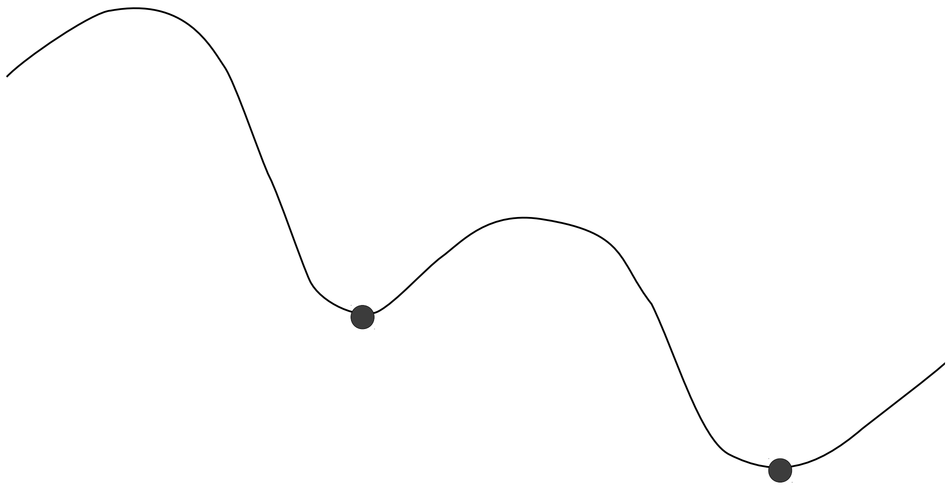
Minimi di una funzione



- *Esistono minimi locali* $(f'(x) = 0)$ *e globali: mi interessa soprattutto trovare questi ultimi;*
- *i minimi di* $f(x)$ *sono i massimi di* $-f(x)$*, quindi gli algoritmi per trovare minimi e massimi sono i medesimi*
- *Non si può trovare un minimo con la stessa precisione di una radice;*
- *alcuni metodi, una volta isolato il minimo, restringono la ricerca per successive divisioni di un intervallo;*
- *altri, come l'interpolazione parabolica cercano di estrapolare velocemente al minimo;*
- *la situazione è in parte analoga alla ricerca di radici con il metodo della bisezione o con quello di Newton.*

Precisione

In prossimità del minimo vale l'approssimazione parabolica:

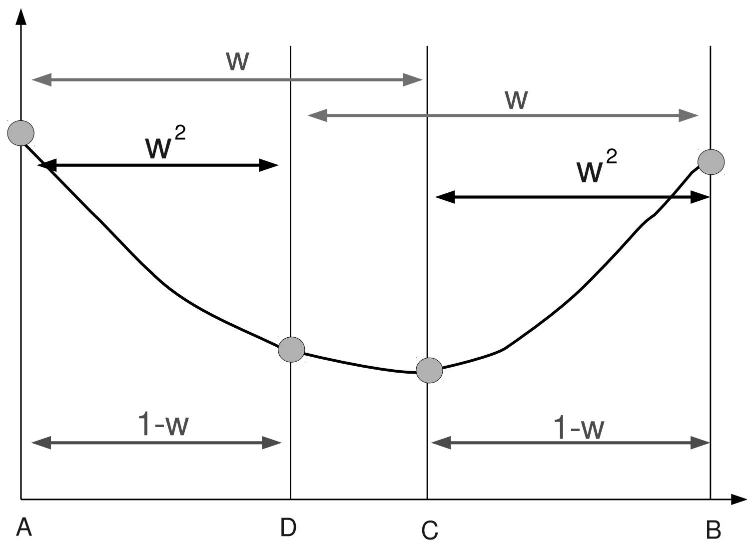
$$f(x) \approx f(x_0) + \frac{1}{2} \cdot f''(x_0) \cdot (x - x_0)^2$$

Se $f(x)$ è nota con precisione ε

$$||x - x_0|| = \sqrt{2\varepsilon / f''(x_0)}$$

Se la precisione della macchina è 10^{-12} il minimo non può essere trovato con precisione superiore a circa 10^{-6}

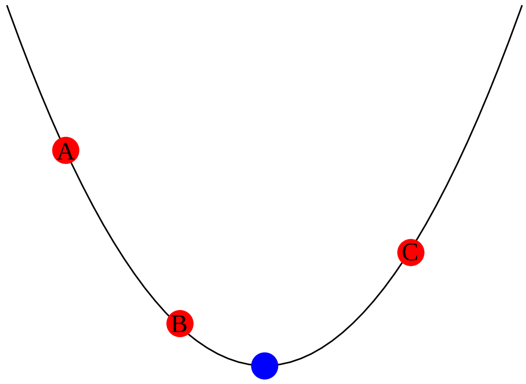
Ricerca aurea



$$f_C \leq f_A \quad \text{e} \quad f_C \leq f_B \quad AB = 1$$

- Ho trovato un minimo se conosco tre punti A, B e C per cui:
  $x_a < x_C < x_B$ con $f(x_A) > f(x_C)$ e $f(x_B) > f(x_C)$
- C dista $w > 0.5$ da A e $1 - w$ da B
- Cerco una scelta ottimale per w, cioè una scelta che restringa ad ogni passo di un fattore w l'intervallo in cui cercare il minimo
- Prendo D tale che $AC = DB = w \cdot AB$
- Il minimo si può ora trovare tra A e C oppure tra D e B
- Se $[A, C]$ è il nuovo intervallo $AD/AC = AC/AB$ per avere autosimilarità
- $w^2 = 1 - w$ e quindi $w = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.618$ è la sezione aurea

Interpolazione parabolica



Suppongo di essere abbastanza vicino al minimo. La funzione $f(x)$ può essere approssimata abbastanza bene come

$$f(x) \approx P + Q \cdot (x - x_0)^2$$

Trovare x_0 vuole quindi dire trovare il minimo se è esatta questa ipotesi; inoltre la procedura è molto più veloce della ricerca aurea

$$\begin{aligned} P + Q \cdot (x_A - x_0)^2 &= f_A \\ P + Q \cdot (x_B - x_0)^2 &= f_B \\ P + Q \cdot (x_C - x_0)^2 &= f_C \end{aligned}$$

Sottraendo le equazioni a due a due mi libero di P:

$$Q \cdot \left[(x_A - x_0)^2 - (x_B - x_0)^2\right] = f_A - f_B$$
$$Q \cdot \left[(x_B - x_0)^2 - (x_C - x_0)^2\right] = f_B - f_C$$

Facendo il rapporto elimino Q

$$\frac{(x_A - x_0)^2 - (x_B - x_0)^2}{(x_B - x_0)^2 - (x_C - x_0)^2} = \frac{f_A - f_B}{f_B - f_C}$$

ovvero

$$\frac{x_A^2 + x_0^2 - 2x_A x_0 - x_B^2 - x_0^2 + 2x_B x_0}{x_B^2 + x_0^2 - 2x_B x_0 - x_C^2 - x_0^2 + 2x_C x_0} = \frac{f_A - f_B}{f_B - f_C}$$

$$\frac{x_A^2 - x_B^2 + 2(x_B - x_A)x_0}{x_B^2 - x_C^2 + 2(x_C - x_B)x_0} = \frac{f_A - f_B}{f_B - f_C}$$

$$\left(x_A^2 - x_B^2 + 2(x_B - x_A)x_0\right)(f_B - f_C) = \left(x_B^2 - x_C^2 + 2(x_C - x_B)x_0\right)(f_A - f_B)$$

$$\left(x_A^2 - x_B^2\right)(f_B - f_C) + \left(x_B^2 - x_C^2\right)(f_B - f_A) = 2 \cdot x_0 \cdot [(x_C - x_B)(f_A - f_B) + (x_B - x_A)(f_C - f_B)]$$

$$x_0 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\left(x_A^2 - x_B^2\right)(f_B - f_C) + \left(x_B^2 - x_C^2\right)(f_B - f_A)}{[(x_C - x_B)(f_A - f_B) + (x_B - x_A)(f_C - f_B)]}$$

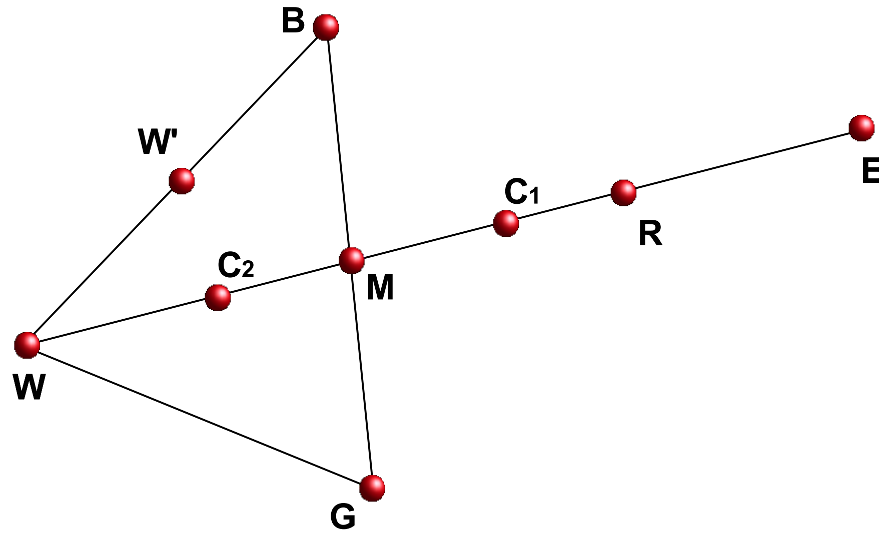
Metodo del simplesso di Nelder-Mead

- *È un metodo per trovare i minimi di funzioni in più dimensioni: io mi limiterò a n=2;*

- *un simplesso è un insieme di $n+1$ punti in n dimensioni che racchiudono un certo volume;*

- *in una dimensione è un segmento, in due un triangolo, in tre un tetraedro;*

- *l'algoritmo consiste nel selezionare tre punti e stabilire quello in cui la funzione è minima (b=best) massima (w=worst) e intermedia (g=good);*



- *si congiungono con una retta B e G, quindi si riflette W rispetto al punto medio M del segmento;*

- *il punto riflesso R dovrebbe essere migliore di W, nel qual caso provo a vedere se il punto E, a distanza doppia, va ancora meglio: se è così E è il nuovo W, altrimenti è R;*

- *se R è peggio di W la cosa si complica, e prendo il migliore dei due punti medi tra R e M e tra W e M; se però questo sono entrambi peggiori di W prendo due nuovi punti: W va nel punto medio tra W e B, mentre M diventa il nuovo G.*

Simulated annealing

- *È un metodo per calcolare i minimi di funzioni di molte variabili;*
- *ci sono moltissimi minimi relativi, e non posso sperare di trovare il minimo assoluto: mi accontento di un buon minimo relativo*
- *sfrutto l'analogia con la cristallizzazione per raffreddamento*
- *Il problema ha troppi gradi di libertà per una soluzione diretta*
- *Il metodo migliore per trovare il minimo è aspettare che il sistema se lo trovi da solo!*
- *Uso una simulazione*

Il problema del commesso viaggiatore

Un commesso viaggiatore deve visitare N città e vuole spendere il meno possibile in benzina. Gli occorre quindi conoscere il percorso più corto che tocca tutte le città una sola volta.

- *Ci sono $N!$ possibili percorsi. Il percorso è funzione delle posizioni di tutte le città e quindi di $2N$ variabili. Trovare il minimo è impossibile con i metodi tradizionali. Devo quindi accontentarmi di un minimo relativo abbastanza buono;*

- *se la benzina costasse poco, non farebbe una gran differenza quale percorso si sceglie. Potrei allora esplorare vari percorsi e, quando il prezzo sale, utilizzare quello più corto che ho trovato;*

- *ci sono analogie tra il commesso e un cristallo*
  - *benzina più economica = temperatura più alta.*
  - *percorso più corto = stato fondamentale del cristallo*
  - *città = molecole*

Strategia da usare

- *Per la formazione del cristallo il raffreddamento deve essere lento, quindi devo far salire lentamente il prezzo della benzina;*

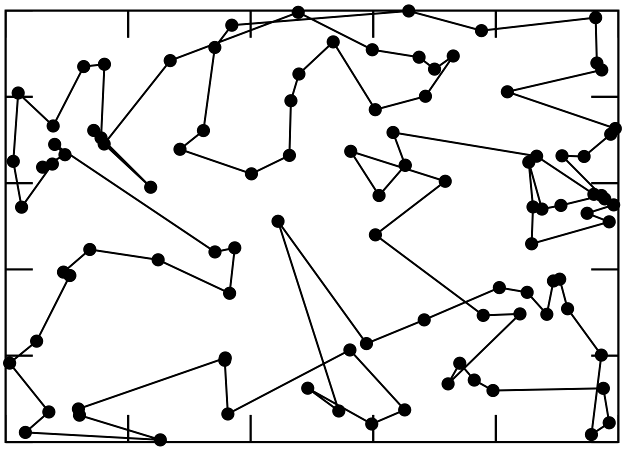
- *esploro un percorso: se è più corto di quello che conosco lo prendo per buono;*

- *se è più lungo però non lo scarto sempre, per evitare di restare in un minimo locale;*

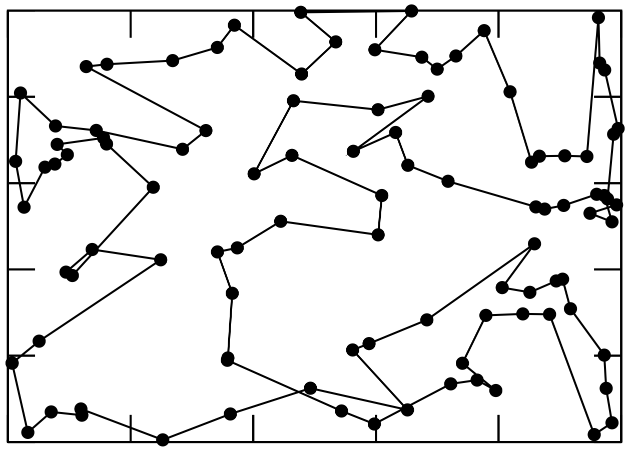
- *un percorso cattivo ha una probabilità di essere accettato tanto minore quanto maggiore è l'aumento di percorso;*

- *un cattivo percorso può essere accettato più facilmente se la benzina costa poco (temperatura alta)*

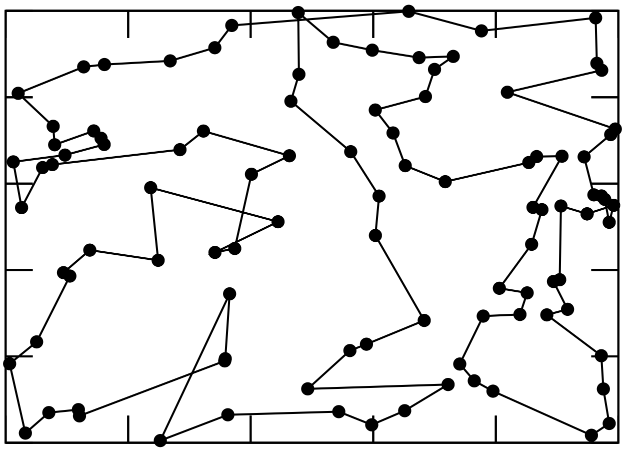
- *in analogia con la meccanica statistica*
  energia = lunghezza del percorso
  La probabilità di accettare un cambiamento di energia sfavorevole è $\exp(-E/T)$*;*



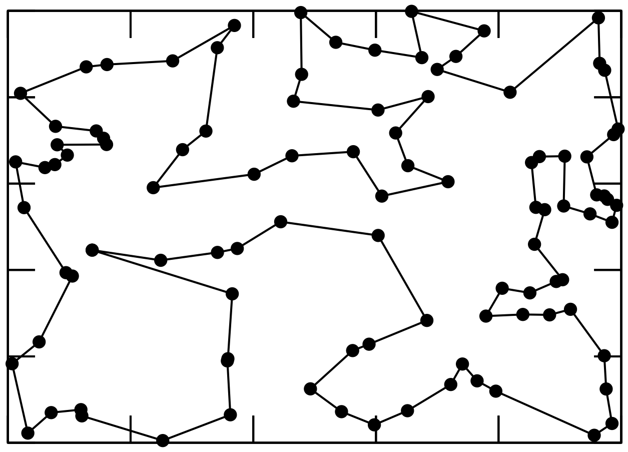
100



200



300



1000