

Метод деформируемого многогранника (Нелдера- Мида)

Кочеганова Л.М.
М21-ИВТ-1

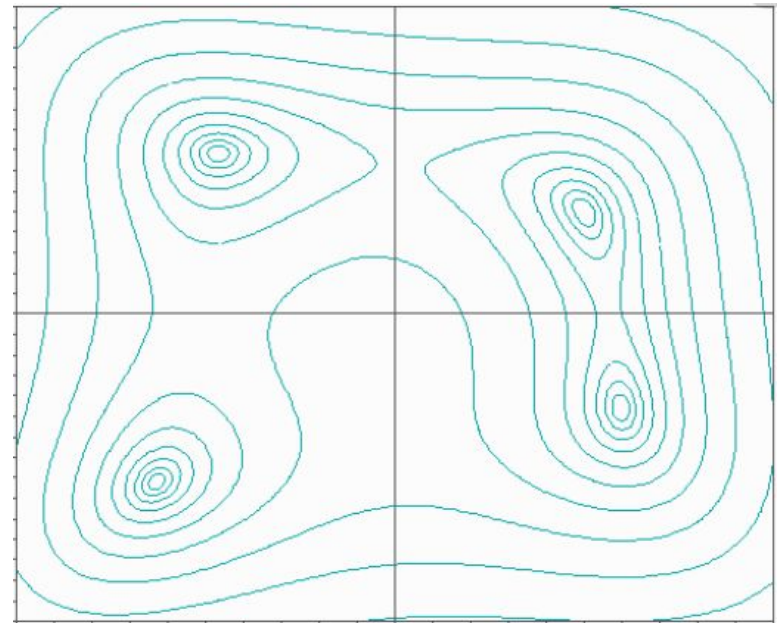
Задача

$$\min_{X \in R^n} \Phi(X) = \Phi(X^*) = \Phi^*$$

Найти минимум критерия оптимальности $\Phi(X)$, определенного в n -мерном евклидовом пространстве R^n

Метод использует следующие операции над симплексами:

1. отражение;
2. редукция;
3. сжатие;
4. растяжение.



Отражение вершин симплекса

Производится относительно центра тяжести X_c остальных вершин.
Отражение k -й вершины с координатами:

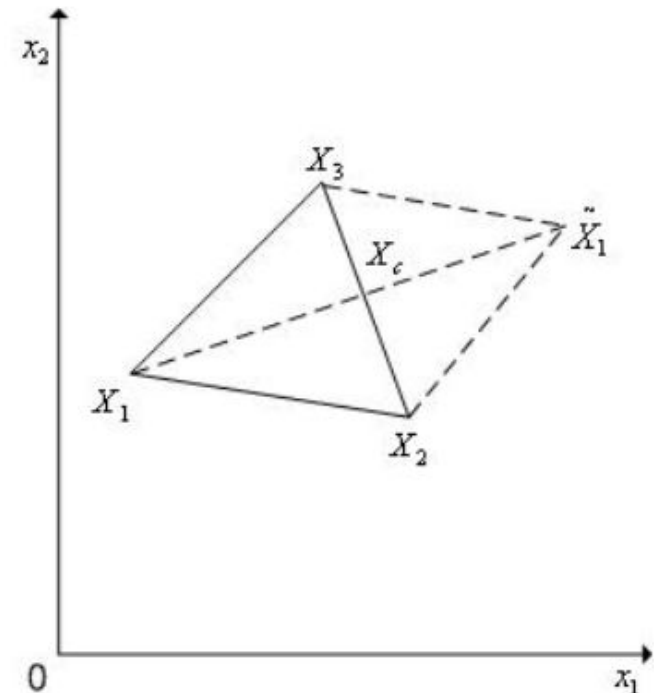
$$X_i^r, i \in [1, n+1]$$

Новый симплекс с координатами вершин:

$$X_i^{r+1} = X_i^r, i \in [1, n+1], i \neq k, X_k^{r+1} = 2X_c^r - X_k^r$$

Вектор координат центра тяжести остальных вершин симплекса:

$$X_c^r = \frac{1}{n} \sum_{i=1, i \neq k}^{n+1} X_i^r$$



Редукция симплекса

Уменьшение длин всех ребер симплекса в одно и то же количество раз.

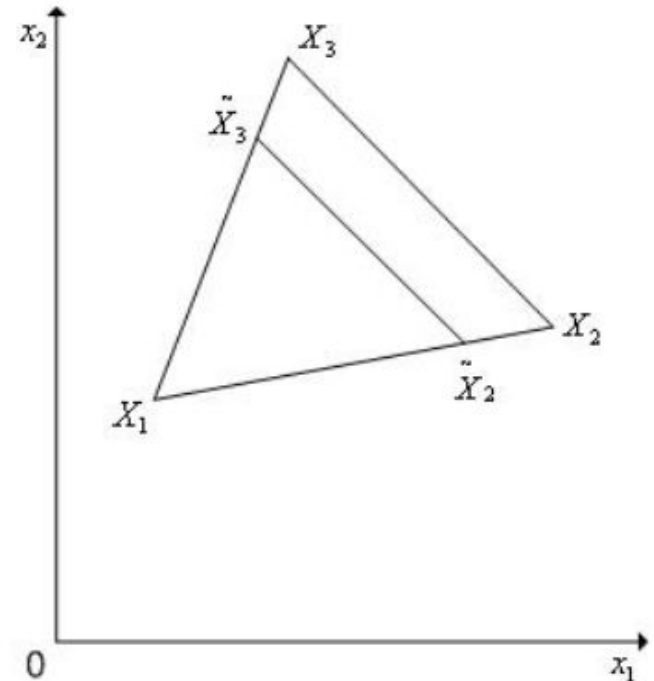
Редукция вершин симплекса $X_i^r, i \in [1, n+1]$ к верши X_k

Новый симплекс с координатами вершин:

$$X_i^{r+1} = X_k^r + \gamma(X_i^r - X_k^r), i \in [1, n+1], i \neq k, X_k^{r+1} = X_k^r$$

Коэффициенты редукции равны:

$$\gamma \in (0, 1), \gamma \approx 0.5$$



Сжатие симплекса

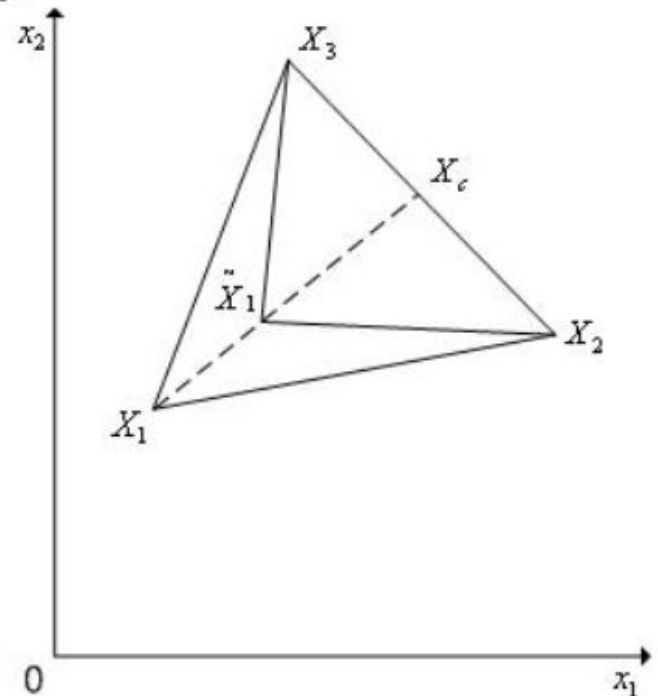
Сжатие симплекса $X_i^r, i \in [1, n+1]$ в направлении $(X_k^r - X_c^r)$

Новый симплекс с координатами вершин:

$$X_i^{r+1} = X_i^r, i \in [1, n+1], i \neq k, X_k^{r+1} = X_c^r + \beta(X_k^r - X_c^r)$$

Коэффициенты сжатия:

$$\beta \in (0, 1), \beta \approx 0.4-0.6$$



Растяжение симплекса

Сжатие симплекса $X_i^r, i \in [1, n+1]$ в направлении $(X_k^r - X_c^r)$

Новый симплекс с координатами вершин:

$$X_i^{r+1} = X_i^r, i \in [1, n+1], i \neq k, X_k^{r+1} = X_c^r + \alpha(X_k^r - X_c^r).$$

Коэффициенты растяжения:

$$\alpha \approx 2.8 - 3.0$$

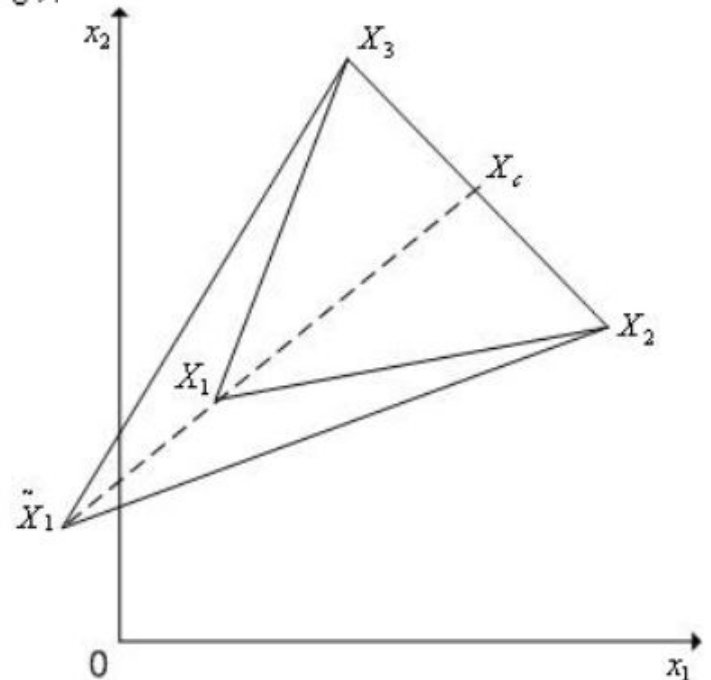


Схема метода Нелдера-Мида

$X_i^r, i \in [1, n+1]$ обозначим за S^r ; зададим начальную точку X^0

Находим координаты $X_i^0, i \in [1, n+1]$ и вычисляем значение функции во всех вершинах симплекса $\Phi(X_i^0)$

Среди вершин симплекса найдем те, что принимают наименьшее, наибольшее и следующее за максимальным значение $X_{l=k_l}^r, X_{h=k_h}^r, X_{s=k_s}^r$

Вычислим значение функции в них: $\Phi(X_l^r) = \min_{i \in [1, n+1]} \Phi(X_i^r),$

$$\Phi(X_h^r) = \max_{i \in [1, n+1]} \Phi(X_i^r),$$

$$\Phi(X_s^r) = \max_{i \in [1, n+1], i \neq h} \Phi(X_i^r)$$

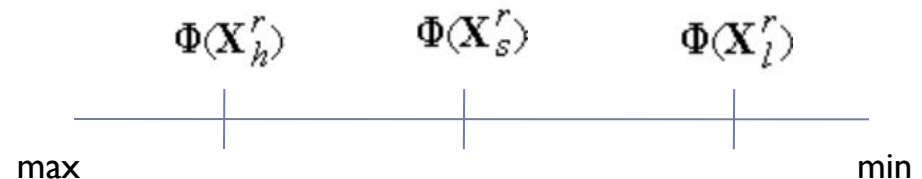


Схема метода Нелдера-Мида

Выполняем отражение вершины симплекса X_h^r , вычисляем $\Phi(X_{kh}^{r+1})$, получили новый симплекс S^{r+1}

Если $\Phi(X_{kh}^{r+1}) \leq \Phi(X_h^r)$ $\Phi(X_{kh}^{r+1}) \leq \Phi(X_l^r)$.

Если $\Phi(X_{kh}^{r+1}) \leq \Phi(X_h^r)$ $\Phi(X_{kh}^{r+1}) \geq \Phi(X_l^r)$.

НО

Если $\Phi(X_{kh}^{r+1}) \geq \Phi(X_h^r)$

Растяжение симплекса в направлении $(X_{kh}^{r+1} - X_c^{r+1})$.
Получаем новую вершину X_{kh}^{r+2} . Если $\Phi(X_{kh}^{r+2}) \leq \Phi(X_l^r)$ возвращаемся к вычислению 3х вершин симплекса и отражению.
 $r=r+2$

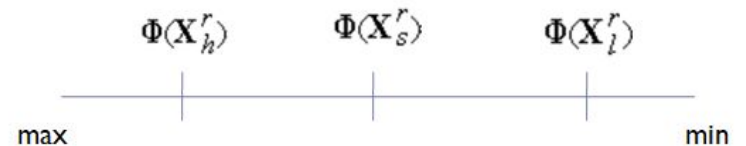
Иначе - данные не используем.

$r=r+1$

Возвращаемся к вычислению 3х вершин симплекса и отражению.

Сжатие симплекса в направлении $(X_{kh}^{r+1} - X_c^{r+1})$.
Получаем новую вершину X_{kh}^{r+2} . Если $\Phi(X_{kh}^{r+2}) \leq \Phi(X_{kh}^r)$, то возвращаемся к вычислению 3х вершин симплекса и отражению. $r=r+2$

Иначе – выполняем редукцию к вершине $X_{l=k_l}^r$



Условие окончания итераций

$$\max_{i \in [1, n+1], i \neq k} |\Phi(\mathbf{X}_i^{r+1}) - \Phi(\mathbf{X}_k^{r+1})| \leq \varepsilon_\Phi$$

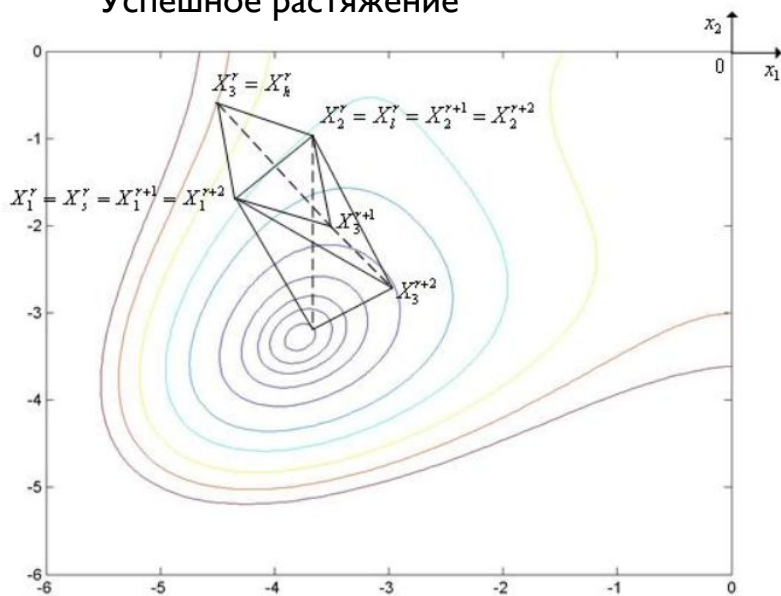
ε_Φ - требуемая точность решения

Можно завершать итерации, когда длина максимального из ребер текущего симплекса станет меньше или равна требуемой точности решения ε_X

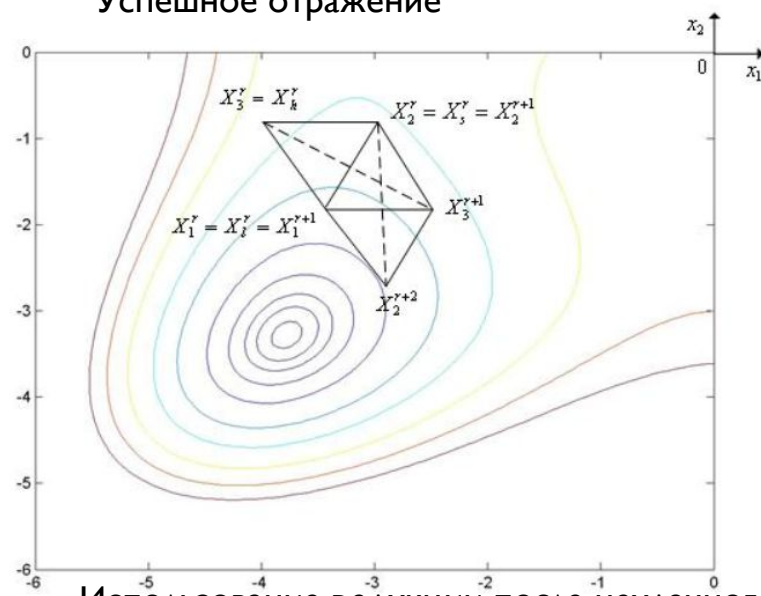
Также можно завершить алгоритм, если выполнено необходимое количество итераций.



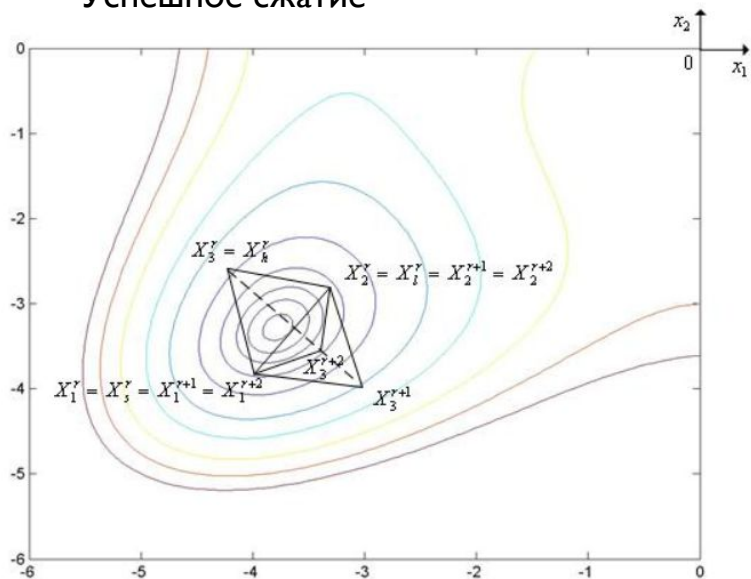
Успешное растяжение



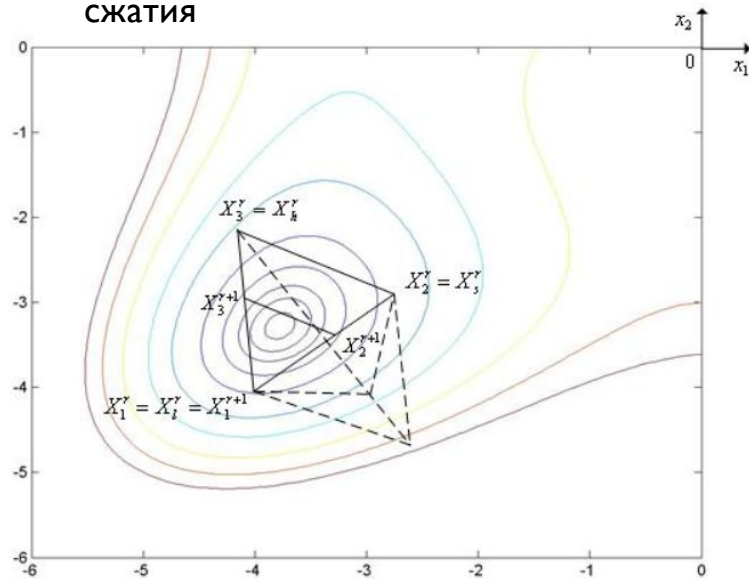
Успешное отражение



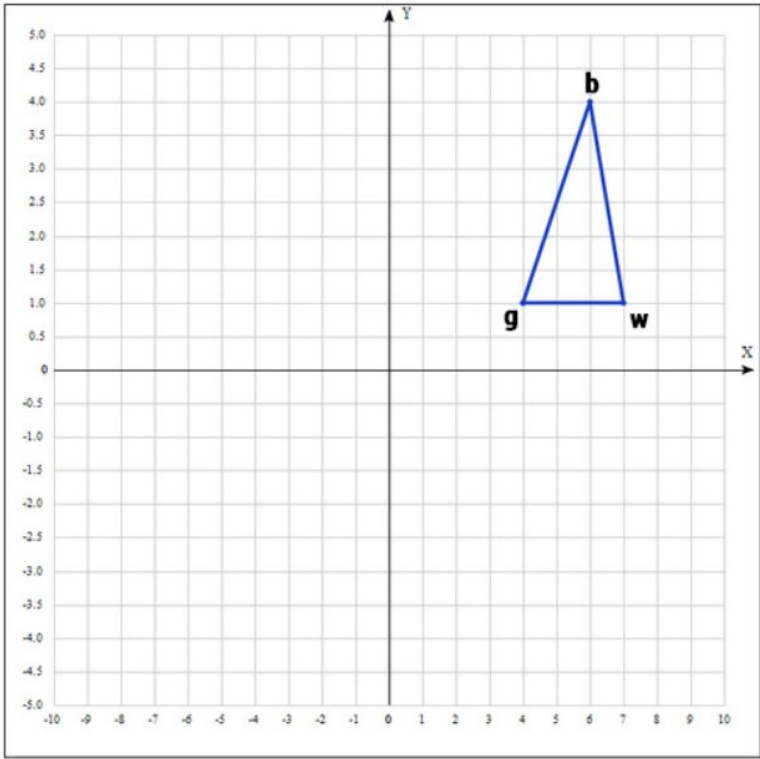
Успешное сжатие



Использование редукции после неудачного сжатия



1)



2)

$$mid = \left(\frac{x_1 + x_2}{2}, \frac{y_1 + y_2}{2} \right)$$

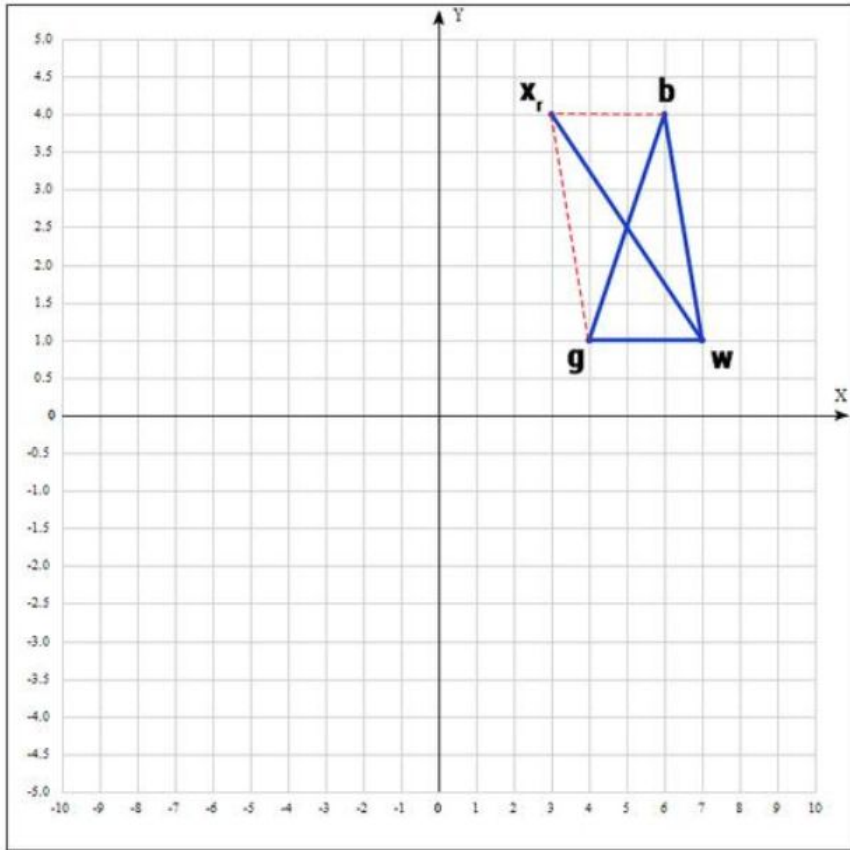
$$mid = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

$$f(V_2) \leq f(V_1) \leq f(V_3).$$

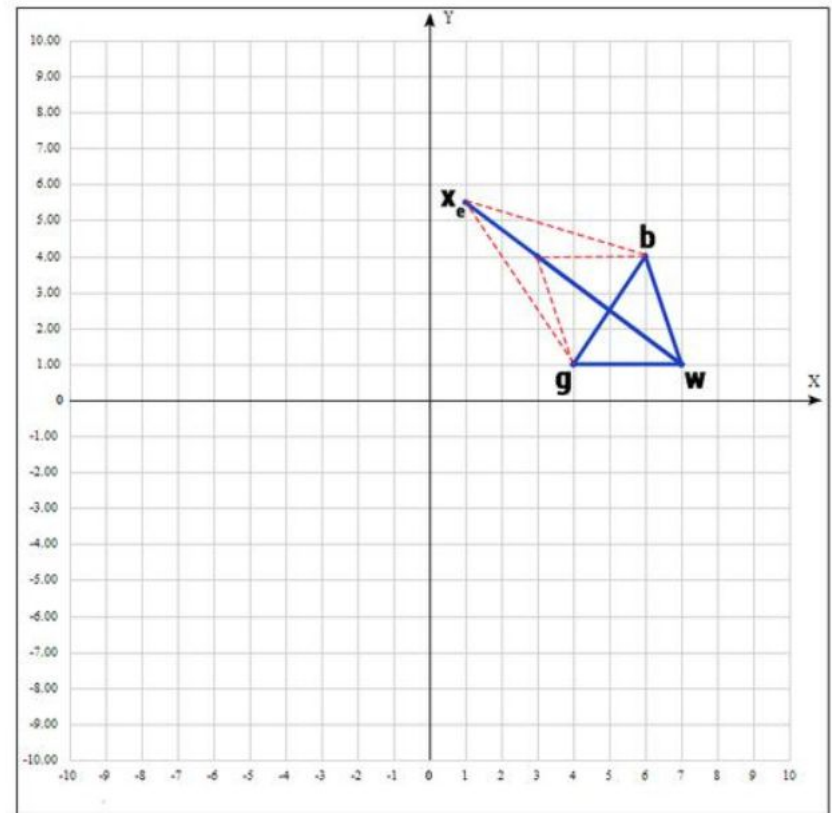
$b = V_2$, $g = V_1$, $w = V_3$, где best, good, worst — соответственно.



3) $x_r = mid + (mid - w)$



4) $x_e = mid + (x_r - mid)$
 $f(x_e) < f(b)$



Пример

Найти экстремум следующей функции: $F(x,y)=x^2+xy+y^2-6x-9y$

Возьмем точки: $V1(0, 0)$; $F(V1) = 0 = b$;

$V2(1, 0)$; $F(V2) = -5 = g$;

$V3(0, 1)$; $F(V3) = -8 = w$.

Находим центр тяжести X_c (середина отрезка bg) = $(b+g)/2 = (1/2, 1/2)$

Отражение вершины: $X1 = 2X_c - w = (1, 1)$

Вычисляем значение в точке $X1$

$F(X1) = -12$; $F(X1) < F(b)$ \longrightarrow операция растяжения

Растяжение вершины: $X2 = X_c + \alpha(X1 - X_c)$

Возьмем $\alpha = 2$ \longrightarrow $X2 = (1.5, 1.5)$

Вычисляем значение в точке $X2$

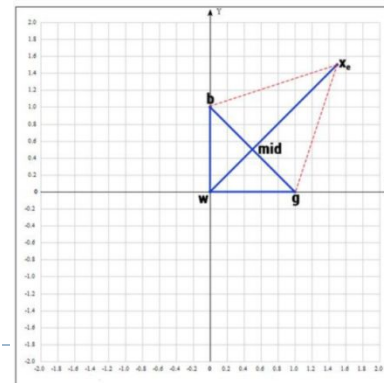
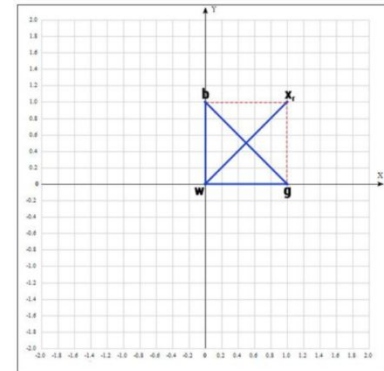
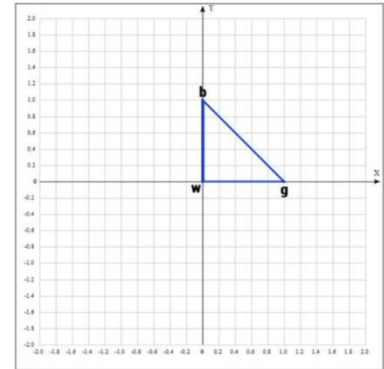
$F(X2) = -15.75$ \longrightarrow получаем новые вершины

$V1(1.5, 1.5)$; $F(V1) = -15.75$

$V2(1, 0)$; $F(V2) = -5$

$V3(0, 1)$; $F(V3) = -8$

Начинаем алгоритм сначала!



Пример

Результат для 10 итераций

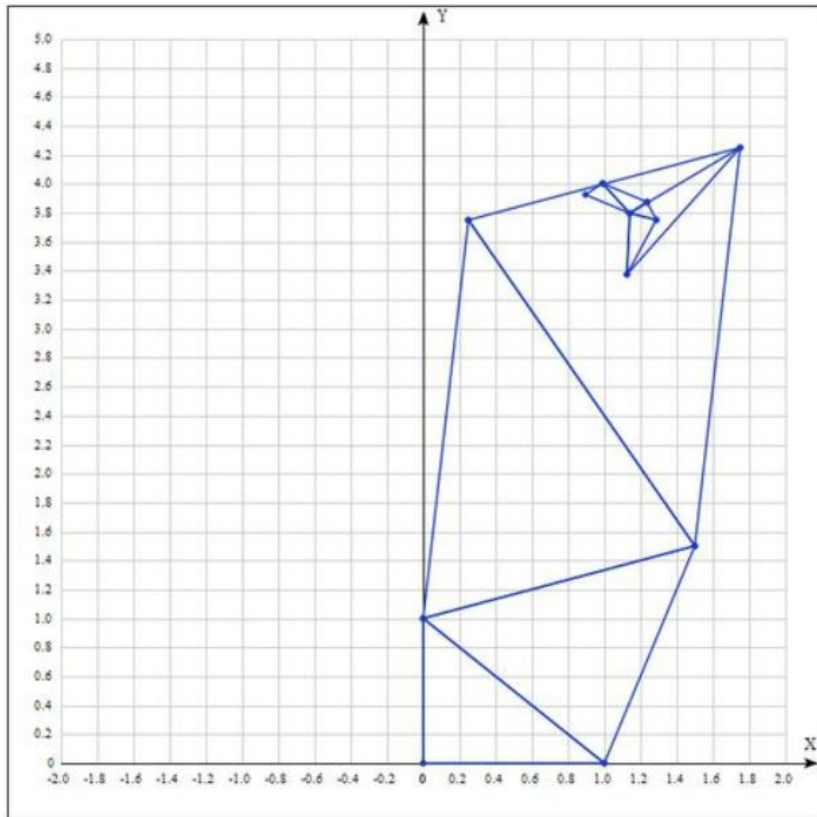


Таблица значений для 10 итераций

Best	Good	Worst
$f(0, 1) = -8$	$f(1.0, 0) = -5$	$f(0, 0) = 0$
$f(1.5, 1.5) = -15.75$	$f(0, 1) = -8$	$f(1.0, 0) = -5$
$f(0.25, 3.75) = -20.187$	$f(1.5, 1.5) = -15.75$	$f(0, 1) = -8$
$f(0.25, 3.75) = -20.187$	$f(1.75, 4.25) = -20.1875$	$f(1.5, 1.5) = -15.75$
$f(1.125, 3.375) = -20.671$	$f(1.75, 4.25) = -20.1875$	$f(0.25, 3.75) = -20.1875$
$f(1.140, 3.796) = -20.9638$	$f(1.125, 3.375) = -20.6718$	$f(1.75, 4.25) = -20.1875$
$f(1.140, 3.796) = -20.9638$	$f(1.287, 3.751) = -20.8668$	$f(1.125, 3.375) = -20.6718$
$f(1.140, 3.796) = -20.9638$	$f(1.236, 3.874) = -20.9521$	$f(1.287, 3.751) = -20.8668$
$f(0.990, 4.002) = -20.9951$	$f(1.140, 3.796) = -20.9638$	$f(1.2365, 3.874) = -20.9520$
$f(0.990, 4.002) = -20.9951$	$f(0.895, 3.925) = -20.9855$	$f(1.140, 3.796) = -20.9638$

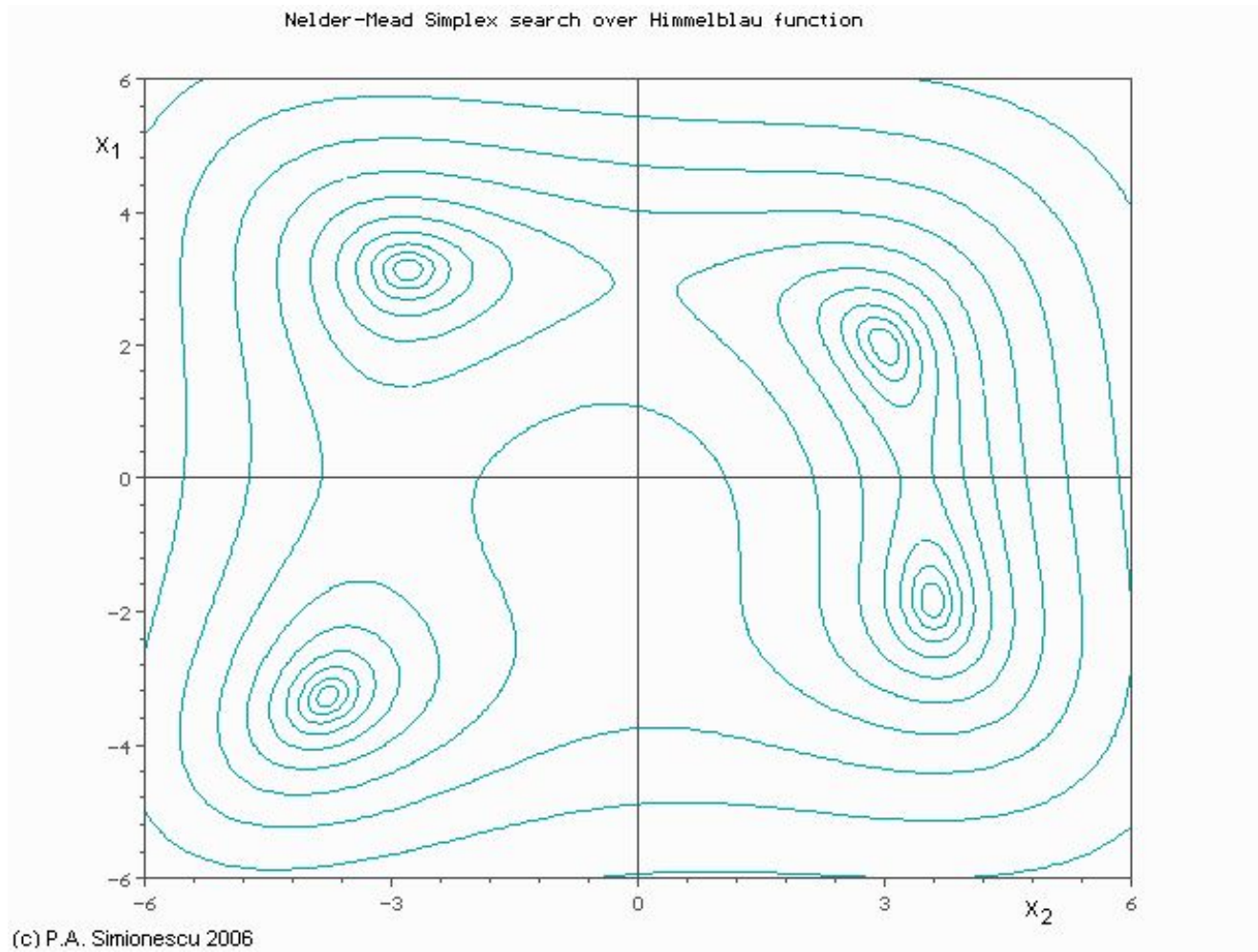
Ответ:

После 10 итераций мы получаем достаточно точное приближение:

$$F(0.990, 4.002) = -20.9951$$

Аналитический экстремум функции достигается в $F(1,4) = -21$

Визуальный пример работы



Список литературы

1. [КУРС «Многомерная оптимизация». Лекция 10. Метод Нелдера — Мида на сайте Института дистанционного обучения ИНТУИТ.](#)
2. [Метод Нелдера-Мида. Краткий алгоритм.](#)
3. <http://bigor.bmstu.ru/?cnt/?doc=МО/ch0606.mod/?cou=МО/base.cou>
4. http://wp.wiki-wiki.ru/wp/index.php/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4_%D0%9D%D0%B5%D0%BB%D0%B4%D0%B5%D1%80%D0%B0_%E2%80%94%D0%9C%D0%B8%D0%B4%D0%B0
5. <https://habr.com/ru/post/332092/>

