot neko morda zanimivo rešitev, ki je prej pri analitičnem reševanju nismo opazili. Lhako pa da gre le za neko numerično napako na koncu. Vse optimizirano v tem poglavju, je optimizirano z metodo *powell*. Ostalih metod nisem preizkušal, ker se je pri kroglah ta izkazala za tako zelo uspešno. Daje bi lahko poskusili še z raznimi drugačnimi funkcijami za poudarjanje vezi, kot je recimo gamma funkcija, kakšne hiperbolične funkcije itd. Z numeričnimi metodami bi se dalo na tudi dosti bolj eleganeten in enostaven način rešiti primer z večimi zaporednimi semaforji. Žal mi je za ostalo zaradi napake opisane v prvem poglavju, zmanjkalo časa.