Cuarta práctica voluntaria — Métodos Matemáticos y Técn. Comp.
Profesor Francisco R. Villatoro — 5 de Abril de 2000

Métodos numéricos para optimización de funciones: Nelder-Mead.

El método simplex de Nelder-Mead (1965) es un método de minimización por búsqueda directa muy útil para optimizar funciones no lineales de menos de 5 parámetros, aunque es algo lento.

La idea del método es partir de un simplex, el cierre lineal de $n+1$ puntos en $\mathbb{R}^n$ (segmento en $\mathbb{R}$, triángulo en $\mathbb{R}^2$, tetraedro en $\mathbb{R}^3$, etc.) y sustituir su vértice con valor más grande por un nuevo vértice de valor menor y que garantice que el simplex se contrae. Sobre el simplex se realizan cuatro operaciones: reflexión, expansión, reducción y contracción.

Sea la función $F(b) \in \mathbb{R}$ con $b \in \mathbb{R}^n$. Se pretende resolver el problema $\min F(b)$ sin restricciones. Para ello, tomaremos tres puntos iniciales b_H, b_N y b_L, y calcularemos una serie de puntos b_i tales que

$$S(b_H) \geq S(b_N) \geq S(b_i) \geq S(b_L).$$

Primero calculamos el centroide b_C del simplex sin el punto b_H, es decir, de todos los puntos que tengamos excepto b_H,

$$b_C = \frac{1}{n} \sum_{H \neq i=1}^{n+1} b_i.$$

La operación de reflexión se aplica para reflejar b_H sobre el punto b_C usando un factor de reflexión α,

$$b_R = b_C + \alpha(b_C - b_H) = (1+\alpha)b_C - \alpha b_H.$$

Si $S(b_R) < S(b_L)$ hemos encontrado un nuevo punto de menor valor, y entonces el simplex puede expandirse extendiendo la línea $b_R - b_C$ para dar un nuevo punto

$$b_E = b_R + (\gamma - 1)(b_R - b_C) = \gamma b_R + (1-\gamma)b_C,$$

donde γ es el factor de expansión (si $\gamma < 1$, de contracción). Si $S(b_E) < S(b_R)$ entonces reemplazamos b_H por b_E y repetimos los pasos anteriores encontrando un nuevo punto de valor máximo y un nuevo centroide b_C. En otro caso, b_R reemplaza a b_L. Si b_R no ha reemplazado a b_L, pero

$$S(b_L) \leq S(b_R) < S(b_N),$$

entonces b_H es reemplazado por b_R y se repite el proceso. Sólo queda la posibilidad de que $S(b_R) \geq S(b_N)$, en cuyo caso debemos reducir el simplex.

Hay dos posibilidades, (a) si $S(b_N) \leq S(b_R) < S(b_H)$ entonces reducimos reemplazando b_H por b_R, encontrando nuevos vértices b_C y b_R, y (b) si $S(b_R) > S(b_H)$ buscaremos un nuevo vértice entre b_C y b_H. En ambos casos, la reducción se realiza mediante la misma fórmula con factor de reducción $0 < \beta < 1$,

$$b_S = b_C + \beta(b_H - b_C) = \beta b_H + (1-\beta) b_C.$$

El nuevo punto b_S reemplazará a b_H (que en el caso (a) era el antiguo b_R) salvo que

$$S(b_S) > \text{mín}\{S(b_H), S(b_R)\},$$

en cuyo caso realizaremos una contracción de todo el simplex por medio de b_L

$$b_i' = b_L + \beta'(b_i - b_L) = \beta' b_i + (1-\beta') b_L, \qquad \forall i \neq L.$$

Ahora se repite el proceso desde el principio. La condición de parada del algoritmo es que

$$\|S(b_i) - \tilde{S}\|_2 = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n+1} (S(b_i) - \tilde{S})^2 \right)^{1/2} < TOL, \qquad \tilde{S} = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} S(b_i).$$

donde TOL es una tolerancia de error a prescribir. Otra posibilidad es $|S(b_L) - S(b_H)| < TOL$, que en algunos casos (funciones con regiones muy planas) funciona mejor.

Los parámetros β y β' controlan lo rápido que se contrae el simplex, y los parámetros α y γ la velocidad de convergencia del algoritmo. Nelder-Mead (1965) recomiendan los valores

$$\alpha = 1, \qquad \gamma = 2, \qquad \beta' = \beta = 0{,}5,$$

que permiten obtener un algoritmo sorprendentemente robusto para la mayoría de los problemas de minimización.

1. Considere $n = 2$ (el plano) y suponga que la función S crece en la dirección vertical de la hoja de papel, dibuje tres puntos b_H, b_N y b_L. Calcule gráficamente en la hoja de papel todos los puntos del algoritmo de Nelder-Mead e indique gráficamente las diferentes posibilidades que pueden ocurrir y cómo actúan las operaciones de reflexión, expansión, reducción y contracción. Es decir, explique gráficamente el algoritmo anterior.

2. Escriba una función en Matlab con el algoritmo de Nelder-Mead:

```
function [b, Sb] = NelderMead ('funcionS', b0)
%%
%% b es el punto mínimo
%% Sb es el valor de la función S(b)
%% b0 es un punto inicial
%% 'funcionS' es la función a minimizar
%%     function S = functionS (b)
%%
```

   ¿Cómo determinaría el simplex inicial a partir del único punto inicial `b0`?

3. La función test de Rosenbrock (1960) es

$$S(b) = 100(b_2 - b_1^2)^2 + (1 - b_1)^2.$$

   Resuelve analíticamente el problema $\min S(b)$. Aplica el algoritmo que has desarrollado en el apartado anterior a dicha función. ¿Qué resultado obtienes? ¿Cuántas veces itera el algoritmo? Escribe una gráfica con el número de iteraciones para cinco tolerancias distintas.

4. El algoritmo de Nelder-Mead puede fallar si los $n+1$ puntos del simplex están degenerados, se encuentran en un hiperplano de $\mathbb{R}^n$ (por ejemplo, en $\mathbb{R}^2$ que se encuentren en una misma línea). En dicho caso, el algoritmo busca en un espacio de dimensión $n-1$ en lugar de en uno de dimensión n y el resultado no es el mínimo buscado. ¿Cómo chequearías los puntos del simplex para verificar que no se encuentran en un mismo hiperplano? ¿Cómo chequearías la solución obtenida para verificar que es realmente un mínimo? Introduce dichos dos test en tu algoritmo. Minimiza la función test de Rosenbrock utilizando el nuevo algoritmo que has desarrollado. ¿Qué resultado obtienes?