Cuaderno ACTIVA, ISSN 2027-8101. No. 4, Julio-diciembre 2012, pp. 73-62
Tecnológico de Antioquia, Medellín (Colombia)

Variante del método de Nelder & Mead para optimización de funciones multivariadas

A variant of the Nelder & Mead method to optimize multivariate functions

Sebastián Gómez
Magíster en Sistemas
Universidad Nacional de Colombia
sgomezj@unal.edu.co

Diego Patiño
Magíster en Sistemas
Universidad Nacional de Colombia
dipatinoco@unal.edu.co

Cristian Vélez
Ingeniero de Sistemas
Universidad Nacional de Colombia
cvelezm@unal.edu.co

Recibido: 15 de septiembre 2012
Aprobado: 28 de octubre 2012

Resumen

Los métodos directos que utilizan diferentes técnicas no derivativas se encuentran en las investigaciones y desarrollos del área de búsqueda heurística; una de ellas es la propuesta por Nelder y Mead, conocida como el método de polígono flexible. Esta técnica se basa en el uso de polígonos con diferentes formas geométricas (reflexión, expansión, reducción y contradicción), que utiliza la inclinación del plano hallado para direccionar la búsqueda y así obtener una aproximación al óptimo local. En el presente artículo se muestra una variación del método mencionado que modifica el cálculo de la expansión, y le permite al método usar un espacio de búsqueda mayor en la dirección encontrada. Dicha modificación se aplica también en el proceso de contracción, ampliando el campo de acción dentro del polígono al momento de identificar un mínimo dentro de él.

Palabras clave: Metaheurística, optimización, polígono, método Nelder-Mead.

Abstract

Direct methods using different non-derivate techniques can be found within the research and developments in the field of heuristics. One of them was proposed by Nelder and Mead, and is known as the flexible polygon method. It is based on the use of polygons with different geometrical shapes (reflection, expansion, reduction and contraction) using the plane slope found to route searches thus obtaining an approach to the local optimum. In this paper, a variation to the method is shown, which modifies the calculation of expansion, and allows the method to use a wider search space in the resulting direction. Such a modification is also applied in the contraction process, thus widening the field of action within the polygon at the time of identifying a minimum in it.

Keywords: Metaheuristics, optimization, polygon, Nelder-Mead method.

1. Introducción

Los algoritmos para resolver problemas de optimización, especialmente en la búsqueda de mínimos en funciones matemáticas, se utilizan en diferentes campos como la industria, la economía e incluso en el campo académico. El desarrollo de estas técnicas comenzó en la segunda mitad del siglo XX, cuando varios autores se dedicaron a la investigación de nuevas metodologías para obtener resultados más óptimos y eficientes (Pierre, 1986; Torczon, Lewis & Kolda, 1986).

Sin embargo, su desarrollo fue posible gracias al avance tecnológico de herramientas computacionales, las cuales facilitaron la aplicación de las diferentes técnicas desarrolladas y ayudaron a su popularización, y asimismo hicieron posible la inclusión de nuevos investigadores dentro de esta área. Gracias al surgimiento y desarrollo de áreas de la computación como la inteligencia artificial y la investigación de operaciones fue posible el mejoramiento de técnicas de búsqueda heurística especializadas en la solución de problemas de optimización.

Los métodos de búsqueda heurística se pueden dividir en dos grandes grupos: los métodos derivativos y los métodos directos. Los derivativos reciben ese nombre puesto que usan la información de las derivadas (en varios órdenes) de las funciones que tratan de optimizar, esto implica que este tipo de métodos se deben usar cuando es fácil encontrar dichas derivadas. Las técnicas de los métodos derivativos utilizan el gradiente de las funciones que optimizan para direccionarse a través del espacio de solución y encontrar los puntos de mínima. Los métodos directos son también conocidos como no derivativos, porque se utilizan cuando la información de sus derivadas no es confiable o no es fácil de hallar. Estos métodos se valen de múltiples estrategias para encontrar una dirección sobre la cual realizar la búsqueda del punto de mínima. En la Figura 1 se muestra un esquema general de los métodos directos, con su clasificación en determinísticos o estocásticos (utiliza factores aleatorios) y sus subdivisiones.

En el presente artículo se discutirán las ventajas de una modificación a un método directo determinístico clásico, específicamente el desarrollado por Nelder y Mead (NM), conocido como el método del polígono flexible, el cual fue formulado hace 40 años y ha sido ampliamente utilizado en estadística, ingeniería y física entre otros (Byatt *et al.,* 2003). La variación introducida acelera la convergencia de NM mediante una mejor exploración de las direcciones de búsqueda generadas por el algoritmo en cada iteración, y hace que el algoritmo encuentre resultados satisfactorios en menos tiempo y con menos iteraciones.

En las siguientes secciones del artículo se aborda el marco teórico, donde se describe detalladamente la metodología de NM. Posteriormente se realiza la descripción del método propuesto en este trabajo resaltando las diferencias con el original, y se presenta su implementación en pseudo-código.

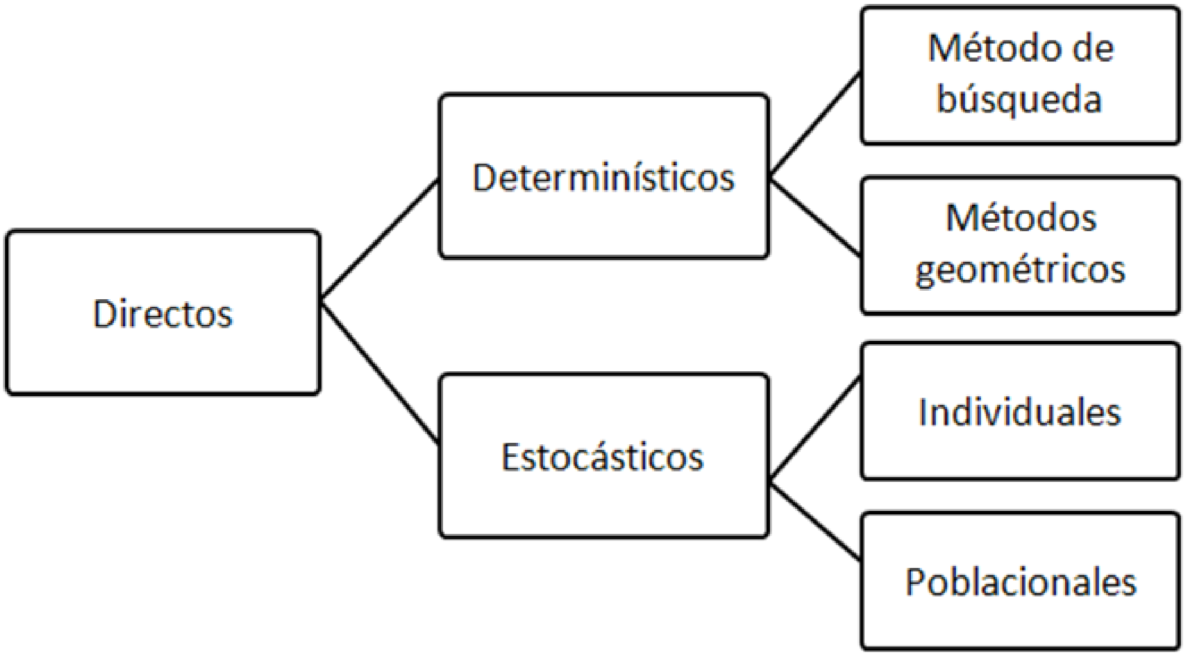


Figura 1. Métodos directos

Para probar las bondades del método propuesto se realizaron algunas pruebas que se muestran en la sección resultados con un conjunto de gráficas que ilustran el comportamiento de ambos métodos a través de su proceso iterativo.

2. Marco teórico y trabajos previos

Las metaheurísticas son una clase de método de aproximación de resultados que se desarrollaron a principios de los años ochenta. Se crearon para atacar problemas de optimización complejos donde las heurísticas clásicas u otros métodos de optimización no eran ni efectivos ni eficientes. Una metaheurística está formalmente definida como un proceso de generación iterativa que guía una o varias heurísticas subyacentes, combinando inteligentemente la exploración y explotación del espacio de búsqueda de soluciones, y aprendiendo estrategias que son usadas para encontrar eficientemente soluciones de óptimos locales (Osman y Laporte, 1996).

Este trabajo se centra en detallar y examinar la metaheurística creada por J. Nelder y R. Mead (1965), y que se basa en la generación sucesiva de hiperplanos en una región factible utilizando su inclinación para hallar la dirección de avance del algoritmo. Para un problema de dimensión *n* el método utiliza *n+1* vértices para generar el hiperplano. El punto con el mejor desempeño en la función objetivo y el punto con el peor desempeño direccionan la búsqueda. Los puntos iniciales se organizan de acuerdo con su valor en la función objetivo. El mejor punto encontrado se denomina en este caso B, el peor como W y un punto intermedio M, que es el centro de los *n+1* puntos y se calcula como:

$$M = \frac{1}{n} \sum_{x_i \neq W}^{n+1} x_i$$

La elección de un nuevo punto para continuar el algoritmo se realiza a través de cuatro procedimientos geométricos: Reflexión, Expansión, Contracción y Reducción, que se describen a continuación y se ilustran en la figura 2.

Reflexión

Este procedimiento consiste en hallar un nuevo punto reflejando W con respecto a M, como se muestra en la Figura 2(a). El punto hallado se convertirá en el nuevo punto del sistema de *n+1* vértices, siempre que la función objetivo evaluada en él sea mayor que la función evaluada en B y no haya en la búsqueda un punto más allá que tenga un mejor desempeño.

Expansión

Consiste en utilizar como nuevo punto aquel que se encuentra al doble de la distancia utilizada en la reflexión (en la misma dirección). Si este nuevo punto no es mejor que el encontrado en la reflexión, se descarta.

Contracción

Si al comienzo de la iteración el punto hallado en la reflexión no fue mejor que B entonces la contracción se encarga de hallar un punto con mejor desempeño entre R y el punto hallado en la reflexión.

Reducción

Si ninguno de los procedimientos anteriores arroja buenos resultados se utiliza la reducción para hallar un nuevo punto mediante la ecuación:

$$S=B+\boldsymbol{\delta}(x\_i-B)$$

Los valores propuestos por Nelder y Mead para los cuatro parámetros del algoritmo en los cuatro procedimientos anteriores son: .

El método NM ha servido como inspiración para una gran cantidad de variaciones de sí mismo en las cuales se introducen algunas modificaciones en los diferentes pasos que conforman su algoritmo. Algunas de las modificaciones incluyen también combinaciones con otras técnicas heurísticas como algoritmos genéticos y búsqueda tabú (Chelouah y Siarry, 2003; Chelouah, 2005; Fan *et al.,* 2006). El Nelder-Mead, así como sus diferentes variaciones, se aplicaron en una gran cantidad de problemas de optimización de índole teórico y con aplicabilidad industrial, en los cuales la función que modela el problema es inusual: una curva suave y continua. Algunos ejemplos de ello son los problemas de distribución de recursos (economic load dispatch) (Pandi, 2008) y problemas de optimización para proyectos y diseños ingenieriles (Baulac *et al.,* 2007; Ouria y Toufigh, 2009; Camp y Garbe, 2004).

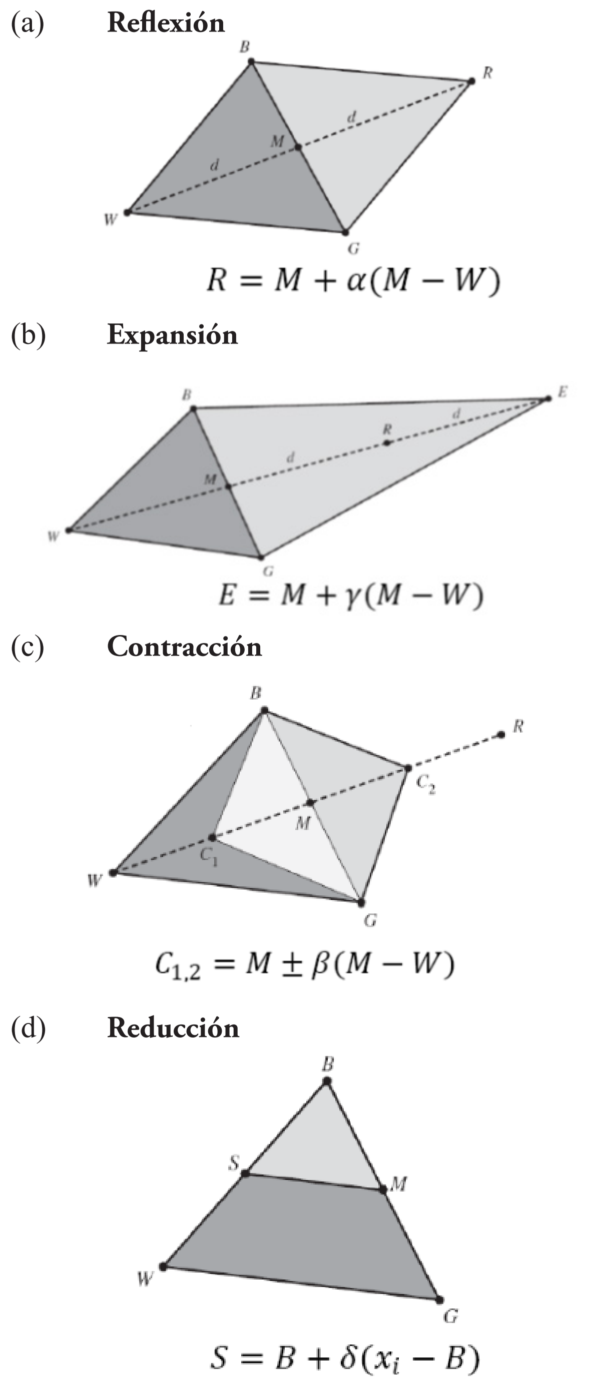


Figura 2. Estrategias geométricas

3. Descripción del modelo propuesto

Este artículo presenta un método, que es una variación al desarrollado por Nelder y Mead, que modifica el uso de dos de las formas geométricas utilizadas originalmente. El método inicialmente plantea un valor fijo para el tamaño de paso al momento de aplicar alguna de sus formas. La variación permite tener valores dinámicos en el tamaño de paso sobre una dirección de avance encontrada, y de esta forma se obtienen mejores resultados con menos iteraciones.

3.1. Características del método

Una de las modificaciones se realiza en el proceso de expansión. Consiste en asumir que un próximo mínimo se encuentra fuera de la figura geométrica original, pero no se sabe qué tanto se debe expandir dicha figura y solo se conocen los valores de la dirección que se debe tomar. Como se mencionó anteriormente, el valor que se utiliza para realizar la expansión () es de 2, según lo propuesto por Parkinson y Hutchison (1972). Con la nueva propuesta se parte del punto inicial encontrado mediante la reflexión, para posteriormente avanzar con un tamaño de paso de 0,2, siempre siguiendo la dirección originalmente hallada. Cada que se avanza un paso se evalúa la función objetivo en dicho punto y se compara con la encontrada en el punto anterior, buscando siempre encontrar una mejor aproximación al mínimo. El algoritmo termina de realizar la expansión cuando la evaluación de la función en el nuevo punto es mayor a la del punto anterior. De esta forma siempre se tomará el mejor punto en la dirección requerida. El algoritmo continúa con la siguiente iteración reiniciando la aplicación de las cuatro estrategias geométricas.

Otra de las variaciones del Nelder-Mead se realiza sobre la contracción. Este procedimiento, a diferencia de la expansión, indica que el nuevo punto se encuentra dentro del polígono, de manera que se deben examinar puntos por debajo de la distancia de reflexión entre W, M y R. Al igual que en la expansión, se conoce una dirección en donde se buscará el nuevo punto. A diferencia del método original, no se evalúa un punto dentro del polígono sino que se analizan varias posibilidades a lo largo de toda la figura recorriendo la dirección encontrada. Originalmente también se utiliza un valor de de normalmente 0,5, tal como lo proponen Parkinson y Hutchison (1972). Este valor puede ser positivo o negativo. En esta propuesta se plantea utilizar = 0,2, pero a lo largo de todo el espacio de búsqueda (que recorra la figura desde el punto W hasta R), evaluando la función en cada uno de los puntos. El algoritmo escogerá como el nuevo valor encontrado aquel punto que obtenga un mejor desempeño en la función objetivo. Posteriormente el proceso iterativo continúa hasta converger.

3.2 Pseudocódigo

En la figura 3, el algoritmo detalla el pseudocódigo de la implementación del método modificado para tener una mejor perspectiva de cada uno de los pasos realizados por el mismo.

Require: $fun \rightarrow$ Función objetivo que se desea minimizar
Require: $n \rightarrow$ Dimensión del problema
Require: $x \rightarrow$ Conjunto de $n+1$ puntos iniciales
Require: $epsilon \rightarrow$ Tolerancia de la función objetivo
Require: $max\_iter \rightarrow$ Máximo número de iteraciones
  Calcular M
  contador = 1
  while RMSE(fun,x,M) > epsilon **and** contador < max_iter **do**
    Calcular B
    Calcular W
    Calcular M
    $R = M + \alpha * (M - W)$
    $Max = Max_{sinW}(fun, x)$
    if fun(R) < fun(B) **then**
      $E = M + \gamma * (M - W)$
      $\gamma' = \gamma + 0{,}2$
      $E' = M + \gamma' * (M - W)$
      $f = fun(E)$
      $f' = fun(E')$
      while f > f' **do**
        $E = E'$
        $\gamma' = \gamma' + 0{,}2$
        $E' = M + \gamma' * (M - W)$
        $f = f'$
        $f' = fun(E')$
      end while

```
    if fun(E) < fun(R) then
      W se reemplaza por E
    else
      W se reemplaza por R
    end if
  else
    if fun(R) > fun(Max) then
      C = M + −0,9 * (M − W)
      for β = −0,7 to 0.9 step 0.2 do
        C' = M + β * (M − W)
        if fun(C) > fun(C') then
          C = C'
        end if
      end for
      if fun(C) < fun(W)  then
        W se reemplaza por C
      else
        for i = 1 to n do
          x_i = B + δ * (x_i − B)
        end for
      end if
    else
      W se reemplaza por R
    end if
  end if
  contador++
end while
```

Figura 3. Algoritmo

4. Resultados

Para establecer la bondad del método propuesto se realizaron pruebas en cinco escenarios distintos y se compararon los resultados con los obtenidos al utilizar el método de Nelder-Mead sin modificaciones. En cada escenario la función utilizada para llevar a cabo el proceso de optimización fue la función de Rosenbrock (2010) para dos variables, definida como:

$$f(x) = 100(x^2 - y)^2 + (1 - x)^2$$

Cuyo valor mínimo absoluto se alcanza en el punto (1,1) con un valor de $f(1,1) = 0$.

El número máximo de iteraciones para cada escenario fue de $k_{max} = 200$, y la tolerancia de la función objetivo se estableció en Los parámetros α y δ conservan los valores del método original: 1 y 0,5 respectivamente. Es válido recordar que para los métodos propuestos los valores de y de son variables. Los puntos iniciales de los cinco escenarios escogidos se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Escenarios de testing

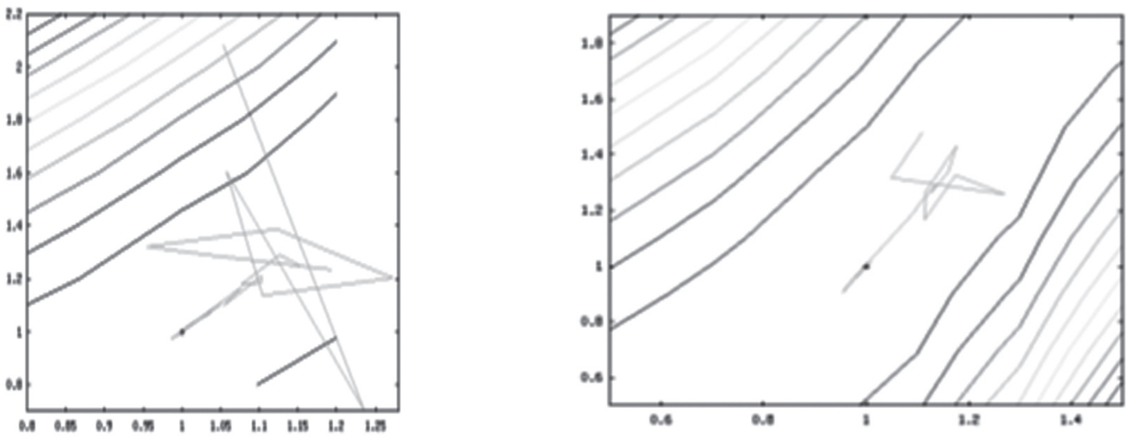
Escenario	Puntos iniciales
E1	X_1: (1.2000, -1.0000) X_2: (2.0000, -1.7800) X_3: (1.5000, 1.2000)
E2	X_1: (1.4987, -0.3967) X_2: (0.8897, 1.5362) X_3: (0.9120, 3.5969)
E3	X_1: (-1.7696, 0.6151) X_2: (-0.4209, 1.7800) X_3: (0.0401, 0.5082)
E4	X_1: (-1.5460, -0.3725) X_2: (1.2000, 3.1000) X_3: (0.2742, 1.1725)
E5	X_1: (-1.3433, 2.0592) X_2: (0.5061, 3.2057) X_3: (1.4715, -0.1257)

Tabla 2. Resultados

	Nelder & Mead		Método propuesto	
Escenario	Iter	f(x)	Iter	f(x)
E1	29	3.3364 e-005	11	8.6809e-006
E2	27	3.1000 e-006	20	5.6213e-006
E3	33	1.1316 e-005	15	5.0424e-005
E4	66	1.4492 e-005	35	4.625e-006
E5	47	1.3350 e-005	46	8.2644e-007

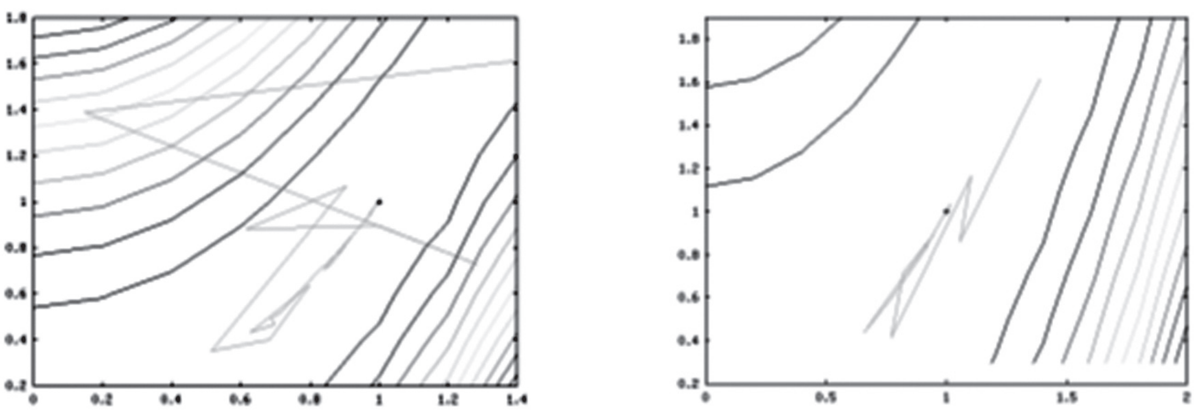
La implementación de los algoritmos (tanto del método original de Nelder-Mead como del propuesto) fue codificada sobre el software para computación numérica Octave (GNU, 2010). El resultado de las pruebas demostró que el método de Nelder-Mead con la modificación introducida arroja mejores resultados de convergencia y reduce significativamente el número de iteraciones realizadas antes de alcanzar un resultado. Además, la calidad de solución encontrada es en promedio dos órdenes de magnitud mejor que las alcanzadas por el método original. La tabla 2 muestra el valor de la función objetivo y la iteración alcanzada en el punto de convergencia para cada uno de los escenarios, tanto para el método original como para el método modificado.

Las pruebas también revelaron un movimiento más suave y menos disperso sobre la región factible, se orientaron con mayor efectividad en la dirección en la que se encuentra el punto de mínima de la función. Dicho movimiento puede observarse en las figuras 4, 5 y 6.



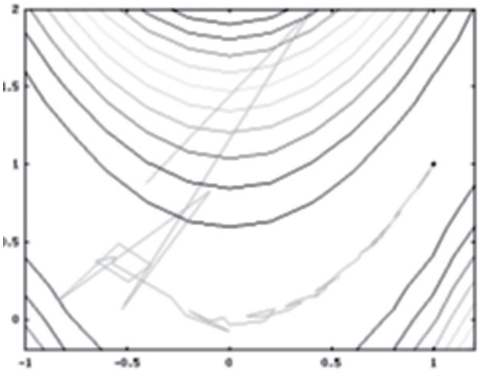
(a) Nelder-Mead (b) Modelo propuesto

Figura 4. Avance del algoritmo para el escenario 2

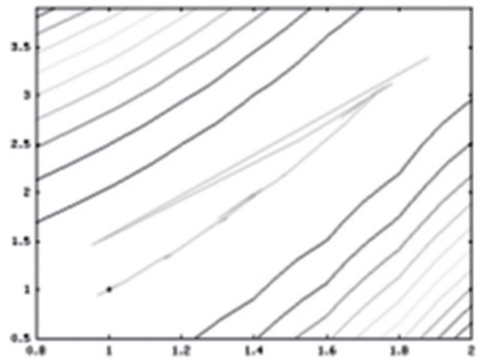


(a) Nelder-Mead (b) Modelo propuesto

Figura 5. Avance del algoritmo para el escenario 3



(a) Nelder-Mead



(b) Modelo propuesto

Figura 6. Avance del algoritmo para el escenario 4

5. Conclusiones y trabajos futuros

El problema principal al que se enfrentan los métodos metaheurísticos de optimización es el de encontrar una dirección de avance que pueda acercar el algoritmo hacia su punto de mínima. Esta tarea es ardua, de manera que una vez encontrada esta dirección es importante realizar una exploración más rigurosa sobre dicha dirección, teniendo en cuenta que existe cierta probabilidad de lograr convergencias mucho más rápidas, como lo revelan los resultados obtenidos por el método propuesto.

Los métodos directos son una buena opción para encontrar mínimos en funciones complejas. El planteamiento original de Nelder y Mead permite alcanzar mínimos considerablemente buenos utilizando pocas iteraciones. Sin embargo, con los resultados encontrados se demuestra que la exploración de variaciones y soluciones nuevas a dicho planteamiento mejora ampliamente los resultados obtenidos. Con estos cambios se observa un número menor de iteraciones, asimismo menos variaciones en la región de la búsqueda, y especialmente se observa que el modelo converge de forma más rápida y común en un mejor desempeño en la optimización.

El presente trabajo enfatiza en la función benchmark Rosenbrock. Para futuros trabajos se plantea aplicar el método propuesto sobre funciones de diferentes características (no continuas, no diferenciables, y con mínimos locales más intrincados).

Referencias

Baulac, M. Defrance, J. & Jean, P. (2007). Optimization of multiple edge barriers with genetic algorithms coupled with a Nelder–Mead local search. *Journal of Sound and Vibration,* Vol. 300 No. 1-2, pp. 71-87.

Byatt, D. Coope, I. and Price, C. (2003). 40 years of the Nelder-Mead algorithm. University of Canterbury, New Zealand.

Camp, M. & Garbe, H. (2004). Parameter Estimation of Double Exponential Pulses (EMP, UWB) with Least Squares and Nelder-Mead Algorithm. *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility,* Vol. 46. No. 4, pp. 675-678.

Chelouah, R. (2005). A hybrid method combining continuous tabu search and Nelder-Mead simplex algorithms for the global optimization of multiminima functions. *European Journal of Operational Research,* Vol. 161, No. 3, pp. 636-654.

Chelouah, R. & Siarry, P. (2003). Genetic and Nelder-Mead algorithms hybridized for a more accurate global optimization of continuous multi-minima functions. *European Journal of Operational Research,* Vol. 148, pp. 335-348.

Fan, S., Liang, Y. & Zahara, E. (2006). A genetic algorithm and a particles warm optimizer hybridized with Nelder-Mead simplex search. *Computers & Industrial Engineering,* Vol. 50, No. 4, pp. 401-425.

GNU Octave (2010). [en línea] http://www.gnu.org/software/octave/ .

Nelder, J. & Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization. *Computer Journal,* Vol. 7, No. 4, pp. 308-313.

Osman, I. & Laporte, G. (1996). Metaheuristics: A bibliography. *Annals of Operations Research,* Vol. 63, pp. 511-623.

Ouria, A. & Toufigh, M. (2009). Application of Nelder-Mead simplex method for unconfined seepage problems. *Applied Mathematical Modelling,* Vol. 33, N.º 9, *Vol.* 3589-3598.

Panigrahi B.K. & Pandi, V.R. (2008). Bacterial foraging optimization: Nelder-Mead hybrid algorithm for economic load dispatch. Engineering and Technology. *IET Gener. Transm. Distrib.,* Vol. 2, No. 4, pp. 556-565.

Parkinson, J.M. & Hutchinson, D. (1972). Numerical methods for non linear optimization. In Lootsma F. A. (ed.). Numerical methods for non-linear optimization (115-135). New York: Academic Press.

Pierre, D. (1986). Optimization theory with applications. New York: Dover Publications.

Rosenbrock (2010). Rosenbrock function. Disponible en http://mathworld.wolfram.com/rosenbrockfunction.html

Torczon, V., Lewis, R. & Kolda, T. (1986). Optimization by direct search: New perspective on some classic and modern methods. *Siam Review,* Vol. 45, No. 3, pp. 385-482.