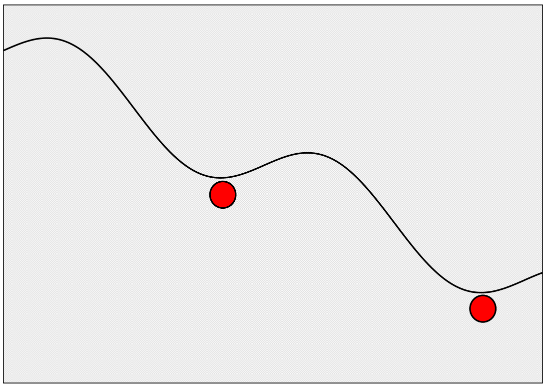
Minimi di una funzione



- minimi locali $(f'(x) = 0)$ e globali;
- i minimi di $f(x)$ sono i massimi di $-f(x)$;
- limiti sulla precisione raggiungibile;
- ricerca per successive divisioni;
- ricerca per interpolazione parabolica;

Precisione

In prossimità del minimo vale l'approssimazione parabolica:

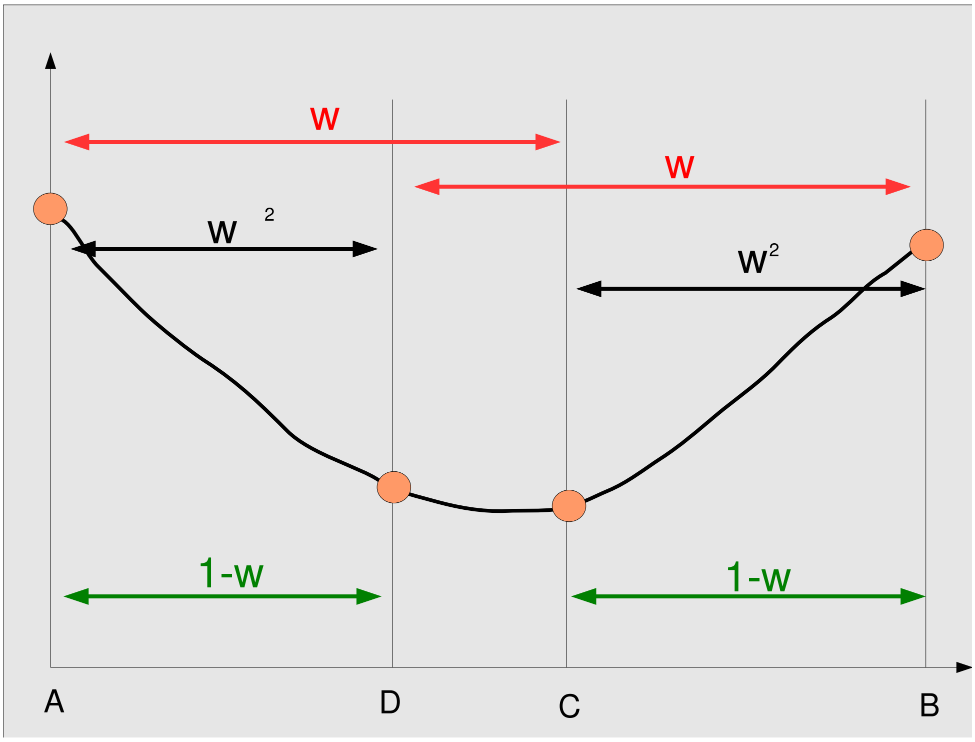
$$f(x) \approx f(x_0) + \frac{1}{2} \cdot f''(x_0) \cdot (x - x_0)^2$$

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



$$f_C \leq f_A \quad \text{e} \quad f_C \leq f_B$$

- C dista $(w > 0.5) \cdot AB$ da A e $(1 - w) \cdot AB$ da B
- voglio prendere terne successive di numeri in modo che l'intervallo in cui si può trovare il minimo si restringa ad un ritmo costante w

- 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 $AD = w \cdot AC$ oppure $AD = (1 - w) \cdot AC$ e $AC = w \cdot AB$ per avere autosimilarità
- nel primo caso da $AB = AD + DB = w \cdot (1 - w) \cdot AB + w \cdot AB$ trovo $1 = w \cdot (1 - w) + w$ che implica $w = 1$, quindi non mi può interessare
- nel secondo caso $AB = AD + DB = w^2 \cdot AB + w \cdot AB$ trovo $1 = w^2 + w$ che implica $w = \alpha = 0.618\ldots$, quindi la soluzione è la sezione aurea

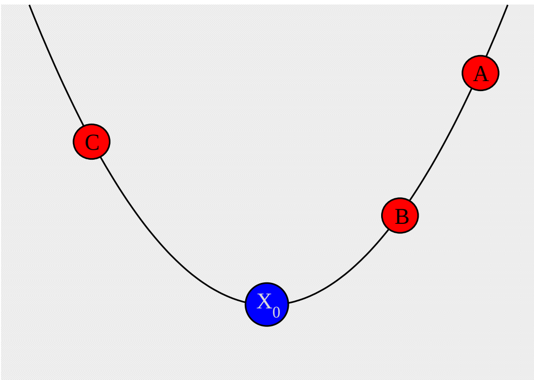
Nello scrivere un programma devo quindi, prima di tutto, isolare un minimo in modo da avere tre punti A,B,C con le caratteristiche che:

- $f_C \leq f_A$, $f_C \leq f_B$ e $A \leq C \leq B$
- $C - A = \alpha \cdot (B - A)$ oppure $C - A = (1 - \alpha) \cdot (B - A)$

A questo punto

- guardo qual è il più grande dei due intervalli $[AC]$ e $[CB]$
- se $[AC] > [CB]$ prendo $D = B - \alpha \cdot AB$
- altrimenti $D = A + \alpha \cdot AB$
- ripeto la procedura finché il mio intervallo non è diventato abbastanza piccolo

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 ottengo:

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

Facendo il rapporto

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

ovvero

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

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

$$\begin{aligned}\left(x_A^2 - x_B^2 + 2(x_B - x_A)x_0\right)(f_B - f_C) \quad &= \\ \left(x_B^2 - x_C^2 + 2(x_C - x_B)x_0\right)(f_A - f_B)&\end{aligned}$$

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

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

Isolare i minimi

- Per isolare i minimi si può partire da un piccolo intervallo $[AB]$.
- Mi serve un terzo punto C tale che nella terna di punti quello di mezzo abbia un valore inferiore agli altri due.
- vado sempre nella direzione discendente: se $f_A > f_B$ cerco un punto alla destra di B
- il nuovo punto ha ascissa $x_C = x_B + (x_B - x_A)/\alpha$ in modo che $(x_C - x_B)/(x_C - x_A) = \alpha$
- se $f_C > f_B$ ho isolato il minimo con i punti A, B, C posso riordinarli in modo che la sequenza sia A, C, B scambiando B con C
- altrimenti procedo spostando l'intervallo $[AB]$ dove prima c'era $[BC]$
- continuo finché non ho isolato il minimo

Simulated annealing

- Minimi di funzioni di molte variabili;
- mi serve un buon minimo relativo piuttosto che il minimo assoluto;
- 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!
- concetto di 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, fare quello più corto trovato.

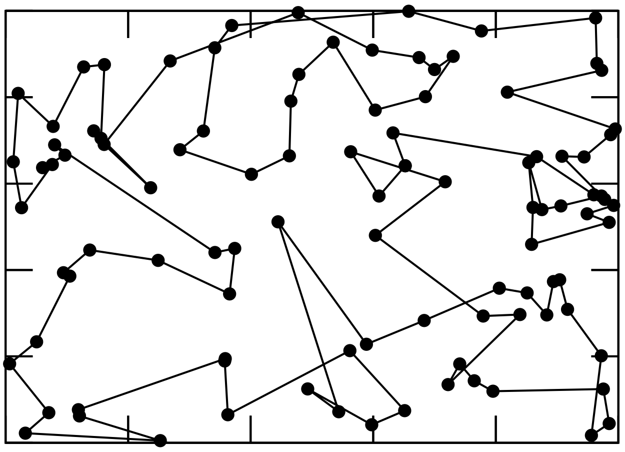
Benzina più economica = temperatura più alta.

Percorso più corto = cristallo

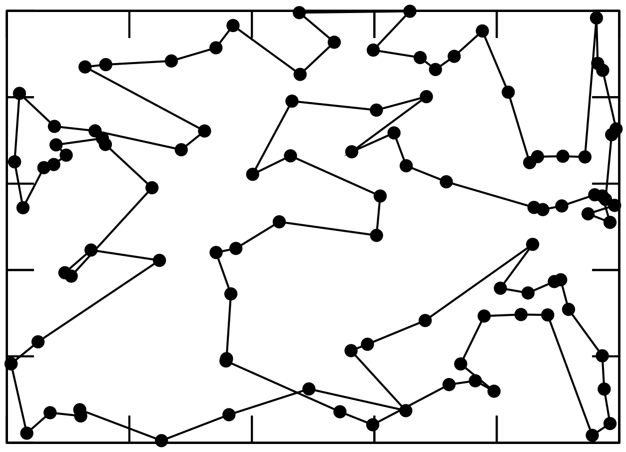
Città = molecole

Strategia da usare

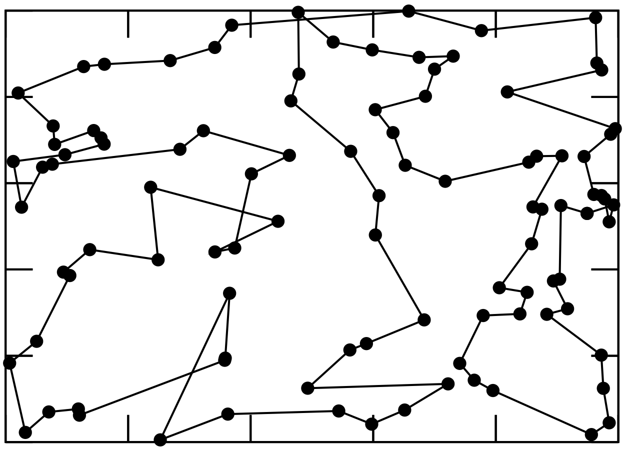
- Per la formazione del cristallo il raffreddamento deve essere lento, quindi devo far salire lentamente il prezzo della benzina.
- Esploro un percorso: se è più corto di quello che conosco lo prendo per buono.
- Se è più lungo però non lo scarto sempre, per evitare di restare in un minimo locale
- Un 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 $\exp(-E/T)$.



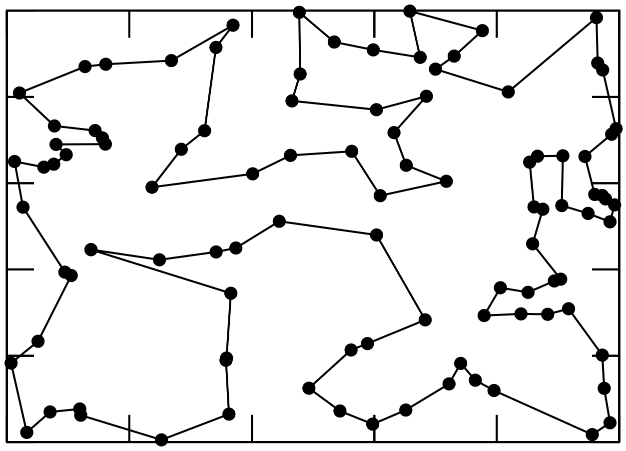
100



200



300



1000