

Függvények minimumának és maximumának megkeresése

2019. május 13.

Nem lineáris függvényillesztés

A χ^2 definíció szerint:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{[y_i - y(x_i|a)]^2}{\sigma_i^2},$$

ezt szeretnénk minimalizálni. Általános esetben ez a következőre vezet:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} = 2 \cdot \sum_{i=1}^N \left[\frac{f(x_i|a) - y_i}{\sigma_i^2} \cdot \frac{\partial f(x|a)}{\partial a_j} \bigg|_{x=x_i} \right] = 0$$

Ha f valamilyen bázisfüggvények (paramétertől nem függő függvények) lineárkombinációjaként állt elő, akkor a probléma lineáris volt.

Optimalizáció, extrémumok megkeresése

Függvényillesztéskor minimumot keresünk

- ▶ nem a deriváltra vonatkozó egyenletrendszer oldjuk meg,
- ▶ hanem közvetlenül próbáljuk χ^2 -et minimalizálni
- ▶ általában viszont ismerjük a $\frac{\partial f(x|a)}{\partial a_j}$ deriváltakat
- ▶ látni fogjuk, ez még később jól jön

Bár a függvényillesztés a leggyakoribb, az extrémumkeresés általánosabb probléma

- ▶ extrémum: minimum vagy maximum
- ▶ rendszer energiaminimuma
- ▶ legkisebb hatás stb.

Extrémumkeresés alapproblémája

Adott egy $f(\mathbf{x})$ függvény

- ▶ skalár értékű, de
- ▶ a változója lehet vektor is
- ▶ általában f valamilyen költségfüggvény, pl. χ^2 illesztés

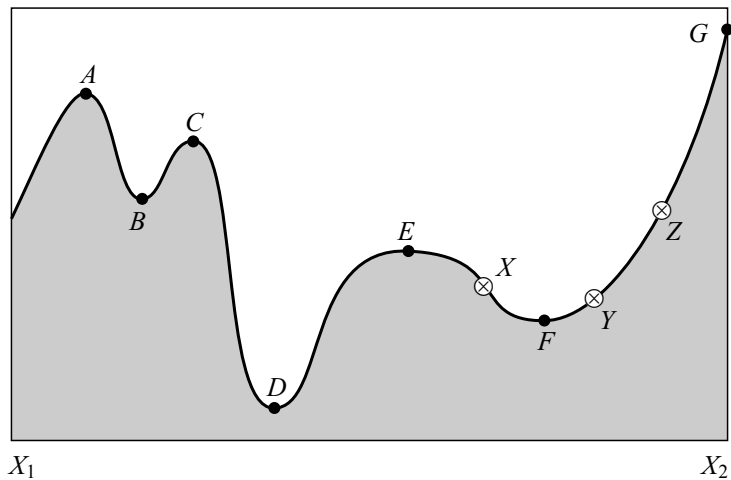
Hol van a függvény minimuma, illetve maximuma?

- ▶ a két probléma azonos $f(\mathbf{x}) \Rightarrow -f(\mathbf{x})$ felcseréléssel
- ▶ együttesen *extrémumkeresésnek* hívjuk.
- ▶ általában minimumkeresésről beszélünk

Feladat: találjuk meg az extrémumot

- ▶ minél kevesebb lépésben
- ▶ minél pontosabban
- ▶ minél kevesebb függvénykiértékeléssel

Lokális és globális minimumok



Az egyik fő probléma: lokális minimumok

Az algoritmusok általában lokálisan működnek

- ▶ nem lineáris esetben sosincs jó globális algoritmus
- ▶ emiatt rossz helyről indulva rossz minimumot találnak
- ▶ „bennragadnak” a lokális minimumban

Emiatt pl. a függvényillesztést eleve „jó helyről” kell indítani

- ▶ különben a χ^2 lokális minimumában landolunk
- ▶ vagy elszáll a végtelenbe

Minimum bekeretezése egy dimenzióban

Gyökkereső algoritmusok esetében

- ▶ ha $f(a)$ és $f(b)$ ellentétes előjelű, akkor
- ▶ a függvénynek a és b között van gyöke

Minimumkeresés esetében

- ▶ már három pontot kell használni
- ▶ $a < b < c$, továbbá
- ▶ $f(b) < f(a)$ és $f(b) < f(c)$
- ▶ ekkor a függvénynek *lokális minimuma* van a és c között

Minimum iteratív keresése

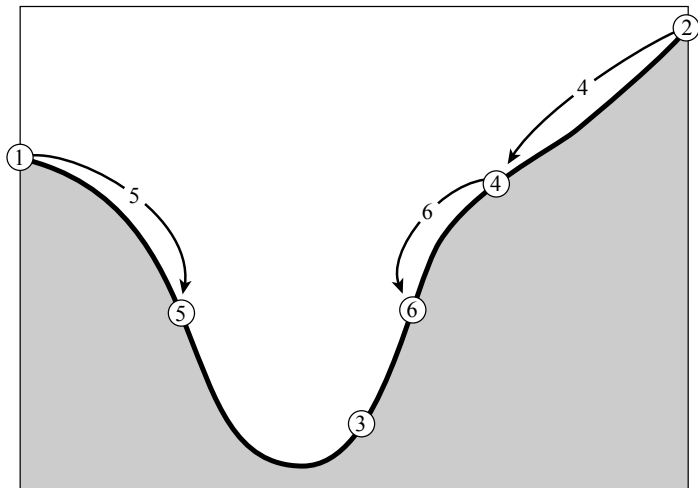
Kiindulás:

- ▶ bekereteztük a minimumot az a , b és c számokkal

Iterációs lépés:

- ▶ választunk egy új x pontot az $[a, c]$ intervallumon belül
- ▶ az a és c pontok közül valamelyiket elhagyjuk
- ▶ úgy, hogy a megmaradó három pontra továbbra is igaz legyen:
- ▶ $a < b < c$, valamint
- ▶ $f(b) < f(a)$ és $f(b) < f(c)$

Minimum iteratív keresése



Az aranymetszés módszere

Hol érdemes az új pontot választani?

- ▶ a kialakuló legrövidebb intervallumot akarjuk megtartani
- ▶ de ennek is tudnia kell a feltételt:
 $f(b') < f(a')$ és $f(b') < f(c')$
- ▶ minimalizálni akarjuk a rossz pont választásának esélyét

Az új pont helyének megválasztása

A b pont valahol az $[a, c]$ intervallumban van

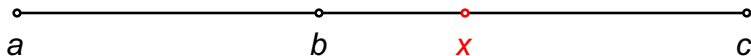
$$w = \frac{b - a}{c - a} \qquad 1 - w = \frac{c - b}{c - a}$$

Ha választunk egy új x pontot, mondjuk b -n túl, akkor legyen

$$z = \frac{x - b}{c - a}$$

Az létre jövő két új intervallum hossza ezért

$$\overline{ax} = (c - a)(w + z) \qquad \text{vagy} \qquad \overline{bc} = (c - a)(1 - w)$$



Az létre jövő két új intervallum hossza ezért

$$\overline{ax} = (c - a)(w + z) \quad \text{vagy} \quad \overline{bc} = (c - a)(1 - w)$$

Legjobban akkor járunk, ha x -et úgy választjuk, hogy mindkét intervallum azonos hosszúságú legyen, azaz

$$z = 1 - 2w$$

A korábbi b pontot is ugyanezzel a stratégiával választottuk, tehát w -re szükségképpen igaz, hogy

$$w = \frac{z}{1 - w}$$

Ez egyenletet ad w -re:

$$w^2 - 3w + 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad w = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \approx 0,38197$$

A módszer hatékonysága

Az intervallum hossza minden lépésben 0,61803-szorosára csökken

- ▶ kicsit lassabb, mint a gyökkeresés felezgetős módszere

Azt várjuk, hogy a minimum a számábrázolás pontosságával meghatározható

- ▶ float: 10^{-7} , double: 10^{-16} , de nem így van!

Ha a minimumot $(1 - \epsilon)b < b < (1 + \epsilon)b$ közé akarjuk keretezni

- ▶ a minimum körüli Taylor-sok második tagja eltűnik

$$f(x) \approx f(b) + \frac{1}{2}f''(b)(x - b)^2$$

- ▶ így a minimum közelébe csak $\sqrt{\epsilon}$ rendben kerülhetünk

$$|b - x| < \sqrt{\epsilon} |b| \sqrt{\frac{2|f(b)|}{b^2 f''(b)}}$$

Brent-módszer parabolikus interpolációval

Az aranymetszés módszere a legrosszabb függvényekre van kitalálva

- ▶ általában ennél könnyebb a helyzet
- ▶ a függvény sok helyütt jól viselkedik
- ▶ ilyenkor lehet magasabb rendű módszereket használni

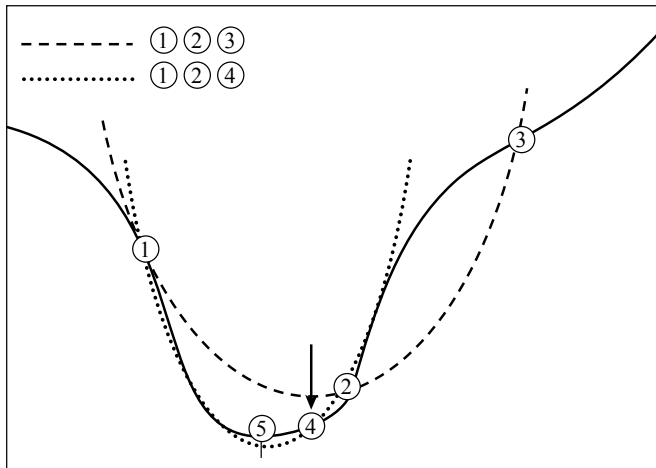
Ha az a , b és c pontok bekeretezik a minimumot

- ▶ megpróbálhatunk parabolát illeszteni
- ▶ az új pontot a parabola minimumába tesszük

Ha nem sikerül jó parabolát illeszteni

- ▶ visszatérünk az intervallum felosztogatásához

Minimum megtalálása parabolaillesztéssel



Deriváltat is használó módszer egy dimenzióban

Ha nem csak az f függvény, de a deriváltja is ismert

- ▶ elvileg kereshetnénk a derivált zérushelyeit
- ▶ például szekáns módszerrel
- ▶ nem tudjuk megmondani, hogy az $f'(x) = 0$ helyek milyen típusú extrémumok

Az aranymetszéses módszer javítható

- ▶ ha a deriváltat olcsó kiszámolni
- ▶ a minimumot itt is a , b és c helyek keretezik
- ▶ kiszámoljuk $f'(b)$ -t, az előjele megadja, hogy merre lépünk

Több dimenziós módszerek

Több dimenzióban nem tudjuk bekeretezni a minimumot

- ▶ kérdés, hogy tudjuk-e a Jacobi-mátrixot
- ▶ ha nem, akkor a meredekséget is numerikusan kell becsülni

A deriváltak helyettesíthetők véges differenciával

- ▶ de az elején csak durván közelítjük

A deriváltak durva közelítésére alkalmasak a szimplexek

- ▶ a D dimenziós térben $D + 1$ pont által meghatározott idom
- ▶ 2 dimenzióban: háromszög
- ▶ 3 dimenzióban: általános tetraéder stb.

A Nelder–Mead-módszer

Kiindulás:

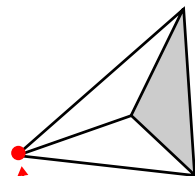
- ▶ választunk egy \mathbf{P}_0 pontot, ami közel van a minimumhoz
- ▶ ekörül választunk egy nem túl nagy szimplexet
- ▶ például a következő módon:

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_0 + \Delta \mathbf{e}_i$$

- ▶ Δ -t a problémának megfelelő nagyságúra kell választani
- ▶ \mathbf{e}_i -k a bázisvektorok

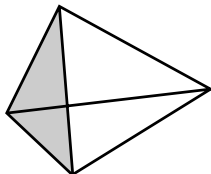
Elemi lépés:

- ▶ meghatározzuk a szimplex azon csúcsát, ahol a függvény értéke a legnagyobb
- ▶ ezt a csúcsot módosítjuk
- ▶ a módosítás többféle módon történhet
- ▶ mindig a lokális minimum irányába haladunk

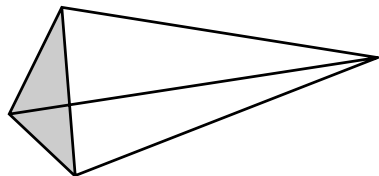


eredeti szimplex

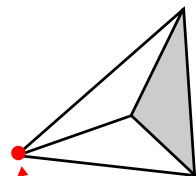
legnagyobb
függvényérték



tükrözés

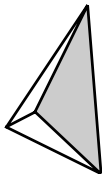


tükrözés és
nyújtás

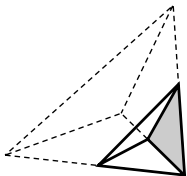


legnagyobb
függvényérték

eredeti szimplex



kontrakció



többirányú kontrakció

A szimplex módszer előnye

A függvény parciális deriváltjait nem ismerjük

- ▶ de a szimplex csúcsai mindig valami képet adnak a függvény lokális meredekségéről
- ▶ a szimplex minden dimenzióban a legegyszerűbb térbeli alakzat

Az „amőba” mozgása

- ▶ a függvény meredek részein lemászik a hegyről
- ▶ a szűk völgyekben összehúzódik, és úgy halad lefelé
- ▶ a végén ráhúzódik a minimumra

Leállási feltétel:

- ▶ a szimplex térfogata egy adott méretnél kisebb
- ▶ a csúcsokban felvett függvényértékek egy adott határon belül vannak

Gradiensvektor

Legyen f olyan, hogy ki tudjuk számolni a $\nabla f(\mathbf{x})$ gradiensvektort

- ▶ azaz minden $\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}$ ismert

A gradiensvektor kiszámolása nem feltétlen nehéz

- ▶ az analitikus alakot kell beprogramozni
- ▶ a parciális deriváltak általában eléggé hasonlóak
- ▶ sok tagot csak egyszer kell kiszámolni
- ▶ ezeket eltároljuk, és újra használjuk

Példa gradiensvektorra

Gauss-görbét szeretnénk illeszteni:

$$f(x) = a \exp \left[-\frac{(x-b)^2}{c^2} \right] + d$$

A parciális deriváltak:

$$\frac{\partial f}{\partial a} = e^{-\frac{(x-b)^2}{c^2}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial b} = \frac{2a(x-b) \exp \left[-\frac{(x-b)^2}{c^2} \right]}{c^2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial c} = \frac{2a(x-b)^2 \exp \left[-\frac{(x-b)^2}{c^2} \right]}{c^3}$$

$$\frac{\partial f}{\partial d} = 1$$

Konjugált gradiens módszere

Legyen f olyan, hogy a minimuma körül igaz rá:

$$f(\mathbf{x}) \approx c - \mathbf{b} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \cdot \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x},$$

- ▶ azaz jó közelítéssel kvadratikus
- ▶ a χ^2 minimalizálási problémák mind ilyenek!
- ▶ ott van a minimuma, ahol $\nabla f = 0$

Összesen $\frac{1}{2}N(N+1)$ ismeretlen van

- ▶ \mathbf{b} , valamint \mathbf{A} pozitív definit
- ▶ f -nek összesen $\frac{1}{2}N(N+1)$ paramétere van
- ▶ nagyságrendileg $O(N^2)$ paramétert kell összeszedni

Az ismeretleneket N darab lineáris minimalizációból igyekszünk kinyerni

Naiv hozzáállás: legmeredekebb ereszkedés

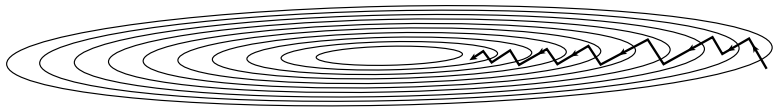
Induljunk ki egy \mathbf{P}_0 pontból

- ▶ ami elég közel van a minimumhoz
- ▶ határozzuk meg a gradiensvektort
- ▶ lépünk $-\nabla f(\mathbf{P}_i)$ irányban
- ▶ a lépés maga egy *egyenes mentén* történő minimalizáció legyen

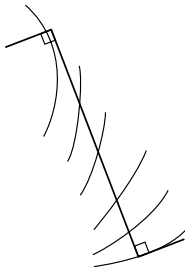
Probléma

- ▶ a lépés mindig merőleges az előzőre
- ▶ ez abból következik, hogy minimumba léptünk
- ▶ „szűk völgyekben” nagyon lassan halad

A legmeredekebb ereszkedés problémája



(a)



(b)

Konjugált gradiens módszere

Ötlet:

- ▶ ha mindig gradiens irányba megyünk, az nem jó
- ▶ lépünk ún. konjugált irányokba

Vektorok egy $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$ halmaza *ortogonális*, ha

$$\mathbf{r}_i^T \cdot \mathbf{r}_j = 0, \quad \text{ha } i \neq j$$

Vektorok egy $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$ halmaza \mathbf{A} szerint *konjugált*, ha

$$\mathbf{p}_i^T \mathbf{A} \mathbf{p}_j = 0, \quad \text{ha } i \neq j$$

- ▶ Egy \mathbf{P}_0 pontból kiindulva olyan lépéseket szeretnénk generálni, melyek teljesítik a konjugalitási feltételt.
- ▶ Belátható, hogy ezzel hatékonyan minimalizálható a felírt kvadratikusan probléma

Konjugált gradiens módszere

Kiindulás:

- ▶ \mathbf{P}_0 pontból indulunk
- ▶ az első lépést gradiens irányban tesszük: $\delta\mathbf{P}_0 = -\nabla f(\mathbf{P}_0)$
- ▶ lépünk az irány mentén minimumba: $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_0 + \beta_0\alpha\mathbf{P}_0$

További lépések:

- ▶ meghatározzuk a legmeredekebb irányt: $\delta\mathbf{P}_n = -\nabla f(\mathbf{P}_n)$
- ▶ de amivel lépünk: $\delta\mathbf{Q}_n = \delta\mathbf{P}_n + \beta_n\delta\mathbf{Q}_{n-1}$, ahol

$$\beta_n = \frac{\delta\mathbf{Q}_n^T \delta\mathbf{Q}_n}{\delta\mathbf{Q}_{n-1}^T \delta\mathbf{Q}_{n-1}}$$

- ▶ vagyis $\mathbf{P}_n = \mathbf{P}_{n-1} + \alpha_n\delta\mathbf{Q}_n$, ahol

$$\alpha_n = \frac{\delta\mathbf{Q}_{n-1}^T \delta\mathbf{Q}_{n-1}}{\delta\mathbf{P}_{n-1}^T \mathbf{A} \delta\mathbf{P}_{n-1}}$$

Néhány nehéz probléma

Minimalizációs problémák több szempontból is lehetnek nehezek

- ▶ nagyon bonyolult a minimalizálandó függvény
- ▶ nem ismerjük a deriváltjait
- ▶ lehet, hogy nem is adott függvényként
- ▶ lehet, komplex algoritmus állítja elő
- ▶ előfordul, hogy nagyon sok változója van

Fizikában többnyire

- ▶ valamilyen rendszer energiaminimumát keressük
- ▶ a változók a rendszer szabadsági fokai

Egy példa: ferromágnesek Ising-modellje

Egy példa sok változóra: ferromágnes

- ▶ olyan anyag, amiben az atomok rácsban vannak
- ▶ minden atomnak van egy elemi spinje (mágneses momentum)
- ▶ ezek a spinek szeretnek egy irányba beállni

A rendszer összenergiája

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \mu H \sum_j S_j,$$

- ▶ S_i az i . spin, értéke $+1$ vagy -1
- ▶ J_{ij} a két spin közötti csatolási állandó
- ▶ H a külső mágneses tér

A spinek milyen beállításánál van a rendszer energiaminimuma?

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \mu H \sum_j S_j,$$

Valódi ferromágnesben

- ▶ J_{ij} állandó, és csak a szomszédos spinek között
- ▶ emiatt analitikusan is kezelhető a probléma
- ▶ ún. átlagtér elmélet
- ▶ a külső tér egy irányba tudja forgatni a spineket (felmágnesezés)
- ▶ hő hatására (random zaj) elvész a mágnesezettség

Spinüveg:

- ▶ J_{ij} tetszőleges két spin között
- ▶ ráadásul J_{ij} random van kiosztva
- ▶ ez sokkal bonyolultabb probléma!

Inkább matematikai példa: utazó ügynök

Egy ügynöknek be kell járnia Amerika összes nagyvárosát

- ▶ minden városba pontosan egyszer kell elutaznia
- ▶ melyik a legrövidebb út

Ha a városok száma N , akkor

- ▶ $\frac{1}{2}N(N-1)$ távolság van
- ▶ az összes lehetséges permutáció a bejárásra $N!$

Nehéz számítási problémák

A lehetséges konfigurációk száma nagyon nagy

- ▶ Ising-modellnél spinek beállása: 2^N
- ▶ utazó ügynöknél utak száma: $N!$

Közös jellemző, hogy egy adott konfigurációra

- ▶ az Ising modellnél az energia kiszámítása csak $O(N^2)$
- ▶ utazó ügynöknél a teljes út kiszámítása csak $O(N)$

Vagyis a probléma

- ▶ nehezebb, mint polinomiális
- ▶ de egy konfiguráció polinomiális idő alatt kiértékelhető

Nehéz számítási problémák

Az ilyen nehéz számítási problémáknak nevük is van:

- ▶ *NP-teljes* problémák
- ▶ nem determinisztikus polinomiális

Nem determinisztikus algoritmus

- ▶ a végrehajtás során véletlen döntéseket hoz
- ▶ ha „szerencséje van”, akkor exponenciális helyett polinomiális időben célba ér
- ▶ szerencse kell hozzá, mert nem tudjuk előre megmondani, hogy melyik végrehajtási ág lesz gyors

Nehéz számítási problémák fizikus megoldása

Nem feltétlenül a legjobb megoldást keressük

- ▶ megelégszünk egy majdnem minimális energiával
- ▶ ez úgysem tér el nagyon a valódi minimumtól

Markov-lánc Monte Carlo

A rendszer tetszőleges állapotából indulunk ki

- ▶ tetszőleges spin-konfiguráció
- ▶ a városok tetszőleges összekötése, stb.

Definiálunk egy elemi lépést

- ▶ egy spin átfordítása
- ▶ két város sorrendjének megcserélése, stb.

Generálunk egy *random* lépést, és döntünk

- ▶ elfogadjuk, és meglépjük
- ▶ nem fogadjuk el, és inkább új lépést generálunk

Elemi lépések elfogadása: importance sampling

A véletlen lépést elfogadjuk, ha annak hatására a költségfüggvény csökken

- ▶ csökken a spin-rendszer energiája
- ▶ csökken a bejárandó városok közti út
- ▶ csökken a χ^2 értéke

Ez így jó, de ez mindig beragad valamilyen lokális minimumba

- ▶ megoldás: kis valószínűséggel engedjük „rossz” lépést is

A valószínűség a költségfüggvényből jön:

$$P_{i \rightarrow j} = \begin{cases} e^{\chi_i^2 - \chi_j^2} & \text{ha } \chi_i^2 < \chi_j^2 \\ 1 & \text{ha } \chi_i^2 \geq \chi_j^2 \end{cases}$$

Bonyolult energiafelületek

Ha nagyon bonyolult az energiafelület (költségfüggvény)

- ▶ nagyon sok változó
- ▶ a völgyek gyakorlatilag fraktálszerkezetet alkotnak
- ▶ a konfigurációs térnek lehetnek nagy vízválasztókkal szeparált részei
- ▶ ezeken a hegyeken csak nagy ugrással lehet átjutni
- ▶ kérdés, hogy elég-e hozzá az elemi lépés

Ergodikus rendszer:

- ▶ ha elemi lépések megtételével bejárható az összes konfiguráció

Szimulált hőkezelés

Módosítjuk a korábbi elfogadási valószínűséget:

- ▶ bevezetünk egy hőmérsékletet

$$P_{i \rightarrow j} = \begin{cases} e^{\frac{\chi_i^2 - \chi_j^2}{T}} & \text{ha } \chi_i^2 < \chi_j^2 \\ 1 & \text{ha } \chi_i^2 \geq \chi_j^2 \end{cases}$$

- ▶ nagyobb hőmérsékleten nagyobb valószínűséggel fogadjuk el a rossz lépést

A rendszert folyamatosan hűtjük

- ▶ miközben random lépéseket végzünk
- ▶ fokozatosan csökkentjük T értékét
- ▶ előbb-utóbb elég jól megközelíthető a minimum