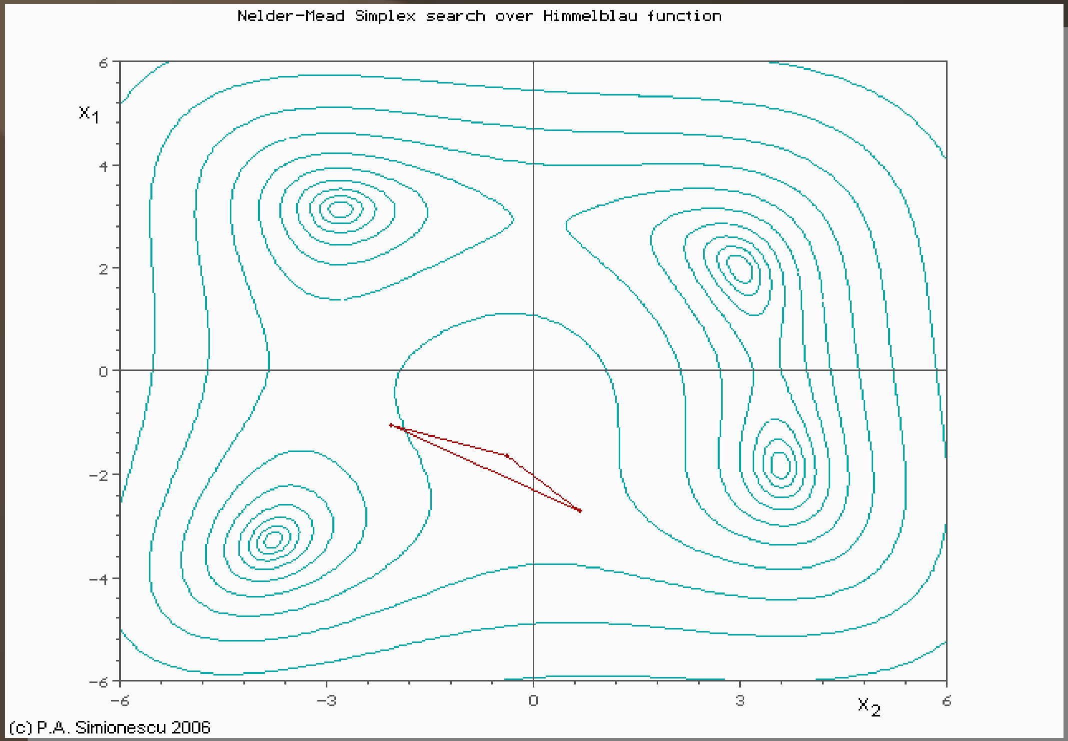
Método Simplex



Con información de:
http://www.chemkeys.com/esp/md/peyo_5/mdoeq_1/metsim_3/metsim_3.htm

Qué es el método Simplex

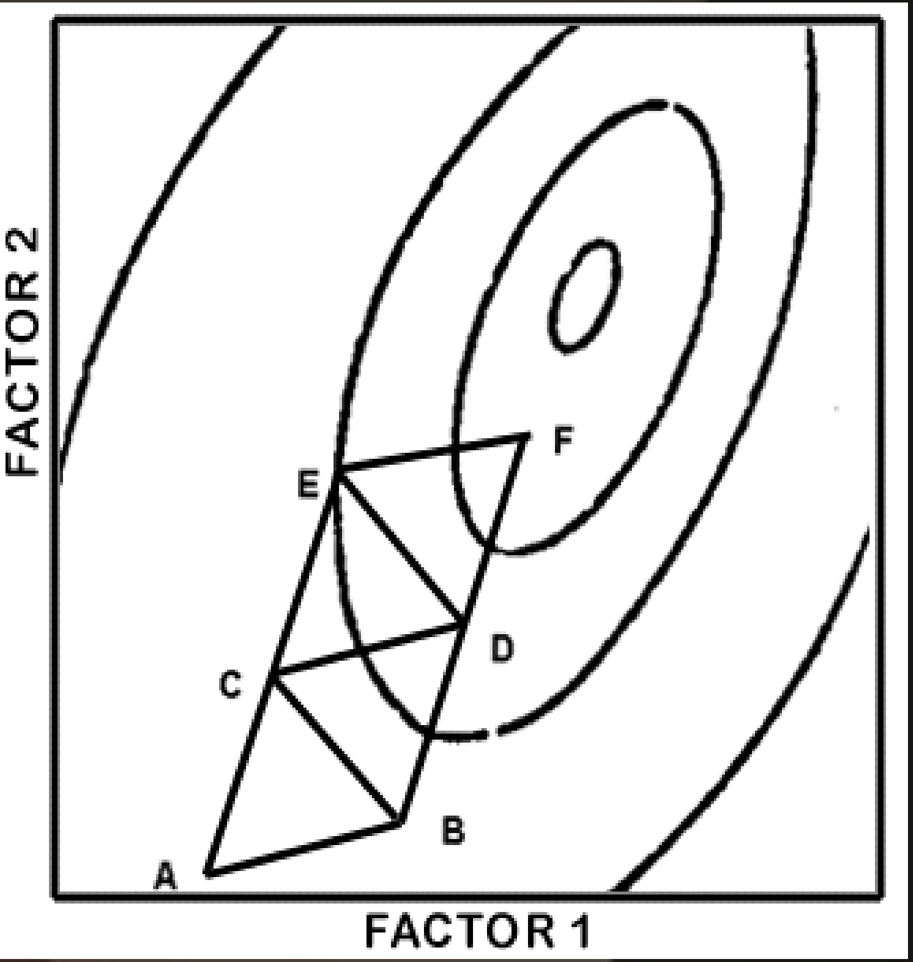
El método Simplex es un método secuencial de optimización y puede ser empleado tanto para maximizar como para minimizar una respuesta.

Un simplex es una figura geométrica de n dimensiones, constituido de n+1 puntos. Cada dimensión corresponde a una variable a ser optimizada. Un simplex en dos dimensiones es un triángulo, en tres dimensiones es un tetraedro y así sucesivamente. El método puede ser extendido para mayores dimensiones, pero la visualización del simplex no será fácil. A pesar de esto, el método Simplex puede ser aplicado, teoricamente, para la optimización de cualquier número de variables

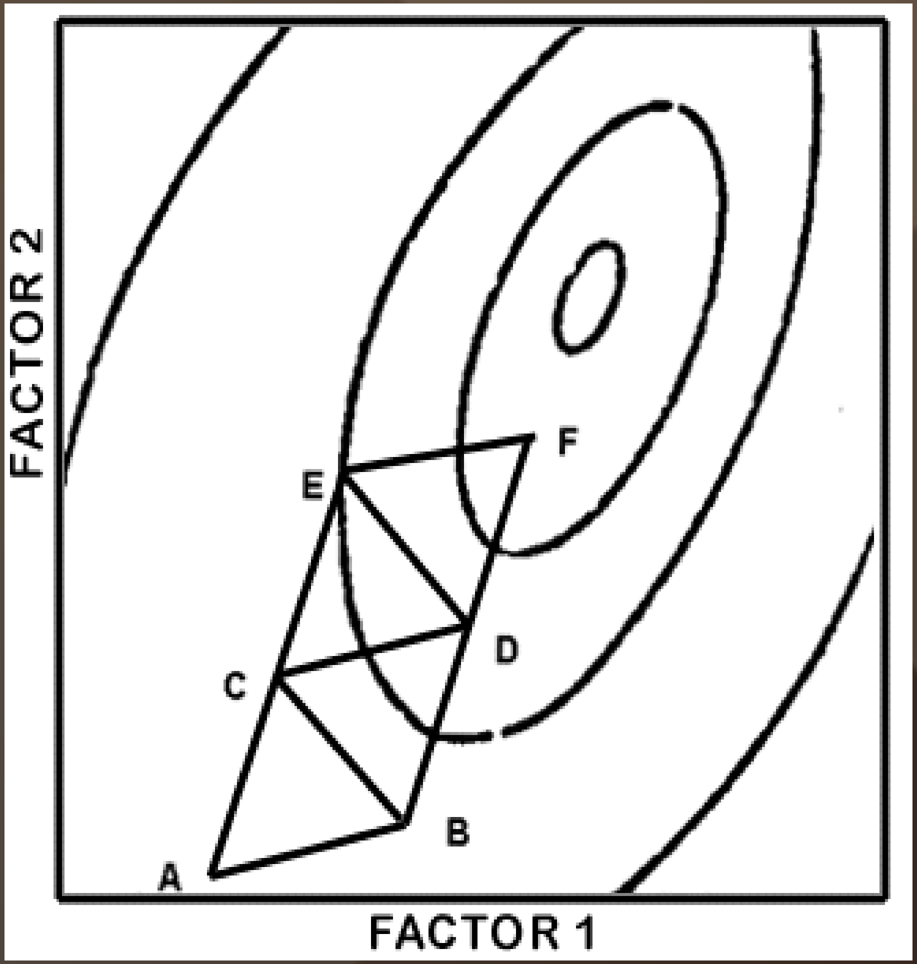
El método Simplex, introducido en su forma original por Spendley; Hext y Himsworth , en 1962, no se basa en planeamientos factoriales y por eso requiere pocos experimentos para moverse, desplazándose en la dirección del óptimo. La aplicación del método Simplex en Química Analítica fue efectuada por la primera vez en 1969. El método Simplex original, a lo largo de estos años, há sufrido modificaciones que obligaron a la distinción del mismo dentro de las estratégias de optimización, así el método Simplex original pasó a ser llamado de Método Simplex Básico (MSB).

Qué es el método Simplex

El procedimiento de optimización, en el método Simplex, comienza por la elección de los n+1 puntos donde será hecha la evaluación de la respuesta. En la Figura tenemos un ejemplo del proceso, para el cual la optimización empieza con los puntos A, B y C. Evidentemente, por tratarse de un sistema, la superficie de respuesta mostrada en la figura a continuación no es conocida, pero es adecuada para ilustrar lo que pasa durante el proceso. No hay necesidad de conocerla previamente, ya que nos interesa la respuesta que será obtenida en cada experimento previsto por el simplex. Este resultado será evaluado contra las demás respuestas para que el proceso pueda continuar, siendo que este tipo de desarrollo convierte al simplex en un método del tipo secuencial.



Qué es el método Simplex



Los puntos A, B y C forman un triangulo y a través del análisis de la figura anterior, el punto A demuestra tener la peor respuesta de los tres. Una conclusión lógica es que la mejor respuesta está en la dirección opuesta a este punto. Por lo tanto, el simplex es reflejado de forma que el punto D, opuesto al punto A, sea obtenido. Entonces, un nuevo experimento es efectuado en las condiciones experimentales del punto D. Los puntos B, C y D, juntos forman un nuevo simplex. El procedimento es repetido sucesivamente, descartándose la peor respuesta. Por lo tanto, como vemos, el objetivo del método Simplex secuencial es forzar al simplex a moverse para la región de respuesta óptima. Las decisiones requeridas para que eso sea posible constituyen las llamadas "reglas" del procedimiento simplex.

Reglas del método Simplex

Regla nº 1: Después de determinar las respuestas de los n+1 experimentos necesarios para iniciar el proceso, com base en el conocimiento ya adquirido sobre el sistema, se debe clasificarlas en mejor [B (the Best)], peor [W (the Worst)] y resultados intermediarios [N (Next to worst)], según el objetivo de la optimización.

Regla nº 2: El simplex es movido para un simplex adyacente, el cuál es determinado descartando la respuesta menos deseada. El vértice correspondiente a esta respuesta es sustituido por un nuevo vértice, generado por su reflexión a través del centroide de la hiperfase de los vértices restantes. Matematicamente, sí los vértices de un simplex k-dimensional son representados por coordenadas vectoriales P1, P2, ..., Pj, ...Pk, ... Pk+1, la eliminación de la respuesta no deseada Pj resulta en la hiperfase formada por P1, P2, ..., Pj-1, Pj+1, ...Pk, ... Pk+1 con el centroide definido por:

$$Pc = 1/k\,(P1 + P2 + ... + Pj\text{-}1 + Pj\text{+}1 + ... + Pk + Pk\text{+}1)$$

Pc = centroide de la hiperfase
K = número de dimensiones del simplex
Pj = vértice correspondiente a la peor respuesta.

El nuevo simplex es definido por esta fase y un nuevo vértice, P, que corresponde a la reflexión del vértice rechazado Pj, a través de la fase por el centroide Pc.

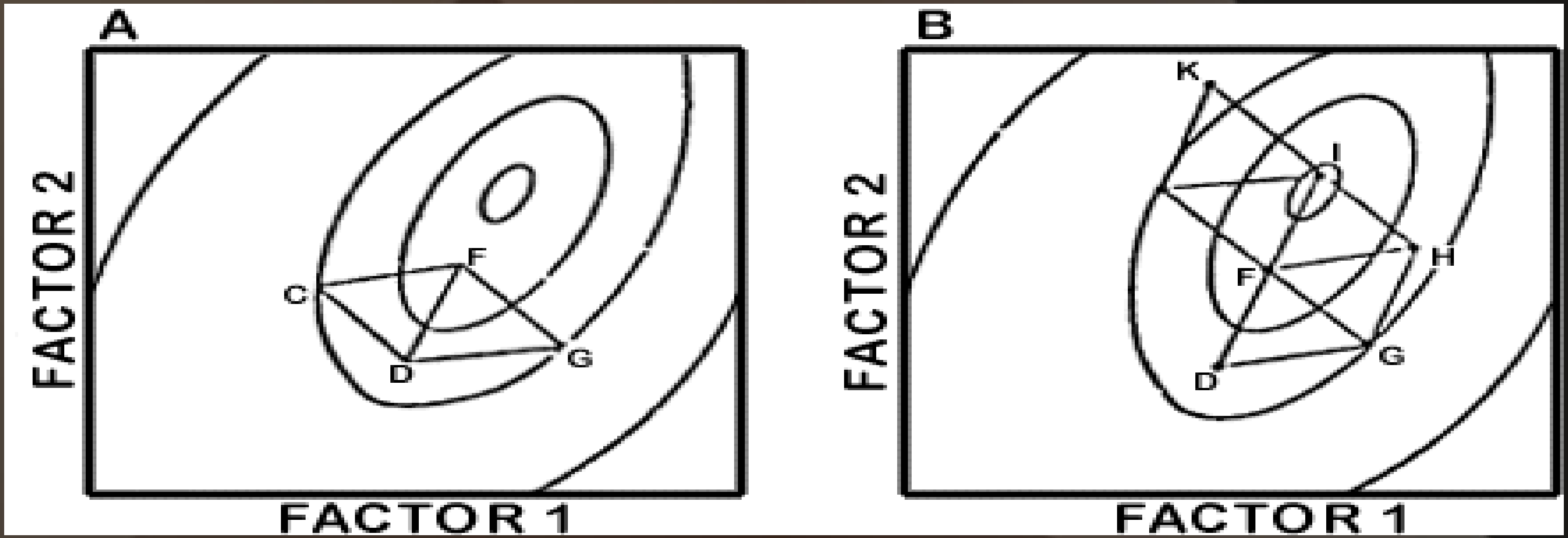
$$P = Pc + (Pc - Pj)$$

Reglas del método Simplex

Regla nº 3: Sí el punto reflejado, P, tuviera la peor respuesta en el nuevo simplex, probablemente el desplazamiento no está sucediendo en dirección al óptimo. En este caso, se debe rechazar la 2ª peor respuesta de este simplex y continuar con la optimización.

Esta regla es necesaria, pués el simplex puede estar encima de una cresta y la aplicación directa de la Regla no 2 puede hacer con que el punto P sea reflejado de vuelta al punto anterior como ocurre en la Figura 'a'. En este caso el simplex oscila y se vuelve sin recurso (decimos, que se mantiene parado).

La Figura 'b' muestra el movimiento de un simplex sobre una cresta donde la Regla no 3 fue empleada entre los simplex DFG y FGH y entre los simplex FIJ y IJK.



Reglas del método Simplex

Esta situación sucede con frecuencia en la región del óptimo. Sí un punto es obtenido cercano a él, todos los otros nuevos puntos tienden a pasar más allá del tope de la curva de respuesta. Entonces, un cambio en la dirección es indicado. En la región del óptimo, normalmente ocurre el simplex circular en vuelta de un óptimo temporario. Como se puede tratar de un resultado falso, el cual hace, con que el simplex se prenda a él, es necesario la siguiente excepción adicional a la Regla no 1.

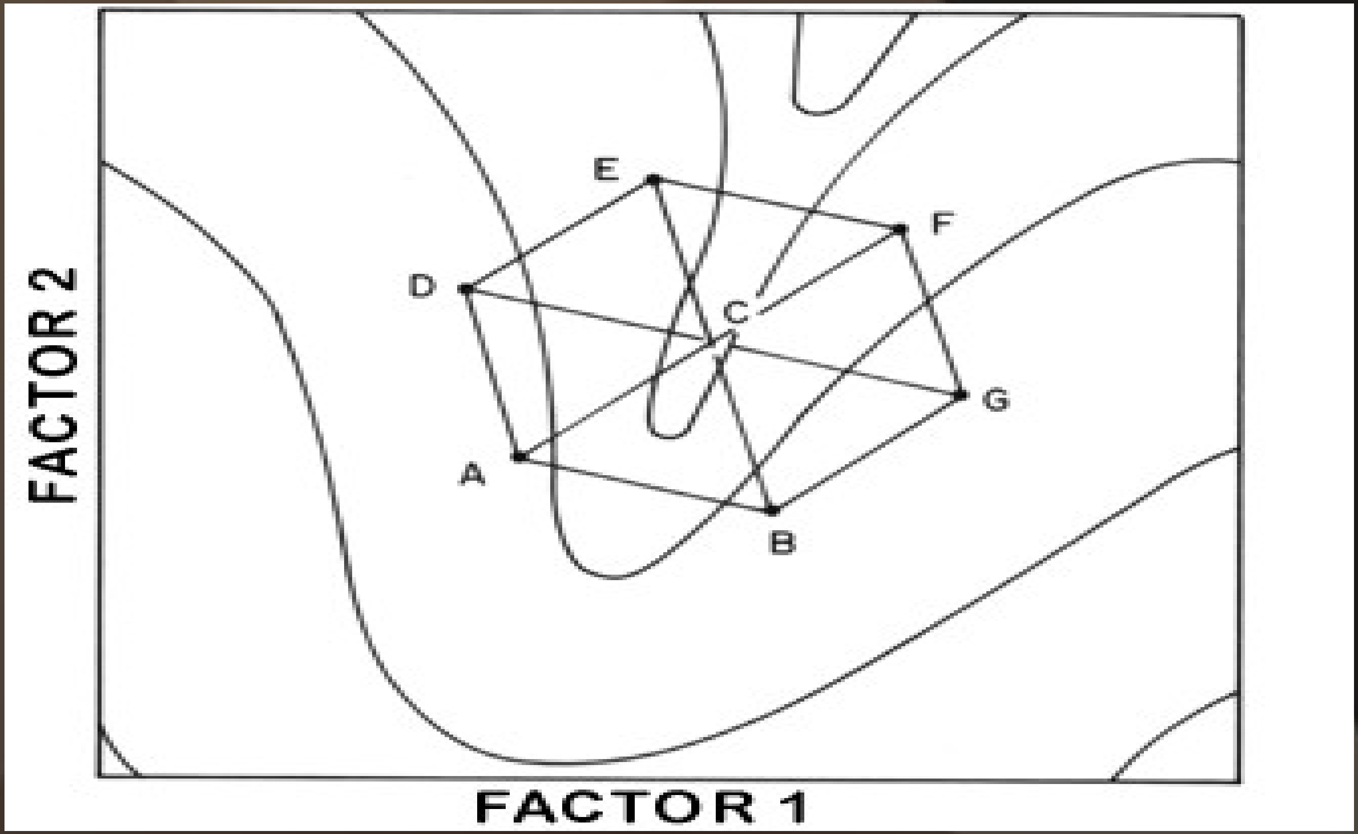
Regla nº 4: Sí un vértice fuera mantenido en k+1 simplex, antes de aplicar la Regla no 2, haga una nueva observación del vértice persistente. Sí el vértice está realmente cercano al óptimo, es probable que la evaluación repetida de la respuesta sea consistente y de esta forma el punto será mantenido. Sí la respuesta en el vértice fuera alta por causa de un error de observación, es improbable que con la nueva evaluación eso ocurra y por lo tanto, el vértice será consecuentemente eliminado.

Regla nº 5: Sí el nuevo vértice encontrárase fuera de los limites aceptables de las variables optimizadas, no se deben realizar observaciones experimentales con estos valores, al contrario se debe atribuir a este la respuesta más indeseable.

Reglas del método Simplex

La aplicación posterior de las Reglas nos 2 e 3 obligará al simplex a regresar dentro de los límites permitidos y este continuará buscando por la respuesta óptima. Cuando un óptimo es localizado, las reglas del simplex lo fuerzan a circular.

En la Figura es ilustrado este tipo de efecto observado durante el proceso de optimización, en este caso el simplex se presenta "estancado" en un óptimo falso:



Reglas del método Simplex

Localización y tamaño del simplex inicial

En la etapa inicial de los experimentos, es recomendable construir un simplex grande para que por sí mismo se mueva rapidamente sobre la superficie de respuestas y pueda localizar la región del óptimo. Para definir más precisamente el óptimo, se construye un simplex menor y se continua la optimización. En el caso que sea necesario, es posible repetir el proceso, dejando el simplex cada vez mas pequeño.

Está claro que existe una limitación para el tamaño del simplex, pués, sí este fuera muy pequeño, los errores experimentales pueden enmascarar los verdaderos efectos sobre la respuesta y hacer con que el simplex se traslade irregularmente dentro de un área cercana al óptimo.

Para definición del primer simplex se debe establecer las variables que estarán sujetas a la optimización. Después, se define el tamaño del paso (step size) de cada variable del simplex.

Desventajas

En particular, en el uso del método simplex básico, tres limitaciones son evidentes:

Primero: El óptimo solamente es localizado con precisión por casualidad.

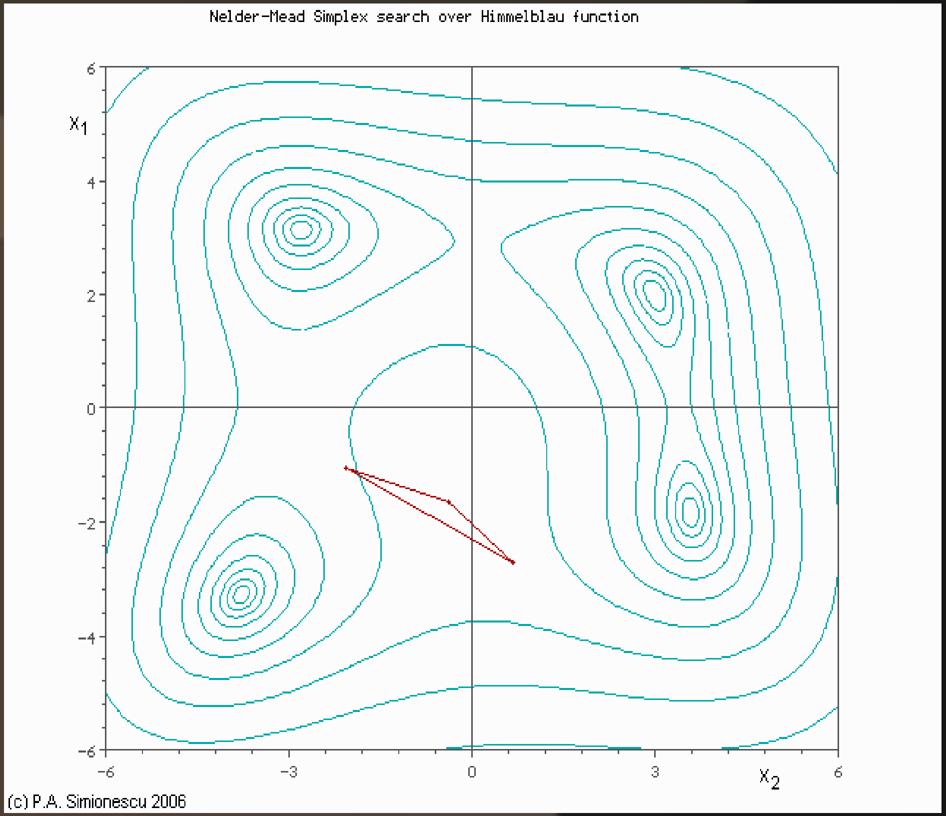
Segundo: Un óptimo falso puede ser localizado.

Tercero: El progreso del simplex en direción al óptimo solamente puede ser efectuado en una proporción constante.

Estos inconvenientes motivaron la modificación del método simplex básico, convirtiéndolo más eficiente en la búsqueda del óptimo, originando el método simplex modificado(MSM).

Método Simplex Modificado

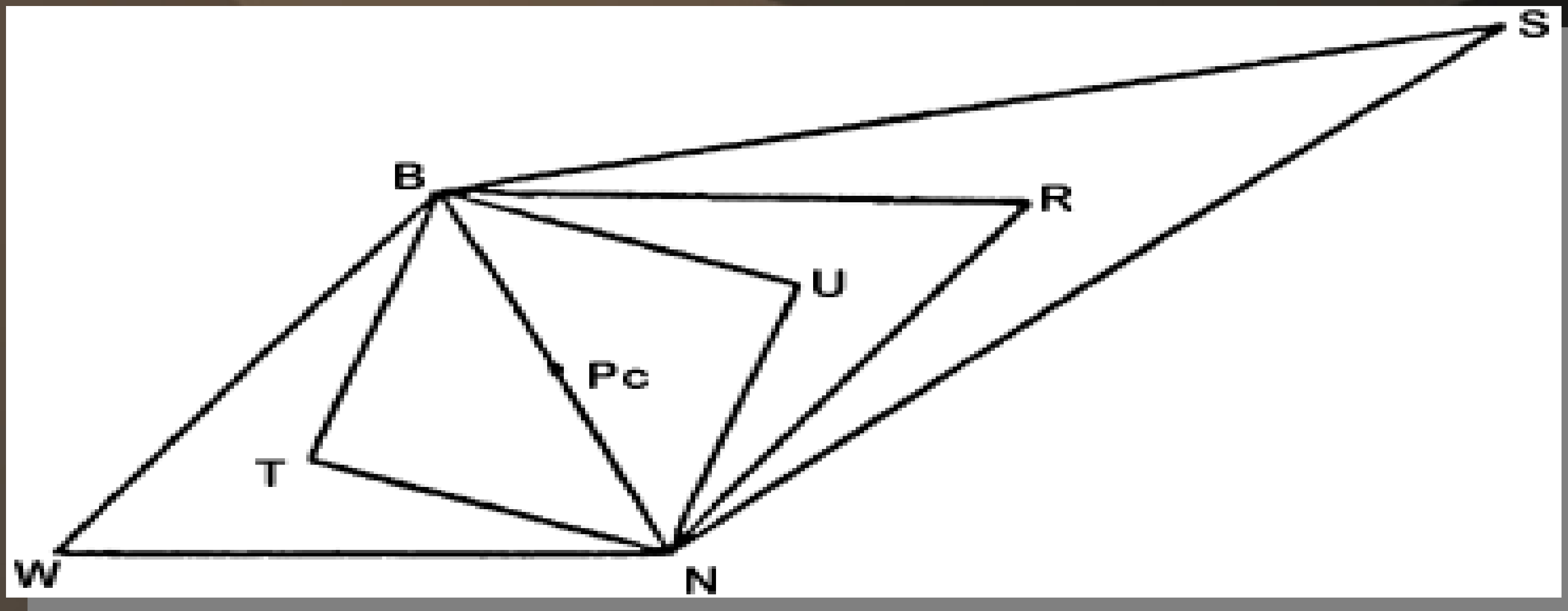
En 1965, Nelder y Mead, propusieron modificaciones en el procedimiento original de movimentación del simplex básico, que permitió obtener un punto óptimo estacionário con suficiente precisión y claridad, además de permitir un desarrollo mas rápido del simplex en dirección al óptimo, originando el denominado Método Simplex Modificado (MSM), donde pueden ser alterados el tamaño y la forma del simplex.



Las reglas de movimiento del método Simplex básico son válidas y a estas fueron aumentadas, por Nelder y Mead.

Reglas del MSM

Las reglas adicionales de movimentación del Método Simplex Modificado , pueden ser mejor entendidas con el auxilio de la Figura:



Andamiento del Método Simplex Modificado Considere el simplex inicial representado por B, N y W en la figura 8. Suponga que W es el vértice que dá la peor respuesta, B la mejor respuesta y N la segunda peor respuesta.

Reglas del MSM

Así, como en el método simplex básico, el primer movimiento del simplex modificado es la reflexión y los vértices para la movimentación del simplex pueden ser resumidos por la ecuación:

$$P = Pc + b\,(Pc - W)$$

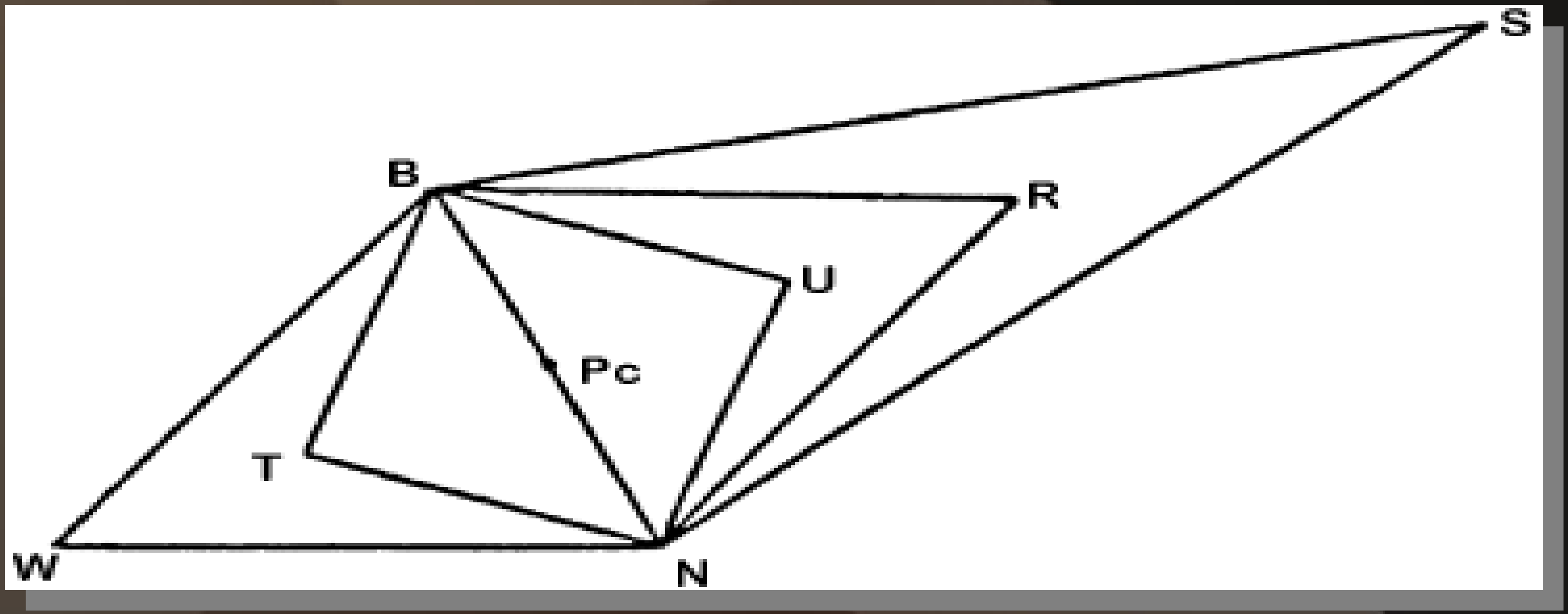
P = vértice para el movimiento del simplex.
Pc= centroide.
W= vértice correspondiente a la peor respuesta.
b = coeficiente de movimiento del simplex.

En el método simplex básico, el único valor permitido para el andamiento del simplex es b = 1, correspondiente a la reflexión, generando el vértice R. Sin embargo, para el Método Simplex Modificado otros valores son permitidos y definidos después de cada observación de la respuesta en comparación con las respuestas obtenidas en los vértices originales representados por B, N y W.

Existen cuatro posibilidades con relación a la respuesta obtenida en R para ser consideradas, las cuáles generan las siguientes reglas de movimiento del simplex modificado.

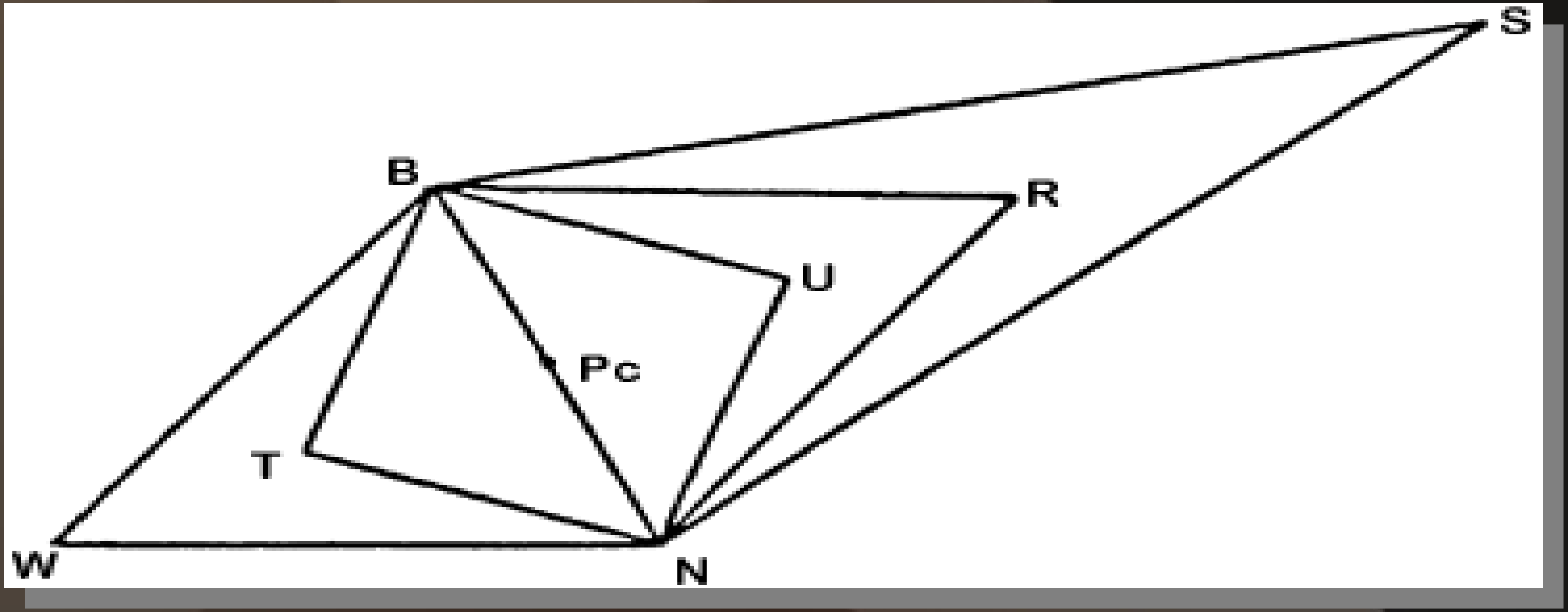
Reglas del MSM

Regla nº 1: Sí la respuesta en R fuera mejor que la respuesta en B, indica que el simplex está caminando en la dirección correcta. Se debe realizar una expansión del simplex inicial. Haciendo b = 2 se duplica el tamaño del simplex en la dirección deseada y se realiza el experimento en S. Sí la respuesta en S fuera mejor que las anteriores, el nuevo simplex será SBN.



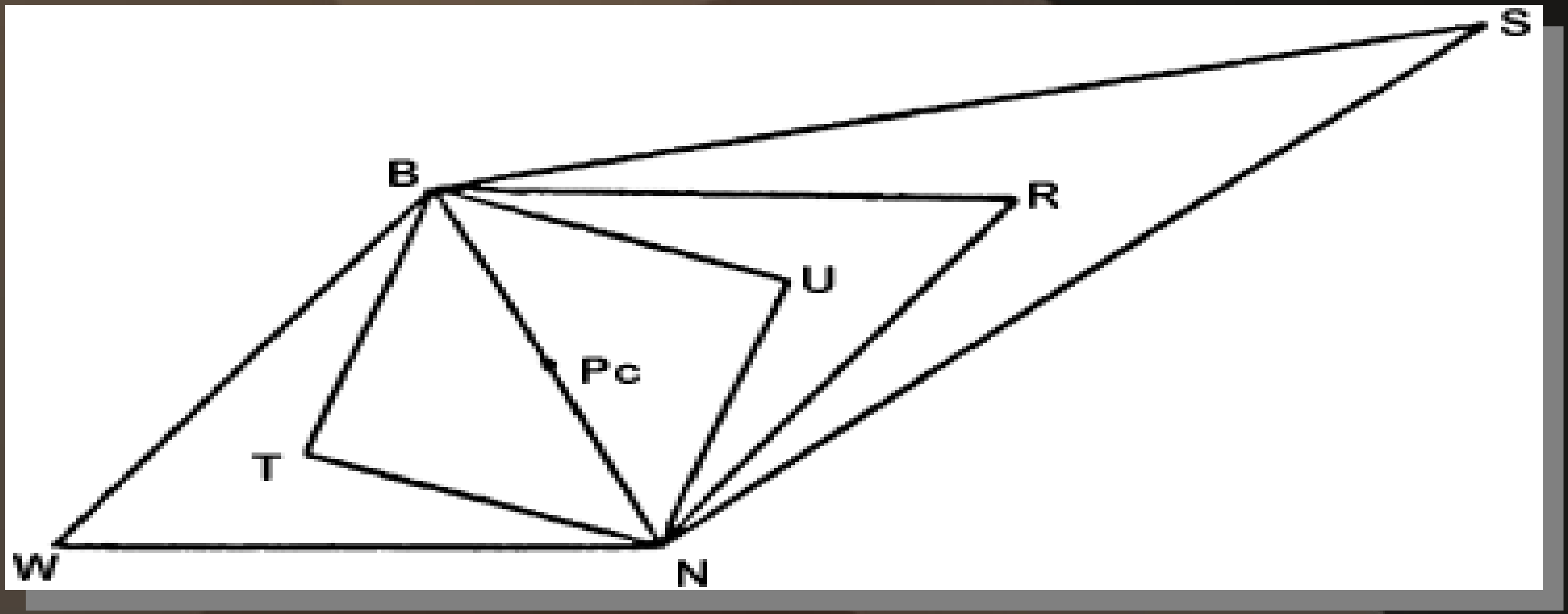
Reglas del MSM

Regla nº 2: Sí la respuesta en R fuera peor que en W, significa que el simplex además de no estar caminando en la dirección correcta, está con tamaño inadecuado. Se debe realizar una contracción con cambio en la dirección del simplex RNB, generando el vértice T, para el cual b = - ½ . Sí la respuesta en T fuera mejor que en W, el nuevo simplex será BNT.



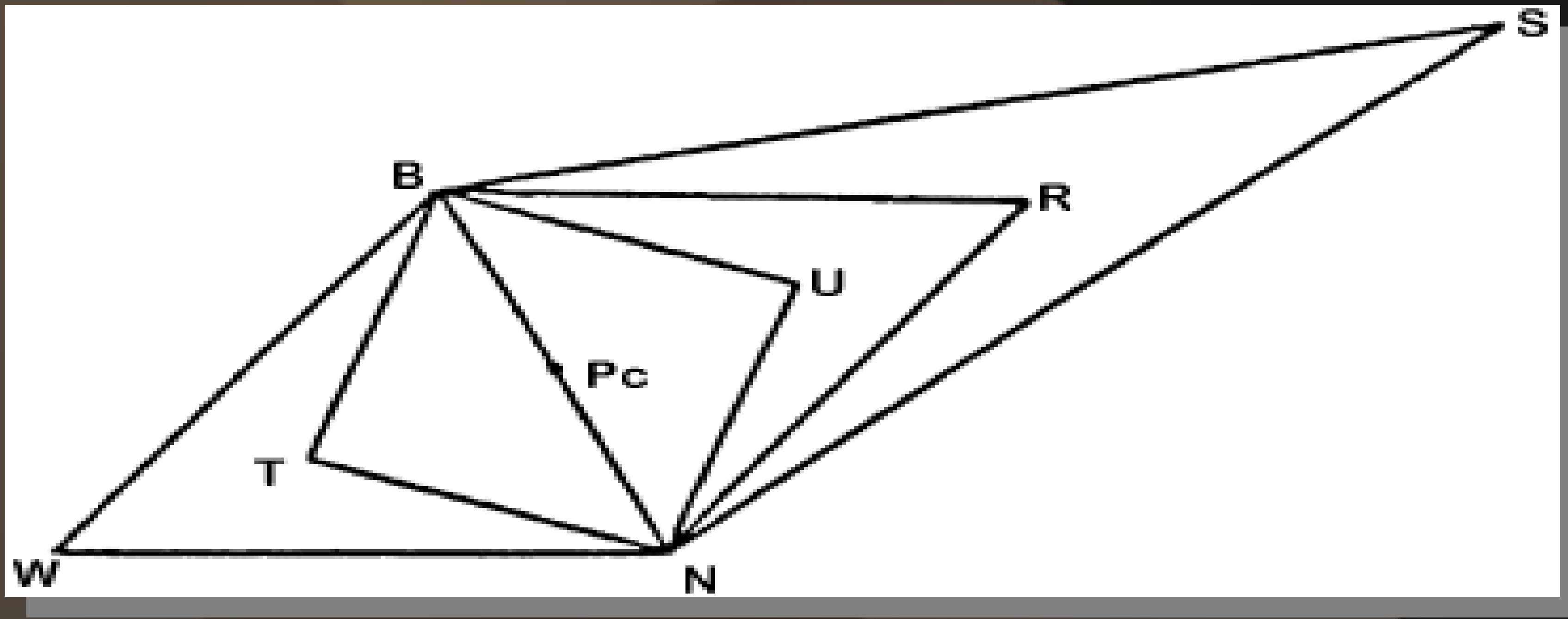
Reglas del MSM

Regla nº 3: Sí la respuesta en R fuera peor que en N, pero mejor que en W, significa que el simplex está muy grande, pero en la dirección correcta. Se hace una observación en U (b = ½). Sí la respuesta en U fuera intermediaria entre B y N, el nuevo simplex será BUN, osea, se hace una contracción.



Reglas del MSM

Regla nº 4: Sí la respuesta en R fuera intermediaria entre B y N, estas operaciones no son recomendables y el nuevo simplex será BRN, procediéndose como en el caso del simplex básico.

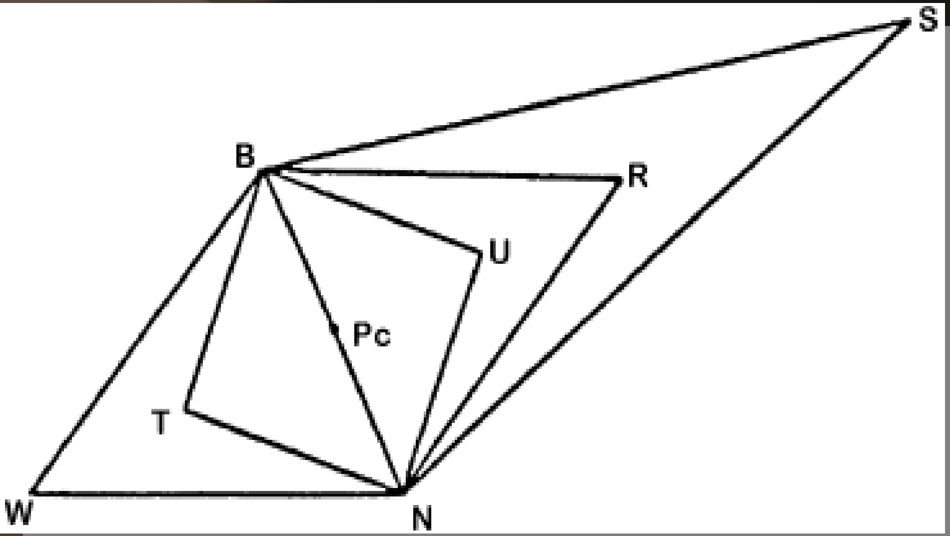


Reglas del MSM

Los movimientos del simplex modificado están resumidos en la Tabla. Los valores de b, correspondientes a la expansión y contracción del simplex pueden asumir valores diferentes de los relacionados en la tabla 3, pero en general estos son los más usados.

Coeficiente, b	Vértice	Movimiento
2	S	Expansión
- ½	T	CMD*
½	U	Contracción
1	R	Reflexión

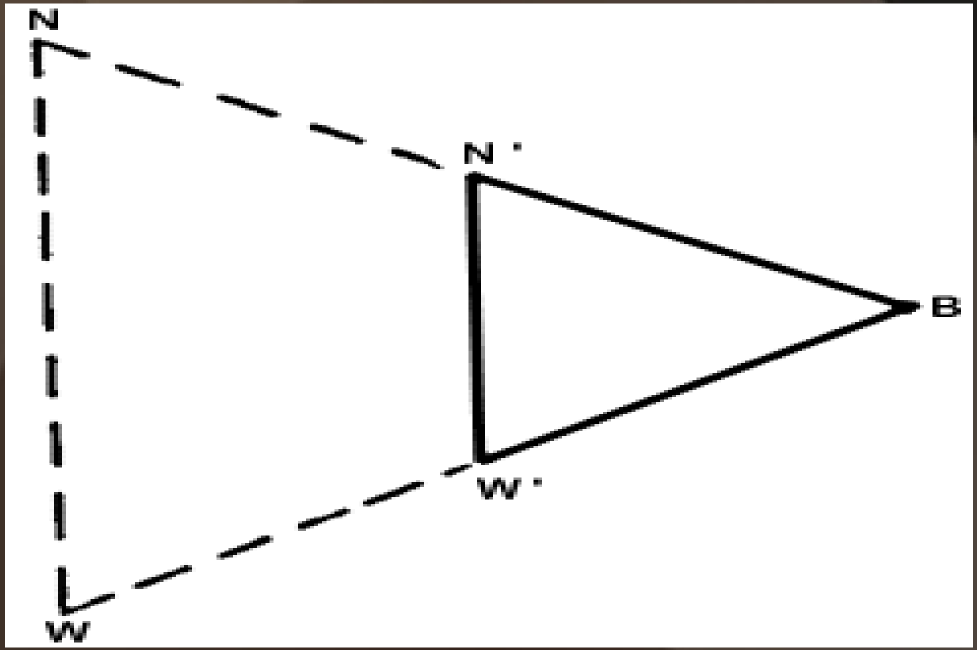
* CMD, contracción con cambio de dirección



Reglas del MSM

Cuando los recursos adicionales de movimiento del simplex (MSM) se muestren equívocos (principalmente la contracción), es decir, el simplex no se mueve, se recomienda una reducción del simplex, también llamada de Contracción Brusca. Es decir, se conserva el vértice B del simplex y se hacen nuevas observaciones para determinar los otros vértices nuevos N' y W', representados en la Figura y determinados de la siguiente forma:

$$N' = (B + N) / 2 \text{ y } W' = (B + W) / 2$$



Desventajas

La idea, aunque efectiva, sufre dos desventajas.

Primera: que requiere de la evaluación de los nuevos k vértices del simplex reduzido para que el proceso de optimización pueda continuar (donde k es el número de factores del procedimento en optimización).

Segunda: es que el tamaño del simplex, cada vez que ocurre una contracción brusca, es reducido y esto puede resultar en la convergencia prematura del simplex en la presencia del error experimental.

Gracias