Institute of
Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Der Downhill-Simplex-Algorithmus

„Amöbe Bewegung“

Zielstellung

- Gegeben ist eine Funktion (stetige oder nicht stetige) von n Variablen

$$F : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$$

$$y = F(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{x} = \left(x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}, x_n\right)$$

- Gesucht ist das (lokale) Minimum dieser Funktion

$$y_m = F(\boldsymbol{x}^m) \text{ mit } y_m < F(\boldsymbol{x}) \; \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{U}/\boldsymbol{x}^m \subseteq \boldsymbol{R}^n$$

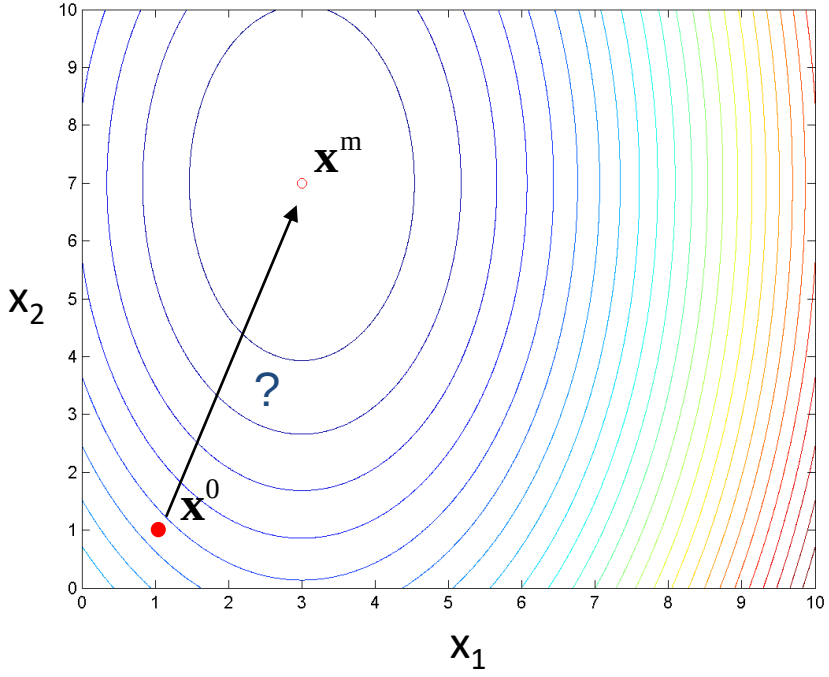
ausgehend von einem Startpunkt

$$\mathbf{x}^0 \in \mathbf{U}$$

Beispiel:

$$F(\mathbf{x}) = 4 \cdot (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 7)^2$$

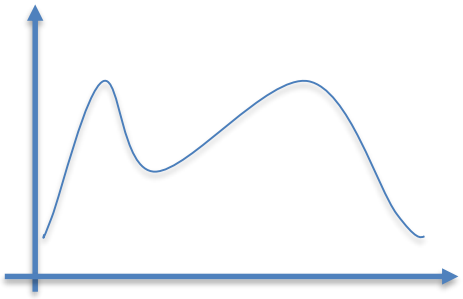
$$\mathbf{x}^0 = (1,1)$$

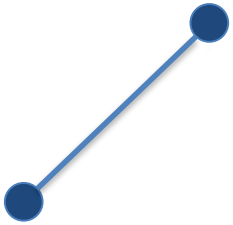


Was ist ein Simplex?

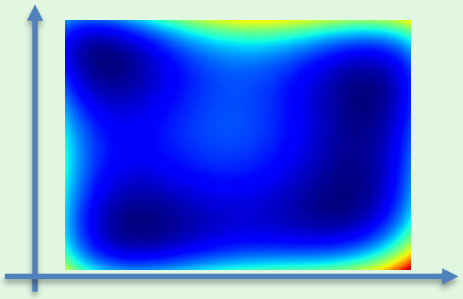
Institute of Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

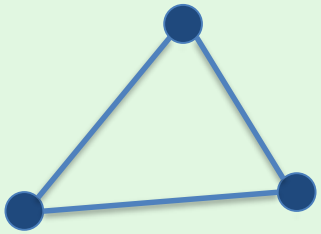
1D



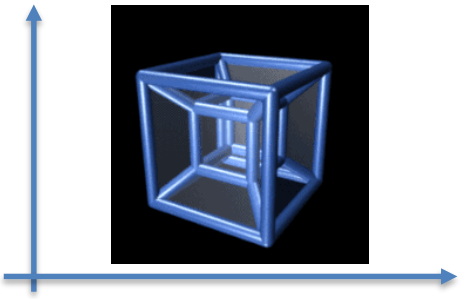


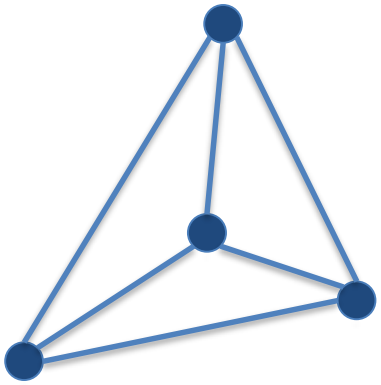
2D





3D





Institute of Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Initialisierung

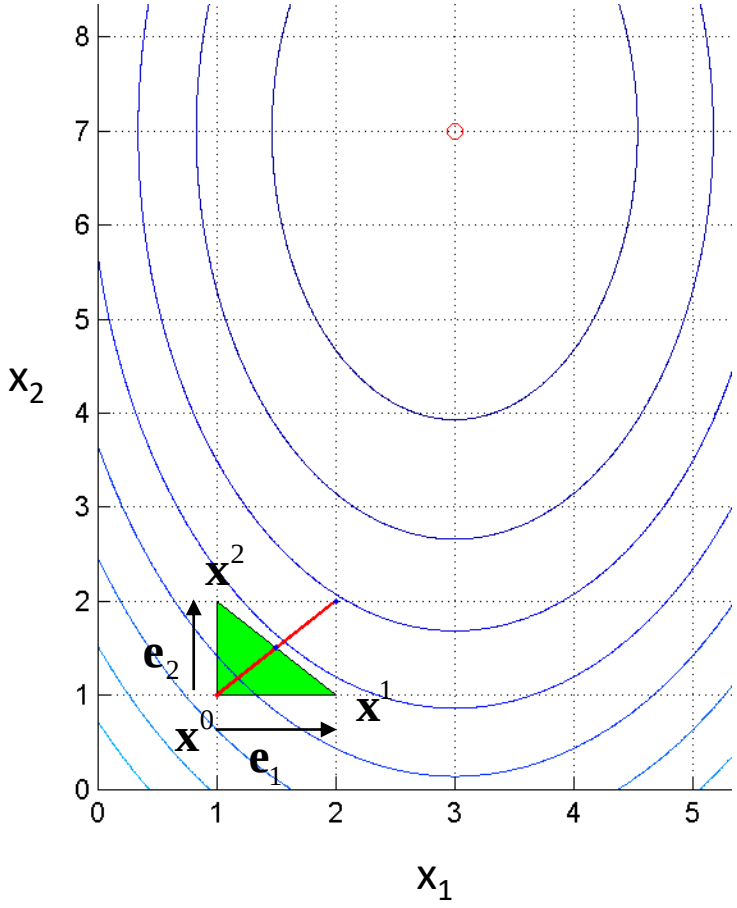
Konstruktion eines Start-Simplexes bestehend aus n+1 Punkten,
z.B. Startpunkt $\mathbf{x}^0$ und n weitere Punkte, welche durch Einheitsvektoren und Länge λ gegeben sind

$$\left\{\mathbf{x}^1,\ldots,\mathbf{x}^n,\mathbf{x}^{n+1} \,|\, \mathbf{x}^i = \mathbf{x}^0 + \lambda \mathbf{e}_i \;\forall i \le n, \mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^0 \right\}$$

Beispiel für 3 Punkte:

$$\begin{bmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^0 \\ x^0 \\ x^0 \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Ausgehend vom Start-Simplex wird ein neuer Simplex konstruiert, so dass die Funktion schrittweise minimiert wird

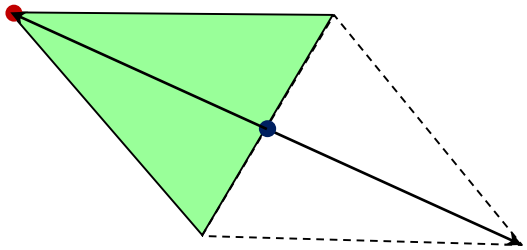


Möglichkeiten der Simplex-Modifikation

Institute of Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

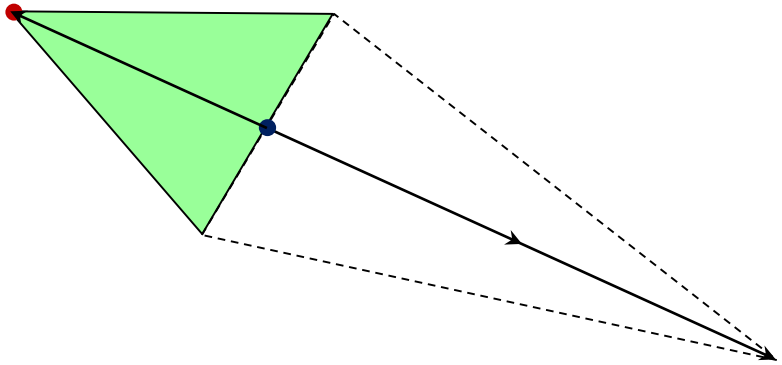
1. Spiegelung des Simplex

→ Fortbewegung



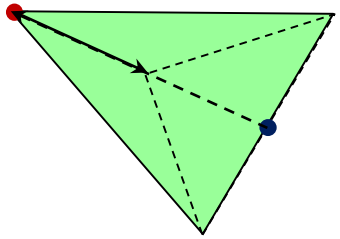
2. Expansion des Simplex

→ Schnellere Fortbewegung



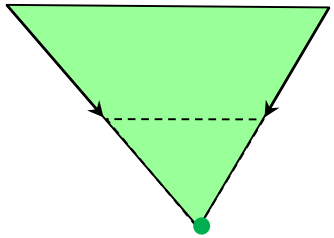
3. Kontraktion des Simplex

→ Zusammendrücken des Simplex, um nicht über das Ziel hinaus zu schießen



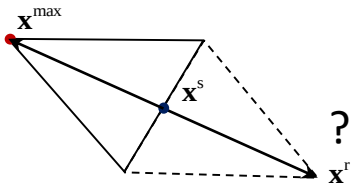
4. Kompression des Simplex

→ Simplex um das bisherige Minimum zusammenziehen



Flussdiagramm

Spiegelung



Minimum erreicht?

nein

ja

Ende

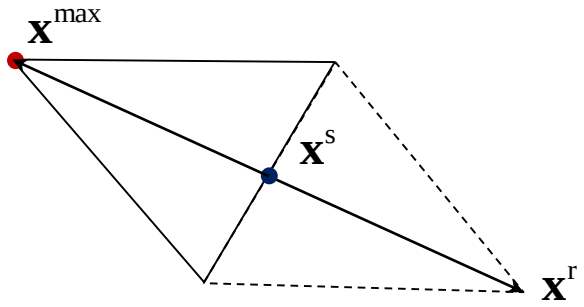
Spiegelung

Spiegelung des Simplex (in jeder Iteration der erste Schritt)

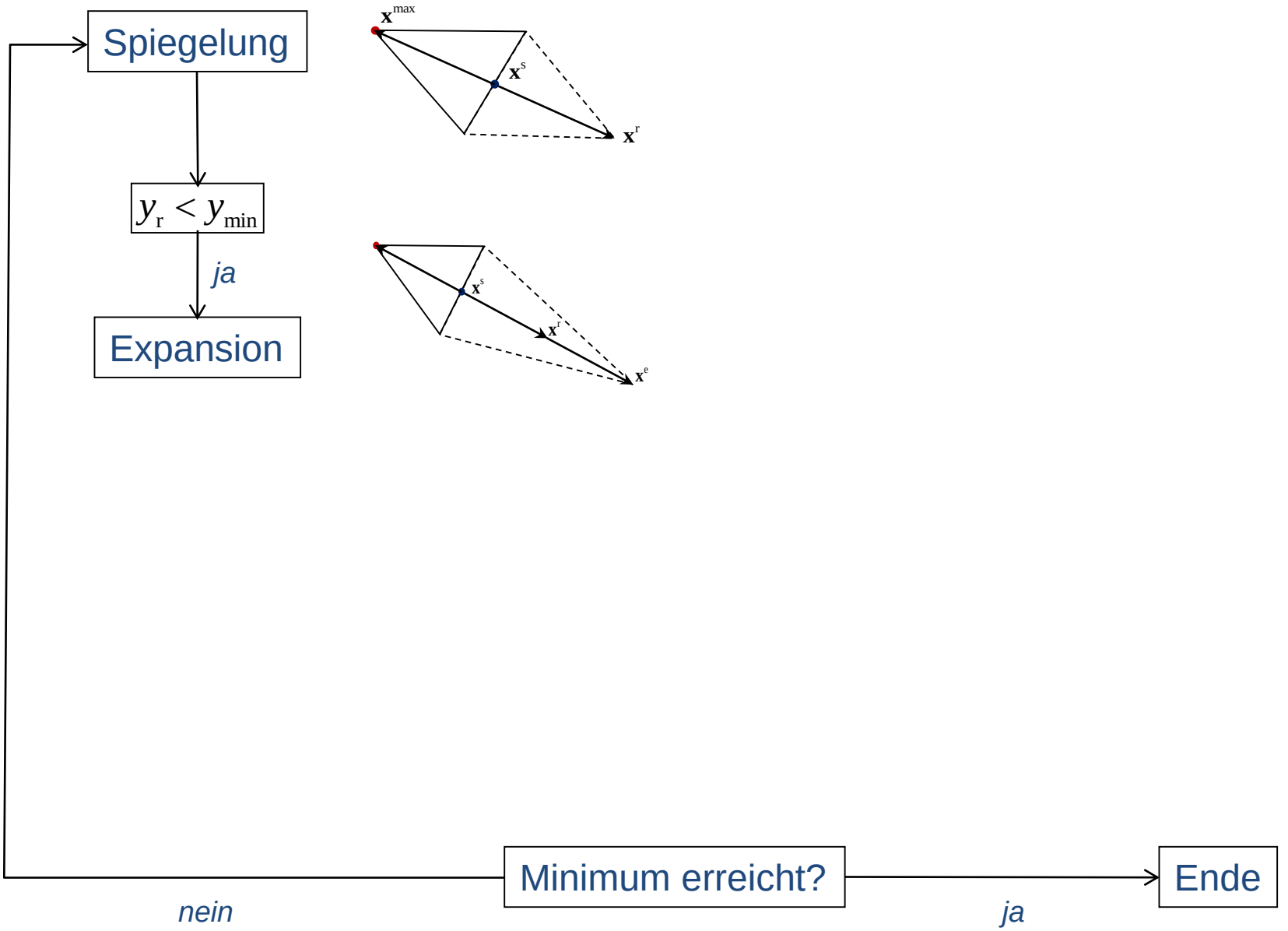
- Berechnung der Funktionswerte $y_i = F\left(\mathbf{x}^i\right)$
- Bestimmung des besten $\left(\mathbf{x}^{\min}, y_{\min}\right)$, des schlechtesten $\left(\mathbf{x}^{\max}, y_{\max}\right)$ und des zweitschlechtesten Punktes $\left(\mathbf{x}^{\mathrm{v}}, y_{\mathrm{v}}\right)$
- Berechnung des Spiegelzentrums $x_k^{\mathrm{s}} = \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{x}^i \neq \mathbf{x}^{\max}} x_k^i$ als koordinatenweisen Mittelwert über alle Punkte mit Ausnahme des schlechtesten
- Spiegelung des schlechtesten Punktes am Spiegelzentrum

$$\mathbf{x}^{\mathrm{r}} = \mathbf{x}^{\mathrm{s}} - \alpha\left(\mathbf{x}^{\max} - \mathbf{x}^{\mathrm{s}}\right)$$

$$y_r = F\left(\mathbf{x}^{\mathrm{r}}\right)$$



Flussdiagramm



Expansion

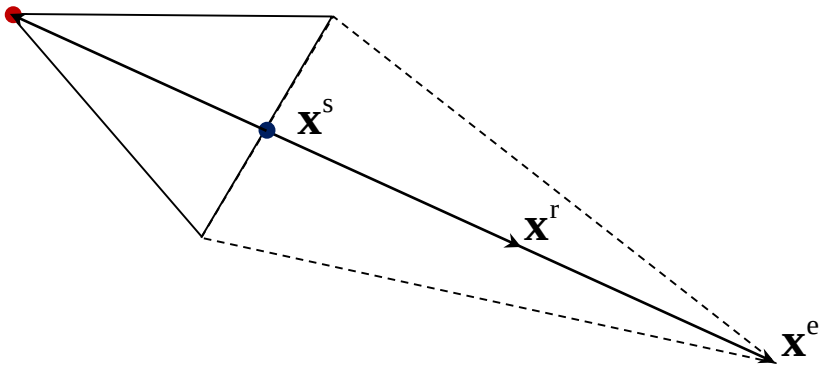
Neuer Punkt besser als bisheriges Minimum? $y_\mathrm{r} < y_\mathrm{min}$

- Falls ja: Versuchen, ob ein noch größerer Schritt möglich ist – **Expansion**

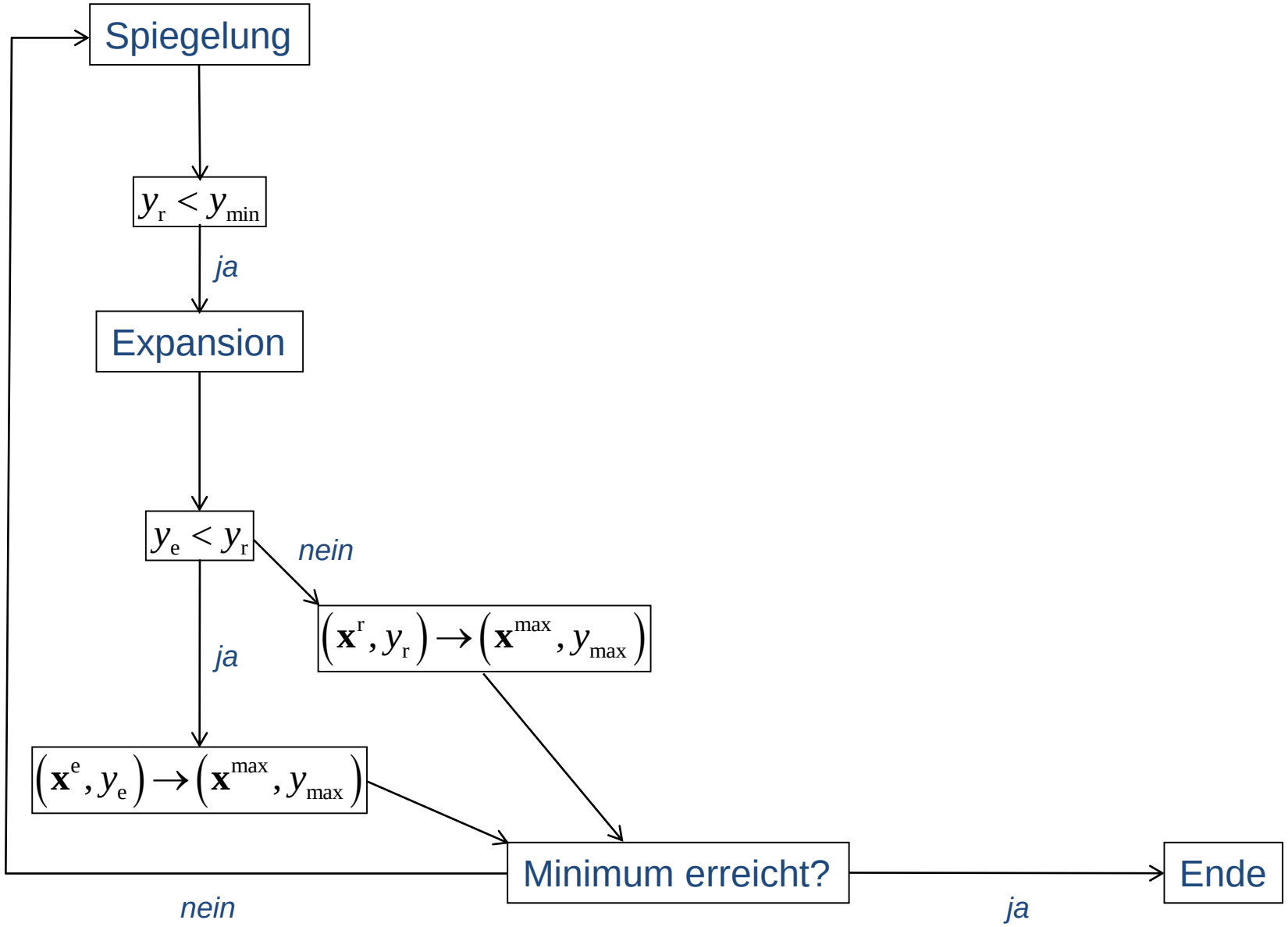
  → Berechne Expansionspunkt

$$\mathbf{x}^\mathrm{e} = \mathbf{x}^\mathrm{s} + \gamma\left(\mathbf{x}^\mathrm{r} - \mathbf{x}^\mathrm{s}\right)$$

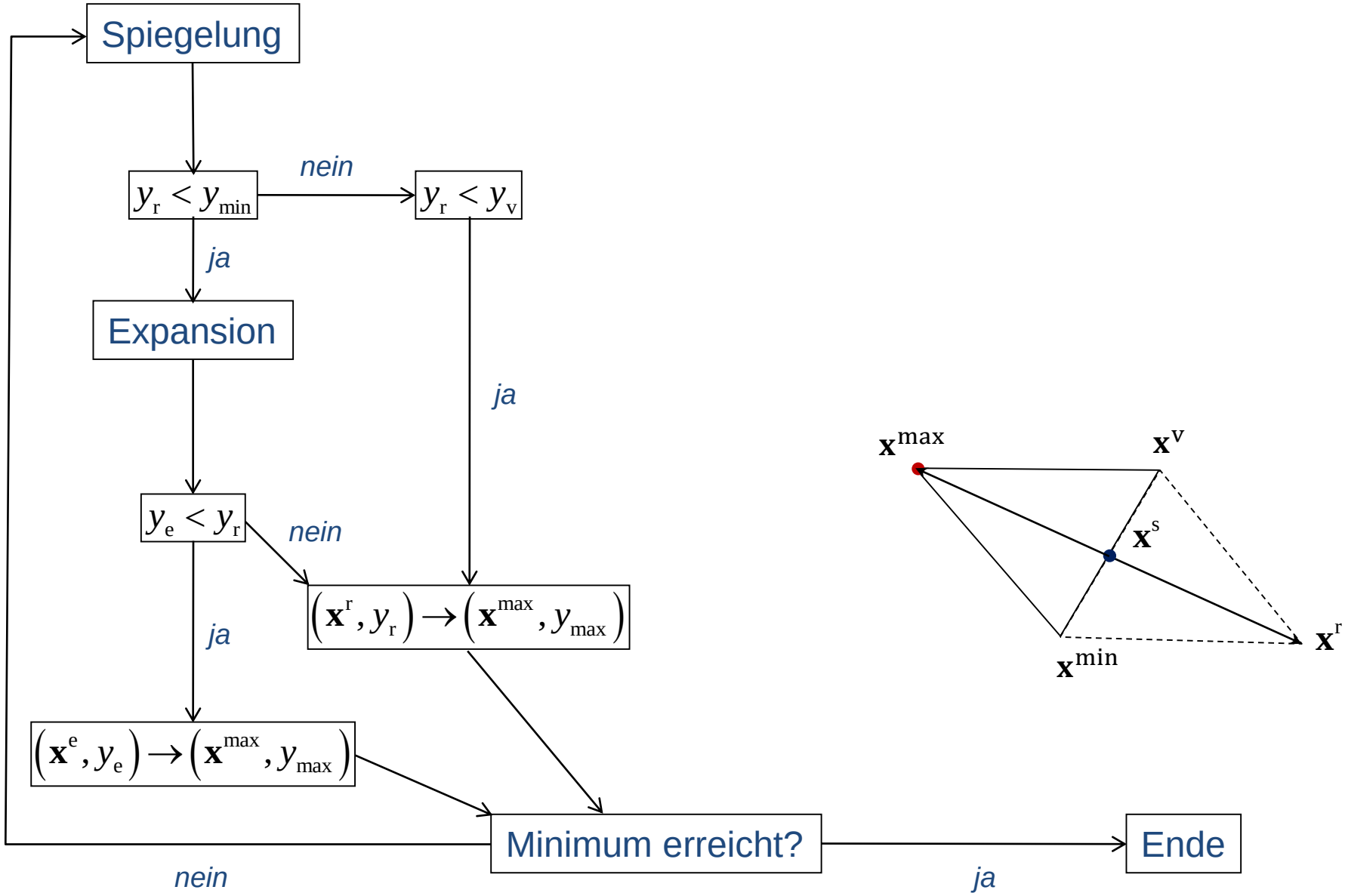
$$y_\mathrm{e} = F\left(\mathbf{x}^\mathrm{e}\right)$$



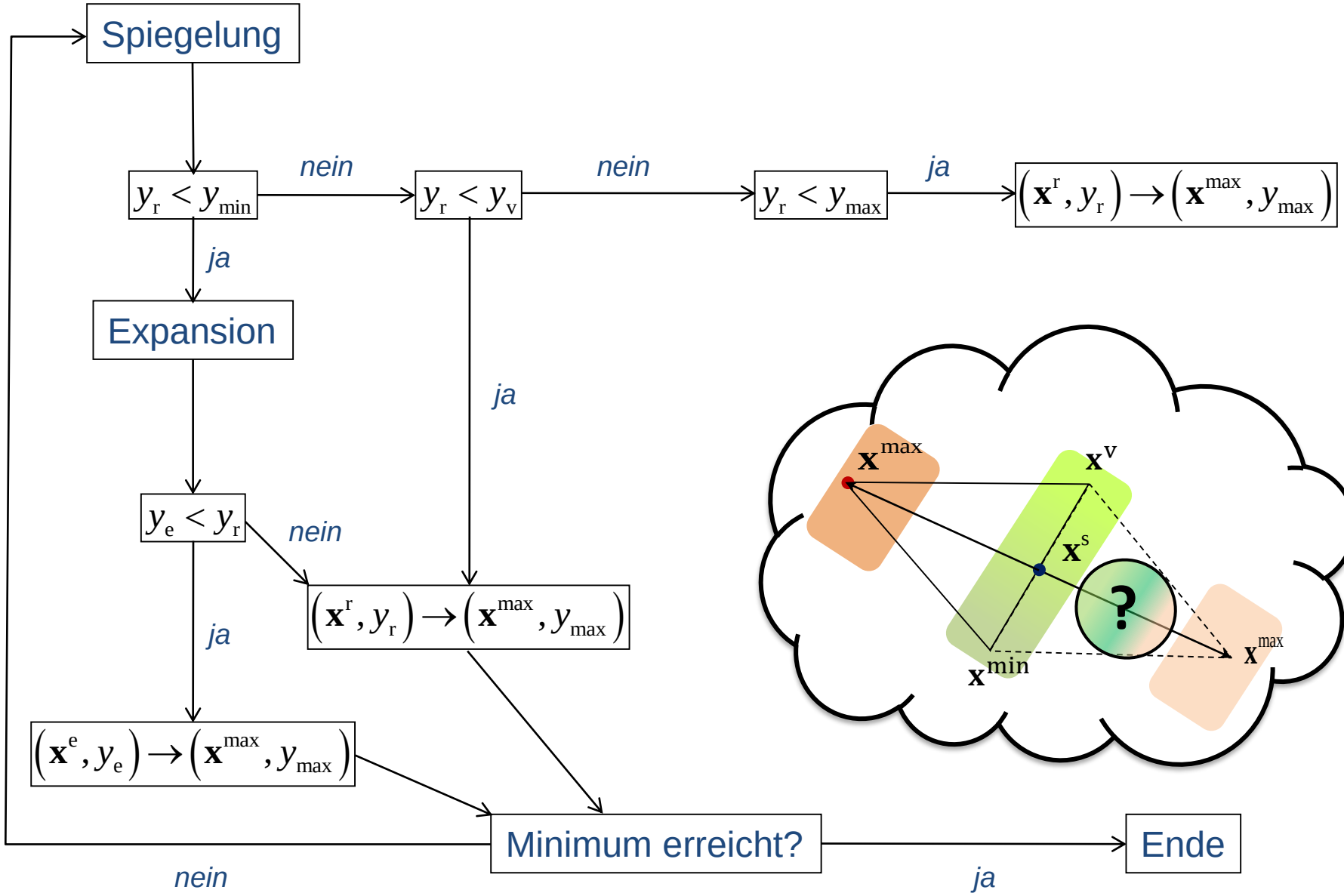
Flussdiagramm



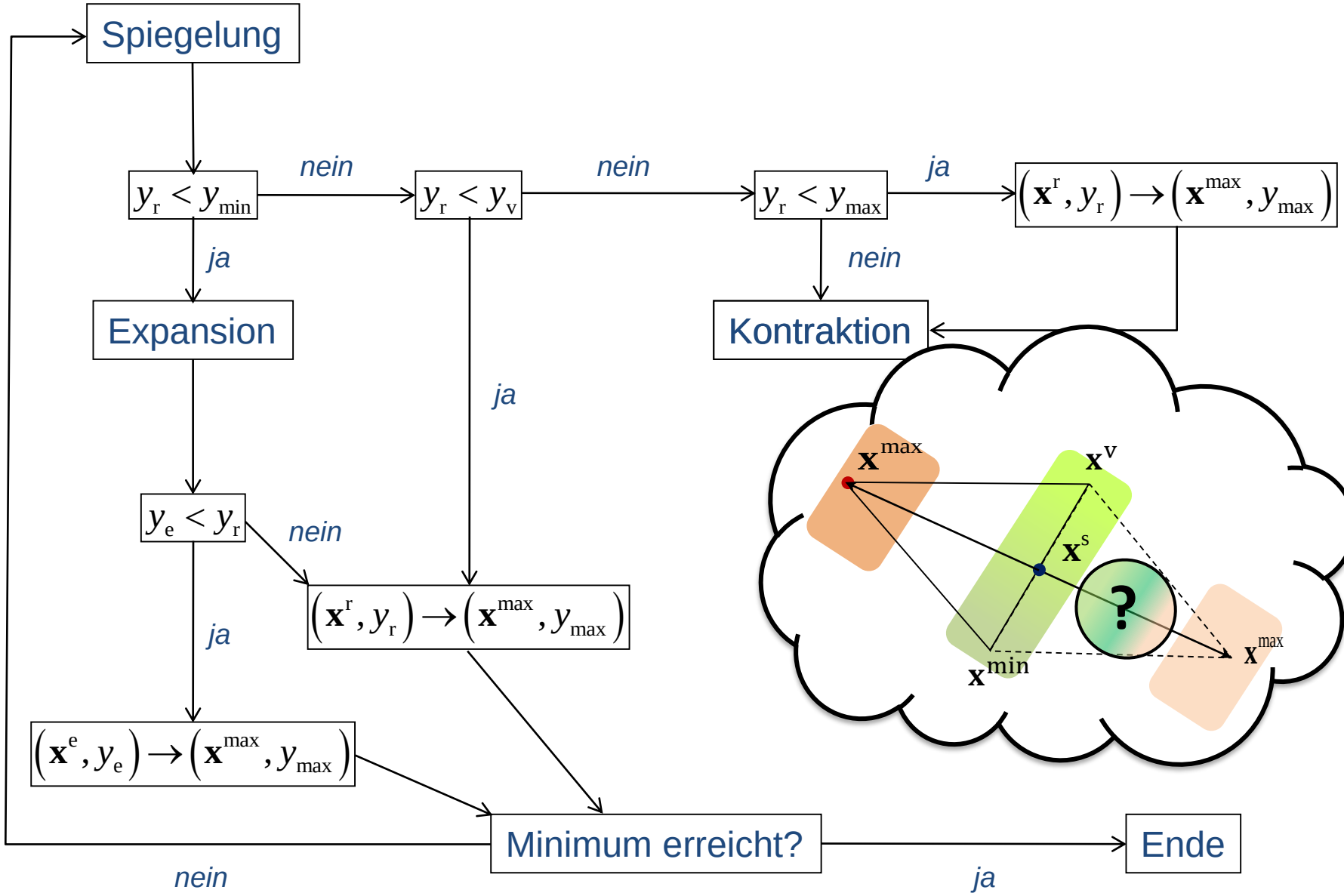
Flussdiagramm



Flussdiagramm



Flussdiagramm



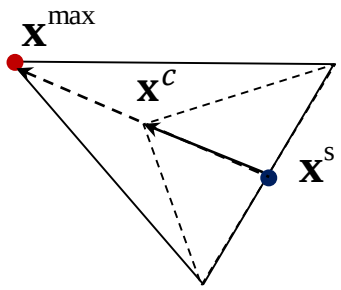
Kontraktion

- **Kontraktion:** Zusammendrücken des Simplex durch Verschieben von $\mathbf{x}^{\max}$

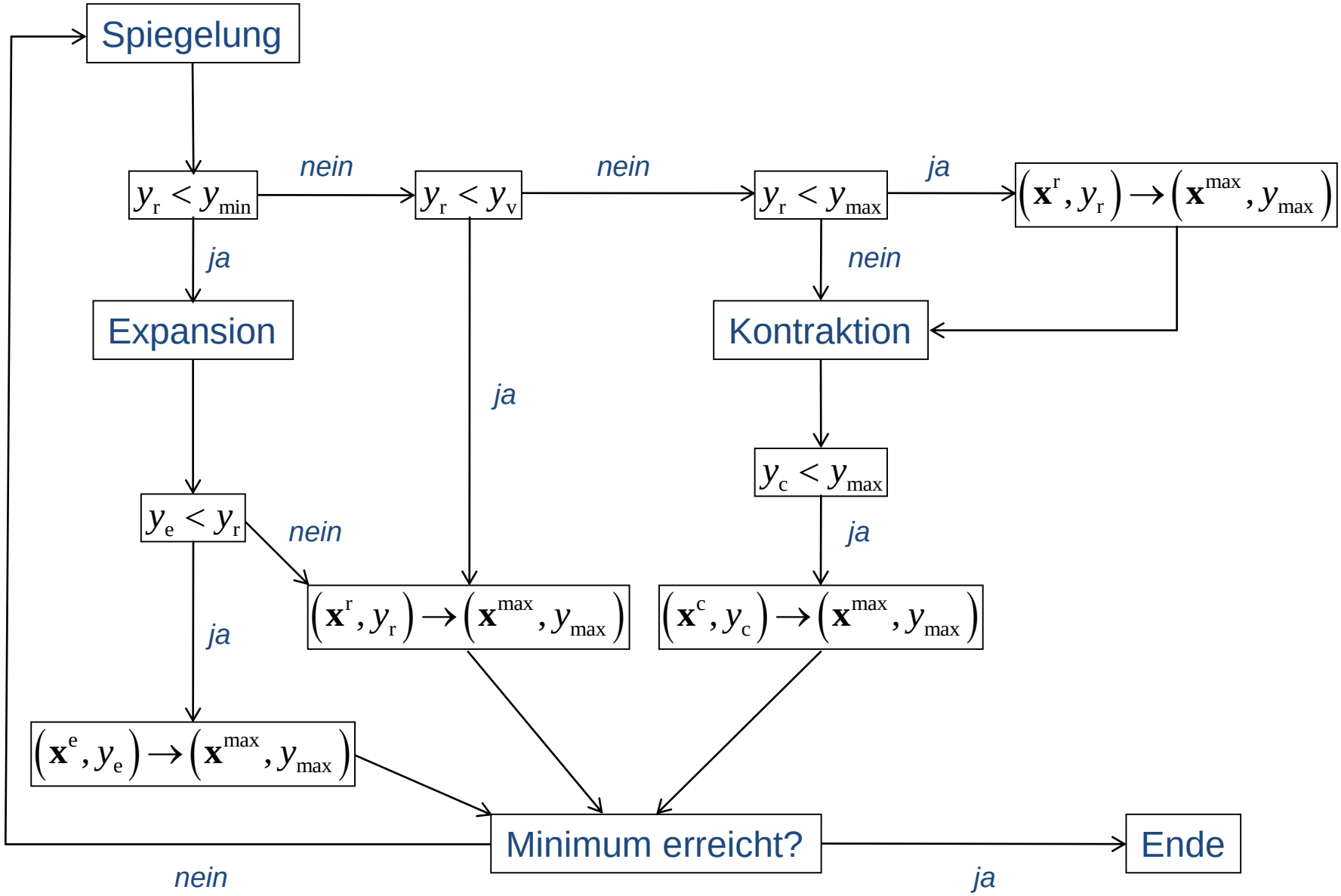
  → Berechne Kontraktionspunkt

$$\mathbf{x}^{\mathrm{c}} = \mathbf{x}^{\mathrm{s}} + \beta\left(\mathbf{x}^{\max} - \mathbf{x}^{\mathrm{s}}\right)$$

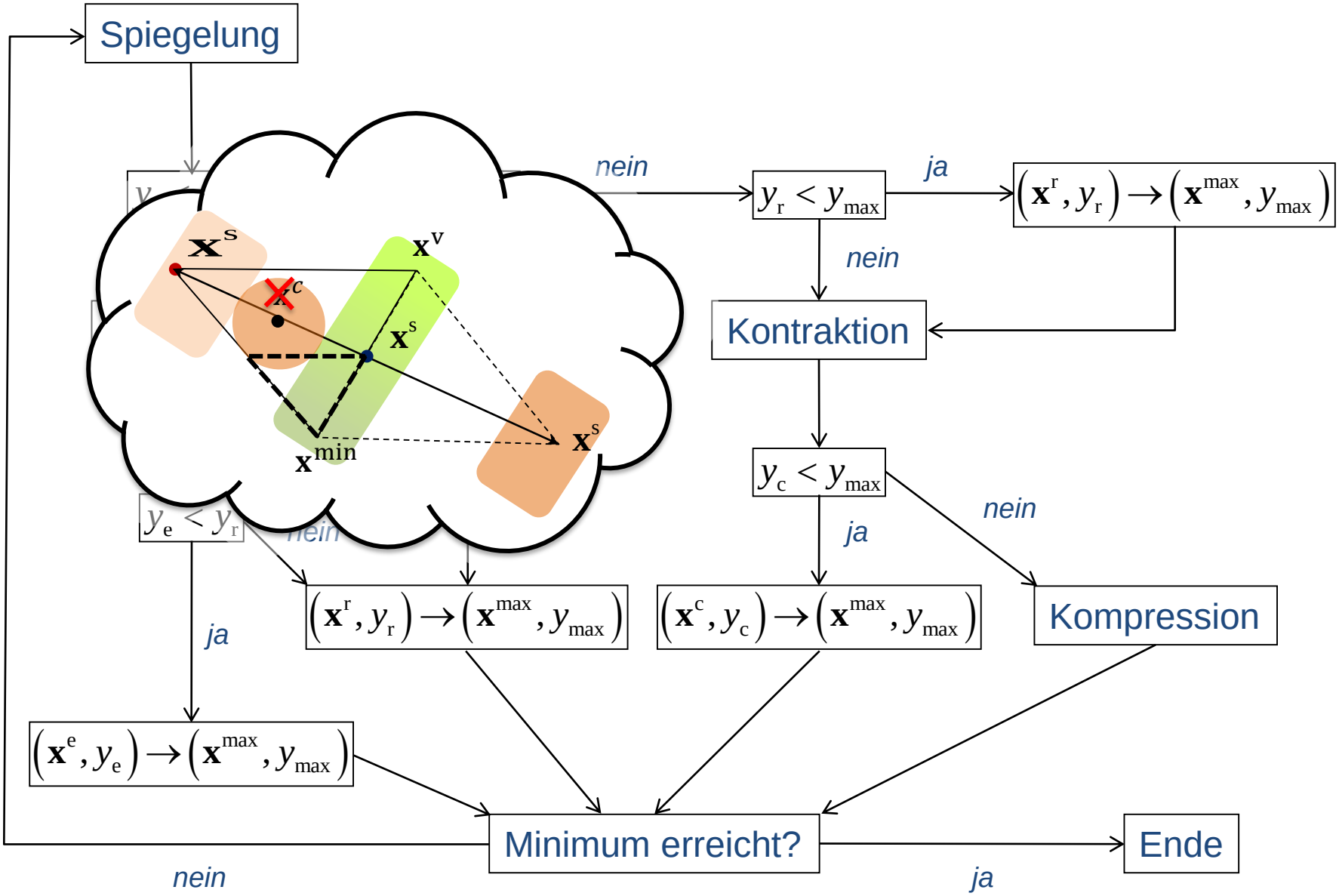
$$y_{\mathrm{c}} = F\left(\mathbf{x}^{\mathrm{c}}\right)$$



Flussdiagramm



Flussdiagramm

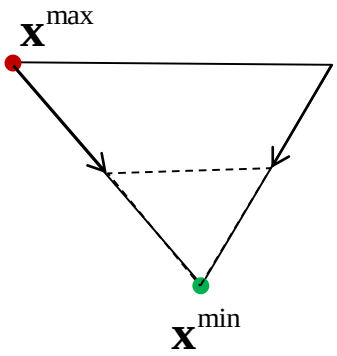


Kompression

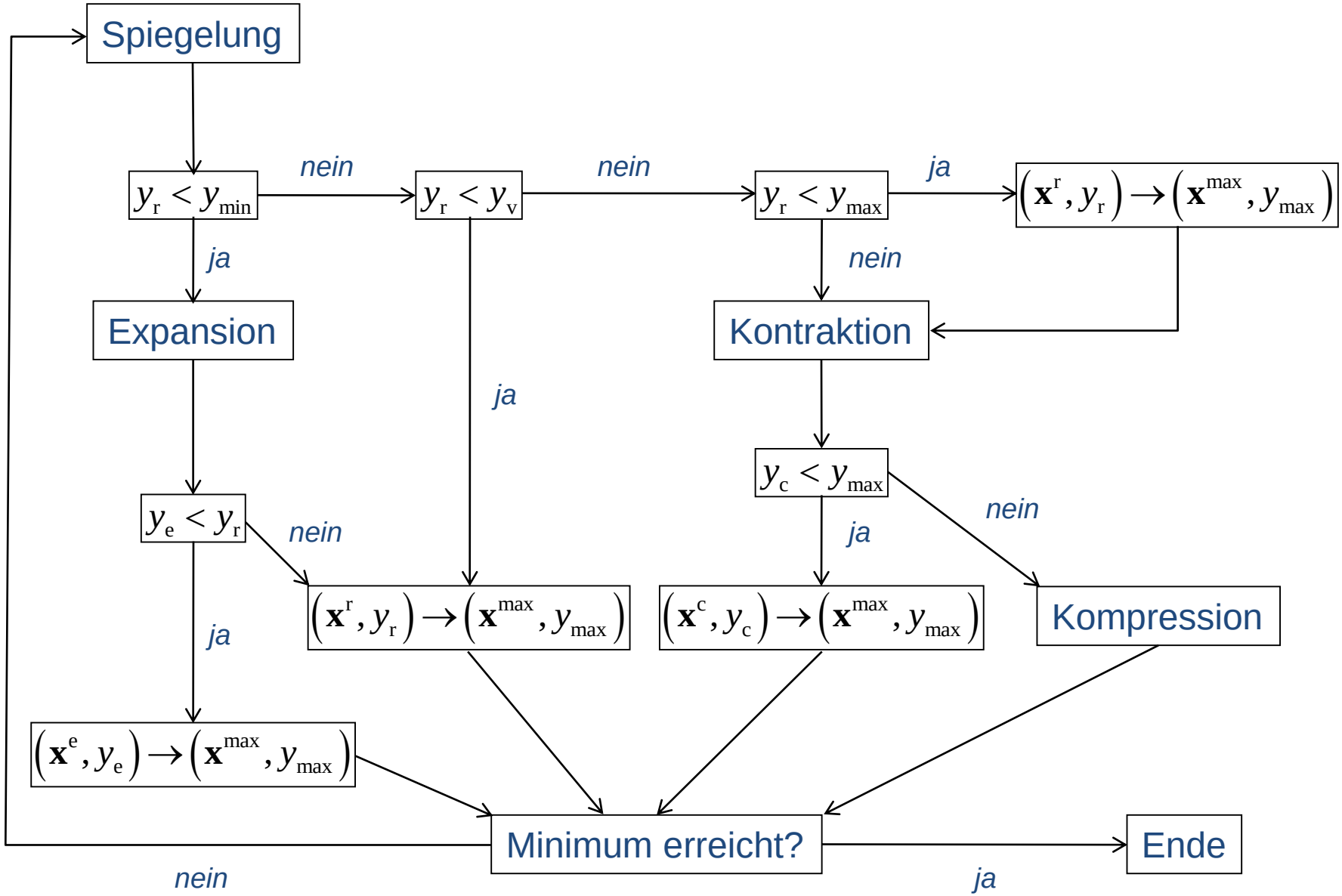
- **Kompression:** Alle Punkte des Simplex auf den besten Punkt zuschieben

  → Berechne Kompressionspunkt

$$\mathbf{x}^i = \frac{\mathbf{x}^i + \mathbf{x}^{\min}}{2}$$



Flussdiagramm



Abbruchkriterium

- Varianz oder Standardabweichung der Funktionswerte des Simplex

$$\frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n+1}\left(y_i-\bar{y}\right)^2<\delta^2$$

- zusätzlich: Simplex-Volumen bzw. Simplex-Größe

- Nicht vergessen: Maximale Anzahl der Schleifendurchläufe beschränken!

Sinnvolle Speicherung der Punkte:

$$X = \begin{bmatrix} x_1^1 & x_2^1 & \dots & x_n^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ x_1^{n+1} & x_2^{n+1} & \dots & x_n^{n+1} \end{bmatrix} \quad Y = \begin{bmatrix} y^1 \\ y^2 \\ \vdots \\ y^{n+1} \end{bmatrix}$$

Nutzung von `idx = np.argsort(Y)` ergibt dann:

$$Y = \begin{bmatrix} y_{max}^1 \\ y_{min}^2 \\ \vdots \\ y^{n+1} \end{bmatrix} \rightarrow \quad np.argsort(Y) = \begin{bmatrix} 1 \\ n \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = idx$$

$$Y[idx] = \begin{bmatrix} y_{min}^1 \\ y^{n+1} \\ \vdots \\ y_{max}^2 \end{bmatrix}$$