MATEMATIČNO-FIZIKALNI PRAKTIKUM

3. naloga: Iskanje funkcijskih ekstremov in prilagajanje funkcij meritvam

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 minimov ali maksimov funkcije lahko poenotimo z metodami iskanja minimov, saj za maksime lahko vedno definiramo $f \to -f$.

V eni dimeniziji je napreprostejša (in najrobustnejša) metoda *zlatega reza*. Najprej poiščemo tri točke (a<b<c), za katere velja f(b) $<$ f(a) in f(b) $<$ f(c); tocka b je torej groba ocena minima. Poskusno točko x izberemo z kriterijem zlatega reza:

- Točko x iščemo v večjem od obeh intervalov [a,b] in [b,c].
- Točko x nato izberemo v danem intervalu tako, da je za *zlati rez*:

$$\bar{W} = \frac{3-\sqrt{5}}{2} = 0.38197$$

  zamaknjena on spodnjega roba intervala, recimo, če je [b,c] daljši interval:

$$x = b + \bar{W} \cdot (c - b)$$

Nato trojico točk transformiramo glede na vrednost f(x), recimo da je spet x $\in$ [b,c]:

- Če je f(b) $<$ f(x), postane novi triplet (a,b,x).
- V nasprotnem primeru, f(b) $>$ f(x), postane novi triplet (b,x,c).

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

Hitrejša, a nekoliko labilnejša metoda, je iskanje minimov z prilagajanjem parabole na tri začetne točke in oceno novega minima iz minima 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 Brentovo metodo poišči ničle nekaj funkcij različnih redov tipa $x^n * sin(x)$ (recimo do tretjega reda) in primerjaj hitrost (št. korakov) in natančnost z točnimi vrednostmi.

- Z zgornjimi metodami poišči najboljše prilagajanje med podatki:

  $$\{x_i\} = [0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1., 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5, 1.6, 1.7, 1.8, 1.9, 2.]$$

  $$\{y_i\} = [0.05174428, 0.06922745, 0.12271473, 0.14090086, 0.15552598, 0.22311474, 0.23520125, 0.24800554, 0.2563338, 0.31468472, 0.29039044, 0.33975773, 0.35883689, 0.37403456]$$

  $$\{\sigma_i\} = [0.03081416, 0.01253708, 0.01917415, 0.00181686, 0.00225624, 0.01171128, 0.00225748, 0.01660379, 0.01675817, 0.004021, 0.00598821, 0.01296109, 0.01965407, 0.02221325, 0.03605553, 0.02020327, 0.02223908, 0.02363796$$

  ,

  $$0.00104557, 0.05750314]$$

  in funkcijo dveh neznanih parametrov a in b, oblike $f(x, a, b) = a * x * exp(b * x)$.

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