Poročilo o iskanju ekstremov in prilagajanju funkcij

4. naloga iz MaFi seminarja

Gašper Harej

1. Uvod

V tem poročilu sem predstavil metode iskanja ekstremov enodimenzionalnih in dvodimenzionalnih funkcij ter prilagajanje (fit) modelnih funkcij naboru izmerjenih podatkov. Najprej sem obravnaval:

- metode *zlatega reza*, *parabolične interpolacije* in *Brentove metode* za enodimenzionalne funkcije,
- numerično iskanje maksimuma dvodimenzionalnih funkcij z *Downhill simplex* (Nelder–Mead) metodo,
- prilagajanje podatkov s funkcijo oblike $f(x, a, b) = a\,x\,e^{b\,x}$ in izračun χ^2.

Nalogo sem izvedel v okolju Python (knjižnice `numpy`, `scipy.optimize`, `matplotlib`), pri čemer sem rezultate tudi grafično ponazoril.

2. Iskanje ekstremov enodimenzionalnih funkcij

2.1. Metode zlatega reza, parabolične interpolacije in Brentove metode

Pri iskanju minimumov (oziroma maksimumov, če minimiziram $-f(x)$) sem uporabil:

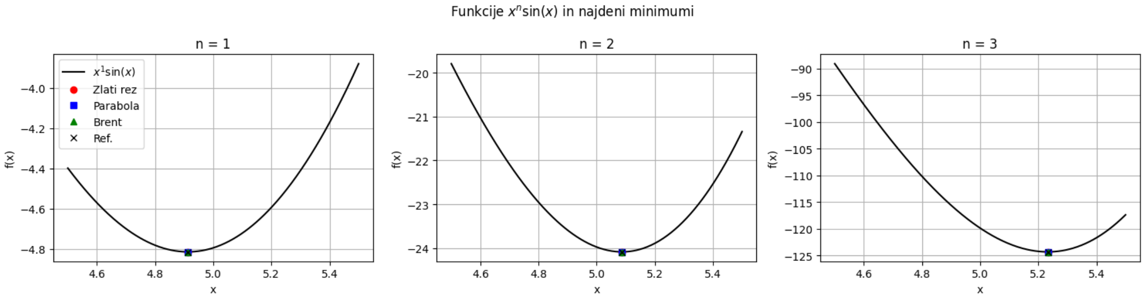
- **Zlati rez** – zelo robustna metoda, ki na vsakem koraku razdeli interval v razmerju zlatega reza in izloči polovico intervala, kjer funkcija ne more imeti minimuma.
- **Parabolična interpolacija** – metoda, ki na podlagi treh točk (in njihovih funkcijskih vrednosti) priredi parabolo ter izračuna položaj njenega minimuma. Metoda je hitrejša, a je manj stabilna, če so točke skoraj kolinearne.
- **Brentova metoda** – kombinacija obeh pristopov, ki večinoma deluje zelo hitro in zanesljivo, saj se v neugodnih primerih (npr. slabša parabolična aproksimacija) vrne k zlatemu rezu.

Funkcije tipa $x^n \sin(x)$ Iskal sem minimum funkcij:

$$f_n(x) = x^n \sin(x), \quad n = 1, 2, 3,$$

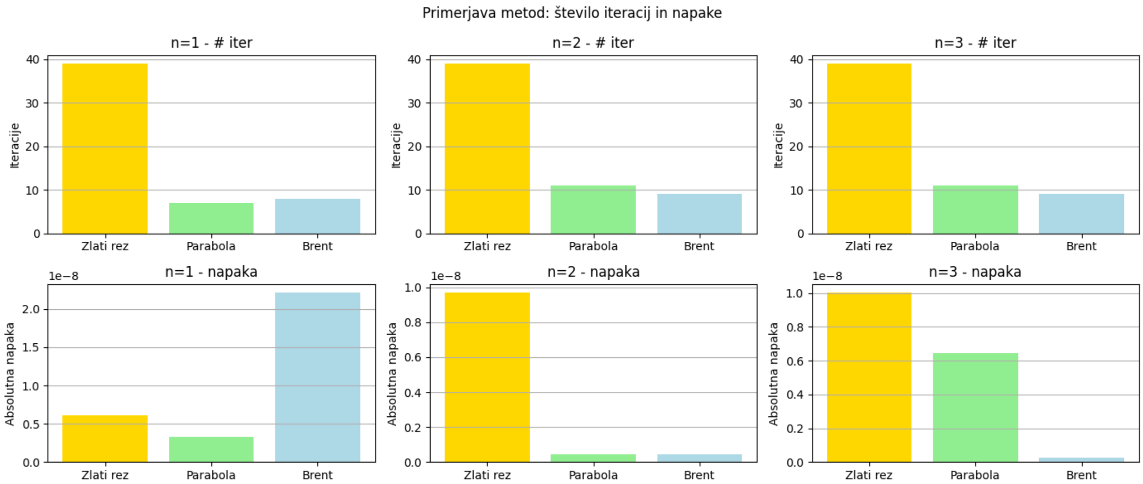
na intervalu [4.5, 5.5]. Rezultate za vse tri metode sem primerjal z *referenčno* rešitvijo, dobljeno z Brentovo metodo in zelo zaostreno toleranco (10^{-14}).

Na Sliki 1 sem prikazal primere za $n = 1, 2, 3$. Vidim, da se vse metode približajo dejanskemu minimumu, pri čemer se včasih vrednosti, dobljene z zlatim rezom in parabolično interpolacijo, razlikujejo za nekaj 10^{-6} ali več.



Slika 1: Funkcije $x^n \sin(x)$ za $n = 1, 2, 3$ (na intervalu $[4.5,\ 5.5]$) z označenimi minimumi, ki sem jih našel z metodami zlatega reza, parabolične interpolacije in Brentove metode.

Hitrost konvergence in natančnost Nato sem izmeril *število iteracij* in *absolutno napako* glede na referenco. Na Sliki 2 (zgornja vrsta) so stolpčni grafi števila iteracij, spodnja vrsta pa prikazuje absolutne napake.



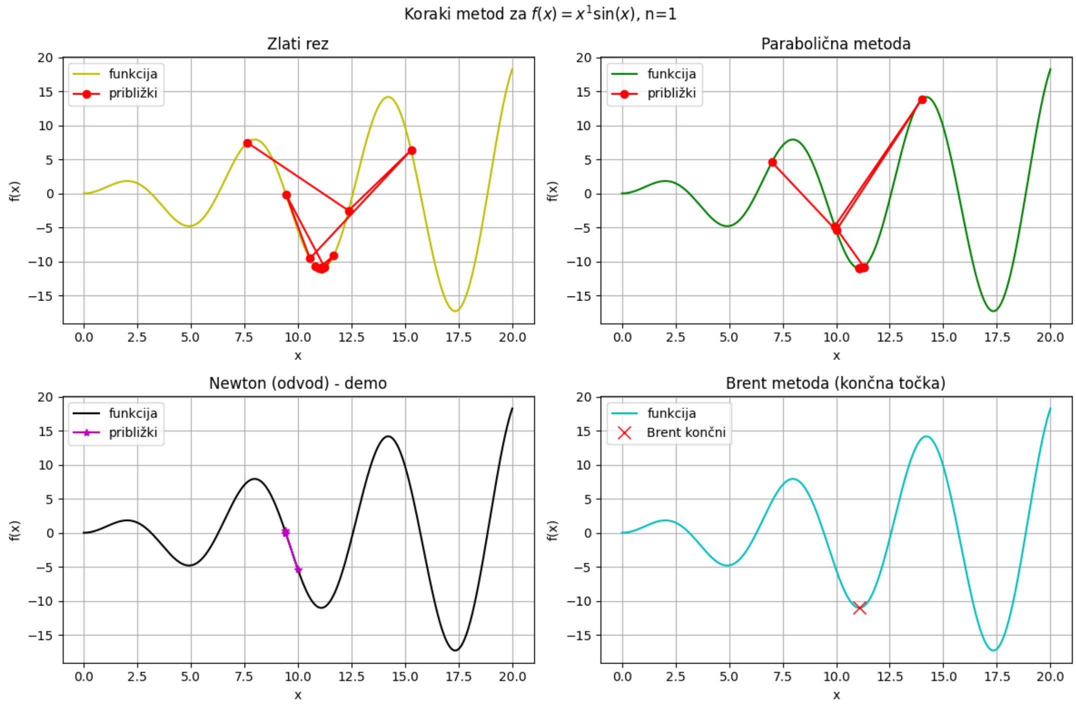
Slika 2: Primerjava metod zlatega reza, parabolične interpolacije in Brentove metode: zgoraj je število iteracij, spodaj absolutna napaka glede na referenco. Za $n = 1, 2, 3$.

Slika 2 kaže, da:

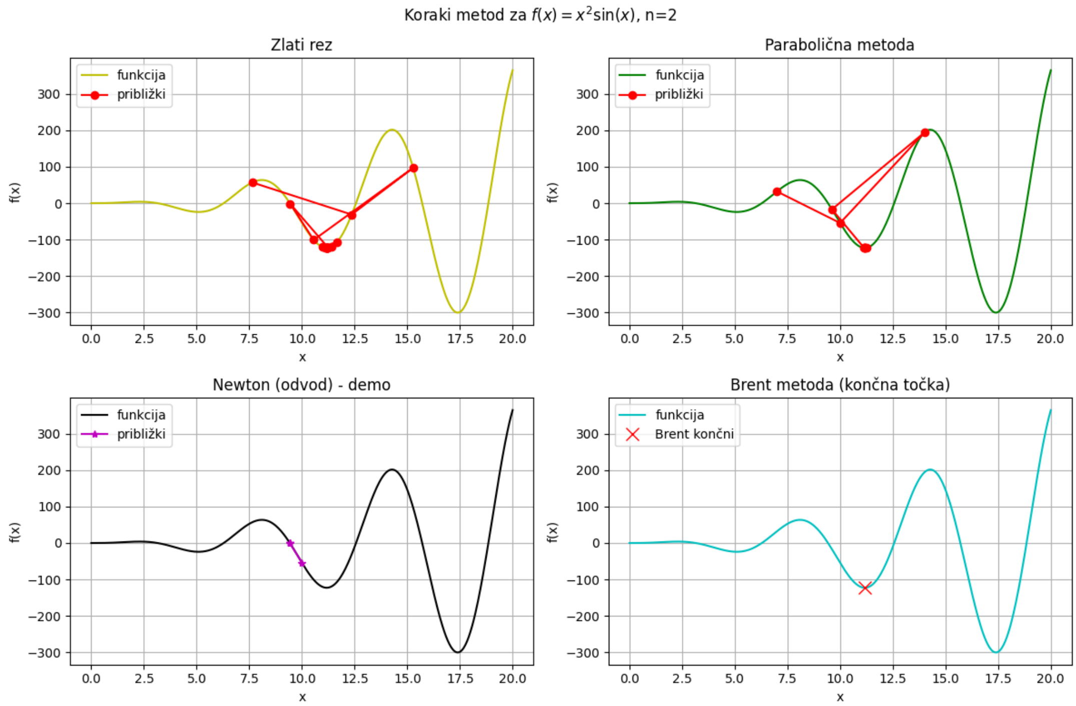
- *Zlati rez* potrebuje največ iteracij, a vedno najde stabilen rezultat,
- *Parabolična interpolacija* je pogosto hitrejša, vendar lahko postane nestabilna,
- *Brentova metoda* se izkaže kot dobra kombinacija obeh pristopov – večinoma doseže nizko število iteracij in visoko natančnost.

2.2. Prikaz iteracijskih korakov

Za podrobnejši vpogled v delovanje sem prikazal *vmesne korake* metod (glej Sliki 3, 4 in 5). V teh grafih sem prikazal, kako *zlati rez* postopoma »krči« interval, *parabolična interpolacija* preskakuje med novimi ocenami minimuma, ter kako *Newtonova metoda* (demonstracija uporabe odvoda) išče ničlo prvega odvoda, kar v praksi zahteva tudi izračun drugega odvoda ali uporabo sekantne metode. Brentova metoda, uporabljena v `scipy`, ne vrača vmesnih korakov, zato sem prikazal le končno točko.

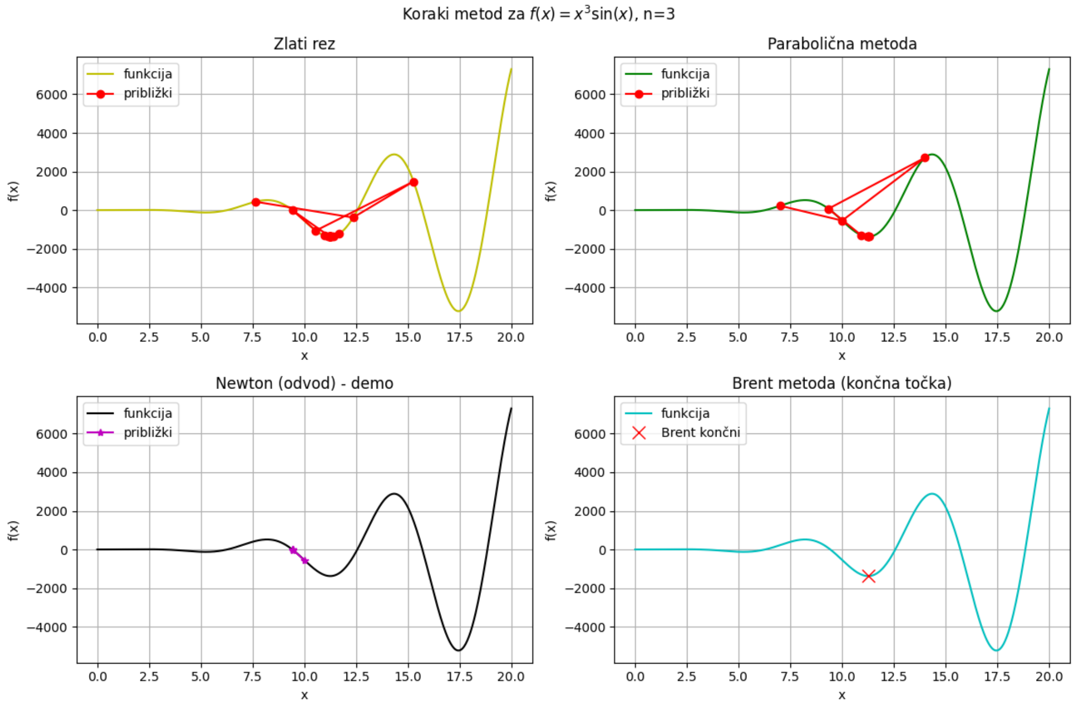


Slika 3: Koraki metod za $f(x) = x^1 \sin(x)$, prikazani v štirih podgrafih (zlati rez, parabola, Newton, Brent).



Slika 4: Koraki metod za $f(x) = x^2 \sin(x)$.

Na Slikah 3–5 sem prikazal, kako sem z uporabo različnih metod iterativno iskal minimum. Rumena (ali zelena, črna) krivulja predstavlja funkcijo, rdeči in magenta simboli pa so vmesni približki, ki sem jih obdelal.



Slika 5: Koraki metod za $f(x) = x^3 \sin(x)$.

3. Prilagajanje podatkov modelu $a\,x\,e^{b\,x}$

Za nabor podatkov $\{x_i,\, y_i,\, \sigma_i\}$ sem prilagodil model:

$$f(x, a, b) \;=\; a\,x\,e^{b\,x}.$$

Pri tem sem uporabil metodo najmanjših kvadratov, ki minimizira

$$\chi^2(a, b) \;=\; \sum_i \frac{\big[y_i - f(x_i, a, b)\big]^2}{\sigma_i^2}.$$

Rezultate sem prikazal na grafu (Slika 6), kjer rdeči križci z navpičnimi črtami predstavljajo izmerjene podatke z negotovostjo σ_i, zelena črta pa je prilagojena krivulja $a\,x\,e^{b\,x}$.

Dobljen je bil rezultat, na primer:

$$a \;=\; 0.426 \pm 0.007, \quad b \;=\; -0.241 \pm 0.002, \quad \chi^2 \;\approx\; 22.88.$$

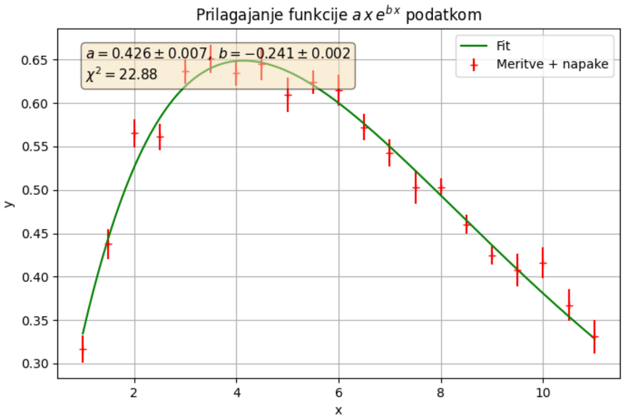
Fit se dobro ujema z izmerjenimi podatki, kar je razvidno iz Slike 6.

4. Downhill simplex za dvodimenzionalne Gaussove porazdelitve

Za iskanje *maksimumov* dvodimenzionalnih funkcij sem uporabil metodo Nelder–Mead (*Downhill simplex*), pri čemer sem minimiziral $-g(x, y)$. Obravnaval sem:

- Enojno 2D Gaussovo porazdelitev:

$$g_1(x, y) \;=\; \exp\Big[-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2\sigma^2}\Big],$$



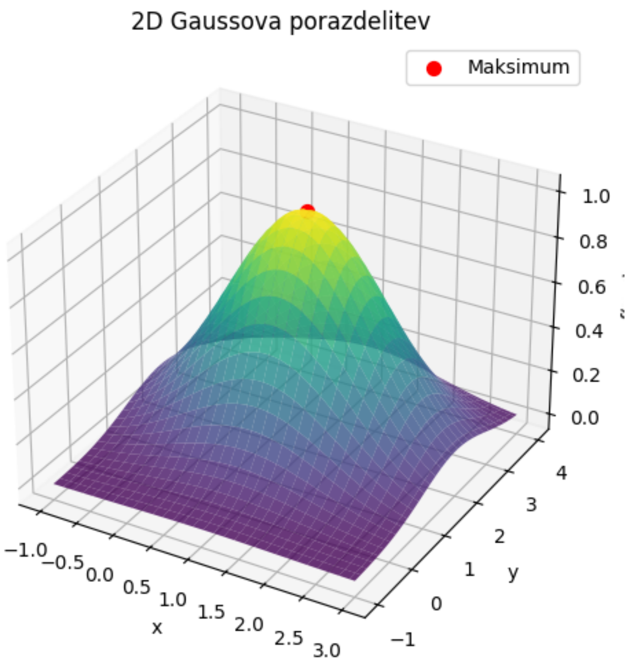
Slika 6: Prilagajanje funkcije $a\,x\,e^{b\,x}$ podatkom. V legendi in besedilnem oknu so prikazane ocenjene vrednosti parametrov a, b ter χ^2.

kjer je pričakovani maksimum pri (x_0, y_0).

- Dvojno (kamelja) Gaussovo porazdelitev, ki je vsota dveh Gaussov z različnima središčema:

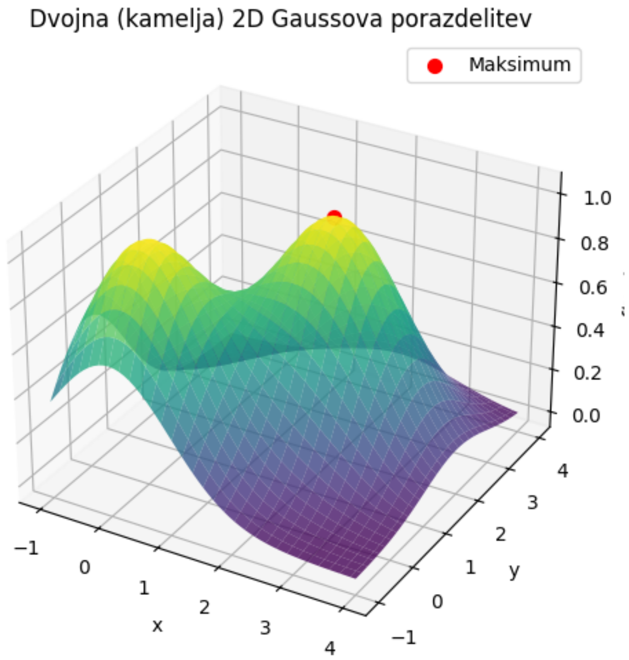
$$g_2(x, y) \;=\; \exp\Big[-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}\Big] \;+\; \exp\Big[-\frac{(x-2)^2+(y-2)^2}{2\sigma^2}\Big].$$

Ta funkcija ima dva lokalna maksimuma.



Slika 7: Enojna 2D Gaussova porazdelitev z označenim maksimumom (rdeča pika).

Na Sliki 7 sem prikazal 3D površinski diagram enojne Gaussove porazdelitve, kjer je maksimum lociran pri (x_0, y_0) (v mojem primeru $(1, 2)$).



Slika 8: Dvojna (kamelja) 2D Gaussova porazdelitev z dvema lokalnima vrhovoma. Označen je največji maksimum.

Na Sliki 8 sem prikazal "kameljo grbo" (vsoto dveh Gaussov). Pri iskanju sem uporabil dve različni začetni ugibanji, saj funkcija ima dva lokalna vrha, in izbral sem tistega z večjo vrednostjo.

5. Zaključek

V tem poročilu sem predstavil več pristopov k iskanju ekstremov:

1. **Zlati rez, parabolična interpolacija in Brentova metoda** za enodimenzionalne funkcije tipa $x^n \sin(x)$. Primerjal sem končno število iteracij in natančnost dobljenih rezultatov. Rezultati kažejo, da je Brentova metoda v praksi zelo učinkovita in stabilna, medtem ko je zlati rez robusten, a zahteva več korakov.

2. **Prilagajanje funkcije** $a\,x\,e^{b\,x}$ podatkom sem izvedel z metodo najmanjših kvadratov, kar mi je omogočilo določitev parametrov a in b ter izračun χ^2, ki je bil v mojem primeru približno 22.88.

3. **Downhill simplex** (Nelder–Mead) sem uporabil za iskanje maksimumov dvodimenzionalnih funkcij (enojne in dvojne Gaussove porazdelitve). Pri tem sem minimiziral negativ funkcije in uspešno našel globalni maksimum.

Priloženi grafi (Slike 1–8) in analize iteracij ter napak potrjujejo, da so izbrane metode uporabne za reševanje problemov iskanja ekstremov, tako v eno- kot dvodimenzionalnem prostoru.