Nelder - Meadova metoda: Lokalana metoda direktne bezuvjetne optimizacije

Grgić, Lucijana

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Lucijana Grgić

Nelder-Meadova metoda: lokalna metoda direktne bezuvjetne optimizacije

Završni rad

Osijek, 2015.

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Lucijana Grgić

Nelder-Meadova metoda: lokalna metoda direktne bezuvjetne optimizacije

Završni rad

Mentor: izv. prof. dr. sc. Kristian Sabo

Osijek, 2015.

Sadržaj

Sažetak

Potreba za optimizacijom funkcija čije nam derivacije nisu poznate, 1965.godine dovela je do nastanka Nelder-Meadove metode. U ovome radu je opisana upravo ta metoda, koja se smatra jednom od popularnijih i raširenijih lokalnih metoda direktne bezuvjetne optimizacije. Nelder-Meadova metoda je zanimljiva zbog svoje jednostavnosti što je pokazano algoritmom u $\mathbb{R}^2$, kao i generalizacijom u $\mathbb{R}^n$. Izneseno je nekoliko informacija o konvergenciji ove metode nakon njezinog nastanka, no većinom negativni rezultati pošto dokaz o konvergenciji ove metode ne postoji. Na kraju je prikazan numerički primjer koji potkrijepljuje cijelu priču, kako o jednostavnosti, tako i o nedostacima.

Ključne riječi: *Nelder-Meadova metoda, Bezuvjetna optimizacija, Lokalna metoda, Simpleks metoda*

Abstract

The need to optimize functions whose derivatives are unknown lead to the occurrence of Nelder-Mead's method in 1965. In this work precisely that method is described which is considered one of the most popular and wideused local methods for direct unconstrained optimization. Nelder-Mead's method is interesting because of its simplicity shown by algorithm in $\mathbb{R}^2$, as the generalization in $\mathbb{R}^n$. There are several informations about convergence of this method since its apperance, but mostly negative results due to lack of evidence. Finally, a numerical example in this work comfirms the whole story, in terms of both simplicity and the disadvantages.

Keywords: *Nelder-Mead's method, Unconstrained optimization, Local method, Simplex search algorithm*

1 Uvod i motivacija

Mnogi problemi koji potječu iz različitih područja primjena, bilo kemije, inženjerstva ili pak medicine, svode se na traženje globalnog minimuma ili maksimuma funkcije $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ na skupu $\mathbb{R}^n$, odnosno točke iz $\mathbb{R}^n$ u kojoj se taj minimum, odnosno maksimum postižu. Za $x^* \in \mathbb{R}^n$ kažemo da je točka globalnog minimuma funkcije f na $\mathbb{R}^n$ ako vrijedi $f(x^*) \leq f(x)$, za svaki $x \in \mathbb{R}^n$. U tom slučaju pišemo

$$x^* = \underset{x\in\mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} f(x).$$

Vrijednost funkcije f u točki x^* zovemo globalni minimum funkcije te pišemo

$$f(x^*) = \min_{x\in\mathbb{R}^n} f(x).$$

Nažalost, određivanje točke globalnog minimuma funkcije f,općenito je vrlo ozbiljan i zahtjevan posao i obično zahtjeva poznavanje svih točaka lokalnih minimuma funkcije f na $\mathbb{R}^n$.

Za $x^* \in \mathbb{R}^n$ kažemo da je točka lokalnog minimuma funkcije f na $\mathbb{R}^n$, ako postoji otvorena kugla $K(x^*, \delta)$ sa središtem u točki x^* polumjera $\delta > 0$ takva da vrijedi $f(x^*) \leq f(x)$, za svaki $x \in K(x^*, \delta)$. Pri tome vrijednost $f(x^*)$ zovemo lokalnim minimumom funkcije f. Metode za traženje točke lokalnog minimuma nazivaju se lokalne optimizacijske metode. Ovisno o uvjetima koje zadovoljava funkcija f, za traženje točke lokalnog minimuma, mogu se koristiti različite lokalne optimizacijske metode. Jedna od lokalnih optimizacijskih metoda je upravo Nelder-Meadova metoda. Ova metoda traži lokalni minimum nelinearnih funkcija $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ koristeći samo funkcijske vrijednosti točaka domene funkcije f zbog čega ova metoda spada u skupinu direktnih metoda. Dakle, je li funkcija f diferencijabilna i da li se njezin gradijent ili Hessijan mogu izračunati, kod ove metode je nebitno jer ona ne zahtjeva nikakve uvjete na funkciju, pa Nelder-Meadovu metodu nazivamo direktnom metodom bezuvjetne optimizacije.

Nelder-Meadovu metodu nazivamo i simpleks metodom, odnosno metodom zasnovanom na simpleksu. Simpleks S u $\mathbb{R}^n$ je n-dimenzionalan politop koji je konveksna ljuska od $n+1$ vrhova. To je najosnovniji geometrijski oblik omeđen ravnim stranicama koji ima minimalni broj vrhova u danoj dimenziji. U 1-dimenziji to bi bila dužina, u 2-dimenziji trokut, u 3-dimenziji tetraedron itd.

Dakle, metoda počinje sa skupom $n+1$ točaka $x_1, \ldots, x_{n+1}$ iz $\mathbb{R}^n$ koje predstavljaju vrhove početnog simpleksa S s kojim ćemo raditi, te sa skupom pripadajućih funkcijskih vrijednosti u vrhovima, tj. $f_j = f(x_j)$ za $j = 1, \ldots, n+1$. Metoda se zasniva na uspoređivanju funkcijskih vrijednosti u svim točkama simpleksa. Točka s najvećom funkcijskom vrijednosti se odbacuje i uvodi se nova točka dobivena nizom transformacija na početnom simpleksu koja s ostalima čini novi simpleks. Nelder-Meadova metoda izvodi niz transformacija s ciljem smanjenja funkcijskih vrijednosti u vrhovima te proces staje kada se simpleks dovoljno smanji ili kada se funkcijske vrijednosti f_j dovoljno približe istom broju.

U sljedećem poglavlju predstavit ćemo nastanak Nelder-Meadove metode, dok ćemo u trećem objasniti kako metoda počinje, prikazati njezin algoritam te navesti kriterij zaustavljanja iterativnog procesa ove metode. Nadalje, generalizirat ćemo metodu u 2-dimenzionalnom prostoru kako bi transformacije simpleksa mogli potkrijepiti slikama. Nakon toga slijedi poglavlje Konvergencija koje govori o nedostatku dokaza i teorijske pozadine Nelder-Meadove metode, a na kraju jedan numerički primjer gdje ćemo se dotaknuti nekih nedostataka.

2 Nastanak i povijest Nelder-Meadove metode

Kako su se razvijala računala i povećavala memorija za pohranu podataka, tako su se 1950-tih i 1960-tih godina pojavile direktne metode za optimizaciju funkcija. Prvu takvu simpleks-metodu su predložili Spendley, Hext i Himsworth 1962.godine [11]. Kako bi se tvorio novi simpleks, ova metoda je koristila samo dvije vrste transformacija: *refleksiju* od vrha s najvećom vrijednošću od f i *smanjivanje* prema vrhu s najmanjom vrijednošću od f. Na taj način je oblik simpleksa uvijek ostajao isti dok se njegova veličina mijenjala. Godine 1965. John Nelder i Roger Mead su poboljšali Spendlejevu metodu dodajući još dvije vrste transformacija: *ekspanziju* i *kontrakciju*, koje su simpleksu, uz promjenu veličine, dopuštale i promjenu oblika. Svoju metodu su predstavili u radu nazvanom ***A simplex method for function minimization*** (vidi [8]) te iste godine i opisali ju kao metodu u kojoj se simpleks prilagođava lokalnom prostoru, odnosno okolini, te se sužava i smanjuje oko minimuma.
Nelder-Meadova metoda brzo je stekla popularnost zbog dva razloga: svoje jednostavnosti i zahtijevanja vrlo malo podataka o funkciji koju želimo minimizirati. Moguće ju je primijeniti na funkciju za koju je dovoljno poznavati isključivo vrijednosti u svim točkama domene. U mnogim slučajevima se ova metoda pokazala vrlo efikasnom, posebno u optimizacijskim problemima manjih dimenzija. Tako se 1980-tih godina našla u poznatoj knjizi ***Numerical Recipes*** (vidi [10]) pod nazivom *"ameba algoritam"* i u programskom sustavu *Matlab* gdje se krije pod naredbom `fminsearch` za traženje točke lokalnog minimuma.
Nažalost, kod optimizacijskih problema u velikim dimenzijama metoda se ne pokazuje korisnom i zanimljivo je da općenito ne postoji dokaz konvergencije ove metode (više o tome u poglavlju **Konvergencija**). Zbog toga postoje mnoge modifikacije Nelder-Meadove metode koje imaju bolja svojstva konvergencije predložene poslije kasnih 1970-tih. Neke od njih se nalaze u [3], [5], [9]. Unatoč problemima s konvergencijom i davnoj godini nastavka, ova metoda je još uvijek među najpopularnijim i najkorištenijim metodama direktne bezuvjetne optimizacije.

3 Nelder-Meadova metoda

U ovome odjeljku ćemo opisati i objasniti korake Nelder-Meadove metode koja se sastoji od ponavljanja niza transformacija. Svaka iteracija Nelder-Meadove metode počinje od simpleksa. Pošto ćemo pretpostaviti da smo u n-dimenzionalnom prostoru, uzimamo simpleks definiran s $n+1$ vrhova, $x_1, \dots, x_{n+1}$ iz $\mathbb{R}^n$. Bez smanjenja općenitosti vrhove označimo tako da vrijedi ovaj niz nejednakosti:

$$f_1 \leq f_2 \leq \cdots \leq f_{n+1}$$

pri čemu je $f_i = f(x_i)$ za $i = 1, \dots, n+1$.
Pošto je naš cilj naći minimum funkcije f, vrh x_1, čija je funkcijska vrijednost najmanja, ćemo nazvati **najboljim vrhom**, dok ćemo x_{n+1}, točku u kojoj je funkcijska vrijednost najveća, prozvati **najlošijim**. Nakon toga ćemo izračunati težište svih vrhova osim onog najlošijeg:

$$\tilde{x} := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i.$$

Zatim slijede transformacije simpleksa kako bismo najlošiji vrh zamjenili s boljim vrhom. Imamo četiri moguće transformacije: *refleksiju, ekspanziju, kontrakciju* i *skraćivanje*. Svaka od njih opisana je s pripadajućim parametrom: α za refleksiju, β za kontrakciju, γ za ekspanziju i δ za skraćivanje. Po [8] ovi parametri trebaju zadovoljavati sljedeće uvjete:

$$\alpha > 0, \quad \beta > 1, \quad 0 < \gamma < 1, \quad 0 < \delta < 1,$$

te su njihove standardne vrijednosti

$$\alpha = 1, \quad \beta = 2, \quad \gamma = \frac{1}{2}, \quad \delta = \frac{1}{2}.$$

Svaka iteracija ima dva moguća ishoda:

1. novi vrh dobiven korištenjem refleksije, kontrakcije i ekspanzije koji zamjenjuje najlošiji vrh u sljedećoj iteraciji

2. n novih vrhova dobivenih skraćivanjem koji s x_1, tj. najboljim vrhom, tvore simpleks za sljedeću iteraciju.

3.1 Algoritam Nelder-Meadove metode u $\mathbb{R}^n$

1. Odredi $n+1$ točaka početnog simpleksa: $x_1, x_2, \ldots, x_{n+1}$
2. Izračunaj vrijednost funkcije f za sve točke simpleksa.
3. Sortiraj točke simpleksa prema vrijednosti funkcije f u točkama na sljedeći način: $f(x_1) \leq f(x_2) \leq \cdots \leq f(x_{n+1})$
4. **Refleksija**
   - Izračunaj težište svih točaka osim najlošije:
     $\tilde{x} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$
   - Izračunaj točku refleksije i vrijednost funkcije f u njoj:
     $x_r = \tilde{x} + \alpha(\tilde{x} - x_{n+1})$
   - Ako točka refleksije nije bolja od najbolje točke simpleksa, a bolja je od druge najgore točke simpleksa, tj.:
     $f(x_1) \leq f(x_r) \leq f(x_n)$
     onda:
     - nova točka simpleksa je točka refleksije x_r koja zamjenjuje najgoru točku x_{n+1}
     - idi na korak 1
5. **Ekspanzija**
   Ako je točka refleksije najbolja, odnosno $f(x_r) < f(x_1)$, onda:
   - Izračunaj točku ekspanzije i vrijednost funkcije f u njoj:
     $x_e = \tilde{x} + \gamma(\tilde{x} - x_{n+1})$
   - Ako je točka ekspanzije bolja od točke refleksije, $f(x_e) < f(x_r)$, onda:
     - nova točka simpleksa postaje točka ekspanzije x_e
     - idi na korak 1

     inače

     - nova točka simpleksa postaje točka refleksije x_r
     - idi na korak 1
6. **Kontrakcija**
   Vrijedi $f(x_r) \geq f(x_n)$. Izračunaj točku kontrakcije i vrijednost funkcije f u njoj:
   $x_c = x_{n+1} + \beta(\tilde{x} - x_{n+1})$
   Ako je točka kontrakcije bolja od najgore točke, tj. $f(x_c) < f(x_{n+1})$, onda:
   - nova točka simpleksa postaje točka kontrakcije x_c

- idi na korak 1

7. **Skraćivanje**
   Vrijedi $f(x_c) \geq f(x_{n+1})$. Za sve točke osim najbolje, x_1, izračunaj nove:
   $x_i = x_1 + \delta(x_i - x_1)$ za $i = 2, \ldots, n+1$.
   Idi na korak 1.

3.2 Kriterij zaustavljanja

Iteracije algoritma Nelder-Meadove metode se ponavljaju sve dok se ne zadovolji neki kriterij zaustavljanja. Većina direktnih metoda kao kriterij zaustavljanja uzimaju jedan od sljedeća dva navedena:

- funkcijske vrijednosti u svim vrhovima simpleksa su blizu jedna drugoj

- vrhovi simpleksa su dovoljno blizu, odnosno simpleks se dovoljno smanjio.

Na primjer, u [10] je predloženo da se Nelder-Meadov algoritam zaustavi ukoliko vrhovi simpleksa u trenutnoj iteraciji zadovoljavaju sljedeće:

$$\max_{2 \leq i \leq n+1} \| x_i - x_1 \| \leq \varepsilon \, max(1, \| x_1 \|),$$

dok je u originalnom radu Neldera i Meada [8] predložen kriterij zaustavljanja:

$$\sqrt{\frac{\sum (y_i - \overline{y})^2}{n}} < \varepsilon$$

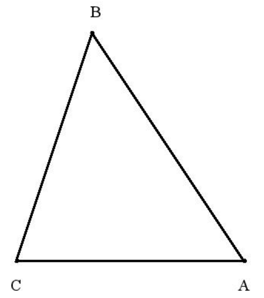
gdje je $y_i = f(x_i)$ za $i = 1, \ldots, n+1$, a $\overline{y}$ aritmetička sredina svih y_i . Broj ε je unaprijed zadana tolerancija, posebno, u [8] je $\varepsilon = 10^{-8}$. No nijedan od ova dva kriterija zaustavljanja ne moraju proći kod Nelder-Meadove metode za neke funkcije o čemu ćemo više u poglavlju **Konvergencija**.

4 Jedna iteracija Nelder-Meadove metode u $\mathbb{R}^n$

U ovome odjeljku ćemo prikazati specijalni slučaj optimizacije u $\mathbb{R}^2$, odnosno primjenu Nelder-Meadove metode u ravnini gdje se ona svodi na niz elementarnih geometrijskih transformacija trokuta. Na taj ćemo način svaku od moguće četiri operacije potkrijepiti i slikom te će metoda biti jasnija.
Pretpostavimo da je zadana funkcija $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$. Promatrajmo trokut $\triangle ABC \subset \mathbb{R}^2$ s vrhovima $A = (x_1, y_1), B = (x_2, y_2)$ i $C = (x_3, y_3)$. Bez smanjenja općenitosti možemo pretpostaviti da je

$$f(A) \leq f(B) \leq f(C),$$

zbog čega ćemo vrh A nazivati najboljim vrh, vrh B drugim najlošijim, a C najlošijim.



Slika 1: Trokut $\triangle ABC$

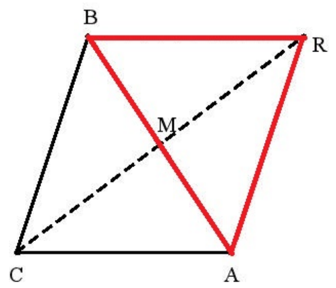
Sljedeći korak je računanje težišta svih vrhova osim najlošijeg. To je u ovom slučaju polovište vrhova A i B koje ćemo označiti s M.

$$M = \frac{1}{2}(A + B)$$

Sada najlošiji vrh C preslikamo centralno-simetrično u odnosu na točku M te dobivamo vrh

$$R = M + (M - C) = 2M - C = A + B - C.$$

Na taj smo način refleksijom preslikali trokut $\triangle ABC$ u trokut $\triangle ABR$.



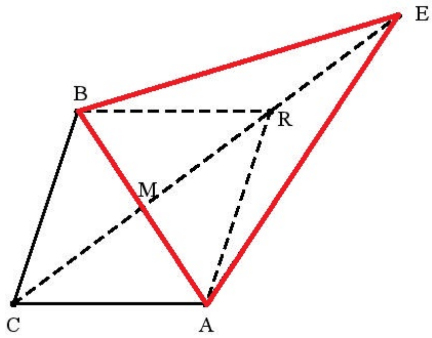
Slika 2: Refleksija trokuta

Zatim provjeravamo u kakvom su odnosu vrhovi C i R:

- Ako je $f(R) < f(A)$, tada smatramo da se krećemo u pravom smjeru te se pomaknemo u istom smjeru do točke

  $$E = R + (R - M) = 2R - M = 2A + 2B - 2C - \frac{1}{2}A - \frac{1}{2}B = \frac{3}{2}A + \frac{3}{2}B - 2C.$$

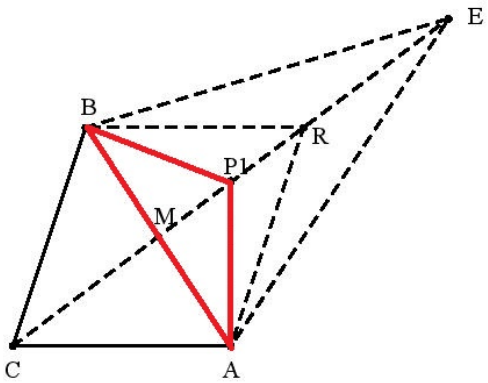
  Sada smo ekspanzijom trokut $\triangle ABR$ preslikali u trokut $\triangle ABE$. Točku C zamijenit ćemo točkom E ako je $f(E) < f(R)$, odnosno točkom R ako je $f(E) \geq f(R)$. Na taj način smo dobili novi trokut s kojim krećemo u sljedeću iteraciju.



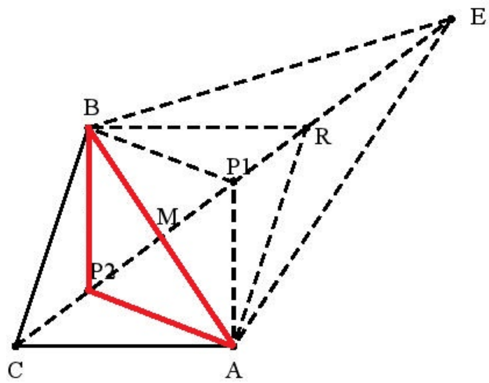
Slika 3: Ekspanzija trokuta

- Ako je $f(R) \geq f(A)$, točku R uspoređujemo s drugom najlošijom točkom B.
  - ▷ Ukoliko vrijedi da je $f(R) < f(B)$, točku C zamjenjujemo točkom R i time ova iteracija prestaje.
  - ▷ Ukoliko vrijedi da je $f(R) \geq f(B)$, provjeravamo odnos vrha R s najlošijim vrhom C.
    - Ako je $f(R) < f(C)$, točku C zamjenjujemo točkom R te definiramo novu točku
    $$P = M + \frac{1}{2}(R - M) = \frac{1}{2}M + \frac{1}{2}R = \frac{3}{4}A + \frac{3}{4}B - \frac{1}{2}C.$$
    - Ako je $f(R) \geq f(C)$, definiramo novu točku
    $$P = M - \frac{1}{2}(M - C) = \frac{1}{2}M + \frac{1}{2}C = \frac{1}{4}A + \frac{1}{4}B + \frac{1}{2}C.$$

  Odnosno kontrakcijom preslikamo trokut $\triangle ABC$ u trokut $\triangle ABP$.



Slika 4: Kontrakcija trokuta

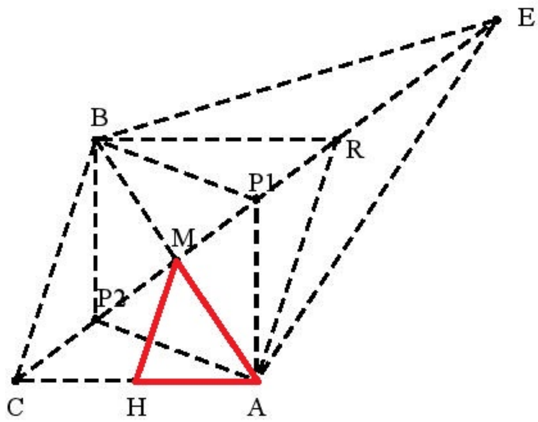


Slika 5: Kontrakcija trokuta

  Konačno uspoređujemo točku P i točku C:

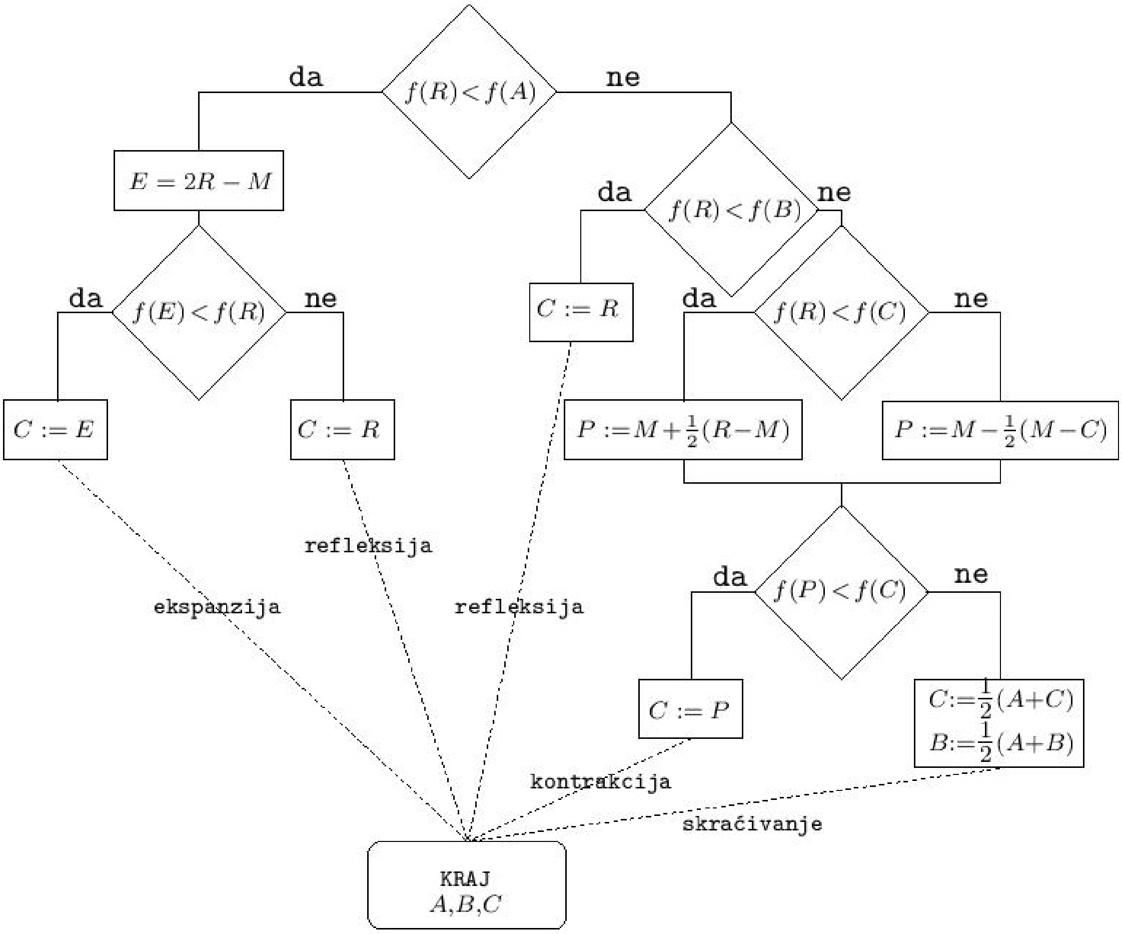
  - Ako je $f(P) < f(C)$, točku C zamjenjujemo točkom P i time dobivamo trokut s kojim krećemo u sljedeću iteraciju.

- Ako je $f(P) \geq f(C)$, krećemo u postupak skraćivanja trokuta: definiramo $H = \frac{1}{2}(A + C)$ te točku B zamijenimo točkom M, a točku C točkom H. Time smo definirali nove dvije točke koje s najboljim vrhom A čine trokut s kojim krećemo u sljedeću iteraciju.



Slika 6: Skraćivanje trokuta

Na sljedećoj slici je prikazan dijagram toka jedne iteracije Nelder-Meadove metode u $\mathbb{R}^2$ koju je izradio Branimir Šajinović.



Slika 7: Dijagram toka jedne iteracije Nelder-Meadove metode u $\mathbb{R}^2$

5 Konvergencija

Kao što smo vidjeli, Nelder-Meadova metoda uistinu nije teška za razumjeti i primijeniti, pogotovo na funkcijama u nižim dimenzijama. No čini se da je najveći problem kod ove metode njezina analiza i teorijska pozadina. U [2] konvergencijski rezultati za direktne metode oslanjaju se na sljedeća dva svojstva:

a) Kutovi promatranog simpleksa poprimaju vrijednosti između 0 i π kroz iteracije, odnosno simpleks ostaje uniformno nepromijenjen.

b) U svakoj iteraciji je potreban neki određeni pad funkcijskih vrijednosti.

Kako nijedno od ova dva svojstva Nelder-Meadova metoda ne zadovoljava, nemamo puno informacija o njezinim konvergencijskim svojstvima. Zanimljivo je kako dvadeset godina nakon što je objavljena Nelder-Meadova metoda tj. [8], nije bilo nikakve analize teorijskih svojstava ove metode. Tek 1985. Woods u [12] navodi negativne rezultate prilikom korištenja Nelder-Meadove metode kod optimizacije nekonveksne funkcije u dvije dimenzije pri čemu u svakoj iteraciji dolazi do skraćivanja trokuta te svi vrhovi konvergiraju točki koja nije minimum. McKinnon je 1998.godine u [7] naveo familiju strogo konveksnih neprekidnih funkcija u $\mathbb{R}^2$ i klasu početnih trokuta čiji vrhovi tijekom transformacija ne konvergiraju minimumu. Te iste godine je i Lagarias u [6] spomenio nekoliko rezultata u vezi konvergencije za strogo konveksne funkcije s omeđenom domenom u jednoj i dvije dimenzije.

Čak i na pitanje *'postoji li ijedna funkcija* $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ *kojoj Nelder-Meadova metoda može naći lokalni minimum'* ne može se dati siguran odgovor. Najljepši predstavnik svih konveksnih kvadratnih funkcija u $\mathbb{R}^2$ bi bila funkcija $f(x, y) = x^2 + y^2$, no i za nju je analiza Nelder-Meada još uvijek otvoren problem. Za manje glatke i neneprekidne funkcije jedino što znamo je da bi Nelder-Meadova metoda u traženju minimuma mogla dovesti do neuspjeha.

Zbog nedostatka dokaza o konvergenciji, nastale su mnoge modifikacije originalne Nelder-Meadove metode u svrhu poboljšanja konvergencijskih svojstava (vidi [3], [9]), no unatoč tome mnogi ljudi ipak posežu za Nelder-Meadovom metodom. Zašto? Vjerojatno odgovor leži u tome što metoda često uspješno daje približno rješenje ili locira područje minimuma bez velikih ocjena funkcije u iteracijama i bez poznavanja njezinih diferencijabilnih svojstava.

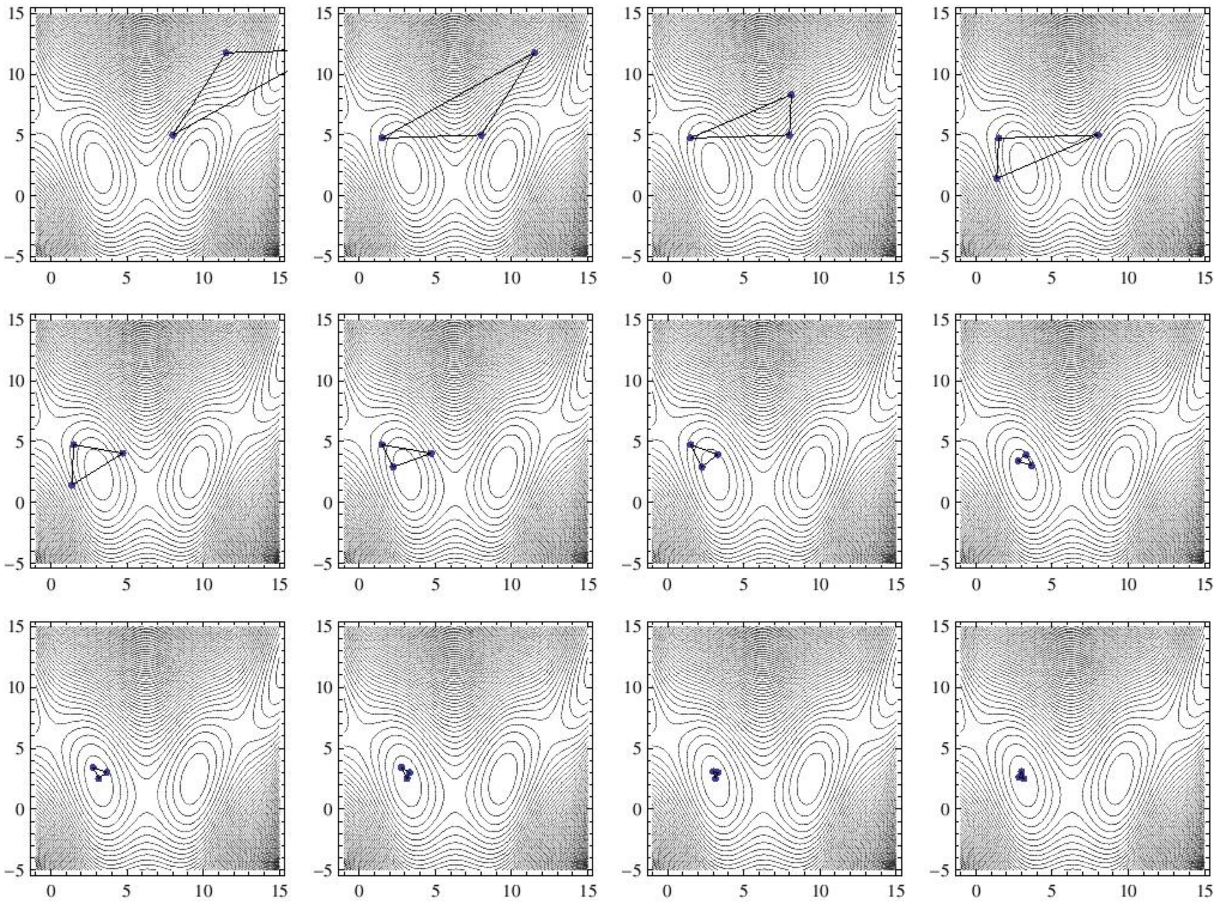
6 Numerički primjer

U ovome odjeljku ćemo navesti jedan česti primjer koji ilustrira mogućnosti i neke nedostatke Nelder-Meadove metode.

Primjer 1 *Promatramo tzv. Braninovu funkciju* $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ *:*

$$f(x_1, x_2) = \left(x_2 - \frac{5.1}{4\pi^2}x_1^2 + \frac{5}{\pi}x_1 - 6\right)^2 + 10\left(1 - \frac{1}{8\pi}\right)\cos x_1 + 10$$

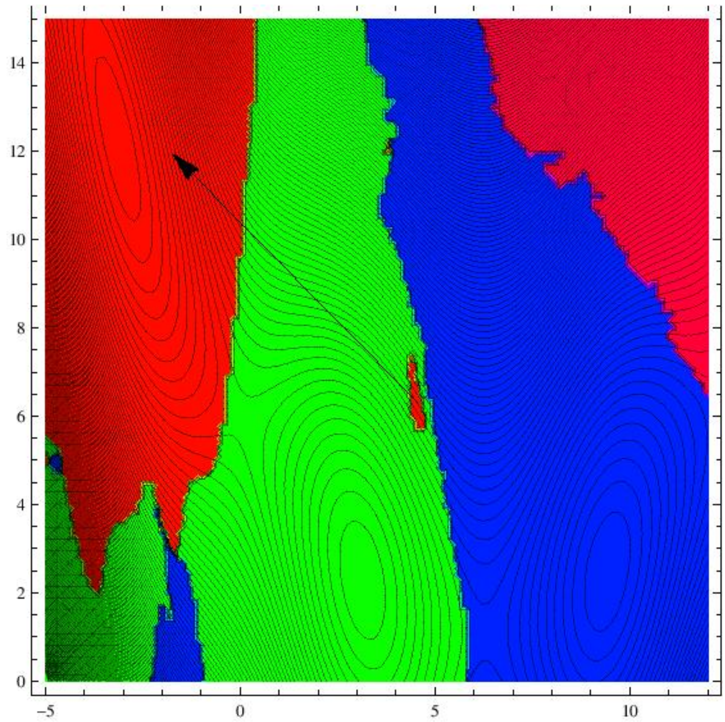
Ova funkcija postiže globalni minimum $f_{min} \approx 0.398$ u beskonačno mnogo točaka na $\mathbb{R}^2$. Na skupu $[-5, 10] \times [0, 15]$ su to točke $x_1^* = (\pi, 2.275), x_2^* = (-\pi, 12.275), x_3^* = (3\pi, 2.475)$.



Slika 8: Iterativni proces Nelder-Meadove metode za Braninovu funkciju

Na Slici 8 prikazan je cijeli iterativni proces Nelder-Meadove metode kroz 12 iteracija koji je konvergirao točki $x_1^* = (\pi, 2.275)$.
Zbog toga što smo za vrhove početnog trokuta uzeli točke $A = (8, 15), B = (10, 12), C = (10, 15)$, proces je konvergirao točki x_1^*, a ne x_2^* ili x_3^*. Stoga, kojoj će točki minimuma proces konvergirati, ovisi o izboru početne aproksimacije.
Napravimo jedan numerički eksperiment u kome ćemo odrediti skup onih početnih aproksimacija koje vode k istoj točki globalnog minimuma. Radi jednostavnosti, umjesto tri vrha početnog trokuta, zadat ćemo jednu točku A dok ćemo ostale dvije odrediti tako

da su $B = A + (1, 0)$, te $C = A + (0, 1)$. Na Slici 9 su istom bojom prikazana područja početnih aproksimacija na skupu $[-5, 10] \times [0, 15]$ koja konvergiraju k istoj točki globalnog minimuma. Uočimo četiri takva područja (a),(b),(c) i (d). U područjima (a),(b),(c) nalaze se sve one početne aproksimacije koje konvergiraju redom točkama x_1^*, x_2^*, x_3^*. Području (d) pripadaju one početne aproksimacije koje konvergiraju točki $x_4^* = (5\pi, 12.875)$. U svrhu izrade Slike 9 definirana je funkcija $\psi : [-5, 10] \times [0, 15] \to \mathbb{R}$ koja svakoj početnoj aproksimaciji $A = (x, y)$ na skupu $[-5, 10] \times [0, 15]$ pridružuje apscisu točke kojoj je Nelder-Meadova metoda konvergirala. Slika 9 je rezultat *Mathematica* naredbe:
`ContourPlot[Psi[x,y] , x, -5, 12, y,0, 15, ColorFunction` $\to$ `Hue]`.



Slika 9: Područja početnih aproksimacija

Kao što smo vidjeli, Nelder-Meadovom metodom smo vrlo brzo doveli trokut u područje minimuma, tj. za mali broj iteraciji trokut je konvergirao točki minimuma, no koristeći određenu početnu aproksimaciju gubimo podatake o ostalim točkama minimuma, ako one postoje.

Literatura

[1] M. Alić, G. Nogo, *Optimizacija: Uvod u teoriju nužnih i dovoljnih uvjeta ekstrema*, Odjel za matematiku, Sveučilište u Osijeku, Osijek, 2004

[2] C.Audet, J.E.Dennis Jr., *Analysis of Generalized Pattern Searches*, SIAM J. Optim., **13**, (2003), 889–903

[3] A.Bürmen, J.Puhan, T.Tuma, *Grid Restrained Nelder-Mead Algorithm*, Comput. Optim. Appl., **34**, (2006), 359–375

[4] D. F. Griffiths, G. A. Watson, *Numerical Analysis 1995*, A. W. Longman Inc. United States of America, (1996), 191–205

[5] J. C. Lagarius, B. Poonen, M. H. Wright, *Convergence of the restricted Nelder-Mead algorithm in two dimensions*, (2011) `http://www-math.mit.edu/~poonen/papers/nm.pdf`

[6] J. C. Lagarias, J. A. Reeds, M. H. Wright, M.H., P. Wright, *Convergence properties of the Nelder-Mead simplex algorithm in low dimensions*, SIAM J. Optim. **9**, (1998), 112–147

[7] K.I.M.McKinnon, *Convergence of the Nelder-Mead Simplex Method to a Nonstationary Point*, SIAM J. Optim., **9**,(1998), 148–158

[8] J. A. Nelder, R. Mead, *A simplex method for function minimization*, Comput. J. **7**, (1965), 308–313

[9] C.J.Price, I.D.Coope, D.Byatt, *A Convergent Variant of the Nelder-Mead Algorithm*, J. Optim. Theory Appl. **113**, (2002), 5–19

[10] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vettering, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, (1988)

[11] W.Spendley, G.R.Hext, F.R.Himsworth, *Sequential Application of Simplex Designs in Optimisation and Evolutionary Operation*, Technometrics, Vol. 4, (1962), 441–461

[12] D.J.Woods, J.E.Dennis Jr. , *Optimization on Microcomputers: The Nelder-Mead Simplex Algorithm*, Technical Report, Delaware, (1985)

[13] `http://www.scholarpedia.org/article/MATLAB`

[14] `http://sim.riteh.hr/folders/8/Nelder-Mead%20metoda.pdf`