**MINIMISATION D’UNE FONCTION : METHODE DU SIMPLEXE**

La méthode de Nelder-Mead est un algorithme d'optimisation non-linéaire qui a été publiée par Nelder et Mead1 en 1965. C'est une méthode numérique heuristique qui cherche à minimiser une fonction continue dans un espace à plusieurs dimensions.

Appelée également « downhill simplex method2 », l’algorithme exploite le concept de simplexe qui est un polytope de N+1 sommets dans un espace à N dimensions. Partant initialement d’un tel simplexe, celui-ci subit des transformations simples au cours des itérations : il se déforme, se déplace et se réduit progressivement jusqu’à ce que ses sommets se rapprochent d’un point où la fonction est localement minimale.

**A. PRINCIPE**

*A.1 Généralités*

Soit une fonction f (x1, x2,...xn) appartenant à Rn pour laquelle on cherche un minimum. La méthode de **Nelder et Mead**, qui est du type exploratoire, consiste à déplacer un polygone (simplexe) de n+1 points de l'espace à n dimensions, en "réfléchissant" le plus "mauvais" sommet (par un coefficient ) du polygone par rapport à l'hyperplan des autres sommets (Fig. 1). Selon le succès rencontré par cette opération, on peut renouveler cette opération en projetant le même point plus loin dans la même direction ("expansion" par un coefficient ), ou revenir en deçà de l'hyperplan ("contraction" par un coefficient ). Une procédure de division par deux de la taille du simplexe est prévue si l'on ne peut plus améliorer les valeurs de la fonctions en appliquant les procédures précédentes.

f(x1)<f(x2)<f(x3)

2

1

3

Fig. 1 : transformation d’un simplexe

*A.2 Les notations*

Phigh le sommet du simplexe tel que : f(Phigh) = max ( f(Pk) ) pour k=1 ... n+1

Ps  le sommet du simplexe tel que : f(Ps) = max ( f(Pk) ) pour k≠high

Plow  le sommet du simplexe tel que : f(Plow) = min ( f(Pk) ) pour k=1 ... n+1

Pbary le barycentre du simplexe tel que : f(Pbary)= f(∑Pk /n) pour k≠high

*A.3 Les transformations de base du simplexe*

La **réflexion** : on remplace Phigh par Prefl = (1+) Pbary - Phigh avec  >0

Ps

Pbary

Prefl

Phigh

Plow

**L’expansion** : on remplace Prefl par Pexpa =  Prefl +(1-) Pbary avec  >0

Ps

Pbary

Pexpa

Prefl

Phigh

Plow

La **contraction** : on remplace Phigh par Pcont = (1-) Pbary+ Phigh avec  >0

Ps

Pbary

Pcont

Phigh

Plow

La **réduction** : on divise tous les côtés par deux : Pk = (Pk+Plow)/2.

Ps

Plow

Phigh

*A.4 Algorithme de principe*

Les opérations à effectuer dans la méthode du simplexe de Nelder et Mead dans n sont celles qui apparaissent dans l’algorithme de principe suivant.

* lire les coordonnées initiales du simplexe 🡪 Pi
* calcul des valeurs correspondantes aux différents nœuds, de la fonction à minimiser 🡪 yi
* identifier le nœud du simplexe tel que : f(Phigh) = max ( f(Pk) ) pour k=1 ... n+1 🡪 high
* identifier le nœud du simplexe tel que : f(Plow) = min ( f(Pk) ) pour k=1 ... n+1 🡪 low

calculer la position du barycentre Pbary = ∑Pk /n pour k≠high

calculer Prefl = (1+) Pbary - Phigh

calculer yrefl

si (yrefl > ylow et yrefl < yhigh ) alors

remplacer Phigh par Prefl *transformation par réflexion*

sinon

si yrefl < ylow alors

Pexpa = (1+) Pbary -  Phigh

calculer yexpa

si yexpa < ylow alors

remplacer Phigh par Pexpa *transformation par expansion*

mettre à jour yhigh

sinon

remplacer Phigh par Prefl

mettre à jour yhigh

fin si

sinon *on est dans le cas yrefl >yhigh*

calculer Pcont = (1-) Pbary+ Phigh

calculer ycont

si ycont> yhigh alors *la contraction ne marche pas on fait une réduction*

remplacer les Pi, tel que i≠low, par (Plow+Pi)/2 *transformation par réduction*

mettre à jour les yi tel que i≠low

sinon

remplacer Phigh par Pcont *transformation par contraction*

mettre à jour yhigh

fin si

fin si

fin si

On répétera ces opérations tant que le critère d’arrêt, définit par (avec  : valeur moyenne des yi) n’est pas atteint. On prendra une précision de 10-8.

**B. TRAVAIL A EFFECTUER**

B.1 A partir de l’algorithme fourni, développer un programme C.

On prendra =1, =0.5 et =2.

B.2 Ecrire le programme. Tester votre programme avec les trois fonctions suivantes :

f1(x, y) = (x-1)2+(y-1)2

f2(x, y) = 100\*(x2-y)2+(x-1)2

f3(x, y, z) = (x-1)2 + (y-0.5)2 + (y-0.5)\*(z-0.75)2

Tester votre programme pour différentes solutions initiales.

B.3 Tester votre programme sur une hypersphère de n.

**C. REFERENCES**

1. J. Nelder, R. Mead, « A simplex method for function minimization », Computer Journal, vol. 7, no 4,‎ 1965, p. 308-313.
2. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, « Numerical Recipes : The Art of Scientific Computing », Cambridge University Press, Third Edition (2007)