Алгоритм Недлера-Мида

2019

1. Возьмем $n+1$ точек $\mathbf{x}_i = (x_{i0}, x_{i1}, \ldots, x_{in})^T, i = \overline{1 \ldots n+1}$, где n — размерность отображаемого пространства оптимизируемой функцией f. Эти точки будут образовывать симплекс.

   Замечание. *Если, например, оптимизируемая функция от двух переменных, т.е. $f = f(x, y)$, то $n = 2$, так как функция выполняет отображение $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$. Для симплекса понадобится $n+1 = 3$ точки.*

2. Найдем значения оптимизируемой функции во всех точках симплекса: $f_i = f(\mathbf{x}_i)$;

3. Найдем наибольшее значение функции f_h, следующее за наибольшим значением функции f_g наименьшее значение функции f_l и соответствующие им точки $\mathbf{x}_h, \mathbf{x}_g, \mathbf{x}_l$.

4. Найдем центр тяжести всех точек, за исключением $\mathbf{x}_h$. Центр тяжести вычисляется по формуле:

$$\mathbf{x}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i \neq h} \mathbf{x}_i,$$

   Замечание. *Если $\mathbf{x}_i = (x, y)^T$, то умножение на число осуществляется по правилу <u>домножения вектора на число</u>:*

$$\frac{1}{n}\mathbf{x}_i = \begin{pmatrix} \frac{1}{n}x \\ \frac{1}{n}y \end{pmatrix}$$

   Вычислим $f_0 = f(\mathbf{x}_0)$.

5. Переместим точку с наибольшим значением функции ($\mathbf{x}_h$). Начать операции изменения симплекса удобнее всего именно с точки, имеющей наибольшее значение функции. Отразив $\mathbf{x}_h$ относительно $\mathbf{x}_0$ получим точку $\mathbf{x}_r$ со значением функции $f_r = f(\mathbf{x}_r)$. Отражение проводится следующим образом:

$$\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_0 = \alpha (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_h),$$

   где α — коэффициент отражения. Координаты точки $\mathbf{x}_r$:

$$\mathbf{x}_r = (1 + \alpha)\mathbf{x}_0 - \alpha \mathbf{x}_h.$$

6. Сравним значения функции f_r и f_l:

   (a) $f_r < f_l$. Точка переместилась в сторону минимума, но, возможно, слишком сильно. Попытаемся скорректировать выполненное перемещение и производим растяжение $\mathbf{x}_r$ в направлении $\mathbf{x}_0\mathbf{x}_r$

относительно точки $\mathbf{x}_0$ и получаем точку $\mathbf{x}_e$. Растяжение проводится следующим образом:

$$\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_0 = \gamma \left(\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_0 \right),$$

где γ — коэффициент растяжения. Координаты точки $\mathbf{x}_r$:

$$\mathbf{x}_e = \gamma \mathbf{x}_r + (1 - \gamma) \mathbf{x}_0.$$

Теперь сравним значения функций в «растянутой» точке (f_e) и в точке с наименьшим значением функции на текущем шаге (f_l).

- $f_e < f_l$. Положение точки требует корректировки, поэтому заменяем точку $\mathbf{x}_h$ на точку $\mathbf{x}_e$ и переходим к проверке сходимости (п. 9).
- $f_e \geq f_l$. Положение точки корретировки не требует. Отбрасываем точку $\mathbf{x}_e$, заменяем точку $\mathbf{x}_h$ на точку $\mathbf{x}_r$ и переходим к проверке сходимости (п. 9).

(b) $f_r \geq f_l$. Требуется сравнение значений функции f_r и f_g.

- $f_r > f_g$. Заменяем точку $\mathbf{x}_h$ на точку $\mathbf{x}_r$ и переходим к проверке сходимости (п. 9).
- $f_r \leq f_g$. Требуется сравнение значений функции f_r и f_g (см. п. 7).

7. Сравним значения функции f_r и f_h:

   (a) $f_r < f_h$. Заменяем точку $\mathbf{x}_h$ на точку $\mathbf{x}_r$ и значения функции f_h на f_r. Переходим на следующий этап (п. 7b)

   (b) $f_r \geq f_h$. Выполняем сжатие точки $\mathbf{x}_h$ в направлении $\mathbf{x}_h\mathbf{x}_0$ относительно точки $\mathbf{x}_0$ и получаем точку $\mathbf{x}_c$. Сжатие проводится следующим образом:

   $$\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_0 = \beta \left(\mathbf{x}_h - \mathbf{x}_0 \right),$$

   где β — коэффициент сжатия. Координаты точки $\mathbf{x}_r$:

   $$\mathbf{x}_c = \beta \mathbf{x}_h + (1 - \beta) \mathbf{x}_0.$$

8. Сравним значения функции f_c и f_h:

   (a) $f_c < f_h$. Заменяем точку $\mathbf{x}_h$ на точку $\mathbf{x}_c$ и переходим к проверке сходимости (п. 9).

   (b) $f_c \geq f_h$. Стягиваем симплекс к точке $\mathbf{x}_l$, делением растояния от каждой точки $\mathbf{x}_i$ до $\mathbf{x}_l$ пополам:

   $$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i + \frac{1}{2} \left(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_l \right), i \neq l$$

9. Проверяем симплекс на сходимость к минимуму. Проверка основана на том, чтобы *стандартное отклонение* значений функции было меньше некоторого заданного малого значения ε. В этом случае вычисляется:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} \left(f_i - \overline{f} \right)^2 ,$$

где $\overline{f}$:

$$\overline{f} = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} f_i .$$

Если $\sigma < \varepsilon$, то все значения функции очень близки друг к другу, и поэтому они, возможно, лежат вблизи точки минимума функции. В этом случае поиск останавливается. В противном случае переходим на п. 2.