

Numerična minimizacija

3. domača naloga pri predmetu Modelska analiza I

Domen Vaupotič

1 Numerična minimizacija

Numerična optimizacija nam omogoča, da poiščemo globalni minimum funkcije. Metode za izračun se v grobem ločijo po tem, ali uporabljajo samo funkcijske vrednosti ali pa potrebujejo tudi vrednosti prvih in drugih odvodov funkcije.

2 Thomsonov problem

Z uporabo numerične optimizacije poiskati takšno postavitev prostogibljivih nabojev ($\vec{r}_0, \dots, \vec{r}_N$) na sferi, da bo celokupna energija najmanjša:

$$V = \sum_{i < j} V_{ij} = \sum_{i < j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \min.$$

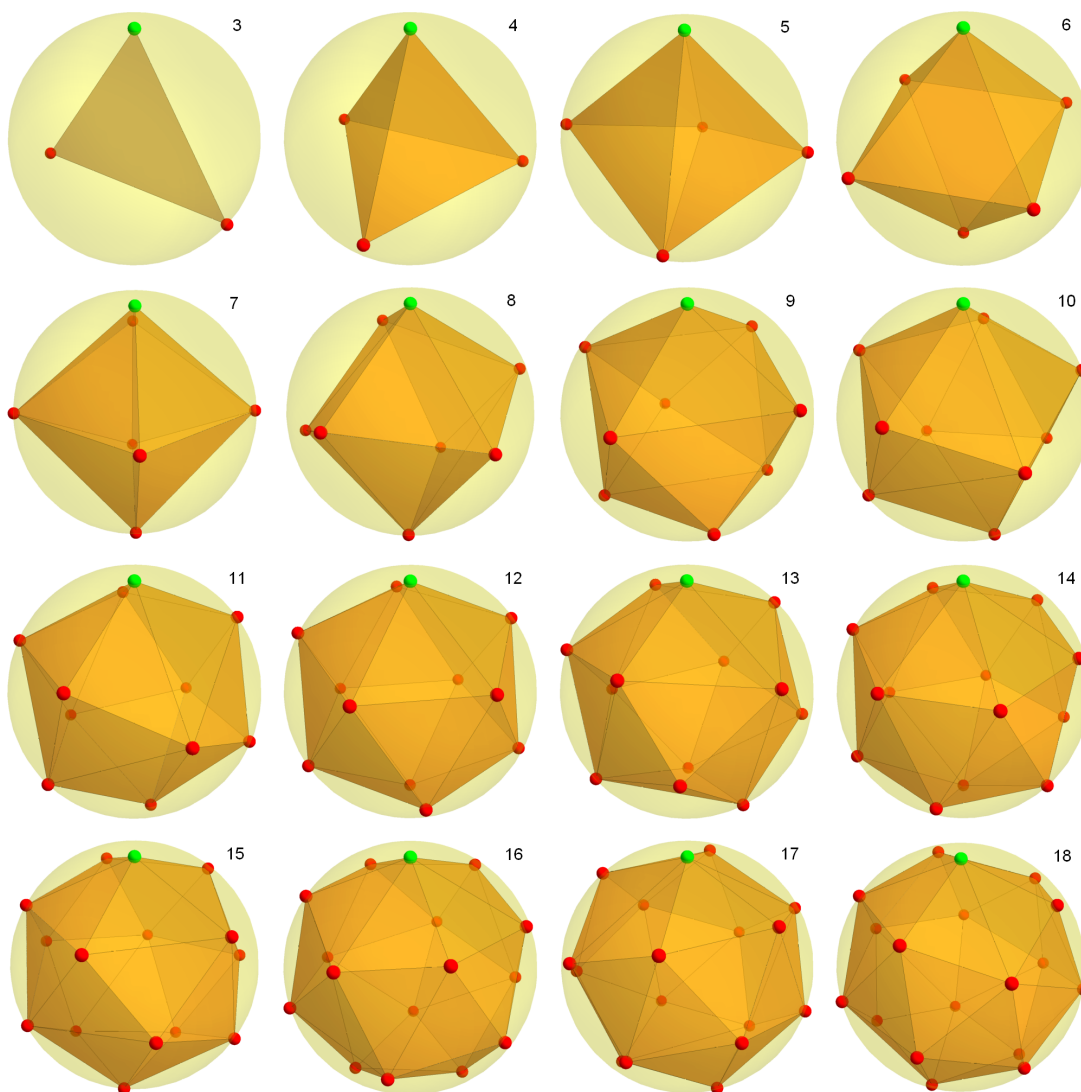
2.1 Rezultati modela

Rezultati Thomsonovega modela so prikazani v tabeli 1, v kateri so navedeni skupna energija V , energija na delec V/N , povprečna parska razdalja med delci $\langle d \rangle$, velikost dipolnega momenta $|\vec{p}|$ in 6 komponent tenzorja kvadrupolnega momenta Q_{ij} . Svoje rezultate sem validiral tako, da sem izračunane minimalne energije in dipolne momente primerjal s tabelo na Wikipedii. Opazimo lahko, da se energijski minimum pri večini vrednosti ujema do vsaj natančnosti 1×10^{-10} , opaznejše razlike so pri praštevilih (11, 13, 17). Dipolni moment se ujema na nekaj odstotkov pri $N = 11$ in $N = 13$, prav tako pa moji rezultati napačno napovejo neničelni dipolni moment pri $N = 15, 17, 18$.

N	V	V/N	$\langle d \rangle$	$ \vec{p} $	Q_{xx}	Q_{yy}	Q_{zz}	Q_{xy}	Q_{xz}	Q_{yz}	V/V_{Wiki}	$ \vec{p} / \vec{p}_{Wiki} $
2	0,5	0,25	2,0	0,0	-2,0	-2,0	4,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
3	1,73	0,58	1,732	0,0	1,3	-2,8	1,5	-0,92	0,0	0,0	$2,0 \times 10^{-10}$	
4	3,67	0,92	1,633	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	$-5,0 \times 10^{-11}$	
5	6,47	1,29	1,568	0,0	0,2	0,3	-0,5	0,75	0,0	0,0	$2,0 \times 10^{-11}$	
6	9,99	1,66	1,531	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	$-5,0 \times 10^{-11}$	
7	14,45	2,06	1,501	0,0	-0,97	0,47	0,5	-0,21	0,0	0,0	$-1,0 \times 10^{-10}$	
8	19,68	2,46	1,481	0,0	-0,12	0,1	0,01	-0,21	0,28	0,17	$-5,0 \times 10^{-11}$	
9	25,76	2,86	1,465	0,0	-0,08	0,04	0,04	-0,03	0,0	0,0	$-1,0 \times 10^{-10}$	
10	32,72	3,27	1,452	0,0	-0,14	-0,14	0,29	0,0	0,0	0,0	$-3,0 \times 10^{-11}$	
11	40,6	3,69	1,441	0,012	-0,17	0,04	0,13	0,12	-0,22	-0,25	$-4,0 \times 10^{-5}$	$7,0 \times 10^{-2}$
12	49,17	4,1	1,433	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	$-2,0 \times 10^{-10}$	
13	58,85	4,53	1,425	0,009	0,09	-0,21	0,12	-0,11	0,0	0,0	$-4,0 \times 10^{-8}$	$-8,0 \times 10^{-2}$
14	69,31	4,95	1,419	0,0	-0,09	-0,01	0,1	-0,32	0,24	0,22	$-3,0 \times 10^{-10}$	
15	80,67	5,38	1,413	0,001	-0,14	0,28	-0,15	0,07	0,0	0,0	$-3,0 \times 10^{-8}$	!
16	92,91	5,81	1,408	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	$-4,0 \times 10^{-10}$	
17	106,05	6,24	1,404	0,001	0,08	-0,01	-0,07	0,1	-0,01	0,01	$-2,0 \times 10^{-7}$	!
18	120,09	6,67	1,4	0,003	0,02	-0,07	0,05	-0,03	-0,02	-0,01	$-9,0 \times 10^{-6}$	!

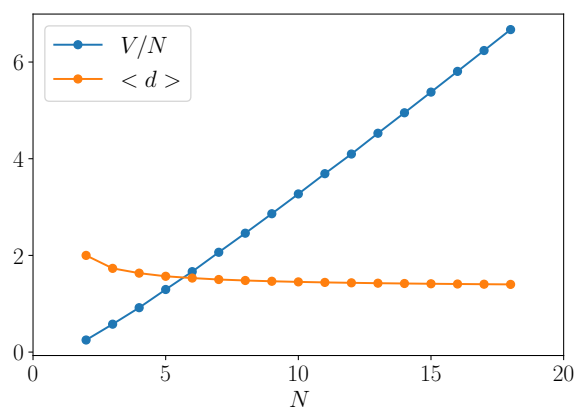
Tabela 1: Tabela vrednosti za rešitve Thomsonovega problema.

Na sliki 1 so prikazani rezultati Thomsonovega problema na območju $N = 3, 4, \dots, 18$.



Slika 1: Rezultati Thomsonovega problema na sferi

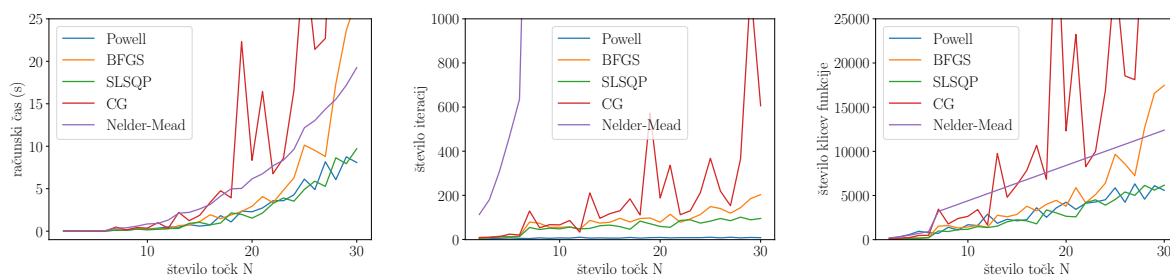
Na sliki 2 je prikazana odvisnost povprečne parske razdalje med delci $\langle d \rangle$ in energije na delec V/N pri različnih N .



Slika 2: Odvisnost povprečne parske razdalje $\langle d \rangle$ in energije na delec V/N od števila delcev.

2.2 Primerjava metod

Na spodnjih treh grafih je kvalitativno prikazano obnašanje različnih metod v odvisnosti od števila delcev.

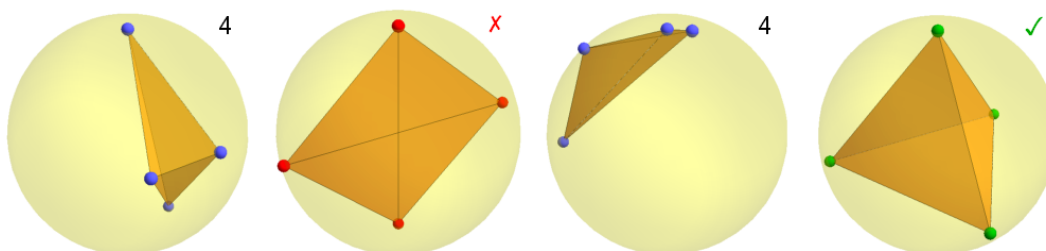


Opazimo lahko, da najbolj izstopa metoda CG (*conjugate gradient*), ki potrebuje največ računskega časa in največ klicem funkcije. Časovna kompleksnost je približno kvadratična.

2.3 Vpliv začetnih pogojev

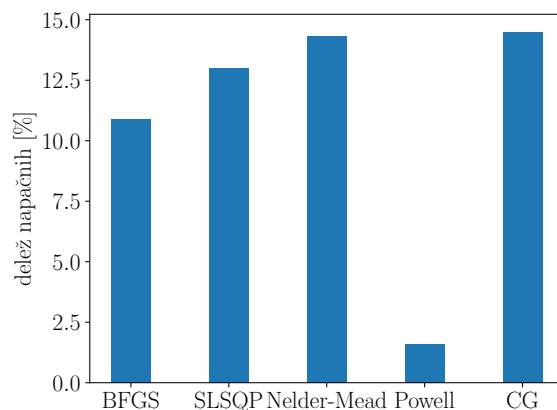
Preveriti sem želel, kako se metode odzivajo na različne začetne pogoje in ali se ujamejo v neoptimalne rešitve. Najlažje je to preveriti pri $N = 4$, kjer metode vračajo dvojne različne rešitve:

telo	V	$\langle d \rangle$
tetraeder	3,674 23	1,632 99
kvadrat	3,828 42	1,609 47



Slika 3: Primer neustrezne (levo) začetne konfiguracije, ki se ujame v kvadrat, in ustrezne (desno) začetne konfiguracije, ki vrne tetraeder.

Preveril sem 1000 naključnih (`random.random`) začetnih pogojev in izračunal delež napačnih rešitev, ki je prikazan na sliki 4. Na sliki 3 je prikazan primer ustrezne in neustrezne začetne konfiguracije.

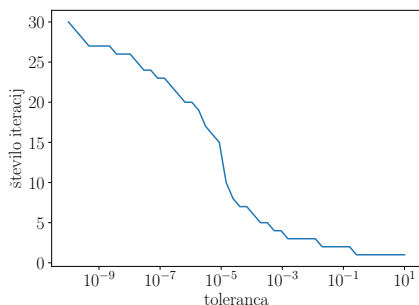


Slika 4: Delež napačnih rešitev pri 500 različnih zčetnih pogojih.

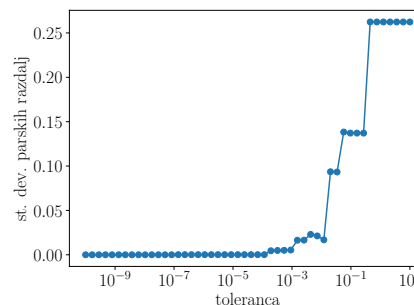
2.4 Vpliv tolerance

Na sliki 5 je prikazan vpliv tolerance na število iteracij minimizacije z metodo Powell pri $N = 14$.

Na sliki 6 je prikazan vpliv tolerance na število iteracij minimizacije z metodo Powell pri $N = 4$. Vemo, da je pravilni rezultat tetraeder, pri katerem so vse dolžine enake ($\sigma_d = 0$).



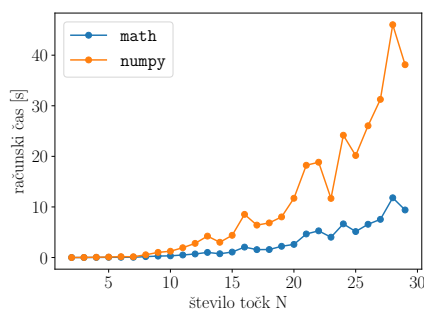
Slika 5: Vpliv tolerance na število iteracij



Slika 6: Vpliv tolerance na pravilnost rezultata

2.5 Vpliv uporabe knjižnice math ali numpy

Pri prvih poskusnih izračunih sem pri izračunu potenciala brezglavo uporabljal trigonometrične funkcije iz knjižnice `numpy`, ki so razmeroma počasne. Zaradi velikega števila klicev funkcije se to znatno odraža na celokupnem računskem času, kar je prikazano na grafu 7.



Slika 7: Primerjava računskega časa pri uporabi knjižnice `math` in `numpy`.

2.6 Uporaba Jacobiana in Hessove matrike

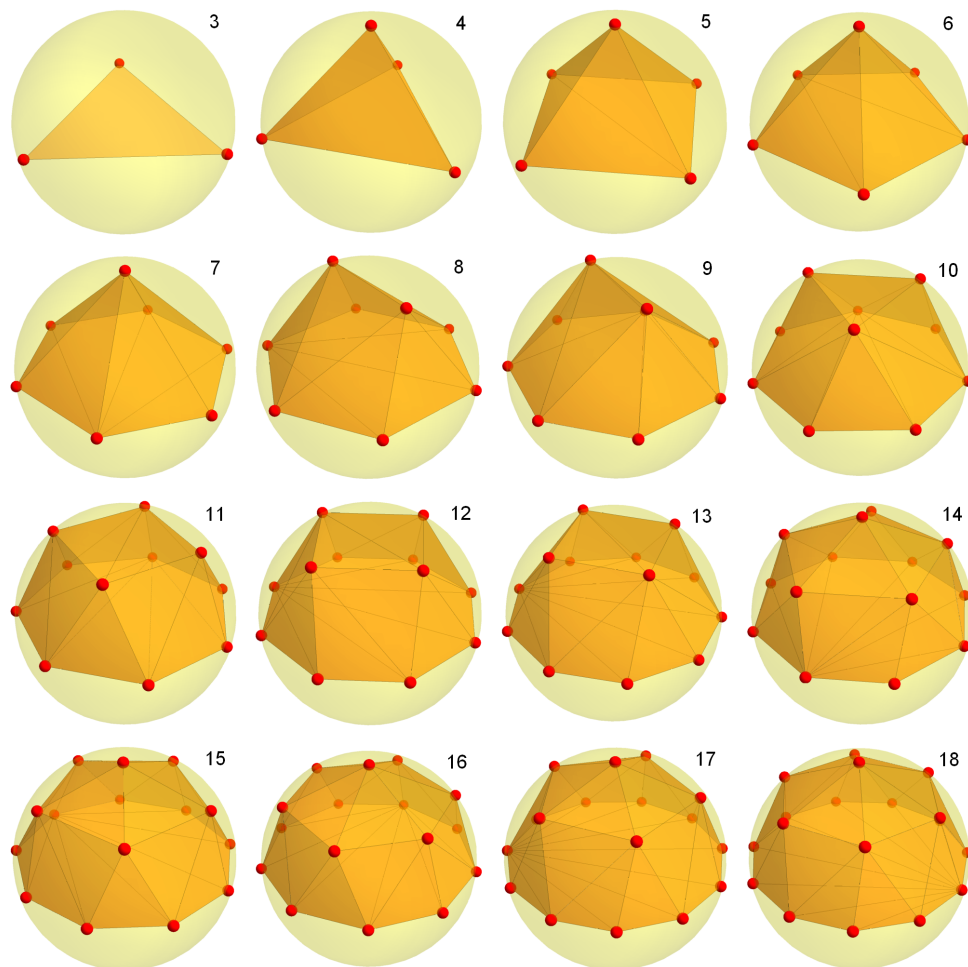
Za primer $N = 4$ sem s programom *Mathematica* eksplicitno izračunal Jacobian in Hessovo matriko funkcije energije, nato pa s 1000 različnimi začetnimi pogoji primerjal metodi `Powell`, ki uporablja samo funkcije vrednosti, in `Newton-CG`, ki uporabi tudi Jacobian in Hessovo matriko.

	Newton-CG	Powell
delež napačnih	15,1 %	1,9 %
< nit >	19,4	5,5
< nfev >	26,7	361
< njev >	45,0	
< nhev >	19,4	

Opazimo, da v povprečju metoda Powell izvede kar 14-krat več evaluacij funkcije, vendar ima še vedno 8-krat manjši delež napačnih rešitev.

2.7 Polsfera

Na grafu 8 so prikazane rešitve Thomsonovega problema za plosfero ($0 \leq \theta \leq \pi/2$) z uporabo metode L-BFGS-B, ki omogoča optimizacijo z omejitvami spremenljivk. Opazimo lahko nivojsko konfiguracijo delcev. Zanimivi so prehodi, ko se pojavi nova plast, npr. $3 \rightarrow 4$ in $13 \rightarrow 14$.



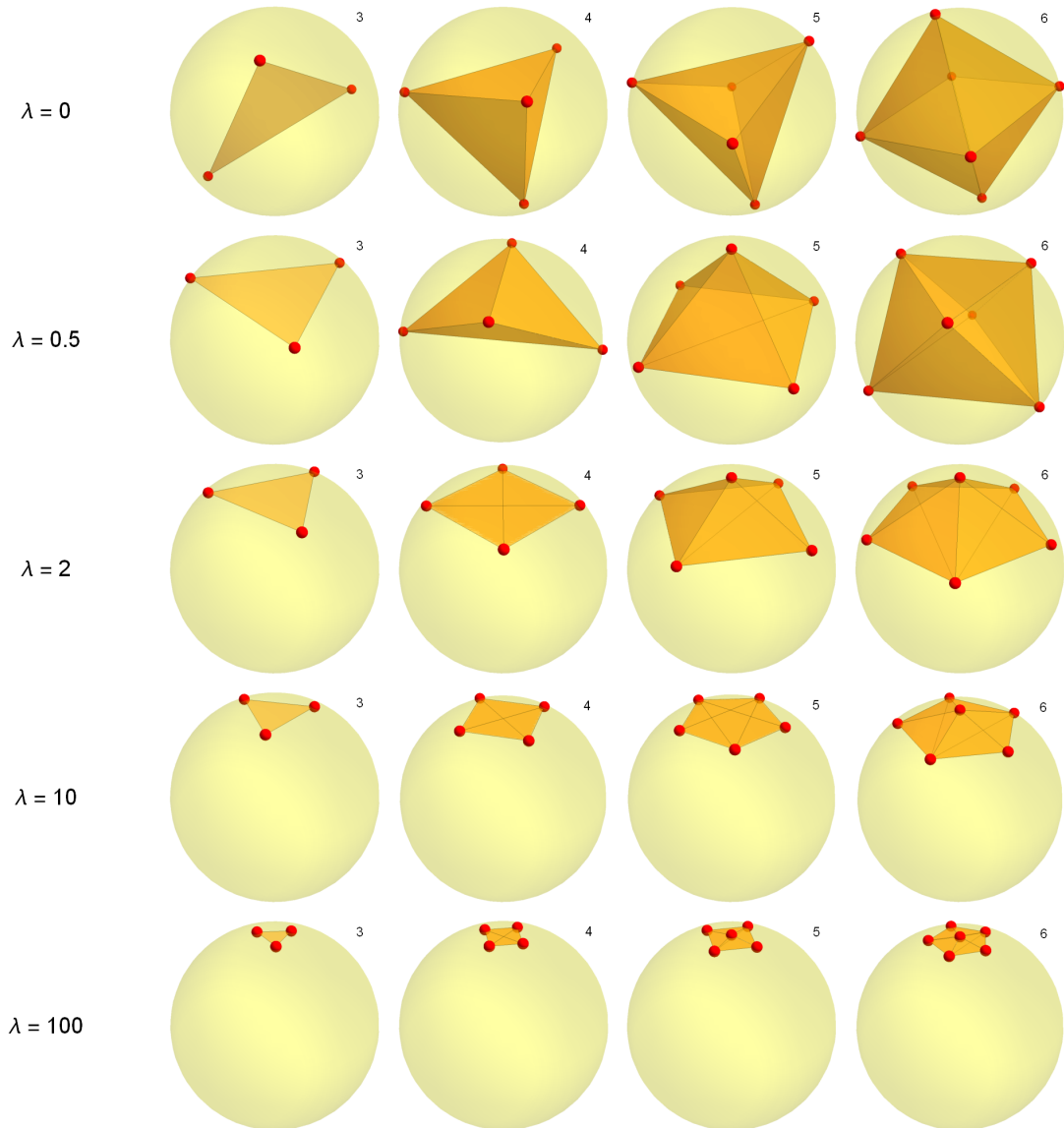
Slika 8: Rešitve Thomsonovega problema za plosfero do $N = 18$

2.8 Sfera v zunanjem električnem polju

Thomsonov problem sem razširil tako, da sem kroglo postavil v homogeno zunanje električno polje jakosti λ , usmerjeno vzdolž osi z .

$$V = \sum_{i < j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \lambda \sum_i \cos \theta_i$$

Na sliki 9 so prikazane konfiguracije pri različnih jakostih električnega polja λ . Opazimo lahko, da se delci pomikajo navzgor in dobivajo planarno razporeditev. Za $N = 4$ je prehod iz prostorske v planarno strukturo na intervalu $\lambda \in (0,5, 2)$, za $N = 5$ pa na intervalu $\lambda \in (2, 10)$.



Slika 9: Rezultati Thomsonovega problema na sferi v zunanjem električnem polju.

3 Optimalna vožnja skozi semafor

Ponovno rešujemo problem iz 1. domače naloge, ki ga tokrat diskretiziramo po času in rešimo z numerično minimizacijo. Najti želimo torej tako funkcijo, ki zadošča pogoju

$$\int_0^T \left(\frac{dv}{dt} \right)^2 dt = \min.$$

$$\int_0^T v(t) dt = L$$

Prvi pogoj prepisemo v diskretno obliko

$$\sum_i \left(\frac{v_i + v_{i-1}}{\Delta t} \right)^2 = \min.$$

Drugo zvezo pa prepisemo v dve neenakosti

$$\Delta t \sum_i v_i \leq (1 + \alpha)L$$

$$\Delta t \sum_i v_i \geq (1 - \alpha)L$$

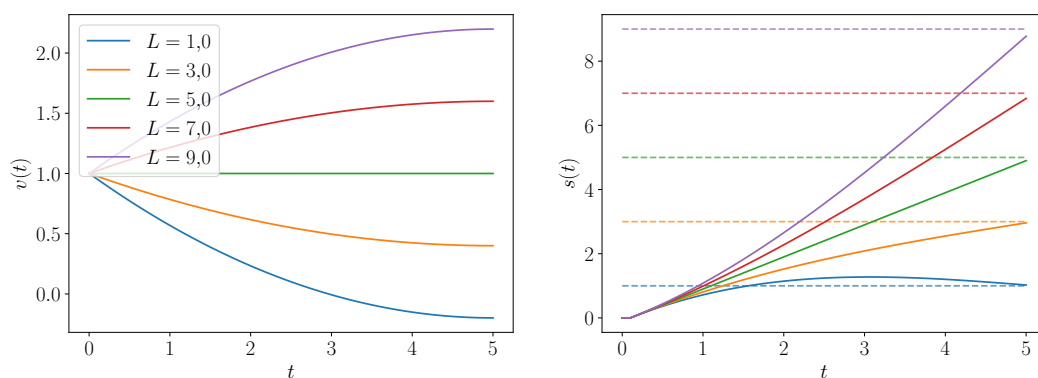
Pri tem za α izberemo majhno število ($\alpha \ll 1$), ki opisuje dovoljeno relativno odstopanje od zahtevane poti L .

Minimizacijski pogoj in obe omejitveni zvezi združimo v eno cenovno funkcijo, ki jo nato minimiziramo:

$$\tilde{F} = \sum_i \left(\frac{v_i + v_{i-1}}{\Delta t} \right)^2 + e^{\kappa[\Delta t \sum_i v_i - (1+\alpha)L]} + e^{\kappa[(1-\alpha)L - \Delta t \sum_i v_i]}$$

Zahtevo o skupni poti smo izrazili v obliki dveh neenakosti in se s tem izognili potrebi, da mora biti κ zelo velik in s tem povzročenimi aritmetičnimi prekoračitvami. Strogost naše zahteve sedaj enostavno prilagajamo s parametrom α .

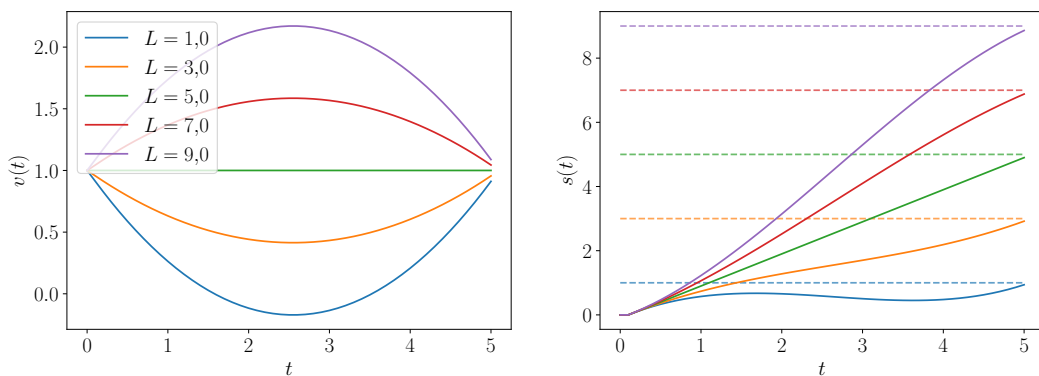
Na sliki 10 so prikazani rezultati za $T = 5$, $v_0 = 1$, $\alpha = 0,001$, $\kappa = 1$ in različne oddaljenosti od semaforja L pri številu delilnih točk $N = 50$.



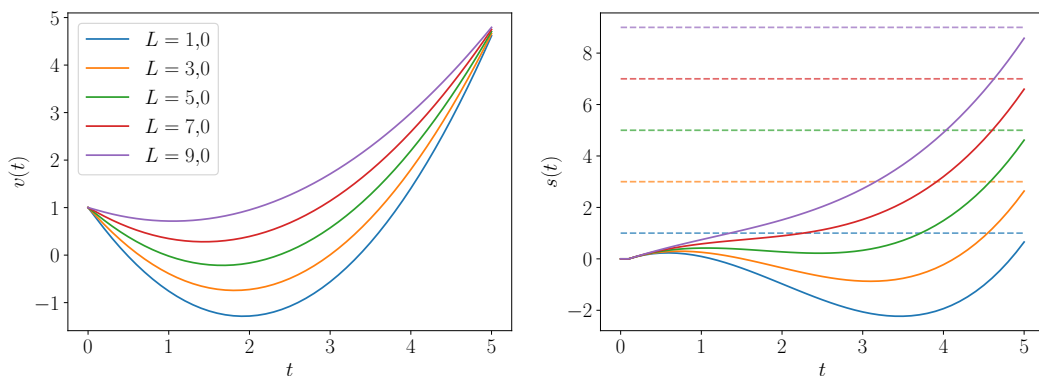
Slika 10: Rezultati optimalne vožnje za različne oddaljenosti od semaforja L .

3.1 Določena končna hitrost

Eksplicitno lahko določimo želeno končno hitrost. Na slikah 11 in 13 sta končni hitrosti določeni na $v_k = 1$ in $v_k = 5$.



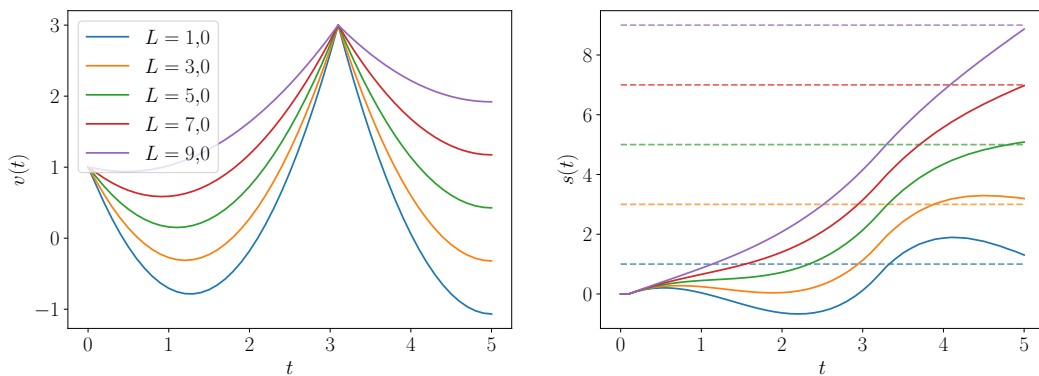
Slika 11: Rezultati optimalne vožnje z definirano končno hitrostjo $v_k = 1$.



Slika 12: Rezultati optimalne vožnje z definirano končno hitrostjo $v_k = 5$.

3.2 Določena vmesna hitrost

Eksplicitno lahko določimo tudi hitrost ob poljubnem času. Graf je zaradi diskretizacije tam prelomljen in pospešek nedefiniran.



Slika 13: Rezultati optimalne vožnje z definirano hitrostjo $v(3) = 3$.