Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

ΥΔΡΟΛΟΓΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΚΑΙ ΠΡΟΓΝΩΣΗ

Ενότητα 1: Υδρολογική προσομοίωση

1.2. Βελτιστοποίηση (Βαθμονόμηση) Υδρολογικών Μοντέλων

Καθ. Αθανάσιος Λουκάς
Εργαστήριο Υδρολογίας και Ανάλυσης Υδατικών Συστημάτων
Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών
Πολυτεχνική Σχολή

Θεμελιώδεις ορισμοί βελτιστοποίησης

- Η έννοια της βελτιστοποίησης εφαρμόζεται σε προβλήματα λήψης αποφάσεων (decision-making), και προϋποθέτει μια διαδοχή από εναλλακτικές επιλογές (alternatives) και αξιολογήσεις (evaluations) των επιπτώσεων κάθε επιλογής.
- Κάθε επιλογή που ικανοποιεί τους περιορισμούς του προβλήματος καλείται εφικτή (feasible). Το σύνολο των εφικτών επιλογών καλείται εφικτός χώρος ή χώρος αποφάσεων (decision space) ή χώρος αναζήτησης (search space).
- Αν κάθε εφικτή επιλογή μπορεί να περιγραφεί από ένα σύνολο μεταβλητών ελέγχου (control variables) $x = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$ και αν σε κάθε τέτοια περιγραφή μπορεί να αντιστοιχιστεί ένα μέτρο επίδοσης (performance measure), τότε ως βέλτιστη (optimal) λαμβάνεται η απόφαση που μεγιστοποιεί το εν λόγω μέτρο.
- Η μαθηματική έκφραση του μέτρου επίδοσης καλείται αντικειμενική ή στοχική συνάρτηση (objective function) και συμβολίζεται $f(x)$.
- Το μέτρο επίδοσης μπορεί να περιλαμβάνει ένα ή περισσότερα κριτήρια, οπότε η στοχική συνάρτηση είναι, αντίστοιχα, βαθμωτή ή διανυσματική. Η γενική μορφή της πολυκριτηριακής στοχικής συνάρτησης είναι:

$$f(x) = \{f_1(x), f_2(x), ..., f_m(x)\}.$$

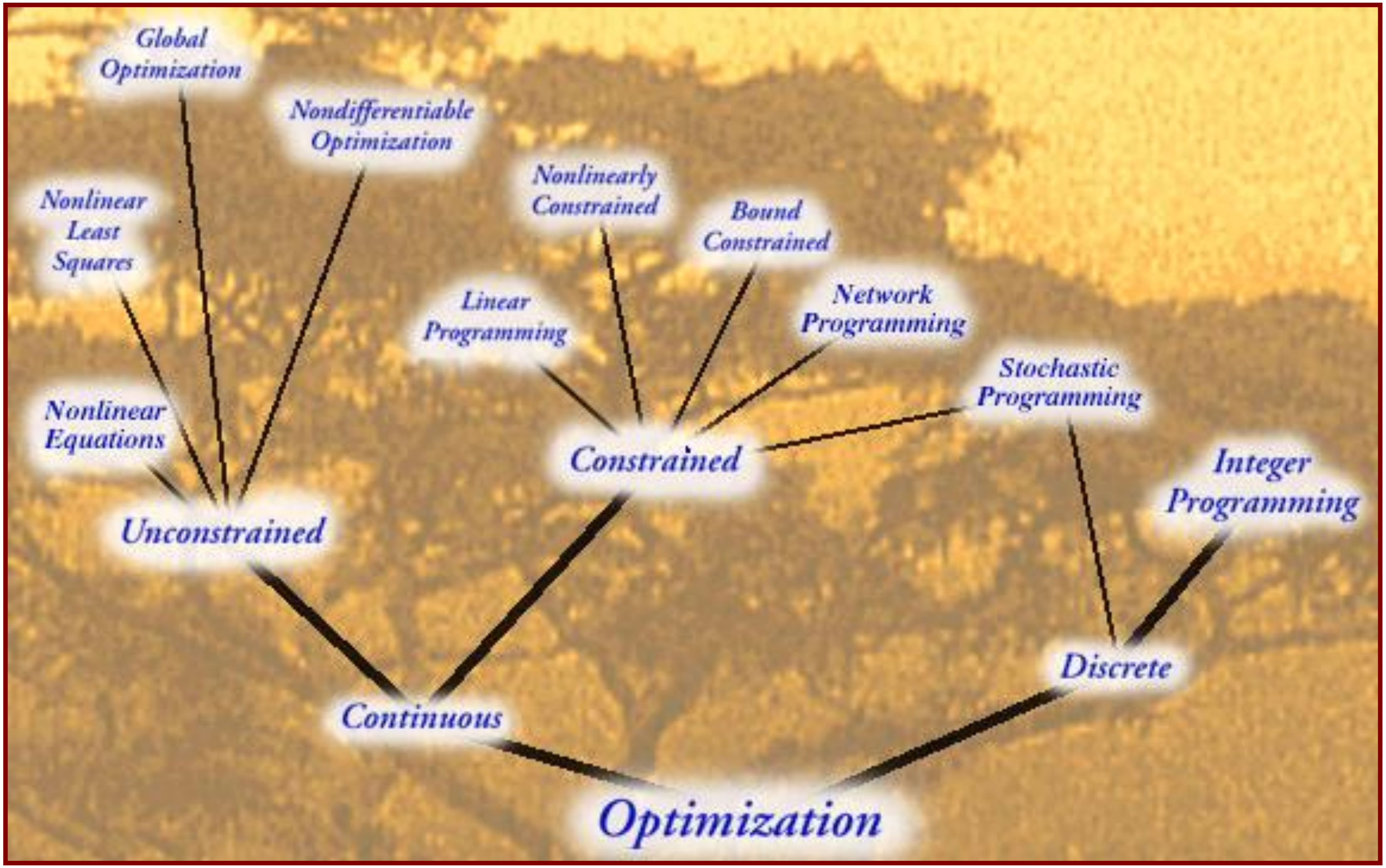
Γενικός ορισμός: Ένα σύστημα είναι βέλτιστο ως προς ένα μέτρο επίδοσης και ένα σύνολο περιορισμών εφόσον λειτουργεί/αποδίδει τουλάχιστον ίσα, αν όχι καλύτερα, από κάθε άλλο σύστημα που ικανοποιεί τους ίδιους περιορισμούς

Μαθηματική διατύπωση βελτιστοποίησης

- Γενική διατύπωση προβλήματος:

  minimize / maximize $f(x) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, όπου $\mathbf{x} \in X$.
- Μορφές στοχικής συνάρτησης / προβλήματος:
  - Βαθμωτή ($m = 1$) ή διανυσματική (πολυκριτηριακή, $m > 1$)
  - Μονοδιάστατη ($n = 1$) ή πολυδιάστατη ($n > 1$)
  - Προσδιοριστική ή στοχαστική
  - Γραμμική ή μη γραμμική
  - Με συνεχείς, διακριτές, ακέραιες ή μικτές μεταβλητές ελέγχου
  - Με περιορισμούς ή χωρίς περιορισμούς
  - Με ρητούς ή ασαφείς (fuzzy) περιορισμούς
  - Γραμμική ή μη γραμμική
  - Κυρτή (μοναδικό ακρότατο) ή μη κυρτή (πολλαπλά ακρότατα)
  - Με αναλυτική ή μη αναλυτική ιδία έκφραση
  - Με αναλυτική ή μη αναλυτική έκφραση των παραγώγων πρώτης και δεύτερης τάξης
  - Με αμελητέο ή σημαντικό φόρτο υπολογισμού (π.χ. εφαρμογές στις οποίες το μέτρο επίδοσης του συστήματος αποτιμάται μέσω προσομοίωσης)

Το ‘δέντρο’ των μεθόδων βελτιστοποίησης



Πηγή: http://www.wu.ece.ufl.edu/optimization/optimization.html

Τεχνικές Βελτιστοποίησης

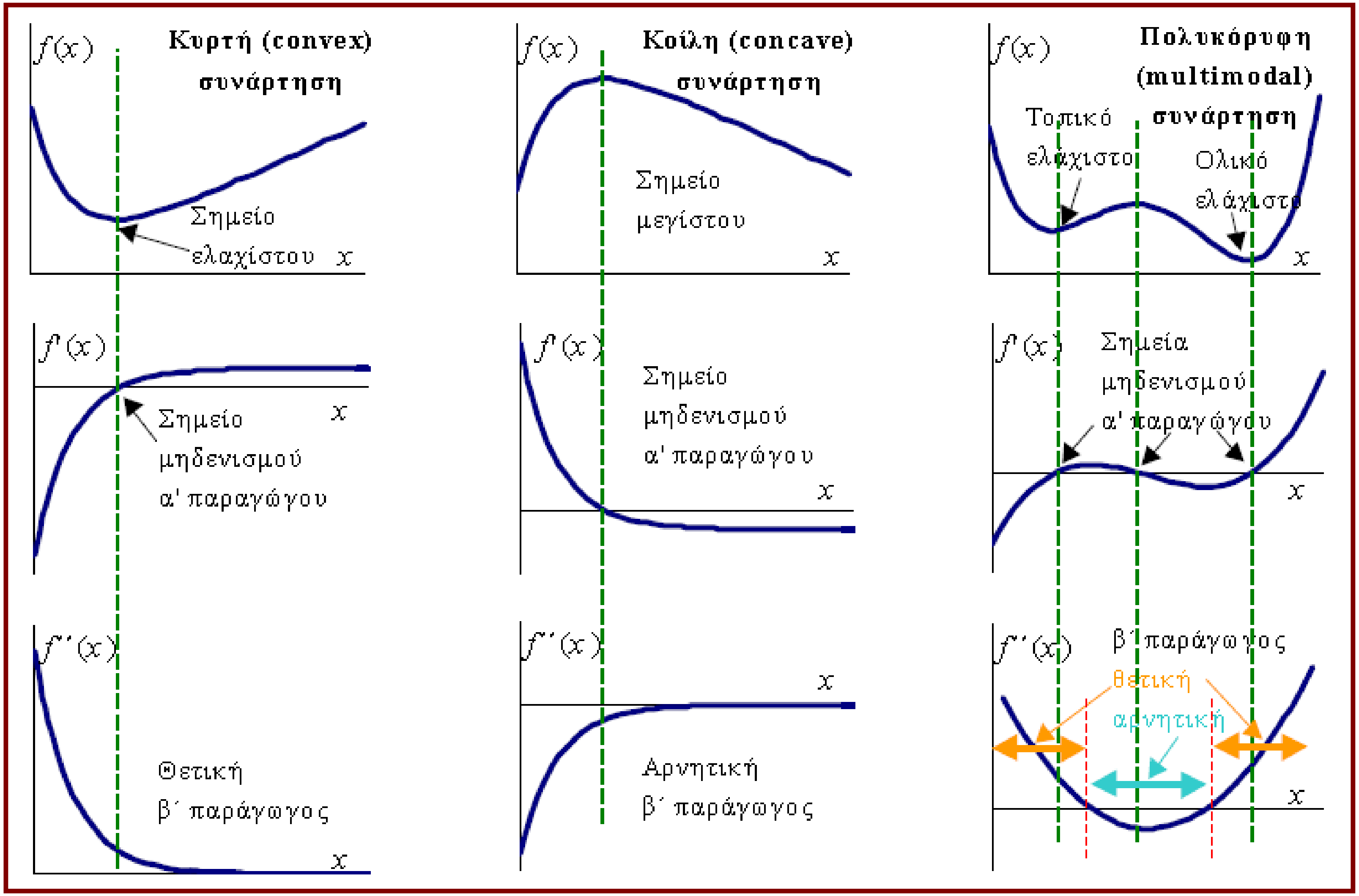
1. Λογισμός (Calculs)
2. Γραμμικός Προγραμματισμός (Linear Programming)
3. Μη Γραμμικός Προγραμματισμός (Nonlinear Programming)
   a) Κατευθείαν Αναζήτηση (Direct Search)
   b) Πολλαπλασιαστές Lagrange (Lagrange Multipliers)
   c) Συναρτήσεις Ποινής (Penalty Functions)
   d) Γεωμετρικός Προγραμματισμός (Geometric Programming)
   e) Μεθοδοι κλίσεων (Gradient Methods)
   f) Άλλες Μέθοδοι
4. Δυναμικός Προγραμματισμός (Dynamic Programming)
5. Αναπαραγωγή (Simulation)
6. Ανάλυση και Πολυεπίπεδη Προσέγγιση (Decomposition and Multilevel Approach)
7. Προγραμματισμός Πολλαπλών Στόχων (Multiobjective Optimization)

Τεχνικές Βελτιστοποίησης

Μέθοδοι επίλυσης των μοντέλων που σχετίζονται με τις προηγούμενες τεχνικές βελτιστοποίησης είναι οι:

1. Θεωρία Σειρών (Queuing Theory)
2. Θεωρία Παιχνιδιών (Game Theory)
3. Θεωρία Δικτυώματος (Network Theory)
4. Λογισμός Μεταβολών Calculus Variations)
5. Αρχή Μεγίστου (Maximum Principle)
6. Γραμμικοποίηση (Qualsilinearization)
7. Ανάλυση και πολυεπίπεδη προσέγγιση (Decomposition and multilevel approach)

Ακρότατα συναρτήσεων μιας μεταβλητής



Πηγή: Α. Ευστρατιάδης, 2012. Θεμελιώδεις έννοιες βελτιστοποίησης και κλασικές μαθηματικές μέθοδοι. Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. (https://www.itia.ntua.gr/getfile/1109/2/documents/HydroInf_Maths_1.pdf)

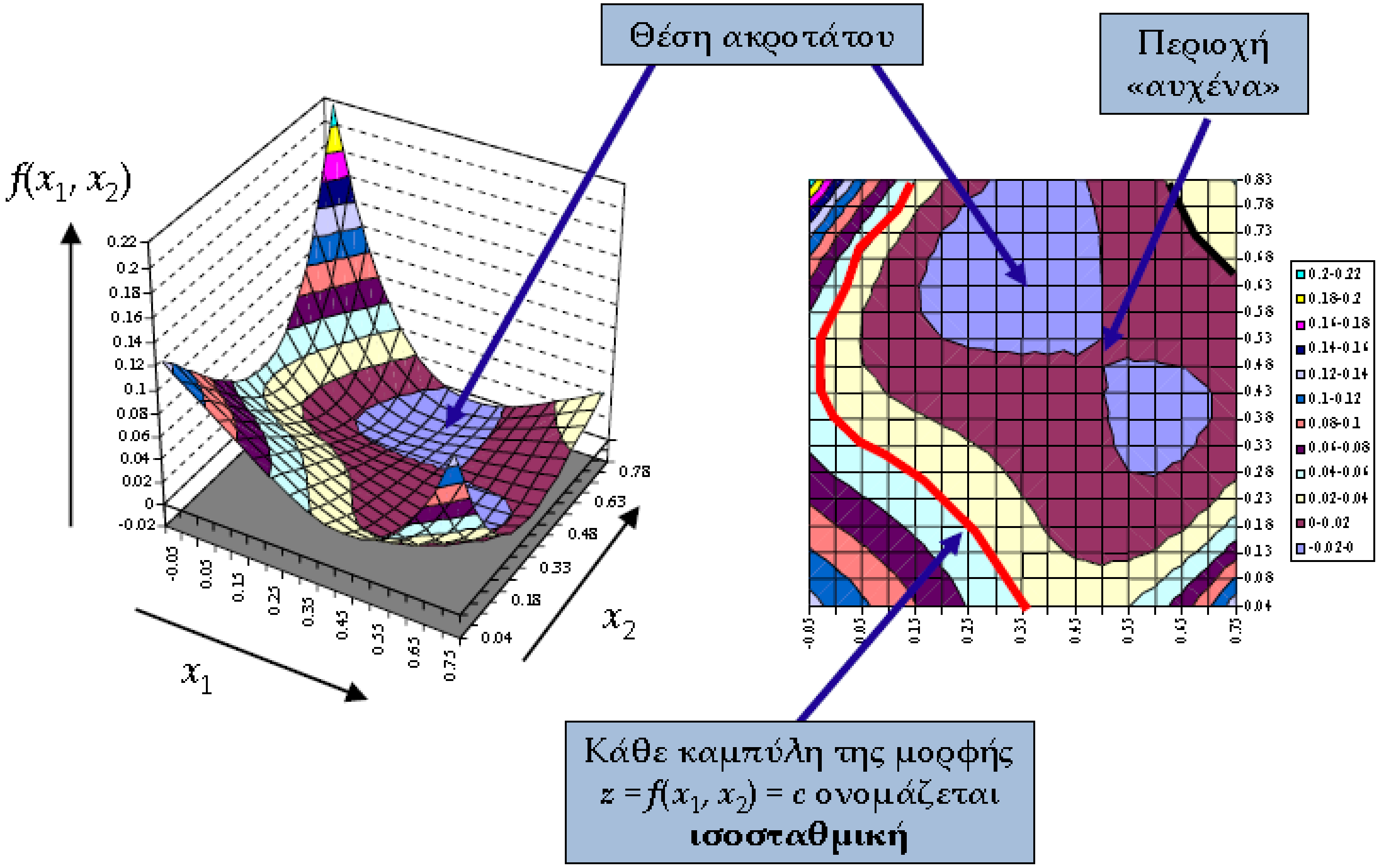
Συναρτήσεις πολλών μεταβλητών

- **Πραγματική συνάρτηση διανυσματικής μεταβλητής**: $f: R^n \rightarrow R$
- **Παράγωγος ως προς διάνυσμα** (της $f(\mathbf{x})$ ως προς **x**): $\frac{df}{dx} := \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right]$
- **Τελεστής «ανάδελτα»**: $\nabla := \left[\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right]^T$
- **Κλίση** ή **βαθμίδα** (gradient): grad(f): $\nabla f = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right]^T = \left(\frac{df}{dx}\right)^T$
- **Δεύτερη παράγωγος ως προς διάνυσμα:**

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\, \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1\, \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\, \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2\, \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n\, \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n\, \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

Η δεύτερη παράγωγος είναι συμμετρικό μητρώο, γνωστό ως *Εσσιανό* (Hessian)

Η έννοια της επιφάνειας απόκρισης



Πηγή: Α. Ευστρατιάδης, 2012. Θεμελιώδεις έννοιες βελτιστοποίησης και κλασικές μαθηματικές μέθοδοι. Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. (https://www.itia.ntua.gr/getfile/1109/2/documents/HydroInf_Maths_1.pdf)

Η έννοια της κυρτότητας

- Ενα *n*-διάστατο πεδίο *S* είναι κυρτό αν για κάθε ζεύγος σημείων $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\} \in S$ και για κάθε $\lambda \in [0, 1]$ ισχύει $\lambda \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2 \in S$.
- Η παραπάνω σχέση καλείται **κυρτός συνδυασμός** και υποδηλώνει ότι το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει οποιοδήποτε ζεύγος σημείων $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\} \in S$ κείται αποκλειστικά στο πεδίο. Αποδεικνύεται ότι:
  - η *τομή* δύο κυρτών πεδίων είναι εξ ορισμού κυρτό πεδίο
  - η *ένωση* δύο κυρτών πεδίων δεν είναι απαραίτητα κυρτό πεδίο
- Έστω συνάρτηση $f(\mathbf{x})$ ορισμένη στο κυρτό πεδίο $X \subseteq R^n$. Για κάθε ζεύγος σημείων $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\} \in X$ και για κάθε $\lambda \in [0, 1]$, η συνάρτηση *f* είναι:
  - **κυρτή** (convex) στο πεδίο X, εφόσον ισχύει:

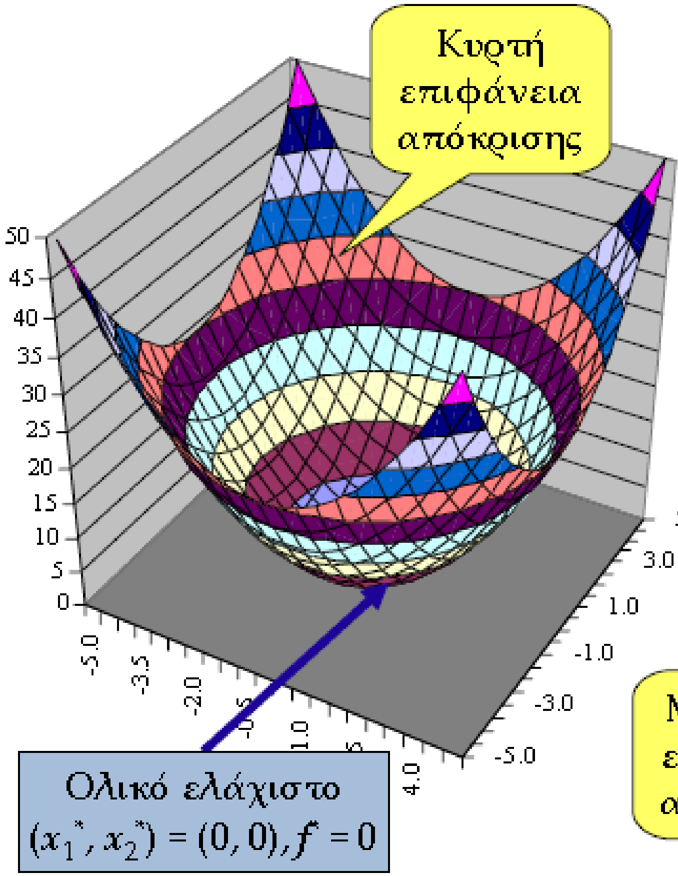
$$\lambda\, f(\mathbf{x}_1) + (1 - \lambda)\, f(\mathbf{x}_2) \geq f\,[\lambda\, \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\, \mathbf{x}_2]$$

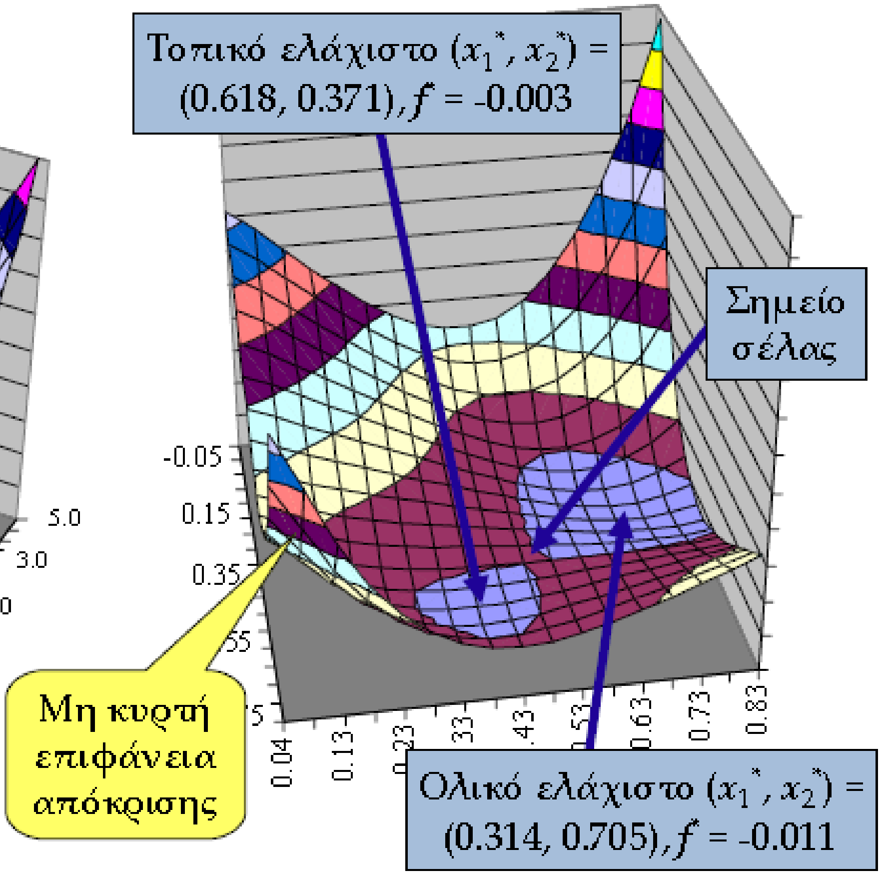
  - **κοίλη** (concave) στο πεδίο X, εφόσον ισχύει:

$$\lambda\, f(\mathbf{x}_1) + (1 - \lambda)\, f(\mathbf{x}_2) \leq f\,[\lambda\, \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\, \mathbf{x}_2]$$

  - **μη κυρτή** (non-convex) στο πεδίο *X*, σε κάθε άλλη περίπτωση.
- Αν η συνάρτηση *f* είναι κυρτή, το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει δύο τυχαία σημεία του *X* δεν βρίσκεται ποτέ κάτω από το γράφημά της, ενώ αν η *f* είναι κοίλη, το εν λόγω τμήμα δεν βρίσκεται ποτέ πάνω από το γράφημά της. Κάθε κυρτή συνάρτηση είναι εξ ορισμού συνεχής

Τοπικά και ολικά ακρότατα



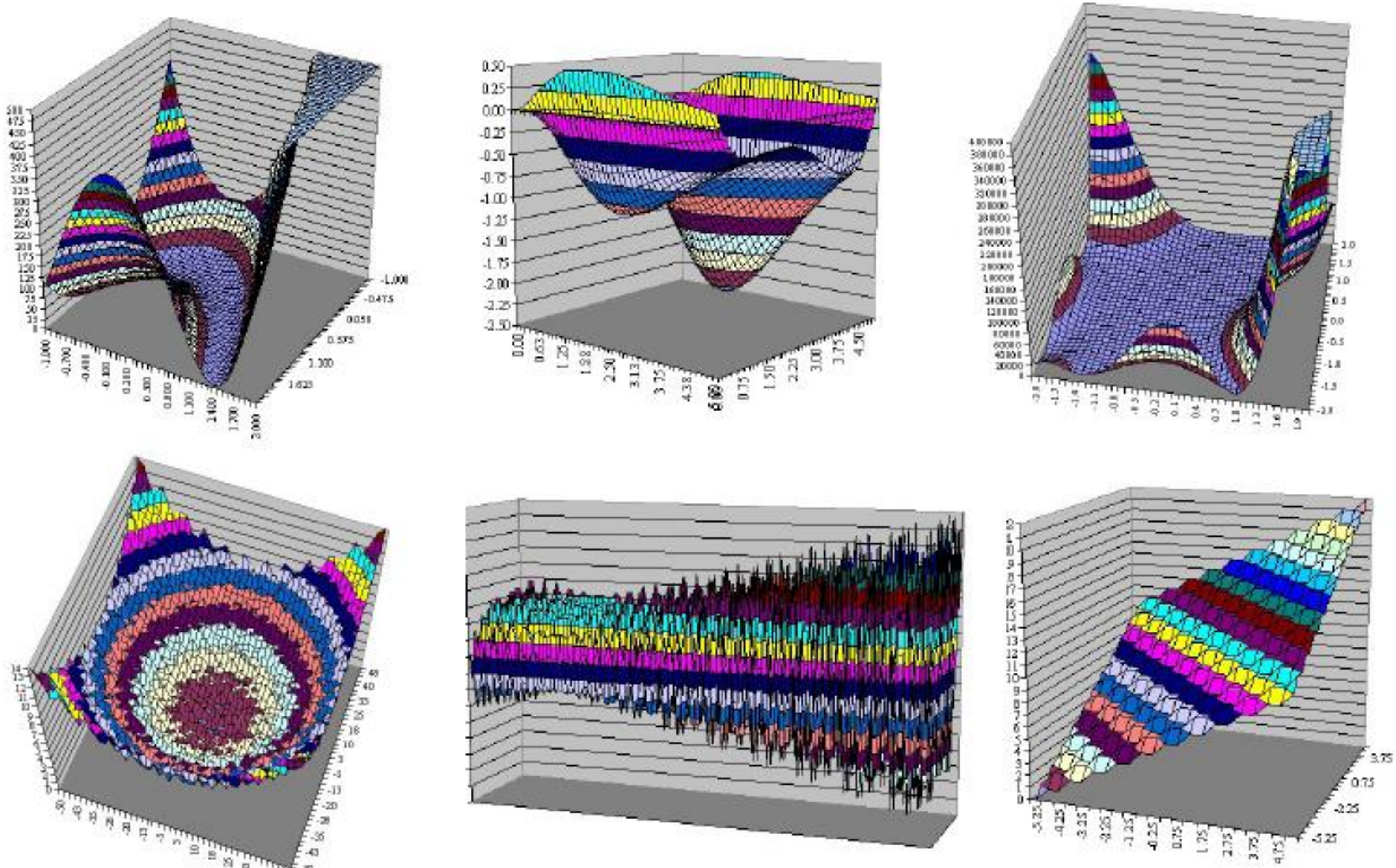


$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$$

$$f(x_1, x_2) = 0.5(1.1x_1 - x_2)^4 + 0.5(x_1 - 0.5)(x_2 - 0.5)$$

Πηγή: Α. Ευστρατιάδης, 2012. Θεμελιώδεις έννοιες βελτιστοποίησης και κλασικές μαθηματικές μέθοδοι. Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. (https://www.itia.ntua.gr/getfile/1109/2/documents/HydroInf_Maths_1.pdf)

Τυπικές μη κυρτές συναρτήσεις ελέγχου



Πηγή: Α. Ευστρατιάδης, 2012. Θεμελιώδεις έννοιες βελτιστοποίησης και κλασικές μαθηματικές μέθοδοι. Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
(https://www.itia.ntua.gr/getfile/1109/2/documents/HydroInf_Maths_1.pdf)

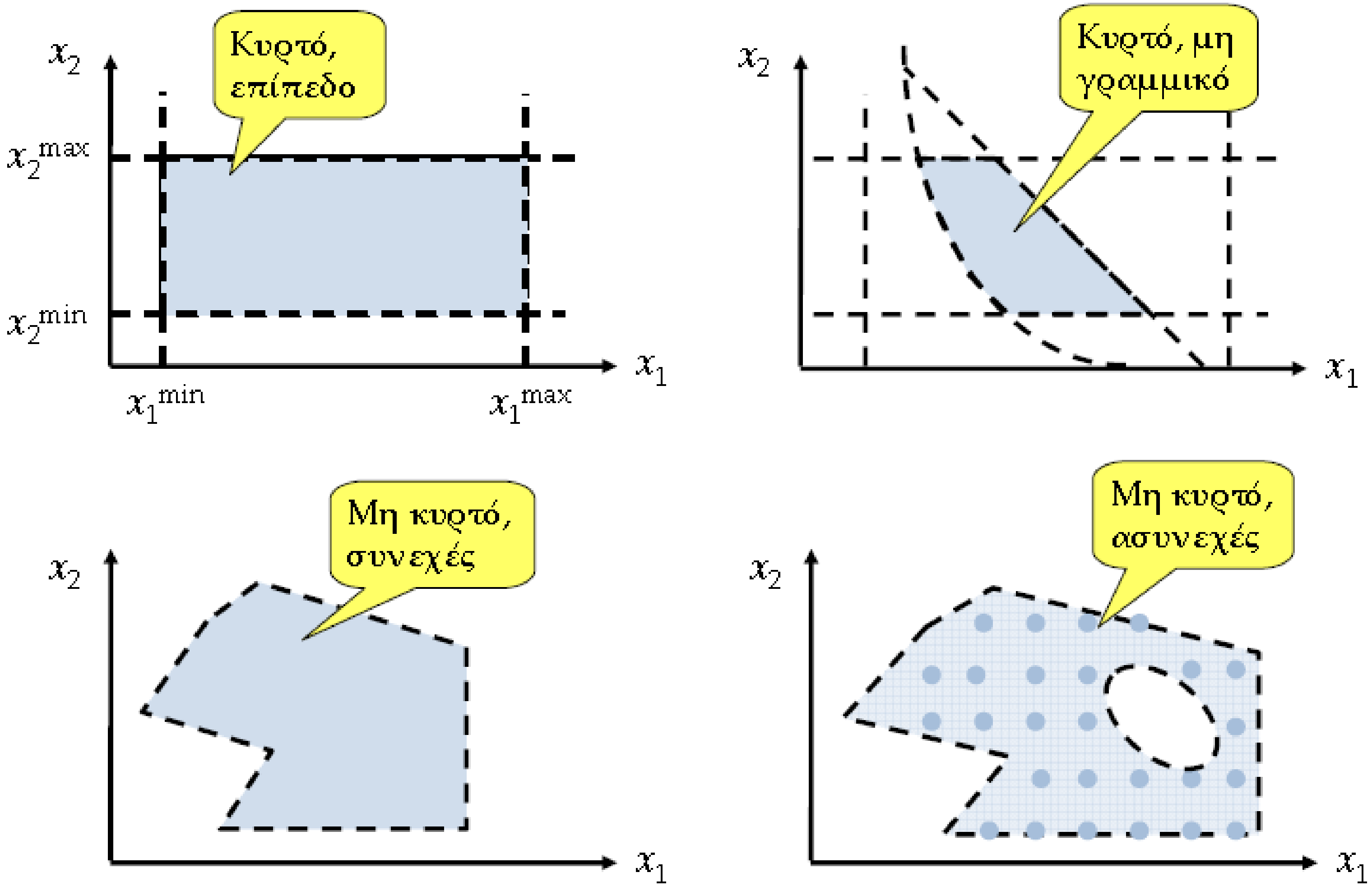
Βελτιστοποίηση υπό περιορισμούς

- Στη γενική περίπτωση, θεωρούμε ότι το πεδίο αναζήτησης $X \subseteq R^n$ περιγράφεται από μαθηματικούς περιορισμούς (constraints) της μορφής:

$$g(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq, =, \geq \geq 0$$

- Στα μοντέλα, οι σχέσεις ισότητας αντιπροσωπεύουν, κατά κανόνα, εξισώσεις διατήρησης μάζας ή ενέργειας, πρόκειται δηλαδή για αυστηρά διατυπωμένους περιορισμούς που απορρέουν από φυσικούς νόμους.
- Η απλούστερη κατηγορία περιορισμών είναι σχέσεις της μορφής $l \leq x \leq u$, που εκφράζουν όρια διακύμανσης παραμέτρων ή περιορισμούς χωρητικότητας. Οι περιορισμοί ορίου αναφέρονται στην βιβλιογραφία ως ρητοί (explicit).
- Ειδικές κατηγορίες περιορισμών:
  - περιορισμοί ακεραιότητας (integrity), οι οποίοι αναφέρονται σε μεταβλητές ελέγχου που λαμβάνουν αποκλειστικά ακέραιες τιμές
  - περιορισμοί δυαδικότητας (boolean), όπου $X = \{0, 1\}$, με την τιμή $x = 0$ να αντιστοιχεί σε άρνηση (false) ενώ η τιμή $x = 1$ υποδηλώνει κατάφαση (true)
  - τελεστές ή λογικές εκφράσεις, όπως “if…then…else”, “and”, “or”, οι οποίοι κωδικοποιούνται μόνο σε γλώσσα υπολογιστή·
  - αριθμήσιμα σύνολα τιμών που υποδηλώνουν «διαθέσιμες» επιλογές (π.χ. σύνολα διαμέτρων εμπορίου σε προβλήματα βελτιστοποίησης δικτύων).

Παραδείγματα περιορισμών – εφικτών πεδίων



Πηγή: Α. Ευστρατιάδης, 2012. Θεμελιώδεις έννοιες βελτιστοποίησης και κλασικές μαθηματικές μέθοδοι. Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
(https://www.itia.ntua.gr/getfile/1109/2/documents/HydroInf_Maths_1.pdf)

Χειρισμός περιορισμών με συναρτήσεις ποινής

- Στη γενική περίπτωση, θεωρούμε ότι το πεδίο αναζήτησης $X \subseteq R^n$ περιγράφεται από μαθηματικούς περιορισμούς (constraints) της μορφής:

$$g(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq, =, \geq \geq 0$$

- Στα μοντέλα, οι σχέσεις ισότητας αντιπροσωπεύουν, κατά κανόνα, εξισώσεις διατήρησης μάζας ή ενέργειας, πρόκειται δηλαδή για αυστηρά διατυπωμένους περιορισμούς που απορρέουν από φυσικούς νόμους.
- Η απλούστερη κατηγορία περιορισμών είναι σχέσεις της μορφής $l \leq x \leq u$, που εκφράζουν όρια διακύμανσης παραμέτρων ή περιορισμούς χωρητικότητας. Οι περιορισμοί ορίου αναφέρονται στην βιβλιογραφία ως ρητοί (explicit).
- Ειδικές κατηγορίες περιορισμών:
  - περιορισμοί ακεραιότητας (integrity), οι οποίοι αναφέρονται σε μεταβλητές ελέγχου που λαμβάνουν αποκλειστικά ακέραιες τιμές
  - περιορισμοί δυαδικότητας (boolean), όπου $X = \{0, 1\}$, με την τιμή $x = 0$ να αντιστοιχεί σε άρνηση (false) ενώ η τιμή $x = 1$ υποδηλώνει κατάφαση (true)
  - τελεστές ή λογικές εκφράσεις, όπως “if…then…else”, “and”, “or”, οι οποίοι κωδικοποιούνται μόνο σε γλώσσα υπολογιστή·
  - αριθμήσιμα σύνολα τιμών που υποδηλώνουν «διαθέσιμες» επιλογές (π.χ. σύνολα διαμέτρων εμπορίου σε προβλήματα βελτιστοποίησης δικτύων).

Μαθηματική διατύπωση προβλημάτων γραμμικής βελτιστοποίησης

- Γενική διατύπωση προβλήματος:

  minimize / maximize $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, όπου $\mathbf{x} \in X$.

- Απαιτήσεις γραμμικής βελτιστοποίησης:
  - Γραμμική στοχική συνάρτηση:

    $$f(\mathbf{x}) = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \ldots + c_n x_n$$

  - Γραμμικοί περιορισμοί:

    $$g_{\mathrm{i}}(\mathbf{x}) = a_{i1} x_1 + a_{i2} x_2 + \ldots + a_{in} x_n \leq b_i \ \forall\ i = 1, \ldots, m$$

  - Συνεχείς και μη αρνητικές μεταβλητές ελέγχου:

    $$x_j \geq 0 \ \forall\ j = 1, \ldots, n$$

- Μητρωική διατύπωση:

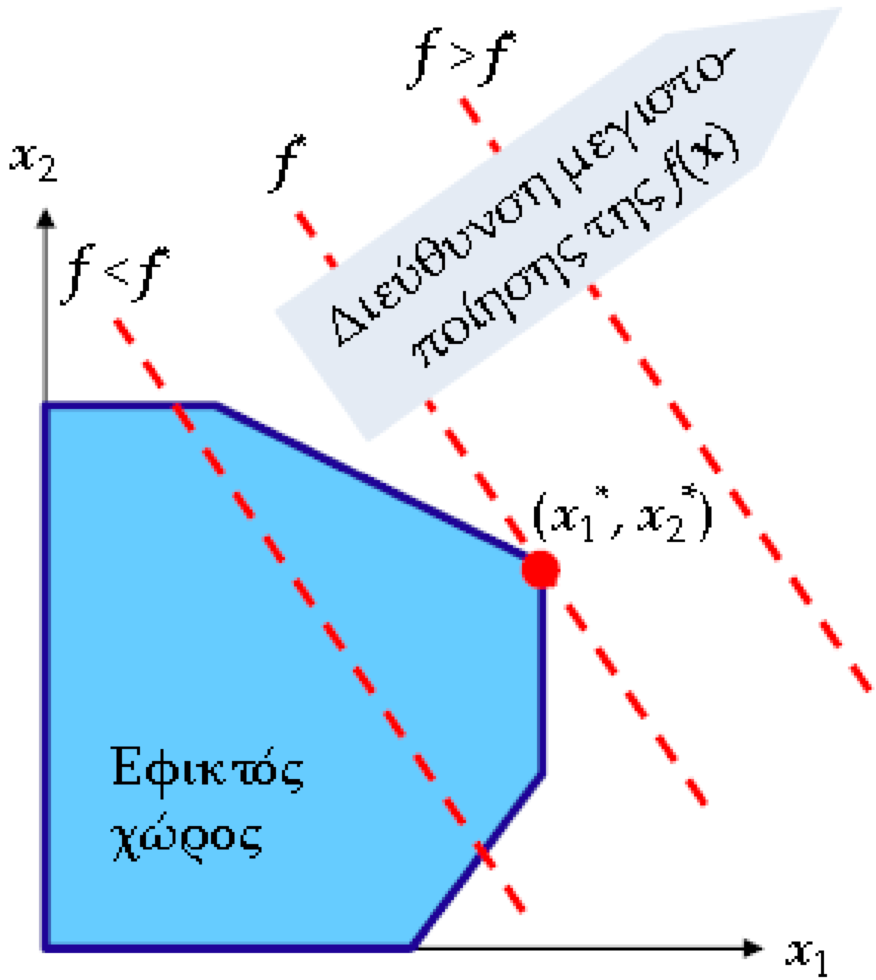
$$\begin{array}{ll} \text{minimize / maximize} & f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ \text{subject to} & \mathbf{A}\,\mathbf{x} \leq \mathbf{b} \\ & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array}$$

όπου **x**: n × 1 διάνυσμα μεταβλητών ελέγχου,
c: n × 1 διάνυσμα συντελεστών,
A: m × n μητρώο συντελεστών,
b: m × 1 διάνυσμα συντελεστών, και
0: n × 1 μηδενικό διάνυσμα.

Γεωμετρική ερμηνεία

- Ο εφικτός χώρος που ορίζουν οι περιορισμοί **A x** ≤ **b** και **x** ≥ 0 ένα *n*-διάστατο κυρτό γεωμετρικό σχήμα (πολύεδρο), με πλήθος ακμών ίσο με $m + n$.
- Οι λύσεις που βρίσκονται στις κορυφές του πολυέδρου υπολογίζονται από την επίλυση όλων των συνδυασμών συστημάτων των *n* μεταβλητών ελέγχου και των $m + n$ περιορισμών, απ’ όπου προκύπτουν $q = (m + n)! / (m!\, n!)$ σημεία.
- Ισχύουν οι ακόλουθες θεμελιώδεις ιδιότητες:
  - Ο αριθμός των εφικτών λύσεων (κορυφές πολυέδρου) είναι πεπερασμένος.
  - Αν υπάρχει μοναδική βέλτιστη λύση, αυτή βρίσκεται σε μια κορυφή του πολυέδρου, ήτοι στην τομή κάποιων περιορισμών.
  - Αν μια εφικτή λύση ακραίου σημείου είναι καλύτερη από όλες τις γειτονικές της, τότε είναι η βέλτιστη του προβλήματος.
- **Παρατήρηση**: Αν και ο αριθμός των κορυφών του χώρου πολιτικής είναι πεπερασμένος, η αναζήτησή τους μέσω απαρίθμησής τους είναι πρακτικά αδύνατη (π.χ. για $n = m = 20$, q ~ 1011).

Γεωμετρική ερμηνεία



Μέθοδος simplex: Ορισμοί και παραδοχές

- Αναζητά διαδοχικά καλύτερες εφικτές λύσεις του προβλήματος, μεταβαίνοντας από κορυφή σε κορυφή του εφικτού χώρου, μέχρι τον εντοπισμό της βέλτιστης.
- Το πρόβλημα αναδιατυπώνεται στην ακόλουθη τυπική μορφή (standard form), με την προσθήκη μιας *μεταβλητής απόκλισης* (slack variable) για κάθε περιορισμό:

$$\text{maximize } z = f(\mathbf{x}) = c_1x_1 + c_2x_2 + \ldots + c_nx_n$$

$$\text{s.t.} \quad a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots + a_{in}x_n + x_{n+i} = b_i \; \forall \; i = 1, \ldots, m$$

$$x_j \geq \mathbf{0} \; \forall \; j = 1, \ldots, n + m$$

- Οι μεταβλητές απόκλισης x_{n+i} εκφράζουν τις αποστάσεις από τους αντίστοιχους περιορισμούς τύπου ≤. Κάθε διάνυσμα $(x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}, \ldots, x_{n+m})$ που ικανοποιεί τους εξισωτικούς, πλέον, περιορισμούς καλείται επαυξημένο (augmented). Κάθε επαυξημένο διάνυσμα που κείται σε κορυφή του εφικτού χώρου καλείται βασικό (basic) διάνυσμα, και περιλαμβάνει εξ ορισμού *n* μηδενικά και *m* μη μηδενικά στοιχεία, που καλούνται μη βασικές και βασικές μεταβλητές, αντίστοιχα.
- Ο αλγόριθμος διαρθρώνεται ως εξής:
  - **Αρχικοποίηση**: Επιλογή σημείου εκκίνησης $\mathbf{x}^{[0]}$ (βασική λύση)
  - **Επαναληπτικός κύκλος**: Αντικατάσταση μιας εφικτής ακραίας (βασικής) λύσης $\mathbf{x}^{[k]}$ από μια γειτονική $x^{[k+1]}$, τέτοια ώστε $f(\mathbf{x}^{[k+1]}) \geq f(\mathbf{x}^{[k]})$
  - **Έλεγχος τερματισμού**: Αναγνώριση βέλτιστης λύσης

Μέθοδος simplex: Επιλογή σημείου εκκίνησης

- Ως σημείο εκκίνησης της διαδικασία αναζήτησης μπορεί να ληφθεί οποιαδήποτε κορυφή του εφικτού χώρου, δηλαδή οποιαδήποτε βασική λύση του προβλήματος.
- Αν $b_i \geq 0$ για κάθε περιορισμό i, τότε ως σημείο εκκίνησης λαμβάνεται η αρχή των αξόνων, οπότε ισχύει:

  $x_j = 0 \ \forall \ j = 1, \ldots, n$ (μεταβλητές ελέγχου - μη βασικές)

  $x_{n+i} = b_i \ \forall \ i = 1, \ldots, m$ (μεταβλητές απόκλισης - βασικές)

  $z = 0$ (αρχική τιμή στοχικής συνάρτησης)

- Αν $b_i < 0$ για έναν τουλάχιστο περιορισμό i, τότε το διάνυσμα $(0, \ldots, 0, b_1, \ldots, b_m)$ είναι μη εφικτό (αφού μία τουλάχιστον μεταβλητή απόκλισης είναι αρνητική). Στην περίπτωση αυτή ακολουθείται ειδική μεθοδολογία, γνωστή ως μέθοδος δύο φάσεων (two-phase simplex method), κατά την οποία εντοπίζεται αρχικά μια κατάλληλη βασική λύση, που στη συνέχεια χρησιμοποιείται ως σημείο εκκίνησης για την επίλυση του αρχικού προβλήματος.
- **Παρατήρηση**: Περιορισμοί της μορφής $a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots + a_{in}x_n \geq b_i$ γράφονται στην ισοδύναμη μορφή $-a_{i1}x_1 - a_{i2}x_2 - \ldots - a_{in}x_n \leq -b_i$, ώστε να είναι συνεπείς με την τυπική διατύπωση του προβλήματος. Στην περίπτωση αυτή, ο όρος στο δεξί μέλος του περιορισμού γίνεται αρνητικός, οπότε εφαρμόζεται η μέθοδος των δύο φάσεων για τον εντοπισμό της αρχικής βασικής λύσης.

Μέθοδος simplex: Επαναληπτική διαδικασία

- Αναζητείται μια νέα βασική λύση που προκύπτει με την αντικατάσταση μιας τρέχουσας βασικής μεταβλητής (*εξερχόμενη μεταβλητή*, x_1) από μια μη βασική (*εισερχόμενη μεταβλητή*, x_e), δηλαδή με μετάβαση από την τρέχουσα κορυφή του εφικτού χώρου σε μια γειτονική.
- **Επιλογή εισερχόμενης μεταβλητής**: Μεταξύ του συνόλου των μη βασικών μεταβλητών που μπορούν να βελτιώσουν την τιμή της συνάρτησης, δηλαδή των x_j με μηδενική τρέχουσα τιμή και θετική μοναδιαία αξία, επιλέγεται η μεταβλητή x_e με τη μέγιστη μοναδιαία αξία.
- **Επιλογή εξερχόμενης μεταβλητής**: Κάθε περιοριστική εξίσωση $i = 1, \ldots, m$ επιλύεται ως προς την εισερχόμενη μεταβλητή x_e, μηδενίζοντας την τρέχουσα βασική μεταβλητή x_i. Από τις m τιμές της x_e, επιλέγεται αυτή που εξασφαλίζει μη αρνητικές τιμές για το σύνολο των λοιπών βασικών μεταβλητών. Ισοδύναμα, επιλέγεται η μεταβλητή x_i που τείνει γρηγορότερα προς το μηδέν καθώς αυξάνει η τιμή της εισερχόμενης μεταβλητής x_e, ήτοι αυτή για την οποία $b_i / \alpha_{ie} = \min$
- Αναδιατύπωση προβλήματος: Διαμορφώνεται μια ισοδύναμη μορφή του προβλήματος, αντικαθιστώντας την εισερχόμενη μεταβλητή σε όλες τις αλγεβρικές σχέσεις (στοχική συνάρτηση και εξισωτικοί περιορισμοί) από έναν γραμμικό συνδυασμό των μη βασικών μεταβλητών.

Μέθοδος simplex: Παρατηρήσεις

- Το κριτήριο επιλογής της εισερχόμενης μεταβλητής, με βάση τη μέγιστη μοναδιαία αξία, δεν εξασφαλίζει την ταχύτερη βελτίωση της στοχικής συνάρτησης, καθώς δεν λαμβάνονται υπόψη οι περιορισμοί.
- Αν περισσότερες από μία μη βασικές μεταβλητές ικανοποιούν το κριτήριο εξόδου, η επιλογή της εισερχόμενης μεταβλητής γίνεται αυθαίρετα, καθώς δεν είναι δυνατό να εντοπιστεί εκ των προτέρων (χωρίς επίλυση των περιορισμών) η μέγιστη βελτίωση της συνάρτησης, δηλαδή η ταχύτερη διαδρομή.
- Αν καμία μη βασική μεταβλητή δεν ικανοποιεί το εν λόγω κριτήριο εισόδου, τότε δεν μπορεί να αυξηθεί περαιτέρω η τιμή της συνάρτησης και η τρέχουσα λύση είναι η ***βέλτιστη***.
- Αν περισσότερες από μία βασικές μεταβλητές ικανοποιούν το κριτήριο εξόδου, οποιαδήποτε μπορεί να ληφθεί ως εξερχόμενη (και να λάβει εξ ορισμού μηδενική τιμή), ενώ και οι υπόλοιπες θα πρέπει να λάβουν μηδενική τιμή, οπότε καλούνται εκφυλισμένες (*degenerated*). Η περίπτωση αυτή συχνά οδηγεί σε ανακύκλωση των βασικών λύσεων, και συνεπώς εγκλωβισμό του αλγορίθμου.
- Αν καμία βασική μεταβλητή δεν ικανοποιεί το κριτήριο εξόδου, η εισερχόμενη μεταβλητή μπορεί να αυξηθεί απεριόριστα, δηλαδή δεν υπάρχει άνω όριο στην τιμή της στοχικής συνάρτησης.

Μέθοδος simplex: Γραφική Μέθοδος

- Maximize $Z = f(x,y) = 3x + 2y$

subject to: $2x + y \leq 18$

$2x + 3y \leq 42$

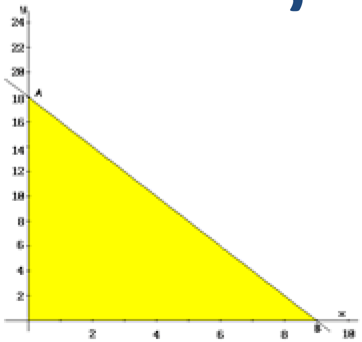
$3x + y \leq 24$

$x \geq 0 , y \geq 0$

Μέθοδος simplex: Γραφική Μέθοδος

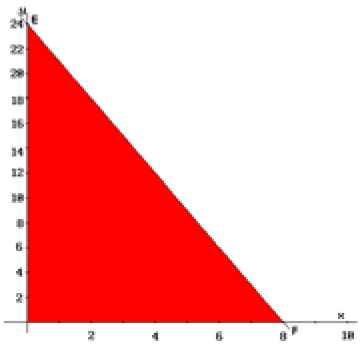
1ος Περιορισμός

$2x + y \leq 18$



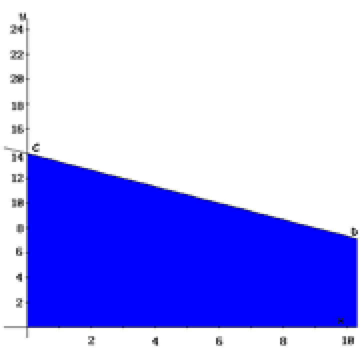
3ος Περιορισμός

$3x + y \leq 24$



2ος Περιορισμός

$2x + 3y \leq 42$



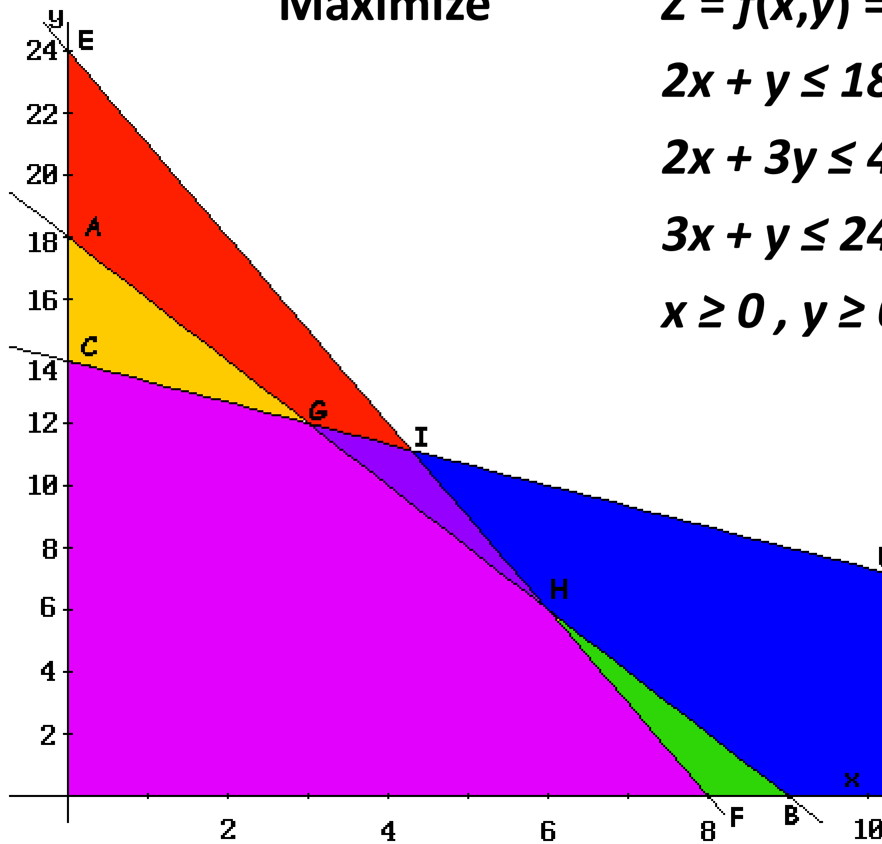
Maximize $\quad Z = f(x,y) = 3x + 2y$

$2x + y \leq 18$

$2x + 3y \leq 42$

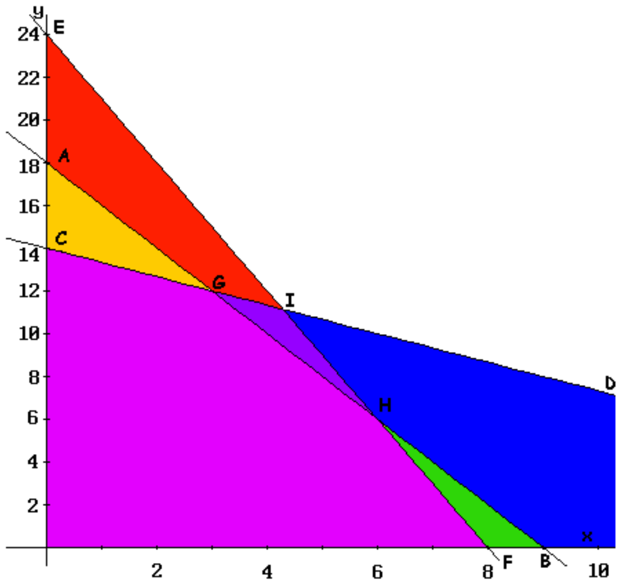
$3x + y \leq 24$

$x \geq 0 \,,\, y \geq 0$



Μέθοδος simplex: Γραφική Μέθοδος

- Επειδή ο εφικτός χώρος (feasible region) δεν είναι άδειος, υπολογίζουμε τις κορυφές του πολυέδρου ως πιθανές λύσεις του συστήματος: O-F-H-G-C
- Υπολογίζουμε την στοχική (αντικειμενική) συνάρτιση ($3x+2y$) στα σημεία (κορυφές) αυτά:



Extreme point	**Coordinates (x,y)**	**Objective value(Z)**
O	(0,0)	0
C	(0,14)	28
G	(3,12)	**33**
H	(6,6)	30
F	(8,0)	24

- Πρόβλημα μεγιστοποίησης στοχικής συνάρτησης. Αρα το σημείο G δίνει το μέγιστη τιμή στη Συνάρτηση Z → βέλτιστη λύση με ***x* = 3 και *y* = 12**

Εφαρμογή Μεθόδου Simplex
Άσκηση – Παράδοση Άσκησης

- Υπολογίστε με τη μέθοδο Simplex
  το παρακάτω πρόβλημα βελτιστοποίησης

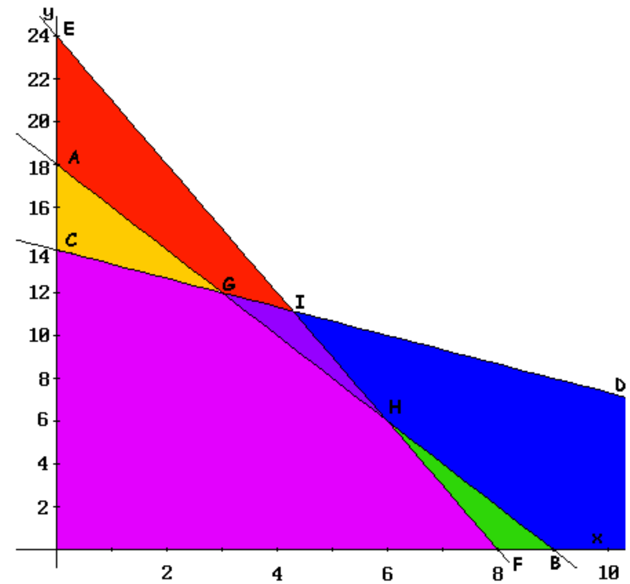
Maximize $Z = f(x,y) = 3x + 2y$

subject to: $2x + y \leq 18$

$2x + 3y \leq 42$

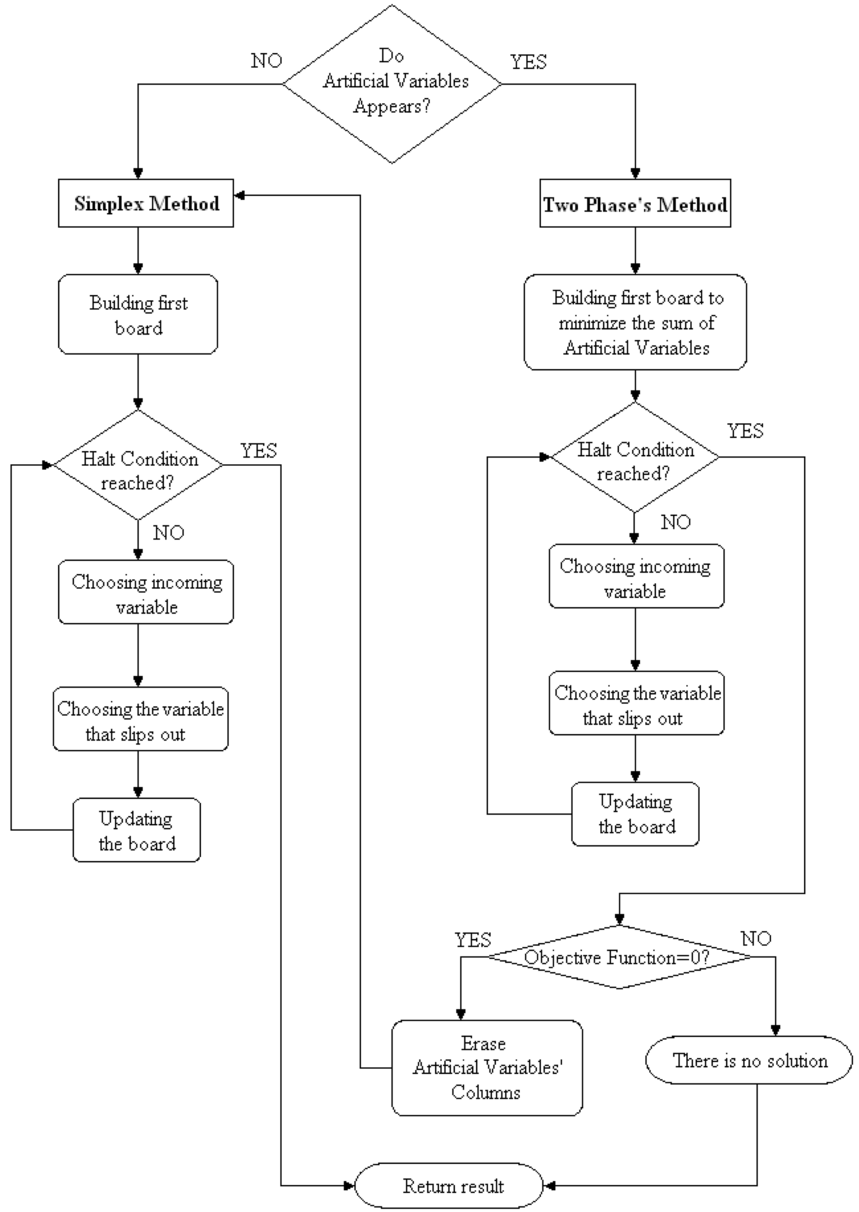
$3x + y \leq 24$

$x \geq 0\ ,\ y \geq 0$



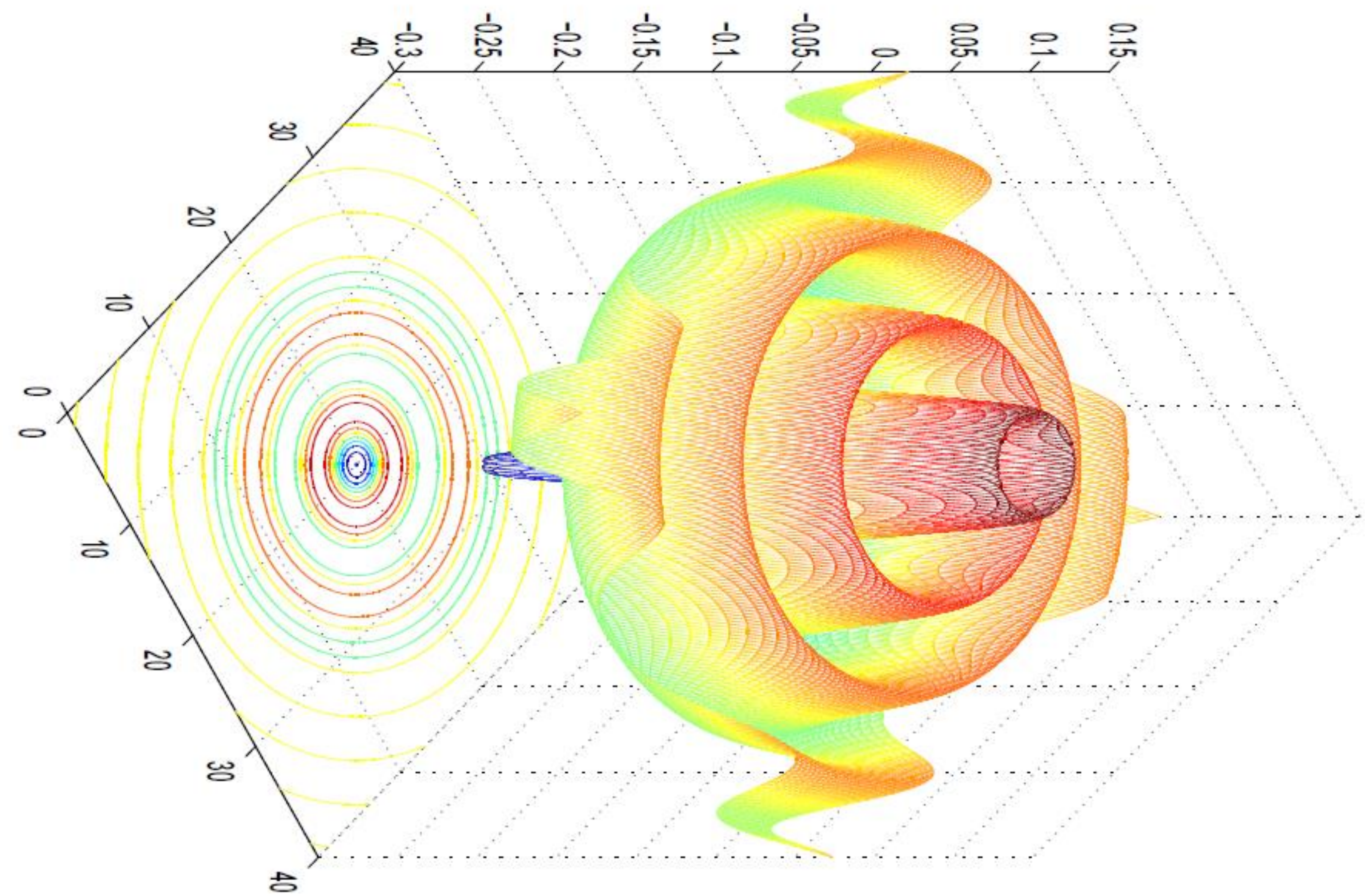
Σχολιάστε τα βήματα υπολογισμού της μεθόδου Simplex σε σχέση με την επίλυση της γραφικής μεθόδου.

Μέθοδος simplex: Διάγραμμα Ροής



Μέθοδος simplex: Γραφική Μέθοδος

$R = \sqrt{(x-20)^2 + (y-20)^2}$ **and** $z = (sin(R+4))/(R+4)$.



Μέθοδος simplex: Χρήση Πινάκων

Μαθηματικό Πρόβλημα

Maximize z

Subject to:

$$
\begin{array}{rrrrrrrcrr}
z & -4x_1 & -3x_2 & & & & & = & 0 & (0) \\
 & 2x_1 & +3x_2 & +s_1 & & & & = & 6 & (1) \\
 & -3x_1 & +2x_2 & & +s_2 & & & = & 3 & (2) \\
 & & 2x_2 & & & +s_3 & & = & 5 & (3) \\
 & 2x_1 & +x_2 & & & & +s_4 & = & 4 & (4)
\end{array}
$$

$$x_1,\, x_2,\, s_1,\, s_2,\, s_3,\, s_4 \geq 0\,.$$

Συντελεστές μεταβλητών (αριστερό μέρος και δεξιό μέρος (RHS)

	z	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	s_4	RHS
R_0 :	1	−4	−3	0	0	0	0	0
R_1 :	0	2	3	1	0	0	0	6
R_2 :	0	−3	2	0	1	0	0	3
R_3 :	0	0	2	0	0	1	0	5
R_4 :	0	2	1	0	0	0	1	4

Μέθοδος simplex: Χρήση Πινάκων

Αρχικός Πίνακας,

Μη-βασικές μεταβλητές: x_1 και x_2

Βασικές μεταβλητές: s_1, s_2, s_3, and s_4.

Αρχικό πρόβλημα βελτιστοποίσης: $(x_1; x_2; s_1; s_2; s_3; s_4) = (0; 0; 6; 3; 5; 4)$

με αρχική τιμή βελτιστοποίησης = 0.

Γραμμή R_0. Συντελεστές x_1 and x_2 αρνητικοί,→ αρχική λύση όχι βέλτιστη.

Ποια η εισερχόμενη μεταβλητή?

The Simplex Method in Tabular Form

Do a Ratio test to find maximum possible increase in x_1.

Basic Variable	z	$\mathbf{x_1}$	x_2	s_1	s_2	s_3	s_4	RHS	Ratio Test	
	1	**-4**	-3	0	0	0	0	0		
s_1	0	**2**	3	1	0	0	0	6	$6/2 = 3$	
s_2	0	**-3**	2	0	1	0	0	3	$-$	
s_3	0	**0**	2	0	0	1	0	5	$-$	
s_4	0	**2**	1	0	0	0	1	4	$4/2 = 2$	$\leftarrow$ Minimum

We did not compute a ratio for R_2 and R_3, why?

s_4 is leaving, we call R_4 the **pivot row**. **Pivot element**?

Μέθοδος simplex: Χρήση Πινάκων

The Simplex Method in Tabular Form

The new basis will be x_1, s_1, s_2, and s_3. Need a new tableau in the configuration specified below.

Basic Variable	z	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	s_4	RHS
	1	0	?	0	0	0	?	?
s_1	0	0	?	1	0	0	?	?
s_2	0	0	?	0	1	0	?	?
s_3	0	0	?	0	0	1	?	?
x_1	0	1	?	0	0	0	?	?

To create this target tableau, we will employ row operations.

	z	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	s_4	RHS
$2 \cdot R_4 + R_0$:	1	0	-1	0	0	0	2	8
$(-1) \cdot R_4 + R_1$:	0	0	2	1	0	0	-1	2
$(3/2) \cdot R_4 + R_2$:	0	0	$7/2$	0	1	0	$3/2$	9
$0 \cdot R_4 + R_3$:	0	0	2	0	0	1	0	5
$(1/2) \cdot R_4$:	0	1	$1/2$	0	0	0	$1/2$	2

Μέθοδος simplex: Χρήση Πινάκων

The Simplex Method in Tabular Form

The new basis: x_1, s_1, s_2, and s_3. The new bfs: $(x_1, x_2, s_1, s_2, s_3, s_4) = (2, 0, 2, 9, 5, 0)$. The new objective value 8. Should I stay or should I go?

x_2 is now the entering variable, the x_2-column is the new pivot column. To determine the pivot row, we again conduct a ratio test.

Basic Variable	z	x_1	$\mathbf{x_2}$	s_1	s_2	s_3	s_4	RHS	Ratio Test	
	1	0	**-1**	0	0	0	2	8		
s_1	0	0	**2**	1	0	0	-1	2	$2/2 = 1$	$\leftarrow$ Minimum
s_2	0	0	**7/2**	0	1	0	$3/2$	9	$9/(7/2) = 18/7$	
s_3	0	0	**2**	0	0	1	0	5	$5/2$	
x_1	0	1	**1/2**	0	0	0	$1/2$	2	$2/(1/2) = 4$	

This shows that the new pivot row will be R_1, and s_1, will be the leaving variable.

Μέθοδος simplex: Χρήση Πινάκων
The Simplex Method in Tabular Form

With the entry 2 (Which?) as the pivot element, we now go through another set of row operations to obtain the new tableau below.

	z	x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	s_4	RHS
$(1/2) \cdot R_1 + R_0$:	1	0	0	$1/2$	0	0	$3/2$	9
$(1/2) \cdot R_1$:	0	0	1	$1/2$	0	0	$-1/2$	1
$(-7/4) \cdot R_1 + R_2$:	0	0	0	$-7/4$	1	0	$13/4$	$11/2$
$(-1) \cdot R_1 + R_3$:	0	0	0	-1	0	1	1	3
$(-1/4) \cdot R_1 + R_4$:	0	1	0	$-1/4$	0	0	$3/4$	$3/2$

The bfs associated with this new tableau is $(3/2, 1, 0, 11/2, 3, 0)$, with a corresponding objective-function value of 9. Should I stay or should I go?

Remarks

1. What, if the entering variable column (printed in **boldface**) has no positive coefficient? No ratio test can be performed!

Δυαδική θεωρία γραμμικού προγραμματισμού

- Για κάθε πρωτεύον (primal) πρόβλημα ΓΠ μπορεί να διατυπωθεί ένα αντίστοιχο δυαδικό (dual), μεταξύ των οποίων ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις:

	Πρωτεύον	**Δυαδικό**
Μεταβλητές ελέγχου	x_j	y_i
Αριθμός μεταβλητών	n	m
Αριθμός περιορισμών	m	n
Στόχος	maximize	minimize
Συντελεστές στοχικής συνάρτησης	c_j	b_i
Περιορισμοί	$\mathbf{A\,x \le b}$	$\mathbf{A^T\,y \ge c}$

- Θεμελιώδες θεώρημα: Αν το πρωτεύον πρόβλημα έχει μια βέλτιστη λύση (x_1*, x_2*, . . . , x_n*), τότε το δυαδικό του έχει μια βέλτιστη λύση (y_1*, y_2*, . . . , y_m*) τέτοια ώστε:

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j^* = \sum_{i=1}^{m} b_i y_i^*$$

σκιώδεις τιμές

- Παρατήρηση: Στη μέθοδο simplex, το πλήθος των επαναλήψεων είναι ανάλογο του αριθμού των περιορισμών m (διπλάσιο ως τριπλάσιο), ενώ παραμένει σχετικά αδιάφορο έναντι του πλήθους των μεταβλητών n. Εφόσον m > n, επιτυγχάνεται σημαντική μείωση του υπολογιστικού φόρτου με επίλυση του δυαδικού αντί του πρωτεύοντος προβλήματος.

Εφαρμογή: Εκτίμηση μεγεθών ταμιευτήρα

- **Ζητούμενο**: Προσδιορισμός ελάχιστης ωφέλιμης χωρητικότητας k, ταμιευτήρα, ώστε να ικανοποιείται μια σταθερή ζήτηση d, με δεδομένη χρονοσειρά εισροών i_t για ένα χρονικό ορίζοντα ελέγχου, μήκους n, και δεδομένο αρχικό απόθεμα s_0
- **Μεταβλητές ελέγχου**: Ωφέλιμη χωρητικότητα k, ωφέλιμο απόθεμα s_t, εκροές λόγω υπερχείλισης w_t, για το σύνολο του ορίζοντα ελέγχου ($2n + 1$ μεταβλητές)
- **Μαθηματική διατύπωση ως πρόβλημα ΓΠ**:

minimize $z = k$

subject to $s_t = s_{t-1} + i_t - d - w_t$ για κάθε $t = 1, \ldots, n$ (υδατικό ισοζύγιο)

$s_t \leq k$ για κάθε $t = 1, \ldots, n$

$s_n = s_0$ (πρόβλημα μόνιμων συνθηκών - steady state)

$k, s_t, w_t \geq 0$

- **Εναλλακτική διατύπωση**: Γνωστή η χωρητικότητα k, άγνωστη η ζήτηση d (πρόβλημα μεγιστοποίησης, maximize z = d)
- **Μειονεκτήματα**:
  - Πολύ μεγάλος αριθμός μεταβλητών ελέγχου
  - Αδυναμία χειρισμού μη γραμμικών σχέσεων
  - Πλήρως ντετερμινιστική θεώρηση – απουσιάζει η έννοια της αξιοπιστίας

Μεθοδολογίες Βελτιστοποίησης

- Δεν υπάρχει ένας γενικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης ο οποίος μπορεί να εφαρμοστεί και να επιλύσει την πλειονότητα των προβλημάτων με τα οποία ασχολείται ο κλάδος της επιχειρησιακής έρευνας
- Σε προβλήματα βελτιστοποίησης υδρολογικών μοντέλων και συστημάτων βροχής – απορροής καθώς και διαχείρισης υδατικών πόρων η **επιλογή** του κατάλληλου αλγόριθμου βελτιστοποίησης εξαρτάται από:
  - **τα χαρακτηριστικά του φυσικού συστήματος** (π.χ. λεκάνη απορροής, υδροταμιευτήρας, υπόγειος υδροφορέας),
  - **τη διαθεσιμότητα δεδομένων και στοιχείων,**
  - **τους αντικειμενικούς στόχους του προβλήματος καθώς και**
  - **τους κάθε είδους περιορισμούς**

Μεθοδολογίες Βελτιστοποίησης

- **Γραμμικός Προγραμματισμός (Linear Programming):** οι μαθηματικές σχέσεις που περιγράφουν: α) το φυσικό σύστημα (π.χ. απορροή σε υδρολογική λεκάνη) και β) διαχειριστικό πρόβλημα (π.χ. αντικειμενική συνάρτηση, περιορισμοί) του προβλήματος είναι **γραμμικές**.
  - δίνονται γρήγορα ενδεικτικές λύσεις για τους λήπτες αποφάσεων
  - Υπεραπλούστευση του φαινομένου

- **Μη-Γραμμικός Προγραμματισμός (Non-linear Programming):** Υπάρχει έστω και μία από τις μαθηματικές σχέσεις οι οποίες περιγράφουν α) το φυσικό σύστημα (π.χ. λεκάνη απορροής) και το β) διαχειριστικό πρόβλημα (π.χ. κόστος εγκατάστασης) που είναι μη-γραμμικής μορφής.
  - Η μη-γραμμική μαθηματική μορφή του διαχειριστικού μοντέλου μπορεί να οδηγήσει σε τοπικές λύσεις (local solutions) (τοπικά ακρότατα)
  - απαιτούν σημαντικό υπολογιστικό χρόνο (CPU time)

Μεθοδολογίες Βελτιστοποίησης

- **Πολυκριτηριακή Ανάλυση (Multi-objective Programming):** Είναι η διαδικασία ταυτόχρονης βελτιστοποίησης δύο ή περισσοτέρων αντικρουόμενων στόχων η οποία υπόκειται σε συγκεκριμένους περιορισμούς. Η βέλτιστη λύση είναι αυτή που ικανοποιεί ταυτόχρονα καλύτερα από τις υπόλοιπες τους στόχους του προβλήματος
  - **Μέθοδος των περιορισμών (Constraint method):** Κάθε φορά επιλέγεται τυχαία μια αντικειμενική συνάρτηση Z_i προς βελτιστοποίηση ενώ οι υπόλοιπες (p-1) στοχικές ή αντικειμενικές συναρτήσεις Z προστίθενται στους ήδη ισχύοντες περιορισμούς
  - **Μέθοδος σταθμισμένων βαρών (Weighted method):** Το πρόβλημα πολλαπλών στόχων μετατρέπεται σε πρόβλημα ενός ενιαίου στόχου ο οποίος είναι το σταθμισμένο άθροισμα κάθε στοχικής ή αντικειμενικής συνάρτησης. Η ταυτόχρονη αξιολόγηση πολλών αντικρουόμενων στόχων δεν οδηγεί οπωσδήποτε στη βέλτιστη περιβαλλοντικά λύση αλλά σε μια μη ευέλικτη λύση που ικανοποιεί τους περισσότερους επιβαλλόμενους στόχους.
  - **Ευρετικές Μεθοδολογιές:** Η εύρεση της βέλτιστης λύσης γίνεται από ένα μεγάλο πλήθος πιθανών λύσεων που είναι αδύνατον να εξεταστούν με οποιαδήποτε άλλη μαθηματική μέθοδο χωρίς όμως να εξασφαλίζεται η σφαιρικότητα της. Η πλειονότητα των κλασσικών μεθοδολογιών απαιτούν τον «ακριβό» υπολογιστικά προσδιορισμό των παραγώγων των αντικειμενικών συναρτήσεων και των συναρτήσεων περιορισμού προκειμένου να προσδιοριστεί η βέλτιστη λύση.

Βιβλιογραφία

Ευστρατιάδης, Α. «Μη γραμμικές μέθοδοι σε πολυκριτηριακά προβλήματα βελτιστοποίησης υδατικών πόρων, με έμφαση στη βαθμονόμηση υδρολογικών μοντέλων», Διδακτορική διατριβή, 391 σελίδες, Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος – Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα, 2008.

Μακρόπουλος, Χ., και Α. Ευστρατιάδης. «Σημειώσεις Βελτιστοποίησης Συστημάτων Υδατικών Πόρων και Υδροπληροφορικής», 307 σελίδες, Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος – Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 2011 (https://www.itia.ntua.gr/el/docinfo/1109/).

Μιμίκου, Μ.Α. «Τεχνολογία Υδατικών Πόρων», Εκδόσεις Παπασωτηρίου, 3η Έκδοση, 2006.

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.