Matematično fizikalni seminar

Iskanje funkcijskih ekstremov in prilagajanje funkcij meritvam

Teodor Jovanovski, 28241125
Profesor: doc. dr. Miha Muškinja
Marec, 2025

1 Uvod

Tako kot pri vseh numeričnih metodah kompleksnost metode iskanja ekstremov narašča z dimenzijo prostora v katerem je funkcija definirana. Najbolj robustne in zanesljive metode so tako razvite za iskanje ekstremov v eni dimenziji. V splošnem pa ne smemo pozabiti na dejstvo, da *ne obstaja* metoda, ki bi avtomatsko našla *globalni* ekstrem (minimum ali maksimum), vsaka metoda se bo slej ko prej ustavila v nekem lokalnem ekstremu. Ali je le-ta globalen in/ali edini pa je potrebno proučiti naknadno (s poskušanjem ipd.).

Iskanje minimumov ali maksimumov funkcije lahko poenotimo z metodami iskanja minimumov, saj za maksimume lahko vedno definiramo $f \to -f$.

V eni dimenziji je najpreprostejša (in najrobustnejša) metoda *zlatega reza*. Najprej poiščemo tri točke (A<b<C), za katere velja f(b) < f(A) in f(b) < f(C); točka b je torej groba ocena minimuma. Novo točko B nato najdemo s uporabo razmerja zlatega reza, tukaj podano kot:

$$\frac{1}{\varphi} = \frac{\sqrt{5}-1}{2} = 0.61803.$$

Koordinata nove točke B je podana z:

$$B = A + h \cdot \frac{1}{\varphi}, \quad h = |C - A|.$$

Dodatno poskusno točko D pa nato dodamo s faktorjem:

$$\frac{1}{\varphi^2} = \frac{3-\sqrt{5}}{2} = 0.38197,$$

in sicer s koordinato:

$$D = A + h \cdot \frac{1}{\varphi^2}, \quad h = |C - A|.$$

Očitno je točka D bližje točki A kot točka B. Nato obravnavamo dva scenarija:

- Če je vrednost $f(D) > f(B)$, potem postane novi triplet (D,B,C), točko A torej nadomesti točka D.
- V nasprotnem primeru, ko je $f(D) < f(B)$, pa postane novi triplet (A,D,B), točko C torej nadomesti točka B, njeno vlogo pa prevzame točka D.

Pri vsakem koraku se interval zmanjša za faktor $\frac{1}{\varphi}$.

Metodo nato ponavljamo do želene natančnosti, pri čemer moramo paziti, da je dosegljiva natančnost le *koren iz numerične natančnosti računskih operacij*! (npr 10^{-8} za dvojno natančnost (double precision)).

Hitrejša, a nekoliko labilnejša metoda, je iskanje minimumov z prilagajanjem parabole na tri začetne točke in oceno novega minimuma iz minimuma prilagojene parabole:

$$x = b - \frac{1}{2}\frac{(b-a)^2[f(b)-f(c)] - (b-c)^2[f(b)-f(a)]}{(b-a)[f(b)-f(c)] - (b-c)[f(b)-f(a)]},$$

ki pa odpove(duje) ko so izbrane tri točke (skoraj) kolinearne. Smiselna je torej ustrezna kombinacija obeh metod, poznana kot *Brentova metoda*.

V primeru, ko je poznana analitična oblika odvoda iskane funkcije, si seveda lahko pomagamo z numeričnim iskanjem ničle v odvodu (npr z metodo bisekcije).

V več dimenzijah je problem ustrezno težji, najrobustnejša in precej učinkovita je t.i. *Downhill simplex* metoda, ki jo bralec z lahkoto najde v literaturi in na spletu.

Poseben primer uporabe minimizacije funkcij je prilagajanje (angl. *fitting*) modelov (in s tem napovedanih funkcij) s prostimi parametri naboru izmerjenih količin. Najpogostejša načina prilagajanja funkcij s prostimi parametri podatkom sta metodi χ^2 in metoda največje zanesljivosti (angl. *Maximum Likelihood*

Metod). Označimo nabor merjenih podatkov z $\{x_i, y_i\}$ in njihove nedoločenosti z $\{\sigma_i\}$, modelske funkcije s $y = f(x, \alpha)$, kjer so z α označeni neznani parametri, ter uvedimo cenilko (angl. *estimator*) za χ^2:

$$\chi^2(\alpha) = \sum_i \frac{(y_i - f(x_i, \alpha))^2}{\sigma_i^2},$$

kjer je nato ocena iskanih parametrov α dobljena z minimizacijo funkcije $\chi^2(\alpha)$.
Metoda največje zanesljivosti se uporablja predvsem v primerih, ko vrednost $y = f(x, \alpha)$ predstavlja verjetnost (ali verjetnostno gostoto) in tako iščemo nabor parametrov α, pri katerih je nabor verjetnosti za dane izmerke največji. Iščemo torej maksimum produkta verjetnosti

$$L(\alpha) = \prod_i f(x_i, \sigma_i, \alpha),$$

oziroma še bolj pogosto minimum naravnega logaritma zgornjega izraza (ki je pohlevnejša funkcija):

$$-\ln L(\alpha) = -\sum_i \ln f(x_i, \sigma_i, \alpha).$$

V primeru, da je verjetnostna porazdelitev Gaussova in da iščemo neznani parameter le-te (μ, srednja vrednost), sta obe metodi enaki (dokaz je prepuščen bralcu).

Naloga:

- Z metodo zlatega reza in parabolično ter saj eno vgrajeno metodo (npr Brentovo metodo v SciPy: scipy.optimize.brent) poišči ekstreme nekaj funkcij različnih redov tipa $x^n * sin(x)$ (recimo do tretjega reda) in primerjaj hitrost konvergence (št. korakov) in natančnost s točnimi vrednostmi.

- Z zgornjimi metodami poišči najboljše prilagajanje med podatki:

$$\begin{aligned}\{x_i\} = [&1.00000000, 1.50000000, 2.00000000, 2.50000000, 3.00000000, 3.50000000, 4.00000000,\\ &4.50000000, 5.00000000, 5.50000000, 6.00000000, 6.50000000, 7.00000000, 7.50000000,\\ &8.00000000, 8.50000000, 9.00000000, 9.50000000, 10.0000000, 10.5000000, 11.0000000]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\{y_i\} = [&0.31700705, 0.43791106, 0.56528271, 0.56102378, 0.63664784, 0.65121353, 0.63487502,\\ &0.64501481, 0.60942923, 0.62411336, 0.61455575, 0.57226264, 0.54291294, 0.50329224,\\ &0.50314769, 0.46050043, 0.42461463, 0.40771586, 0.41605889, 0.36732963, 0.33085992]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\{\sigma_i\} = [&0.01548814, 0.01715189, 0.01602763, 0.01544883, 0.01423655, 0.01645894, 0.01437587,\\ &0.01891773, 0.01963663, 0.01383442, 0.01791725, 0.01528895, 0.01568045, 0.01925597,\\ &0.01071036, 0.01087129, 0.01020218, 0.01832620, 0.01778157, 0.01870012, 0.01978618]\end{aligned}$$

  in funkcijo dveh neznanih parametrov a in b, oblike $f(x, a, b) = a * x * exp(b * x)$. Uporabi eno od vgrajenih metod (npr. v Pythonovih SciPy knjižnicah.)

- **Dodatno:** Z Downhill simplex metodo poišči maksimum dvo-dimenzionalne Gaussove porazdelitve ter dvojne 2D Gaussove porazdelitve (kamelja grba).

2 Iskanje ekstremov

Tokrat sem se odločil, da za domačo nalogo uporabim tako Python kot MATLAB. Za prvi del sem uporabil Pythonovo kodo, ki nam je bila na voljo v spletni učilnici.

Odločil sem se, da bom za svojo domačo nalogo uporabil naslednje tri funkcije:

$$f(x) = xsin(x)$$
$$f(x) = x^2 sin(x)$$
$$f(x) = x^3 sin(x),$$

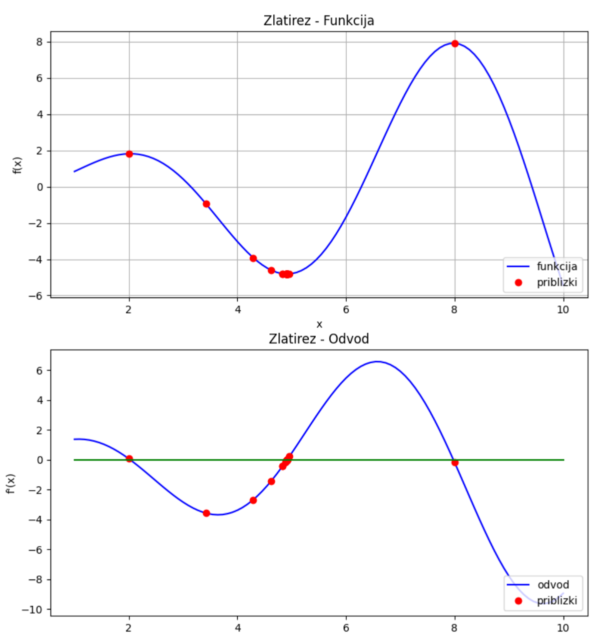
pri čemer sem vse odvode izračunal na roko.

Cilj tega dela domače naloge je bil poiskati ekstrem funkcije s tremi različnimi metodami in primerjati rezultate.

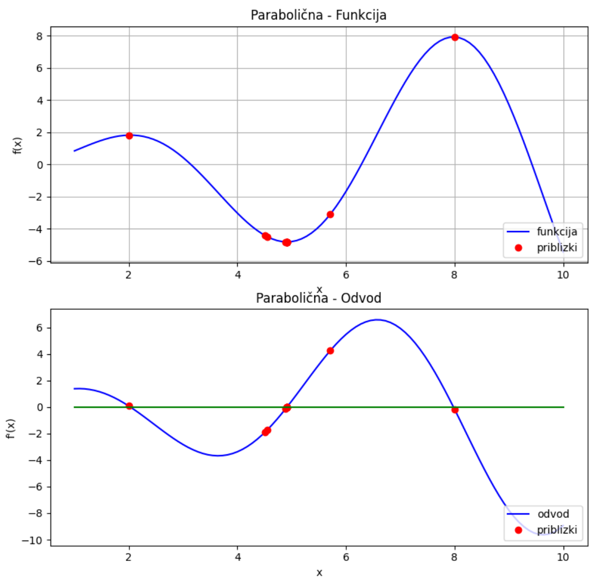
2.1 $f(x) = xsin(x)$

	Brent	Zlati rez	Parabolično
Minimum	4,9131804405349655	4,913180457109577	4,913180435607417
Relativna napaka	$2,239 \cdot 10^{-10}$	$3,597 \cdot 10^{-9}$	$7,790 \cdot 10^{-10}$
Št. poskusov	23	77	14

Tabela 1: Rezultati za funkcijo $f(x) = xsin(x)$



Slika 1: Vizualni prikaz iskanja ekstremov z metodo zlatega reza za funkcijo in njen prvi odvod.

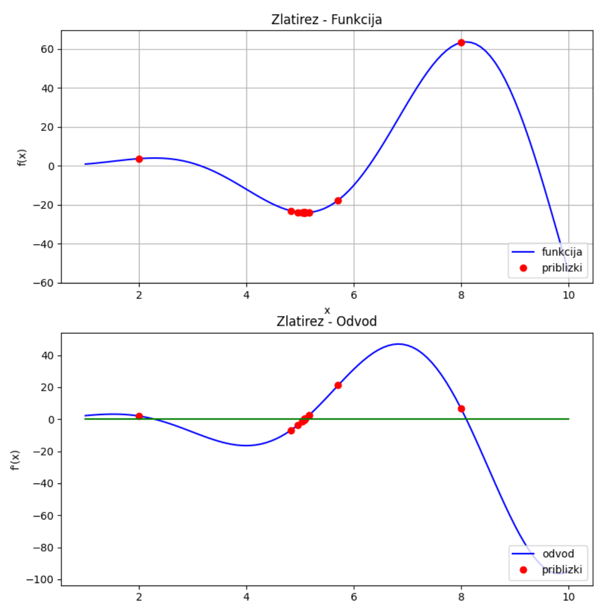


Slika 2: Vizualni prikaz iskanja ekstremov s parabolično metodo za funkcijo in njen prvi odvod.

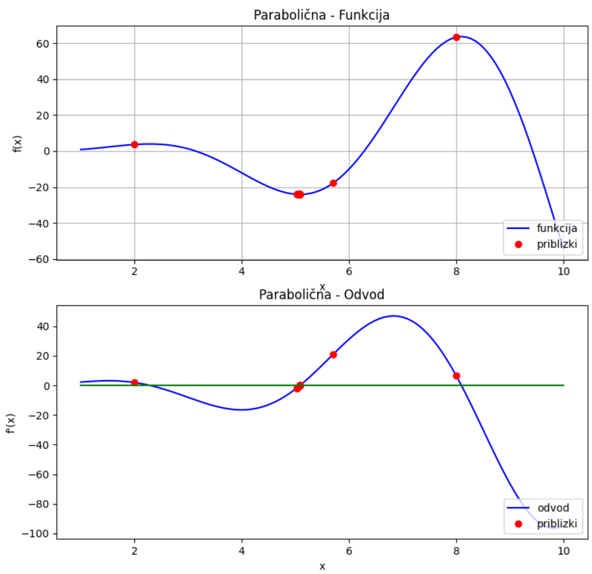
2.2 $f(x) = x^2 sin(x)$

	Brent	Zlati rez	Parabolično
Minimum	5,086985094134327	5,086985103196909	5,086985095667046
Relativna napaka	$6,302 \cdot 10^{-12}$	$1,788 \cdot 10^{-9}$	$3,076 \cdot 10^{-10}$
Št. poskusov	22	77	20

Tabela 2: Rezultati za funkcijo $f(x) = x^2 sin(x)$



Slika 3: Vizualni prikaz iskanja ekstremov z metodo zlatega reza za funkcijo in njen prvi odvod.

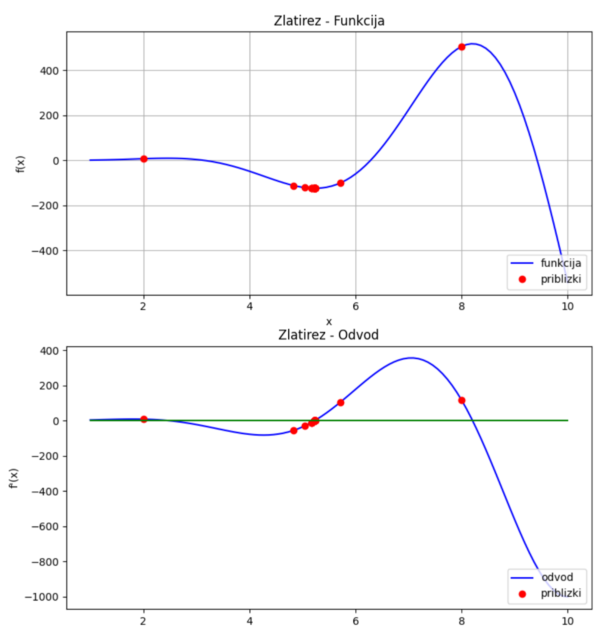


Slika 4: Vizualni prikaz iskanja ekstremov s parabolično metodo za funkcijo in njen prvi odvod.

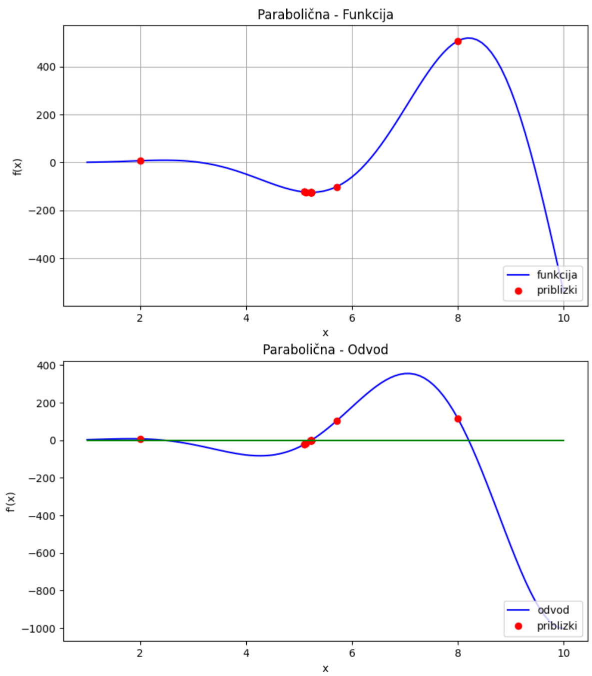
2.3 $f(x) = x^3 sin(x)$

	Brent	Zlati rez	Parabolično
Minimum	5,232938453333917	5,232938462613543	5,232938452858347
Relativna napaka	$3,411 \cdot 10^{-11}$	$1,739 \cdot 10^{-9}$	$1,250 \cdot 10^{-10}$
Št. poskusov	24	77	19

Tabela 3: Rezultati za funkcijo $f(x) = x^3 sin(x)$



Slika 5: Vizualni prikaz iskanja ekstremov z metodo zlatega reza za funkcijo in njen prvi odvod.



Slika 6: Vizualni prikaz iskanja ekstremov s parabolično metodo za funkcijo in njen prvi odvod.

2.4 Komentar

Po pričakovanjih je Brentova metoda, ki je sama po sebi kombinacija metod, najnatančnejša in deluje z veliko hitrostjo. Parabolična metoda se je izkazala za najhitrejšo, njena natančnost pa je primerljiva z natančnostjo Brentove metode, čeprav moram poudariti, da je bila uporabljena v primeru, v katerem zanjo ni bilo pričakovati težav.

3 Prilagajanje

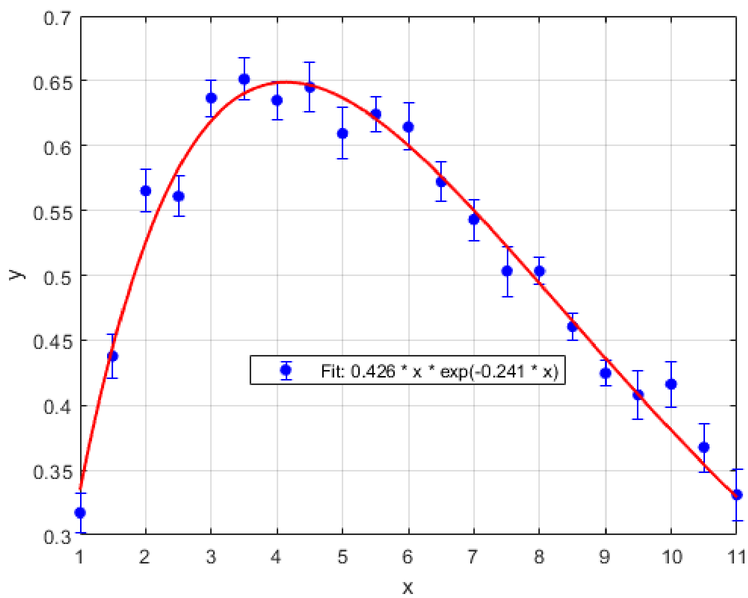
Za drugi del domače naloge sem uporabil MATLAB, in sicer funkcijo *fit* iz *Curve Fitting Toolbox.*

Cilj drugega dela domače naloge je bil poiskati najboljše prilagajanje med podatki in funckijo dveh neznanih parametrov oblike $f(x, a, b) = axe^{bx}$ z uporabo eno od vgrajenih metod. Matlabova funkcija *fit* uporablja metodo tehtanih najmanjših kvadratov.

3.1 Rezultati

Postopek prilagajanja je dal naslednje optimalne vrednosti parametrov:

$$a = 0,425979$$
$$b = -0,241493$$



Slika 7: Podatkovne točke, prilagojene krivulji $f(x, a, b) = axe^{bx}$.

Graf kaže, da se funkcija dobro ujema s podatki.

4 Zaključek

V tej nalogi sem uporabil numerične metode za iskanje ekstremov funkcij in za prilagajanje modelne funkcije podanim podatkom. Primerjava metod in rezultati prilagajanja kažejo na uporabnost teh metod pri analizi matematičnih funkcij in eksperimentalnih meritev.