Függvényillesztés Monte Carlo algoritmussal

Geresdi Attila, Halbritter András

2008. március 26.

1. Bevezetés

A Monte Carlo algoritmusok szerteágazó alkalmazási területei közül a függvényillesztés a számítógépes gyakorlat témája. A leírás áttekinti a szükséges elméleti hátteret, valamint segítséget ad a konkrét megvalósításhoz.

2. Elméleti háttér

Legyen az illesztendő adatsor $Y_{\mathrm{orig}}(X_{\mathrm{i}})$, ahol $i = 1 \ldots N$. Az illesztett adatsor hasonlóan $Y_{\mathrm{fit}}(X_{\mathrm{i}}, \vec{A})$, ahol $\vec{A} = (A_1, A_2 \ldots A_{\mathrm{M}})$ a paraméterek listája, amelyek hangolásával érjük el, hogy az illesztett adatsor rásimuljon az eredetire. Ez a következő energiakifejezés minimalizálását jelenti:

$$E(\vec{A}) = \sum_{i=1}^{N} \left| Y_{\mathrm{orig}}(X_{\mathrm{i}}) - Y_{\mathrm{fit}}(X_{\mathrm{i}}, \vec{A}) \right| \qquad (1)$$

A minimalizálást Monte Carlo–Metropolis algoritmussal végezzük: Változtassuk meg a paramétereket véletlenszerűen: $\vec{A}' = \vec{A} + \delta\vec{A}$. Ezzel a (1) szerint kiszámolt energia is változik: $E(\vec{A}) \rightarrow E(\vec{A}')$. Az új paramétereket elfogadjuk, ha közelebb kerültünk a minimumhoz, tehát $E(\vec{A}') < E(\vec{A})$. Célunk elkerülni, hogy az algoritmus befagyjon egy lokális minimumba, ezért $p = \exp(-\beta(E(\vec{A}') - E(\vec{A})))$ valószínűséggel dolgozunk tovább az új paraméterekkel, ha $E(\vec{A}') > E(\vec{A})$. Vegyük észre, hogy $\beta \rightarrow \infty$ esetben csak lefelé léphetünk, míg a $\beta \rightarrow 0$ határátmenetben véletlenszerű mozgást kapunk a paramétertérben. Ez adja a fizikai jelentését az algoritmusban szereplő β értéknek: megfeleltethető egy, a paramétertérben mozgó részecske $(kT)^{-1}$ inverz hőmérsékletének.

3. Implementáció

A fentiek megvalósításához a következő felépítést érdemes követni:

1. Készítsünk globális tömböt az eredeti, valamint az illesztett adatsornak;
2. Hasonlóan globális változókban tároljuk az inverz hőmérsékletet, az illesztési paramétereket, valamint azok lépésközét;
3. Deklaráljunk két véletlenszám-generátort: egyet a paraméterek megváltoztatásához és egyet az $\exp(-\beta\Delta E)$ valószínűségű lépéshez;
4. Hozzunk létre globális változókat a megváltoztatott paramétereknek, valamint egy tömböt a megváltoztatott paraméterekkel generált illesztőfüggvénynek.

Az illesztés inicializálásához hozzuk létre a szükséges változókat, és olvassuk be a kezdőértékeket a TextBoxokból.

Az illesztést az alábbiak szerint végezzük:

1. Számítsuk ki a (1) szerinti energiát az aktuális változókkal;
2. Változtassuk meg az egyik paramétert a megadott határok között egyenletes eloszlással;
3. Számítsuk ki az így megváltozott energiát;
4. A régi és új energia különbsége alapján döntsünk arról, hogy elfogadjuk-e a változást: ha az új érték kisebb, akkor minden esetben, ha nem, akkor sorsoljunk egy véletlenszámot, és $\exp(-\beta\Delta E)$ valószínűséggel;
5. Ha szükséges, írjuk ki az új értéket a TextBoxba, és ábrázoljuk a megváltozott illesztőfüggvényt;
6. A fentiek szerint járjunk el a többi paraméter esetében.

4. Feladatok

Készítsünk grafikus függvényillesztő felületet a data.dat fileban található 500 elemű adatsor illesztéséhez a

$$y(t) = Ae^{-t/\tau}\sin(2\pi t/T)$$

függvénnyel, ahol A, τ, T a keresett paraméterek. A cél eléréséhez az alábbiak szerint haladjunk:

- Olvassuk be és ábrázoljuk a data.dat állomány tartalmát!
- Hozzunk létre TextBoxokat, amelyekkel állíthatóak a függvényillesztés kiinduló paraméterei, azok lépésköze, valamint az inverz hőmérséklet!
- Hozzunk létre gombokat, amelyekkel elindíthatjuk a függvényillesztést: legyen lehetséges újraindítani az illesztést a TextBoxokban megadott kezdeti paraméterekkel, valamint 1, illetve 100 illesztési ciklust elindítani!
- A program jelenítse meg az aktuális paramétereket, az (1) szerinti energiát, valamint az illesztett függvényt!

A jegyzőkönyvben szerepeljen a program felépítésének leírása, valamint a probléma diszkussziója. Vizsgáljuk meg a kezdeti paraméterek, az inverz hőmérséklet, valamint a paraméterek lépésközeinek hatását az illesztés gyorsaságára és jóságára, azaz adjuk meg, hogy átlagosan hány lépés után illeszkedik a generált függvény az eredetire, valamint mekkora a jellemző minimális energia! Opcionálisan próbáljuk ki, hogy lehetséges-e jobb eredményt elérni, ha β-t, illetve a lépésközöket dinamikusan változtatjuk! A dokumentációhoz csatoljuk a program forráskódját!