Metodo della sezione aurea per la minimizzazione di funzioni

Introduzione. Molti metodi per la minimizzazione[1] di funzioni $f(x)$ rispetto a x hanno numerosi punti in comune con i metodi per la ricerca di zeri di equazioni per due motivi: a) un problema di minimizzazione di funzioni può essere ricondotto ad un problema di ricerca di zeri sotto opportune condizioni, purchè sia possibile valutare la derivata della funzione da minimizzare rispetto a x; b) la strategia per la ricerca del punto di minimo basata su un procedimento iterativo: mentre nella ricerca di zeri il punto di zero è compreso tra due punti (sempre più vicini all'aumentare delle iterazioni) in cui la funzione assume valori di segno alterno, nella minimizzazione di funzioni si cercano tre punti vicini con la proprietà che il valore del punto di mezzo sia più basso di quello dei punti adiacenti.

In pratica, la metodologia consiste nell'avere ad ogni iterazione una terna di punti a, b, c con $a < b < c$, $f(b) < \{f(a), f(c)\}$ e da questa individuare un punto $x \in]a, c[$ tale che possibilmente $f(x) < \{f(a), f(b), f(c)\}$; a questo punto si ridefinisce la nuova terna candidata per l'iterazione successiva come a, b, x o b, x, c a seconda che $f(b) < f(x)$ o viceversa.

Tale metodologia presuppone la disponibilità in partenza di tre punti $\{a, b, c\}$ soddisfacenti la proprietà $f(b) < \{f(a), f(c)\}$. A tale scopo è possibile effettuare una ricerca preliminare sull'intervallo in cui viene cercato il minimo, per esempio scegliendo in esso N punti equidistanti, valutando il valore della funzione in essi e selezionando il punto di minimo assoluto individuato (b); i punti adiacenti costituiranno gli altri due punti della terna iniziale (a, c). Da questo momento in poi si assume che l'intervallo $[a, c]$ contenga un solo minimo.

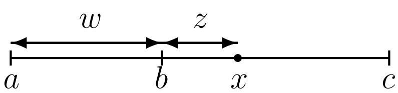
Regola della sezione aurea. Siano $\{a, b, c\}$ la tripletta di punti e $\{f_a, f_b, f_c\}$ i corrispondenti valori della funzione f nei punti, con $f_b < \{f_a, f_c\}$. Sia w la frazione di intevallo $[a, c]$ per cui b dista da a; ne consegue che b dista da c di una frazione $1 - w$:

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

[1] Si ricordi che i metodi per la massimizzazione di funzioni si riconducono ai metodi per la minimizzazione di funzioni semplicemente cambiando il segno della funzione da massimizzare.

Sia x il nuovo punto di minimo candidato e sia z la frazione di intervallo $[a, c]$ per cui x dista da b:

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



Si noti che z può essere negativo se $a < x < b$, vale a dire x è a sinistra di b. Scelto il punto x, la nuova tripletta sarà $\{a, b, x\}$ oppure $\{b, x, c\}$. Nel primo caso la lunghezza del nuovo intervallo sarà $w+z$ (relativamente alla lunghezza dell'intervallo $c-a$); nel secondo caso $1-w$. Se si vuole minimizzare il rischio che l'intervallo alla successiva iterazione sia troppo piccolo (e quindi che non contenga il minimo effettivo della funzione), allora possiamo scegliere z in modo tale che i due intervalli potenziali, $w+z$ e $1-w$ abbiano la stessa lunghezza, vale a dire

$$w + z = 1 - w$$

e quindi

$$z = 1 - 2w. \tag{1}$$

Ne consegue che il nuovo punto z è simmetrico a b nell'intervallo $[a, c]$, nel senso che $|b-a| = |c-x|$. Pertanto il punto x giace all'interno del maggiore tra i due segmenti $[a, b]$ e $[b, c]$. Ne consegue anche che z risulta positivo solo se $w < 1/2$.

Rimane aperta la questione di come scegliere w. È naturale pensare che w sia stato determinato all'iterazione precedente applicando la stessa strategia per la scelta di z: pertanto la frazione di segmento $[a, b]$ all'iterazione precedente per cui il punto b dista dall'estremo a (w) risulta uguale alla frazione di segmento $[b, c]$ all'iterazione successiva per cui il punto x dista da b ($z/(1-w)$; si suppone che z cada in $[b, c]$):

$$\frac{z}{1-w} = w. \tag{2}$$

Risolvendo le equazioni (1) e (2), si ottiene l'equazione quadratica

$$w^2 - 3w + 1 = 0$$

le cui soluzioni sono

$$w = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}.$$

La soluzione con il segno + si scarta perché darebbe luogo a $w > 1$, pertanto l'unica soluzione accettable dell'equazione quadratica è

$$w = \frac{3-\sqrt{5}}{2} \simeq 0.38197.$$

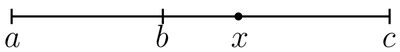
In pratica una collocazione ottimale di punti prevede che il punto centrale disti 0.38197 da un estremo e 0.61803 dall'altro estremo (in misura relativa rispetto alla lunghezza del segmento $[a, c]$). Tali frazioni prendono il nome di *sezione aurea*. Si noti che il metodo della sezione aurea non fa uso della derivata della funzione.

Algoritmo.

Siano a, b, c noti con $f_b < \{f_a, f_c\}$. Sia $\gamma = 0.38197\ldots$

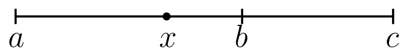
Se $|b-a| < |c-b|$,

$$x = b + 0.38197|c-b|$$

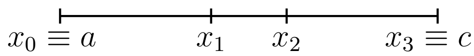


Se $|b-a| \geq |c-b|$,

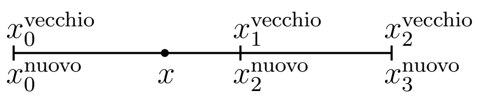
$$x = b - 0.38197|b-a|$$



Chiameremo i 4 punti a, b, c, x come x_0, x_1, x_2, x_3:



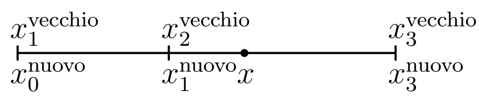
Caso $f(x_1) < f(x_2)$



$$x = x_1^{\text{vecchio}} - \gamma(x_1^{\text{vecchio}} - x_0^{\text{vecchio}})$$

$$= (1-\gamma)x_1^{\text{vecchio}} + \gamma x_0^{\text{vecchio}}$$

Caso $f(x_1) \geq f(x_2)$



$$x = x_2^{\text{vecchio}} - \gamma(x_3^{\text{vecchio}} - x_2^{\text{vecchio}})$$

$$= (1-\gamma)x_2^{\text{vecchio}} + \gamma x_3^{\text{vecchio}}$$

`fissati` a, b, c `ed una tolleranza` ε`:`

$x_0 = a$; $x_3 = c$;
$b - a > c - b \Rightarrow x_1 = b - \gamma(b - a)$; $x_2 = b$;
$b - a \leq c - b \Rightarrow x_1 = b$; $x_2 = b + \gamma(c - b)$;
$f_0 = f(x_0)$; $f_1 = f(x_1)$; $f_2 = f(x_2)$; $f_3 = f(x_3)$;
`fino a che` $x_3 - x_0 > \varepsilon$
$\quad f_1 < f_2 \Rightarrow x_0^{\mathrm{n}} = x_0$; $x_3^{\mathrm{n}} = x_2$; $x_2^{\mathrm{n}} = x_1$;
$\quad\quad x_1^{\mathrm{n}} = x_1 - \gamma(x_1 - x_0) = \gamma x_0 + (1 - \gamma) x_1$;
$\quad f_1 \geq f_2 \Rightarrow x_0^{\mathrm{n}} = x_1$; $x_3^{\mathrm{n}} = x_3$; $x_1^{\mathrm{n}} = x_2$;
$\quad\quad x_2^{\mathrm{n}} = x_2 + \gamma(x_3 - x_2) = (1 - \gamma) x_2 + \gamma x_3$;
$\quad f_0 = f(x_0)$; $f_1 = f(x_1)$; $f_2 = f(x_2)$; $f_3 = f(x_3)$;
$\quad x_0 = x_0^{\mathrm{n}}$; $x_1 = x_1^{\mathrm{n}}$; $x_2 = x_2^{\mathrm{n}}$; $x_3 = x_3^{\mathrm{n}}$;
`end`