

3. naloga - Numerična minimizacija

Tina Klobas

24. oktober 2019

1 Opis problema

Z numerično minimizacijo iščemo minimum funkcije $f(\mathbf{r})$ več neodvisnih spremenljivk, ki jih združimo v vektor \mathbf{r} . Lahko uporabimo minimizacijo po posameznih spremenljivkah, vendar je to časovno potratno, zato bomo v prvem delu preizkusili in primerjali metode:

- *Nelder-Mead* znana tudi kot *ameba* konceptu simpleksov, ki so večdimenzionalni politopi z n stranicami in $n + 1$ oglišči. Algoritem primerja vrednosti funkcije v vseh treh ogliščih in tistega, v katerem je največja, zamenja z novim ter tako tvori nov trikotnik. Postopoma zmanjšamo velikost trikotnika in dobimo koordinate lokalnega minimuma.
- *Powell* je po posplošitev sekantne metode na več dimenzionalni problem. Na vsakem koraku metoda določi konjugirane smeri v prostoru, nato pa vzdolž njih ujame minimum.
- *BFGS* (Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno) je zelo podobna prejšnji metodi, kjer na vsakem koraku začetno vrednost \mathbf{x}_0 izboljšujemo s premikanjem v smeri gradienta.
- *CG* (metoda konjugiranega gradienta) je še ena zelo podobna metoda prejšnjima, ki se uporablja za reševanje sistemov, ki jih lahko opišemo z redkimi matrikami, ki so preveliki, da bi se jih lotili z npr. razcepom Choleskega.

Več o vseh teh metodah v Numerical Recipes.

2 Thomsonov problem

Zanima nas kako razporediti N enako nabitih elektronov po površini krogle, ob čemer zahtevamo minimum elektrostatične energije:

$$W_{el} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i>j} \frac{1}{\|r_i - r_j\|}. \quad (2.1)$$

Izberemo set sferičnih koordinat $\{\phi_i, \theta_i\}$ in fiksiramo prvi naboj na $\phi_1 = \theta_1 = 0$, s čimer problem z $2N$ koordinatami rešujemo z $2(N-1)$ spremenljivkami.

2.1 Rezultati

Na naslednjih grafih 2.1 so prikazani rezultati porazdelitev, ki sem jih dobila z minimizacijo energije z metodo *Powell* za nekaj različnih števil nabojev N .

Primerjava časovne potratnosti

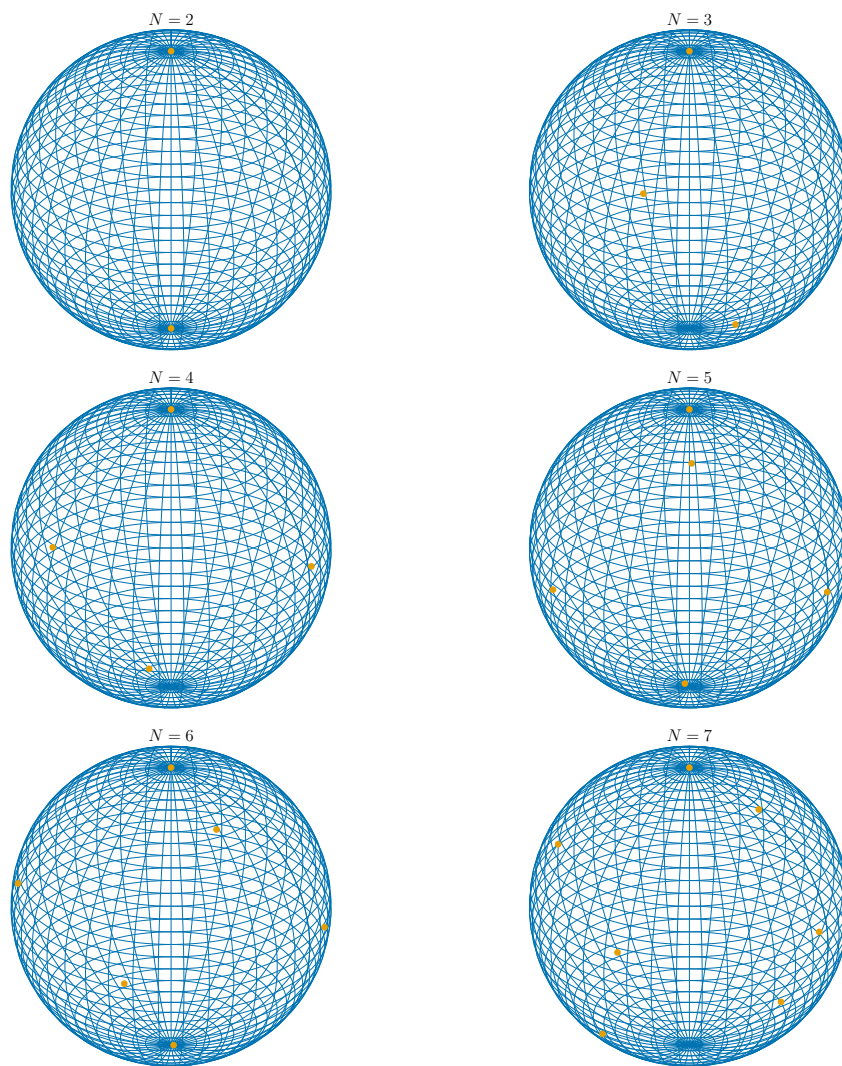
Na grafu 2.2 so prikazane časovne potratnosti štirih metod v odvisnosti od N . Z naraščanjem števila nabojev časi vseh štirih algoritmov rastejo, najbolje pa se obnese *Powell*. Čeprav izgledata metodi *CG* in *BFGS* na začetku za manjše N boljši od *amoeba*, potrebujeta pri velikih številih N veliko več časa, *CG* kar trikrat več.

Dipolni moment

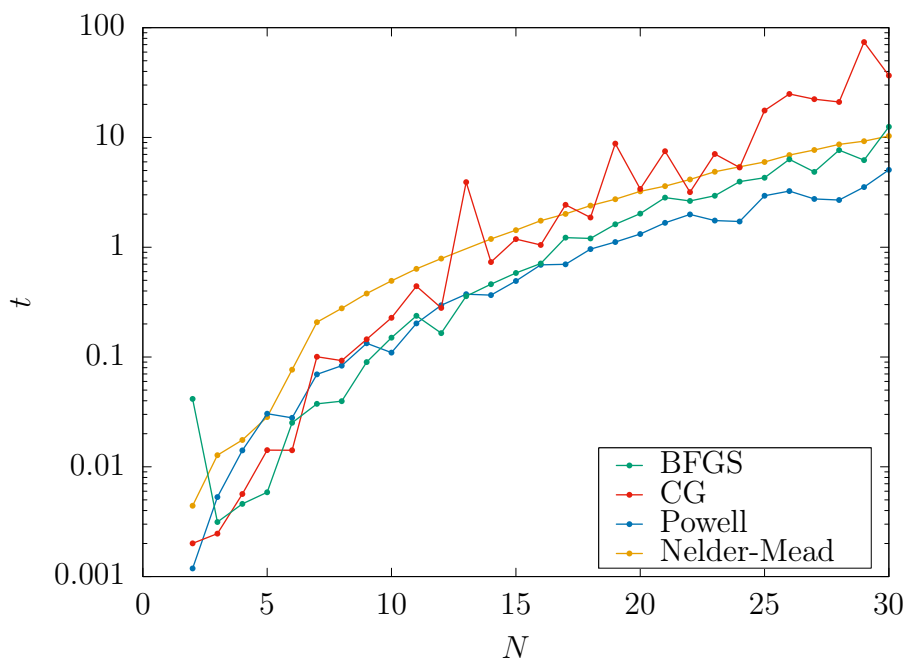
Natančnost metod sem ocenila z izračunom dipolnega momenta porazdelitev nabojev:

$$p_e = e \sum_i \mathbf{r}_i, \quad (2.2)$$

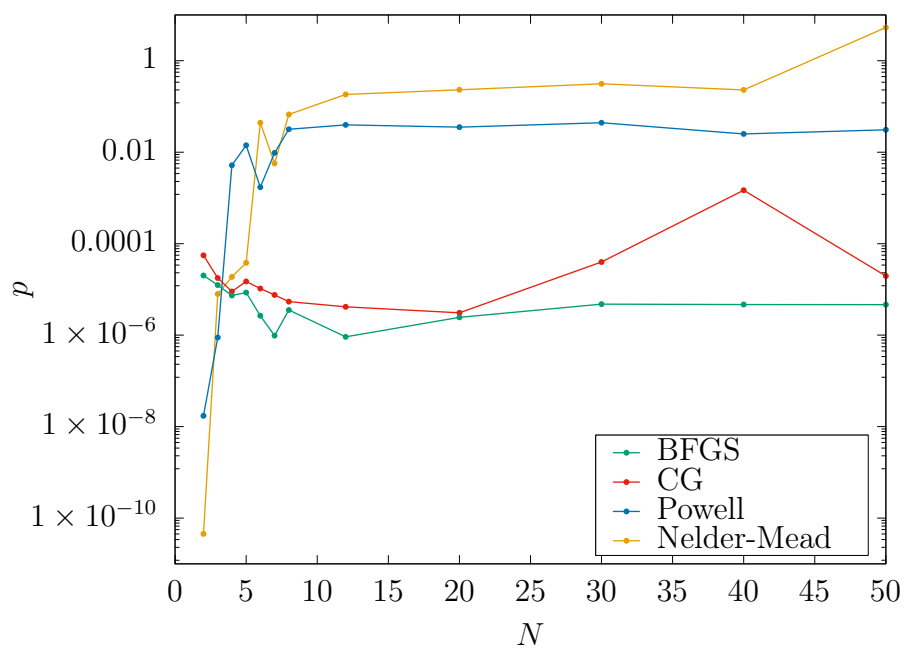
za katerega vemo, da mora veljati $p_e = 0$, ko je porazdelitev simetrična, rešitve za različne metode pa sem potem narisala na graf 2.3. Opazimo, da je metoda *Nelder-Mead* ne samo počasnejša od *Powellove*, še manj natančna je. Drugi dve metodi sta sicer veliko počasnejši, vendar rezultati veliko manj odstopajo od pričakovanih. Če bi izračune večkrat ponovili, bi sicer grafi izlgledali manj raztreseni, vendar bi zanje porabili veliko več časa in tukaj to niti ni potrebno, saj je že s tega vidno da ima metoda *BFGS* od vsej najboljše natančnost za tako minimizacijo, pa tudi njena časovna potratnost ni toliko slabša od npr. *Powella*.



Slika 2.1: Rezultati minimizacije energije za različna števila nabojev na sferi.



Slika 2.2: Primerjava časovne potratnosti različnih modelov s povečevanjem števila nabojev.



Slika 2.3: Primerjava momentov za različne porazdelitve.

Elektrostatična energija

Natančnost vseh štiri metod sem primerjala tudi z rezultati dobljenimi na *wikipedia* in relativnimi odmiki od teh vrednosti, ki so na grafu 2.4. Tudi s tega grafa je vidno, da metodi *Powell* in *Nelder-Mead* nista najbolj natančni.

3 Vožnja skozi semafor: 2. del

Zopet rešujemo nalogo optimizacije vožnje avta skozi semaforje, tokrat časovno skalo diskretiziramo in se problema lotimo z numerično minimizacijo. Z uporabo brezdimenzijskega časa y in hitrosti x dobimo potem diskretizirane enačbe

$$F_0 = \int \left(\frac{dx}{dy} \right)^2 dy \approx \left(\frac{x_1 - x_0}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{x_2 - x_1}{\Delta y} \right)^2 + \dots + \frac{1}{2} \left(\frac{x_2 - x_1}{\Delta y} \right)^2. \quad (3.1)$$

Pogoj, da semafor prevozimo v času, ko se prižge zelena luč matematično zapišemo kot:

$$\int_0^1 x dy \leq 1 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{1}{2}x_0 + x_1 + \dots + \frac{1}{2}x_n \right) \Delta y \leq 1, \quad (3.2)$$

Enakosti v zadnji enačbi ne moremo zadostiti, lahko pa to vsaj poskusimo tako, da funkcionalu F_0 dodamo vezi F_i , ki kaznujejo neupoštevanje neenačbe in potem iščemo minimum

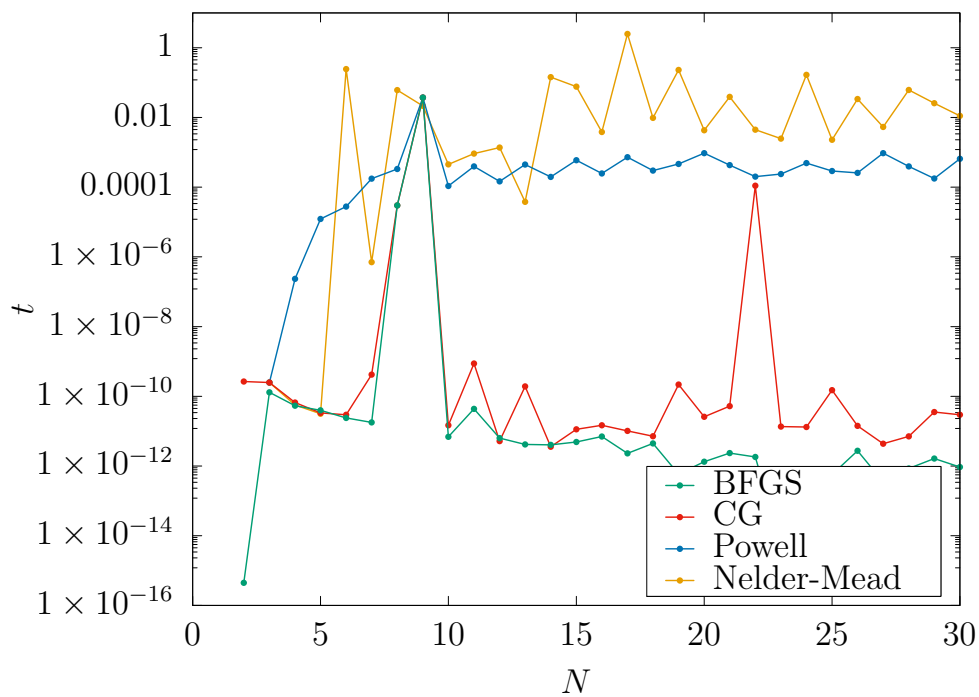
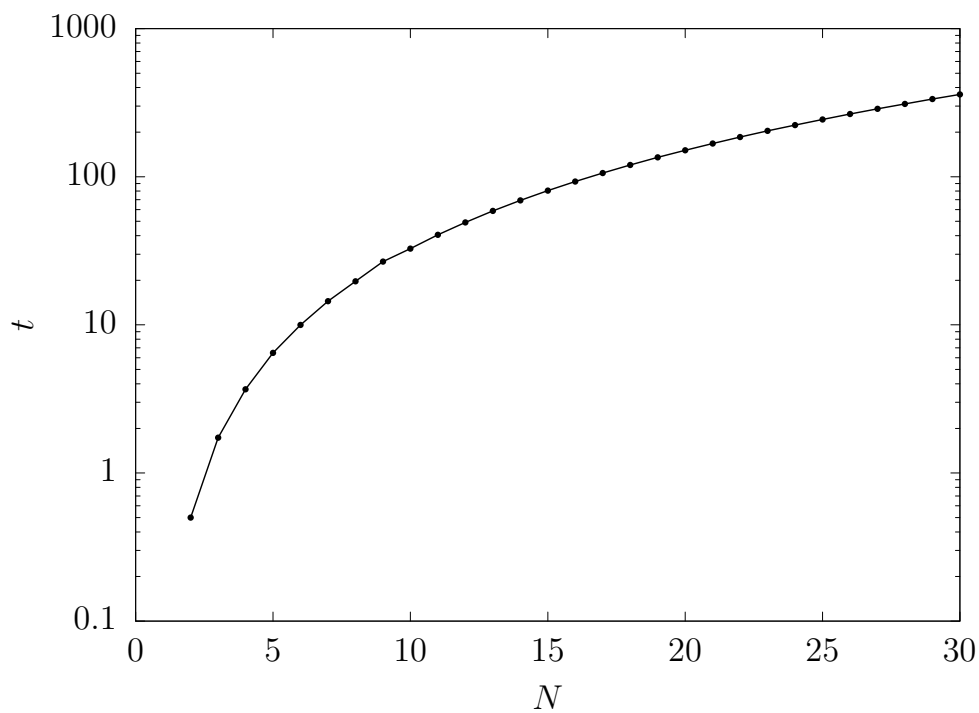
$$F = \int \left(\frac{dx}{dy} \right)^2 dy + \lambda \int x dy. \quad (3.3)$$

Primerna funkcija za to je eksponentna funkcija oblike $\exp(\xi(v - v_{\text{lim}}))$, saj za večje ξ ostreje zadostimo pogoju 3.2.

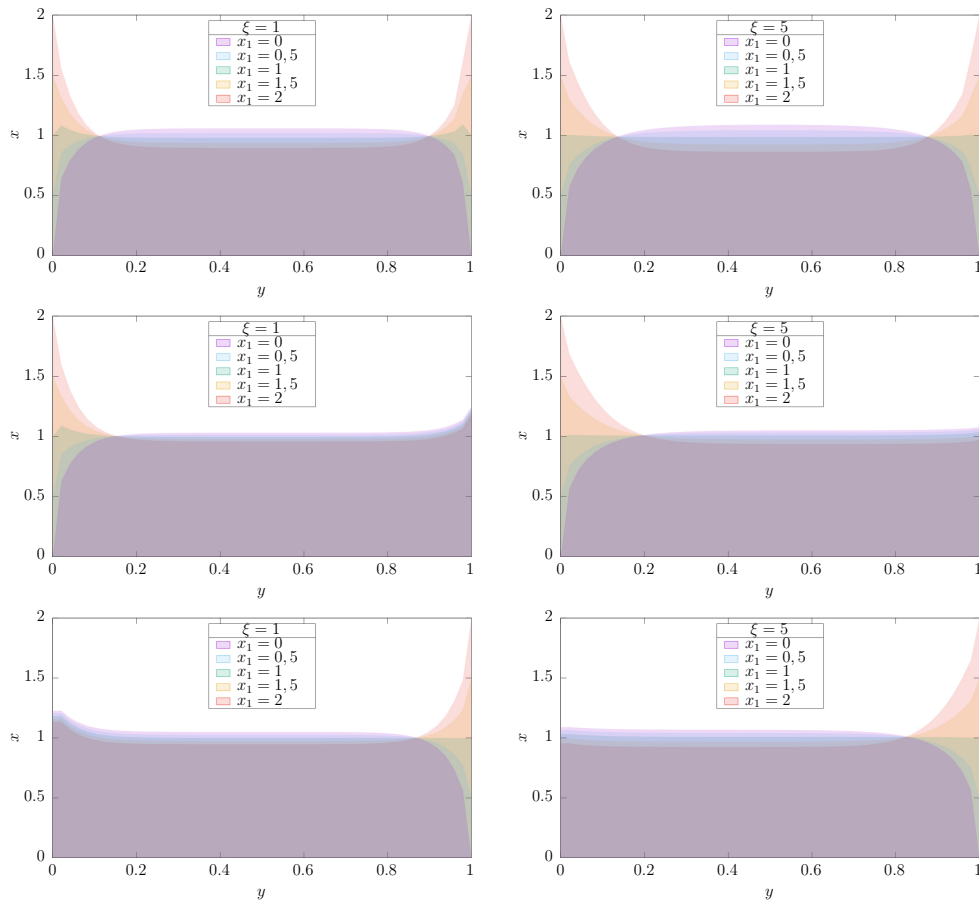
Omejimo se samo na pozitivne hitrosti, kar naredimo tako, da dodamo funkcionalu še eno vez eksponentne oblike:

$$F = F_0 + e^{\xi(\frac{1}{2}x_0 + x_1 + \dots + \frac{1}{2}x_n - 1)} + \sum_{i=1}^N e^{-\mu x_i}, \quad (3.4)$$

in označimo drugi člen z F_1 , tretjega pa z F_2 . S parametroma ξ in μ lahko sedaj nadzorujemo, kako ostro hočemo zadostiti pogoju neenačb. Na grafu 3.1 so narisane vožnje do semaforja za različne robne pogoje; enkrat zahtevamo, da sta začetna in končna hitrost enaki, drugič fiksiramo le začetno hitrost, v zadnjem primeru pa le končno.



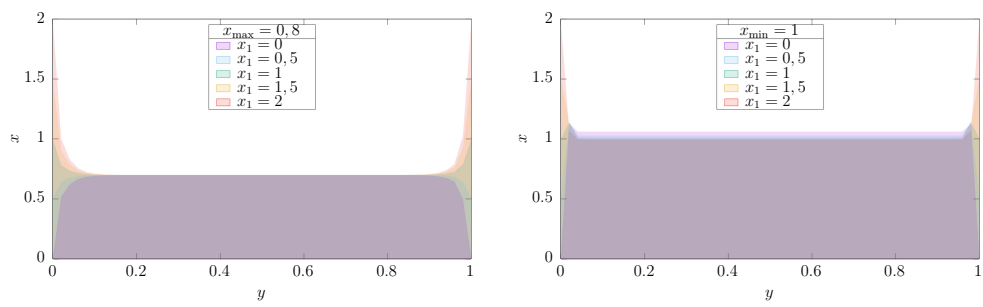
Slika 2.4: Spreminjanje energije s številom N (podatki vzeti s spleta wikipedia.org/wiki/Thomson_problem) in primerjava ostalih metod s temi podatki



Slika 3.1: Vožnja do semaforja z različnimi robnimi pogoji, ki si sledijo z vrha navzdol: periodični, fiksna začetna hitrost x_0 in fiksna končna hitrost x_N .

Opazimo, da moramo pri vožnji z nižjo hitrostjo od optimalne $x < 1$ izgubljen pot nadoknaditi v zelo kratkem času, dolžina tega časa (in tudi zaobljenost grafa) pa je odvisna od velikosti parametra ξ in je večja za večje parametre (podobno tudi za prehitre hitrosti).

Pri $\xi = 1$ se v vseh primerih na enak način pojavijo repi povišane hitrosti na prostih koncih, potem pa, ko vrednost parametra povečamo, izginejo in se celotna funkcija veliko bolj pohlevno obnaša. Na grafih ?? sta narisana poteka za različne začetne vrednosti s periodičnimi robnimi pogoji, kjer smo enkrat od spodaj omejili hitrost (npr. vožnja po hitri cesti) in enkrat zgoraj omejili (npr. vožnja skozi naselja). Pričakovano s takimi omejitvami zmanjšamo interval zaviranja oz. pospeševanja. Vidimo, da smo v obeh primerih s tema omejitvama vplivali na hitrosti nad in pod omejitvami, čemur bi se izognili tako, da uporabili kakšno drugo omejitveno funkcijo.



Slika 3.2: Pri periodičnih robnih pogojih in $\xi = 5$ so na grafih narisani poteki za za primer, ko imamo zgornjo mejo x_{\max} in spodnjo x_{\min} .