单纯形替换法

1. 单纯形替换法：Spendley、Hext 和Himsworth

于1962年提出；

Nelder 和Mead 1965年改进

2. 问 题：

$$\min_{x \in R^n} f(x)$$

$f(x)$是R^n上连续函数，即$f(x) \in C(R^n)$。

3. 算法思想

(1) 集合迭代的思想。

$$S_0 \to S_1 \to \cdots \to S_k \to S_{k+1} \to \cdots$$

这里 $S_i(i = 1,2,\cdots)$为单纯形

(2) 下降迭代的思想。

使S_i中顶点的目标函数值下降。

4. 单纯形概念

（1）单纯形的定义

设$V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)} \in R^n$，如果 $V^{(j)} - V^{(0)}$ $(j=1,2,\cdots,n)$ 线性无关，则 $V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}$ 的凸组合称为由 $V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}$构成的单纯形，记为 $S=[V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$,即

$$S=[V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$$

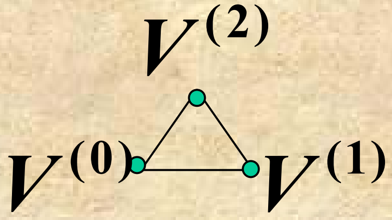
$$=\{x \mid \sum_{j=0}^{n} \alpha_j V^{(j)}, \text{其中} \sum_{j=0}^{n} \alpha_j = 1, \alpha_j > 0\}$$

称 $V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}$为该单纯形的顶点。

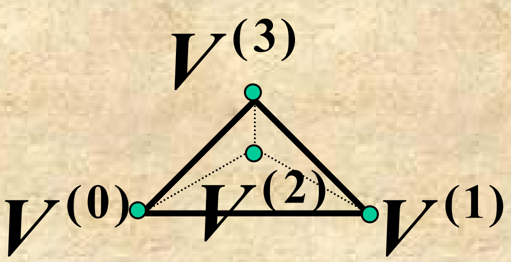
(2) 例:

R^1： 线段

R^2： 三角形



R^3： 四面体



5. 如何构造单纯形?

给定点 $x^{(0)}$和正数δ, 令:

$$V^{(0)} = x^{(0)}$$

$$V^{(1)} = V^{(0)} + \delta e_1 \qquad V^{(1)} - V^{(0)} = \delta e_1$$

$$V^{(2)} = V^{(1)} + \delta e_2 \qquad V^{(2)} - V^{(0)} = \delta (e_1 + e_2)$$

$$\cdots\cdots \qquad \cdots\cdots$$

$$V^{(n)} = V^{(n-1)} + \delta e_n \qquad V^{(n)} - V^{(0)} = \delta (e_1 + e_2 + \cdots e_n)$$

则 $S = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$构成一个单纯形。

例 设$V^{(0)}=(1,0,1)^T,\delta=\frac{1}{2}$。

令

$$V^{(1)}=V^{(0)}+\delta e_1=(1,0,1)^T+\frac{1}{2}(1,0,0)^T=(\frac{3}{2},0,1)^T,$$

$$V^{(2)}=V^{(1)}+\delta e_2=(\frac{3}{2},0,1)^T+\frac{1}{2}(0,1,0)^T=(\frac{3}{2},\frac{1}{2},1)^T,$$

$$V^{(3)}=V^{(2)}+\delta e_3=(\frac{3}{2},\frac{1}{2},1)^T+\frac{1}{2}(0,0,1)^T=(\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{3}{2})^T。$$

则 $S=[V^{(0)},\ V^{(1)},\ V^{(2)},\ V^{(3)}]$构成一个单纯形 。

6. 单纯形替换法的几何解释

给定单纯形 $S=[V^{(0)},\ V^{(1)},\cdots,V^{(n)}]$。

设 $$f(V^{(h)})=\max\{f(V^{(0)}),f(V^{(1)}),\cdots,f(V^{(n)})\},$$

$$f(V^{(l)})=\min\{f(V^{(0)}),f(V^{(1)}),\cdots,f(V^{(n)})\}。$$

令 $\overline{V}=\dfrac{1}{n}\sum\limits_{i\neq h}V^{(i)}$。

单纯形替换法的第一步：

反射步： $$V^{(r)}=\overline{V}+\alpha(\overline{V}-V^{(h)})$$

$V^{(r)}$：反射点，α：反射系数，一般取 $\alpha=1$。

下面根据反射步结果确定后继操作：

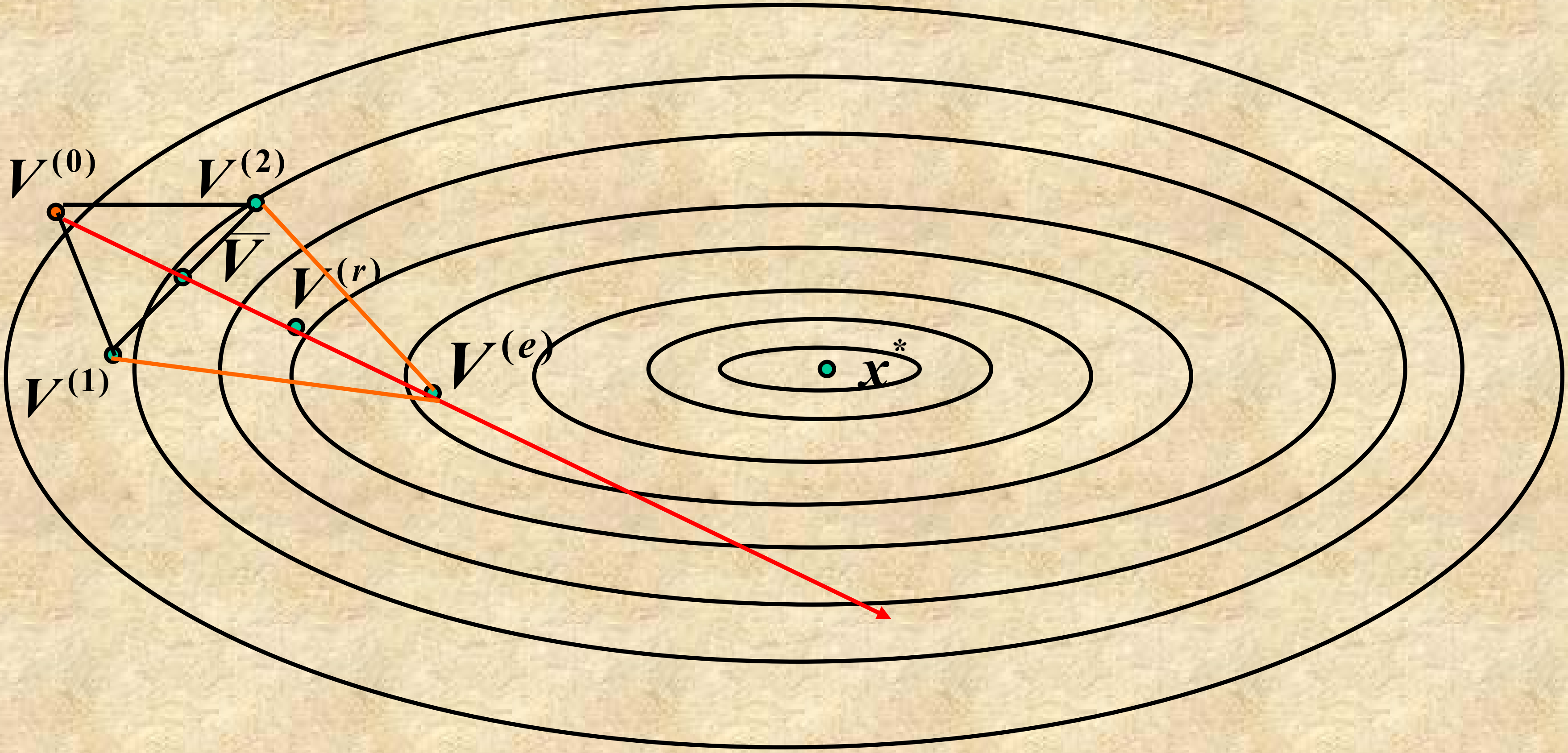
如果 $f(V^{(r)}) < f(V^{(l)})$:

延伸步：则令 $V^{(e)} = \overline{V} + \beta(V^{(r)} - \overline{V})$ ，

$V^{(e)}$: 延伸点，β : 延伸系数，一般取 $\beta = 2$。

若 $f(V^{(e)}) < f(V^{(r)})$,则用 $V^{(e)}$ 代替 $V^{(h)}$,构成新的单纯形 ，

否则用 $V^{(r)}$ 代替 $V^{(h)}$,构成新的单纯形。



例　$f(V^{(0)}) = \max\{f(V^{(0)}), f(V^{(1)}), f(V^{(2)})\}$

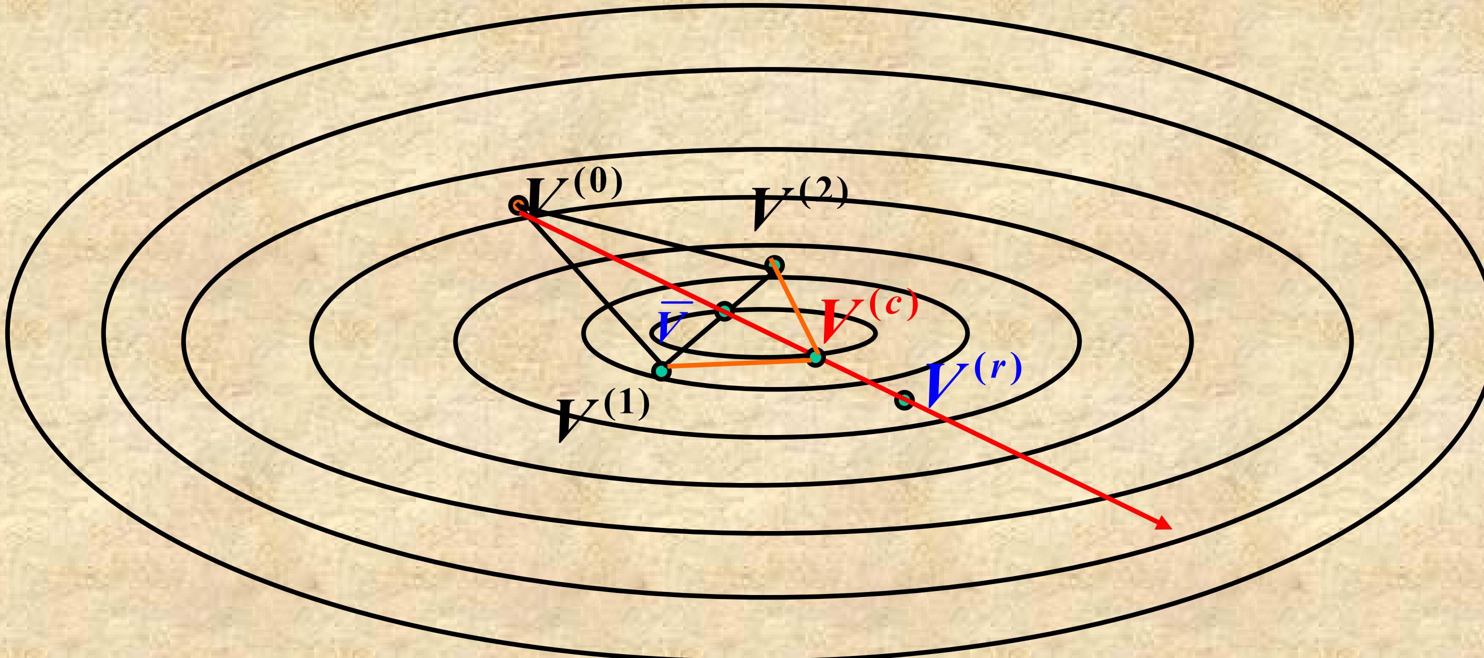
$f(V^{(r)}) < f(V^{(l)})$

令 $V^{(e)} = \overline{V} + \beta(V^{(r)} - \overline{V})$　.

如果存在 $i \neq l,h$ ，使得

$$f(v^{(l)}) \leq f(v^{(r)}) < f(v^{(i)})$$

则用 $V^{(r)}$ 代替 $V^{(h)}$,构成新的单纯形。



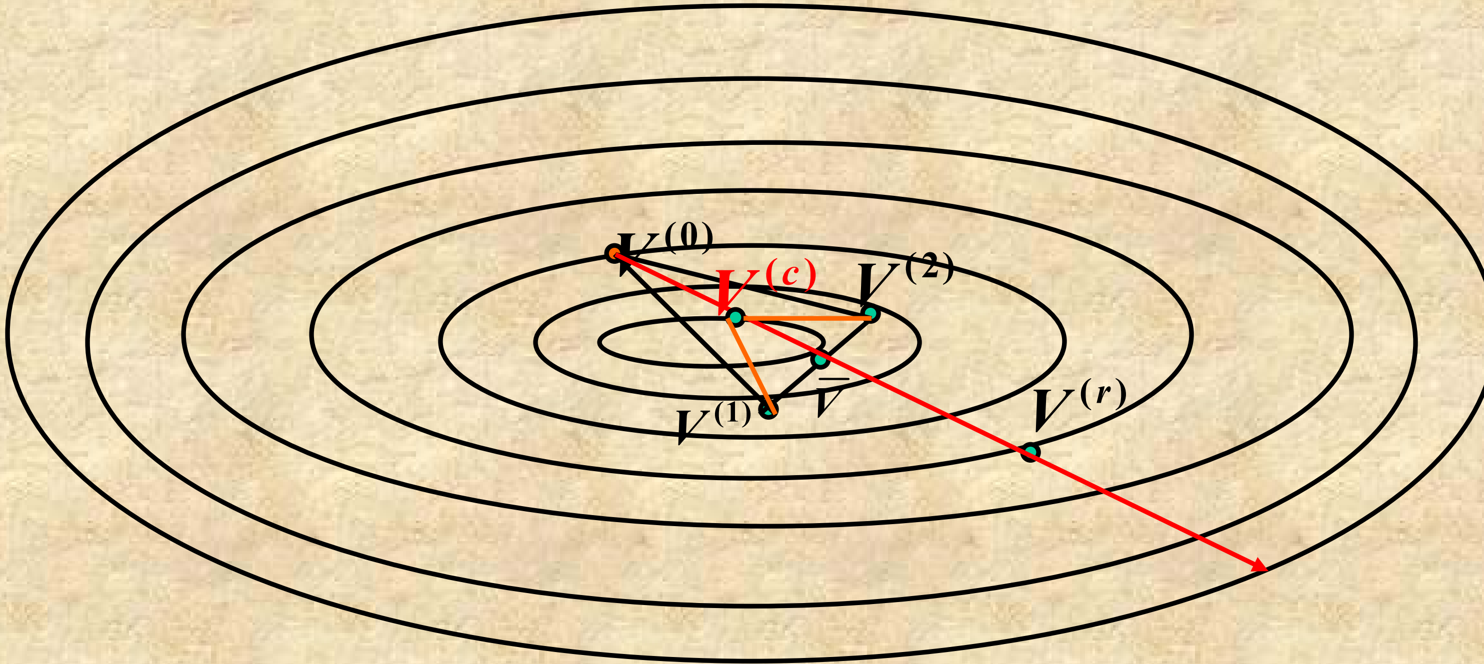
收缩步（情形一）:

$\forall\ i \neq h$ 有 $f(V^{(i)}) \leq f(V^{(r)}) \leq f(V^{(h)})$

则令 $V^{(c)} = \overline{V} + \gamma(V^{(r)} - \overline{V})$,

$V^{(c)}$:收缩点， γ: 收缩系数，一般取 $\gamma = \dfrac{1}{2}$。

若 $f(V^{(c)}) < f(V^{(h)})$,则用 $V^{(c)}$ 代替 $V^{(h)}$,构成新的单纯形。



收缩步（情形二）:

若 $f(V^{(r)}) > f(V^{(h)})$, 则令 $V^{(c)} = \bar{V} + \gamma(V^{(h)} - \bar{V})$,

$V^{(c)}$: 收缩点， γ: 收缩系数，一般取 $\gamma = \frac{1}{2}$。

若 $f(V^{(c)}) < f(V^{(h)})$, 则用 $V^{(c)}$ 代替 $V^{(h)}$, 构成新的单纯形。

如果 $f(V^{(c)}) > f(V^{(h)})$:

棱长减半步: $$V^{(i)} = \frac{V^{(i)} + V^{(l)}}{2} \quad (i = 0,1,\cdots,\mathrm{n})$$

$$S_{k+1} = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]。$$

7. 单纯形替换法的步骤

Step **1.**(初始步) 给定初始点 $x^{(0)}$, 构造初始单纯形

$$S_0=[V^{(0)},V^{(1)},\cdots,V^{(n)}],\text{精度}\ \varepsilon>0,\ \ k:=0$$

Step **2.**（准备步）计算 $f(V^{(h)})=\max_{0\le i\le n} f(V^{(i)})$,

$$f(V^{(l)})=\min_{0\le i\le n} f(V^{(i)}),$$

$$\bar{V}=\sum_{i\ne h} V^{(i)}/n\ 。$$

step **3.**(反射步) $V^{(r)}=\bar{V}+\alpha(\bar{V}-V^{(h)})$

($V^{(r)}$: 反射点, α: 反射系数, 一般取 $\alpha=1$)

如果 $f(V^{(r)})<f(V^{(l)})$, 则转 ***step*** **4.**

如果 $f(V^{(r)})\ge f(V^{(l)})$, 则转 ***step*** **5.**

step 4.(延伸步) $V^{(e)} = \overline{V} + \beta(V^{(r)} - \overline{V})$

($V^{(e)}$: 延伸点, β: 延伸系数，一般取 $\beta = 2$)

如果 $f(V^{(e)}) < f(V^{(l)})$ ($f(V^{(e)}) < f(V^{(r)})$),

则 $V^{(h)} := V^{(e)}$, $S_{k+1} = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$,

转 *step* 7(判断步).

如果 $f(V^{(e)}) \geq f(V^{(l)})$ (即 $f(V^{(e)}) \geq f(V^{(r)})$),

则 $V^{(h)} := V^{(r)}$, $S_{k+1} = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$,

转 *step* 7(判断步).

step 5.(收缩步)

(1) 如果存在 $i \neq h$ 使得 $f(V^{(r)}) < f(V^{(i)})$, 则

$V^{(h)} := V^{(r)}$, $S_{k+1} = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$, 转 *step* 7.

(2) 如果 $\forall\, i \neq h$ 有 $f(V^{(i)}) \leq f(V^{(r)}) \leq f(V^{(h)})$, 则

令 $V^{(c)} = \overline{V} + \gamma(V^{(r)} - \overline{V})$,

($V^{(c)}$: 收缩点， γ: 收缩系数，一般取 $\gamma = \dfrac{1}{2}$。)

如果 $f(V^{(c)}) < f(V^{(r)})$,

则 $V^{(h)} := V^{(c)}$, $S_{k+1} = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$,

转 *step* 7(判断步).

如果 $f(V^{(c)}) > f(V^{(r)})$, 则 转 *step* 6 (棱长减半步).

(3) 如果 $f(V^{(r)}) > f(V^{(h)})$, 则 $V^{(c)} = \overline{V} + \gamma(V^{(h)} - \overline{V})$。

如果 $f(V^{(c)}) < f(V^{(r)})$,

则 $V^{(h)} := V^{(c)}$, $S_{k+1} = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$,

转 *step* 7(判断步).

如果 $f(V^{(c)}) > f(V^{(r)})$, 则 转 *step* 6 (棱长减半步).

$step$ 6.(棱长减半步) $V^{(i)} = \dfrac{V^{(i)} + V^{(l)}}{2}$ $(i = 0,1,\cdots,\mathrm{n})$

$S_{k+1} = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$, 转 Step 7(判断步)。

$step$ 7.(判断步) 计算 $V = \dfrac{\sum_{i=0}^{n} V^{(i)}}{n+1}$,

如果 $\sum_{i=0}^{n} \left\| V^{(i)} - V \right\| \le \varepsilon$（或者 $\max_{1 \le i \le n} \left\| V^{(i)} - V^{(j)} \right\| \le \varepsilon$）,

则算法结束，得到 $x^* = V$。

如果 $\sum_{i=0}^{n} \left\| V^{(i)} - V \right\| > \varepsilon$（$\max_{1 \le i \le n} \left\| V^{(i)} - V^{(j)} \right\| > \varepsilon$）, 那么

$S_{k+1} = [V^{(0)}, V^{(1)}, \cdots, V^{(n)}]$, $k =: k + 1$,

转 Step 2 (准备步)。

例 试用单纯型替换法求 $\min \quad f(x)=(2x_1-x_2)^2+x_2^2$，

其中初始单纯型的顶点 $V^{(0)}=(-1,2)^T$，步长 $\delta=1, \alpha=1$。

试求一次迭代后的单纯 型。

解： 构造初始单纯形。

$$V^{(1)}=V^{(0)}+\delta e_1=(0,2)^T, \quad V^{(2)}=V^{(1)}+\delta e_2=(0,3)^T.$$

$$\therefore S_0=[V^{(0)},V^{(1)},V^{(2)}]$$

$$\therefore f(V^{(0)})=20, f(V^{(1)})=8, f(V^{(2)})=18.$$

$$\therefore f(V^{(h)})=\max_{0\le i\le 2} f(V^{(i)})=20, \quad f(V^{(l)})=\min_{0\le i\le 2} f(V^{(i)})=8.$$

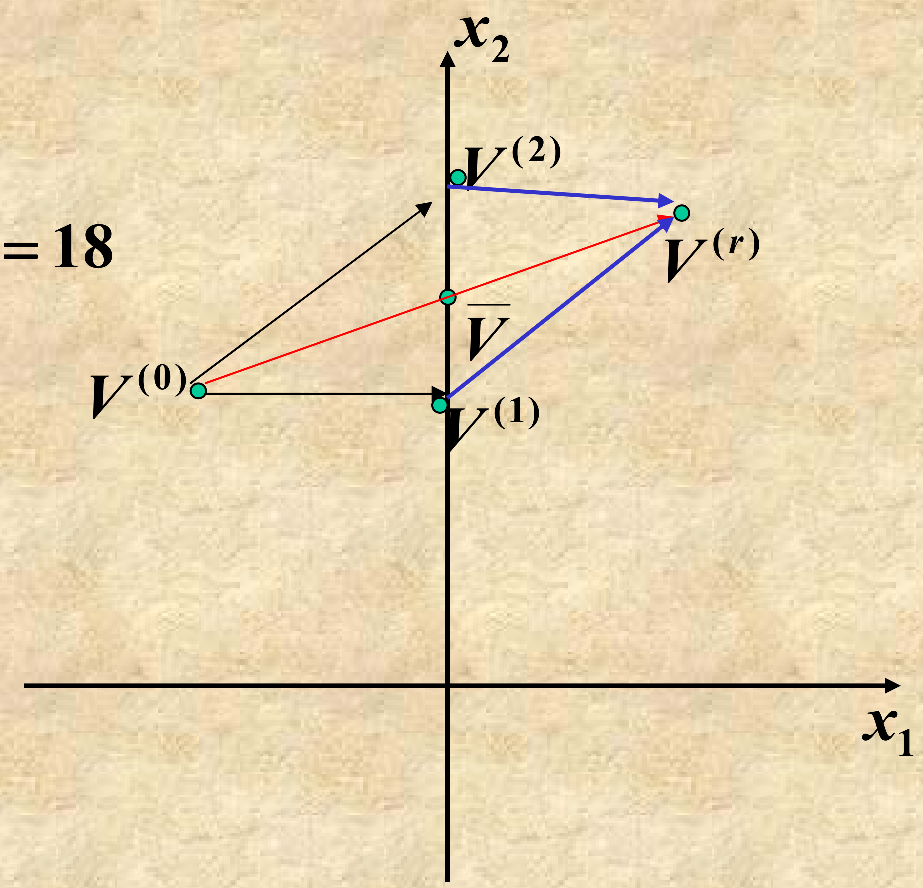
$$\therefore \overline{V}=\frac{V^{(1)}+V^{(2)}}{2}=(0,5/2)^T$$

$$\therefore V^{(r)} = \overline{V} + \alpha(\overline{V} - V^{(0)}) = (1,3)^T$$

$$\therefore f(V^{(r)}) = 10$$

$$\because f(V^{(r)}) = 10 < f(V^{(2)}) = 18$$

$$\therefore S_1 = [V^{(1)}, V^{(r)}, V^{(2)}]$$



练习 试用单纯型替换法求 $\min \quad f(x)=(x_1-2)^2+2(x_2-3)^2$，

其中初始单纯型的顶点 $V^{(0)}=(-1,0)^T$，步长 $\delta=1, \alpha=1, \beta=2$。

试求一次迭代后的单纯 型。