4. Übungsblatt zu Computersimulationen
SS 2006

1. Ein quadratisches Problem

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\,\mathbf{x}^T\,A\,\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\,\mathbf{x} + c$$

ist zu minimieren, wobei $\mathbf{x}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ und A eine hermitesche $n \times n$-Matrix ist. Das ist (zumindest für positiv definite Matrizen) äquivalent mit dem Lösung des Gleichungssystems

$$A\,\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

Dazu bietet sich das **konjugierte Gradienten-Verfahren** an, das durch folgende Iteration gegeben ist:

Man wähle einen Startvektor $\mathbf{x}_0$ und $\mathbf{g}_0 = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\,\mathbf{x}_0$.

- $\lambda_i = \frac{\mathbf{g}_i^T\,\mathbf{g}_i}{\mathbf{r}_i^T\,A\,\mathbf{r}_i}$
- $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \lambda_i\,\mathbf{r}_i$
- $\mathbf{g}_{i+1} = \mathbf{g}_i - \lambda_i\,A\,\mathbf{r}_i$
- $\gamma_i = \frac{\mathbf{g}_{i+1}^T\,\mathbf{g}_{i+1}}{\mathbf{g}_i^T\,\mathbf{g}_i}$
- $\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{g}_{i+1} + \gamma_i\,\mathbf{r}_i$

Nach spätestens n Iterationen ist das Verfahren auskonvergiert.

Überlegen Sie, an welcher Stelle eventuell Probleme auftreten können. Wie kann man diese verhindern?

Test:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Bitte mit **verschiedenen Startvektoren** testen!
Der Lösungsvektor ist

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.2 \end{pmatrix}.$$

2. Schreibe ein Simulated Annealing Programm zur Lösung des Traveling Salesman Problems. Beachte folgendes:

   - Die Städteverteilung von $N = 20$ Städten wird mit Hilfe der zur Verfügung gestellten Funktion gsv1() (File: gsv1.m) generiert.

- Die Energie ist durch die Gesamtweglänge des Rundkurses bestimmt:

$$E(\{\mathbf{x}\}) = \sum_{i=1}^{N} |\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i| \quad \text{mit} \quad \mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{x}_1 .$$

  Die Festlegung des Startpunktes im Rundkurs ist willkürlich.

- Die Wahrscheinlichkeit für einen Zustand bei gegebener Temperatur T ist

$$p_E(\{\mathbf{x}\}|T) = \frac{1}{Z} \exp\left\{-\frac{1}{T} E(\{\mathbf{x}\})\right\}$$

- Vorschlag einer neuen Konfiguration nach folgender Regel.: Wähle zufällig zwei Städte S_a und S_b. Tausche ihre Position im Weg aus:

  K**:** $\quad S_1, \ldots, S_{a-1}, \underbrace{S_a, S_{a+1}, \ldots, S_{b-1}, S_b}_{bisher}, S_{b+1}, \ldots, S_n$

  K'**:** $\quad S_1, \ldots, S_{a-1}, \underbrace{S_b, S_{b-1}, \ldots, S_{a+1}, S_a}_{neu}, S_{b+1}, \ldots, S_n$

  Die entsprechende Differenz der Energien lautet ($a < b$)

$$E(K') - E(K) = \overline{S_{a-1}S_b} + \overline{S_a S_{b+1}} - \overline{S_{a-1}S_a} - \overline{S_b S_{b+1}}$$

- Akzeptanzwahrscheinlichkeit: $\min\left(1, \frac{p_E(K'|T)}{p_E(K|T)}\right)$
- Anzahl der Schritte pro Temperatur: Faustregel: $L = N(N-1)/2$
- Abkühlstrategie: $T_k = T_a q^k$ mit $0 < q < 1$ (z.B. $q = 0.95$)
- Starttemperatur so wählen, dass ungefähr 80% der vorgeschlagenen Änderungen akzeptiert werden.

Bestimme innerhalb einer Temperatur folgende Mittelwerte

- mittlere Energie: $< E >= \frac{1}{L} \sum_K E(K)$
- $< E^2 >= \frac{1}{L} \sum_K E(K)^2$
- Varianz: $(\Delta E)^2 =< E^2 > - < E >^2$

und stelle sie grafisch dar. Auch der aufgefundene Pfad ist graphisch darzustellen.

Diskutieren Sie mögliche Konvergenzkriterien!