Μη γραμμικές μέθοδοι βελτιστοποίησης – Εξελικτικοί και γενετικοί αλγόριθμοι

Σημειώσεις στα πλαίσια του μαθήματος:
Βελτιστοποίηση συστημάτων υδατικών πόρων

Ανδρέας Ευστρατιάδης και Δημήτρης Κουτσογιάννης
Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Αθήνα, 2004-2007

Εναλλακτικές διατυπώσεις του προβλήματος μη γραμμικής βελτιστοποίησης

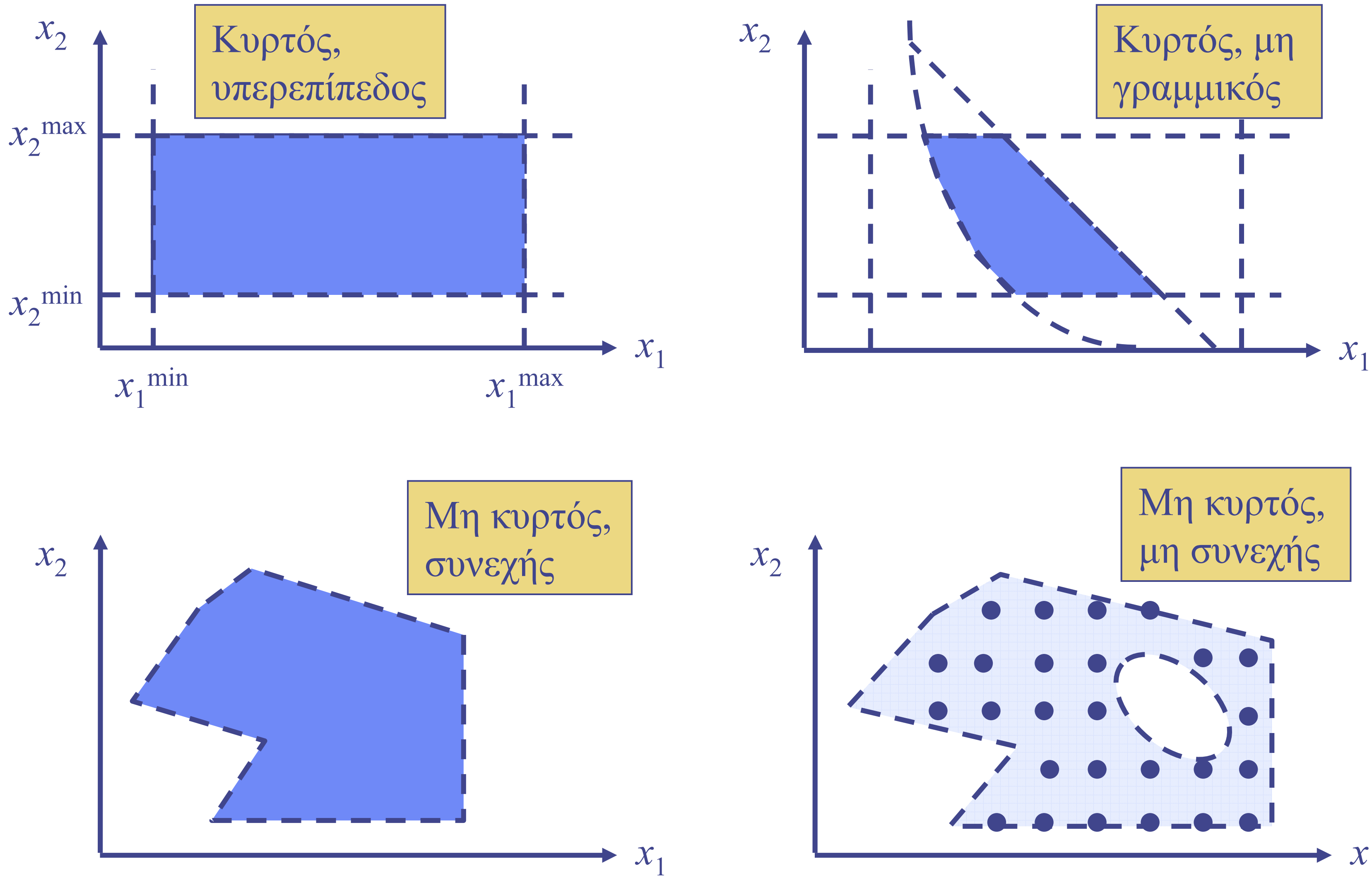
- **Γενική διατύπωση**:

$$\min/\max f(\mathrm{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

$$\left.\begin{array}{ll} \text{s.t.} & g_j(x_1, x_2, \ldots, x_n) \geq, \leq, = 0, \text{ για } j = 1, \ldots, k \\ & x_i^{\min} \leq x_i \leq x_i^{\max}, \text{ για } i = 1, \ldots, n \end{array}\right\} \text{Εφικτός χώρος (πεδίο ορισμού)}$$

- **Μορφές στοχικής συνάρτησης**:
  - Μονοδιάστατη ή πολυδιάστατη
  - Με συνεχείς ή όχι μεταβλητές ελέγχου
  - Κυρτή (μοναδικό ακρότατο) ή μη κυρτή (πολλαπλά ακρότατα)
  - Με αναλυτική ή μη αναλυτική ιδία έκφραση και των παραγώγων της
  - Με αμελητέο ή σημαντικό φόρτο υπολογισμού (στοχικές συναρτήσεις σε πραγματικές εφαρμογές που αποτιμώνται μέσω προσομοίωσης)
- **Μορφές περιορισμών**:
  - Ενσωματωμένοι στη στοχική συνάρτηση
  - Πεδίο ορισμού = όρια μεταβλητών ελέγχου

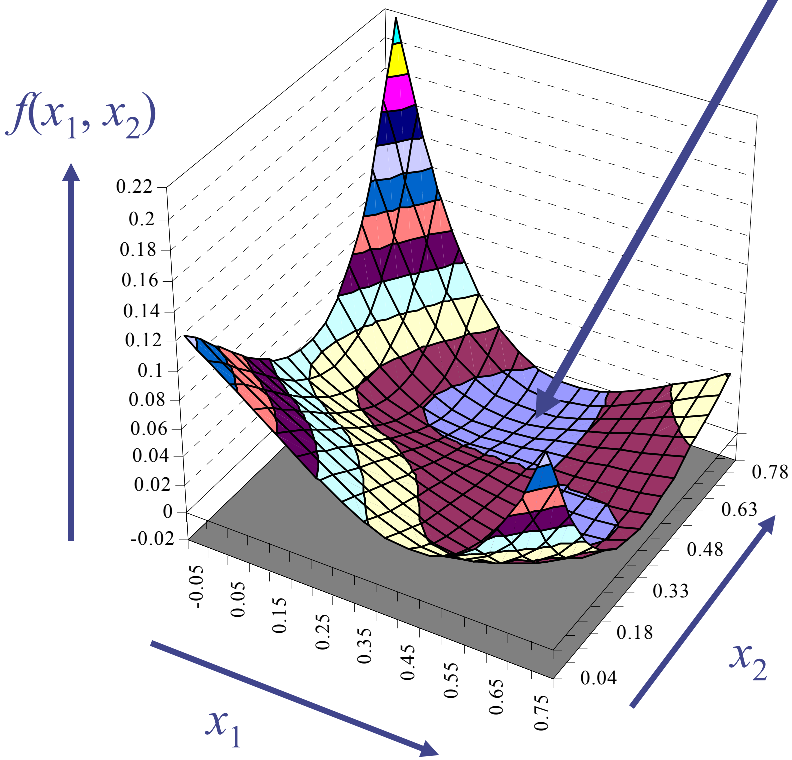
Τυπικές μορφές χώρων αναζήτησης

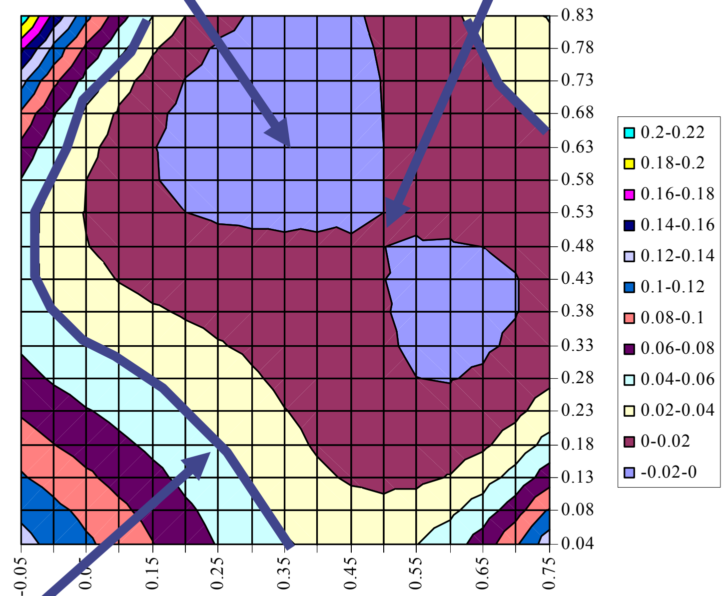


Η έννοια της επιφάνειας απόκρισης

Θέση ακροτάτου

Περιοχή «αυχένα»





Κάθε εξίσωση $z = f(x_1, x_2)$ = σταθερό ονομάζεται **ισοσταθμική** της f

Βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς

Έστω συνάρτηση $f(\mathbf{x})$ ορισμένη στο R^n που είναι συνεχής σε όλο το πεδίο ορισμού της και έχει συνεχείς μερικές παραγώγους δευτέρας τάξεως. Κάθε σημείο μηδενισμού του διανύσματος κλίσης της συνάρτησης, δηλαδή κάθε σημείο $\mathbf{x}^*$ για το οποίο:

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = grad\, f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

ονομάζεται **στάσιμο** (stationary). Αν $H_i(\mathbf{x})$ είναι η i υπο-ορίζουσα του εσσιανού μητρώου που προκύπτει με αφαίρεση των $n - i$ τελευταίων γραμμών και στηλών, τότε:

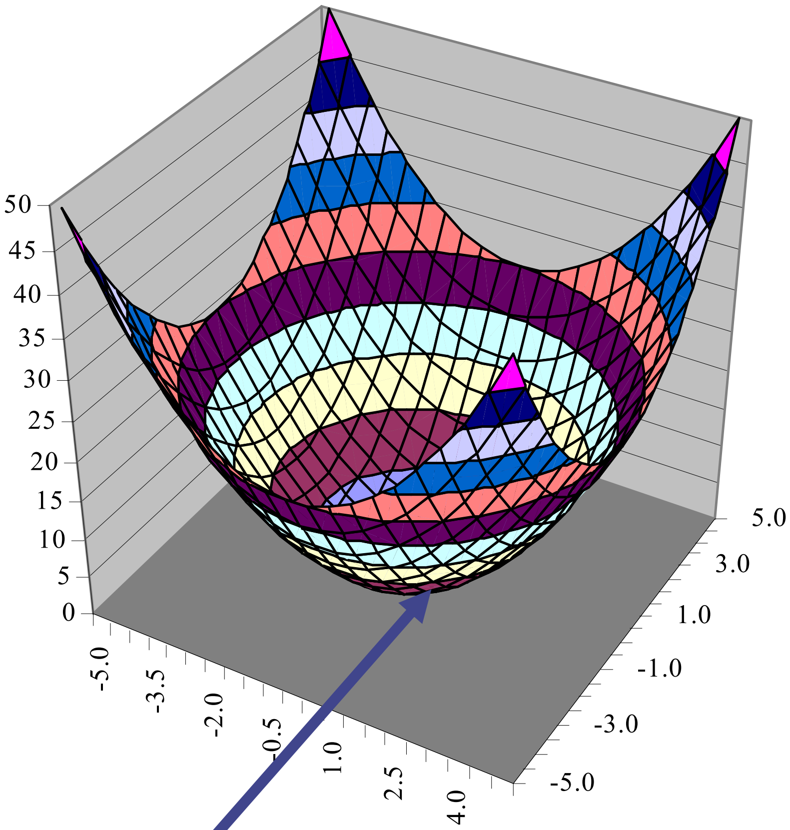
- αν $H_i(\mathbf{x}^*) > 0$ για κάθε i (θετικά ορισμένο μητρώο), τότε το $\mathbf{x}^*$ είναι **τοπικό ελάχιστο**·
- αν $H_i(\mathbf{x}^*) \neq 0$ για κάθε i και $\text{sign}(H_i) = \text{sign}(-1)^i$, τότε το $\mathbf{x}^*$ είναι **τοπικό μέγιστο**·
- αν $H_n(\mathbf{x}^*) \neq 0$ και δεν ισχύει καμία από τις παραπάνω περιπτώσεις, τότε το $\mathbf{x}^*$ είναι **σημείο σέλας**·
- αν $H_n(\mathbf{x}^*) = 0$, δεν μπορεί να υπάρξει συμπέρασμα.

Στην περίπτωση που η συνάρτηση είναι **κυρτή**, η f έχει μοναδικό στάσιμο σημείο που αντιστοιχεί στο **ολικό ακρότατο** αυτής (ελάχιστο ή μέγιστο). Κατά συνέπεια, αν μια συνάρτηση ικανοποιεί την **αναγκαία συνθήκη** $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ και την **ικανή συνθήκη** κυρτότητας, τότε παρουσιάζει μοναδικό (ολικό) ακρότατο στο σημείο $\mathbf{x}^*$.

Αν η συνάρτηση είναι μη κυρτή, τότε έχει περισσότερα του ενός στάσιμα σημεία, καθένα από τα οποία μπορεί να είναι τοπικό ελάχιστο ή τοπικό μέγιστο ή σημείο σέλας. Μια τέτοια συνάρτηση ονομάζεται **πολυσχηματική** (multimodal).

Τοπικά και ολικά ακρότατα

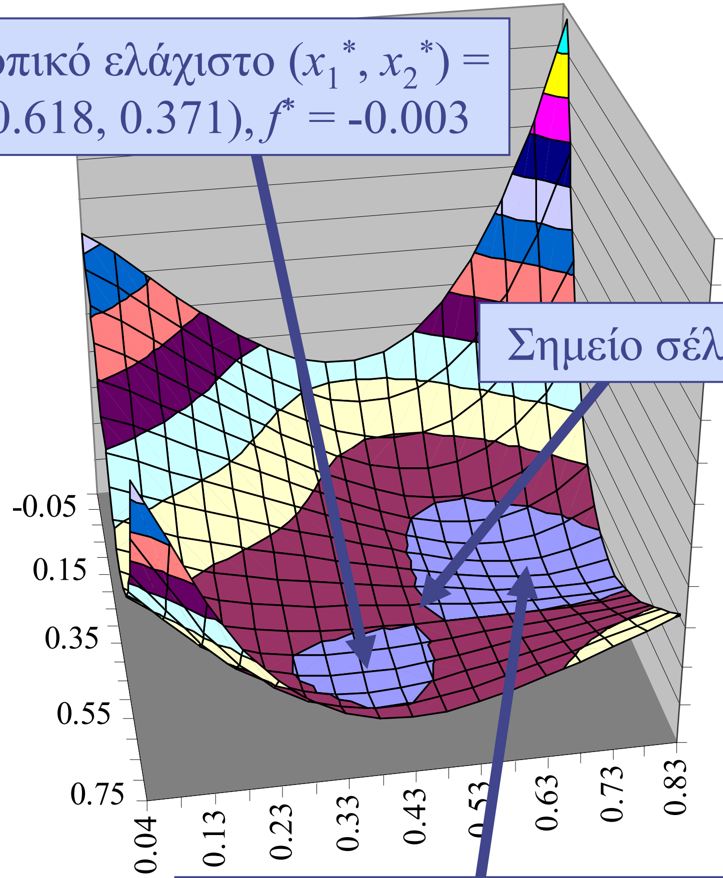
$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$



Ολικό ελάχιστο $(x_1^*, x_2^*) = (0, 0)$, $f^* = 0$

Τοπικό ελάχιστο $(x_1^*, x_2^*) = (0.618, 0.371)$, $f^* = -0.003$

Σημείο σέλας



Ολικό ελάχιστο $(x_1^*, x_2^*) = (0.314, 0.705)$, $f^* = -0.011$

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

Βελτιστοποίηση με περιορισμούς

Έστω συνάρτηση $f(\mathbf{x})$, με k περιορισμούς της μορφής $\mathbf{g}(\mathbf{x}) := [g_1(\mathbf{x}), ..., g_k(\mathbf{x})]^T \leq \mathbf{0}$.

Το σημείο $\mathbf{x}^*$ είναι η ολικά ελάχιστη λύση της f εφόσον ικανοποιεί τους περιορισμούς και επιπλέον υπάρχει διάνυσμα μη αρνητικών συντελεστών $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, ..., \lambda_k)^T$ τέτοιο ώστε:

$$\lambda_i \, g_i(\mathbf{x}^*) = 0 \text{ για κάθε } i = 1, \ldots, k$$

$$\frac{df(\mathbf{x}^*)}{d\mathbf{x}} + \boldsymbol{\lambda}^T \frac{d\mathbf{g}(\mathbf{x}^*)}{d\mathbf{x}} = \mathbf{0}^T$$

Οι παραπάνω εκφράσεις, που είναι αναγκαίες προϋποθέσεις ύπαρξης ακροτάτου ενός προβλήματος με περιορισμούς, είναι γνωστές ως **συνθήκες Kuhn-Tucker**.

Κάθε πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμούς μπορεί να αναχθεί σε πρόβλημα χωρίς περιορισμούς, με θεώρηση της βοηθητικής συνάρτησης:

$$\varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}), \ \mathbf{x} \in R^n$$

Δεδομένου ότι $\lambda_i \, g_i(\mathbf{x}^*) = 0$ για κάθε i, το ολικό ακρότατο της $\varphi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ ταυτίζεται με το ολικό ακρότατο της $f(\mathbf{x})$, δηλαδή $\varphi(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = f(\mathbf{x}^*)$. Η επίλυση του μετασχηματισμένου προβλήματος γίνεται θεωρώντας ως μεταβλητές ελέγχου τις αρχικές παραμέτρους $\mathbf{x}$ καθώς και τους συντελεστές $\boldsymbol{\lambda}$ (**πολλαπλασιαστές Lagrange**).

Οι συνθήκες Kuhn-Tucker είναι **ικανές** και **αναγκαίες** για την ύπαρξη ολικού ελαχίστου της f, εφόσον τόσο η συνάρτηση όσο και οι περιορισμοί είναι **κυρτές** συναρτήσεις.

Χειρισμός περιορισμών μέσω συναρτήσεων ποινής

Η ύπαρξη περιορισμών σε ένα μη γραμμικό πρόβλημα βελτιστοποίησης δυσχεραίνει εξαιρετικά την διαδικασία βελτιστοποίησης, καθώς προϋποθέτει:

- την αναλυτική έκφραση των παραγώγων της στοχικής συνάρτησης και των περιορισμών (ώστε να μπορούν να διατυπωθούν οι συνθήκες Kuhn-Tucker)·
- την εύρεση των στάσιμων σημείων της βοηθητικής συνάρτησης, δηλαδή των διανυσμάτων $\mathbf{x}^*$ και $\boldsymbol{\lambda}^*$ (αναγκαία συνθήκη στασιμότητας)·
- την ισχύ της ικανής συνθήκης κυρτότητας.

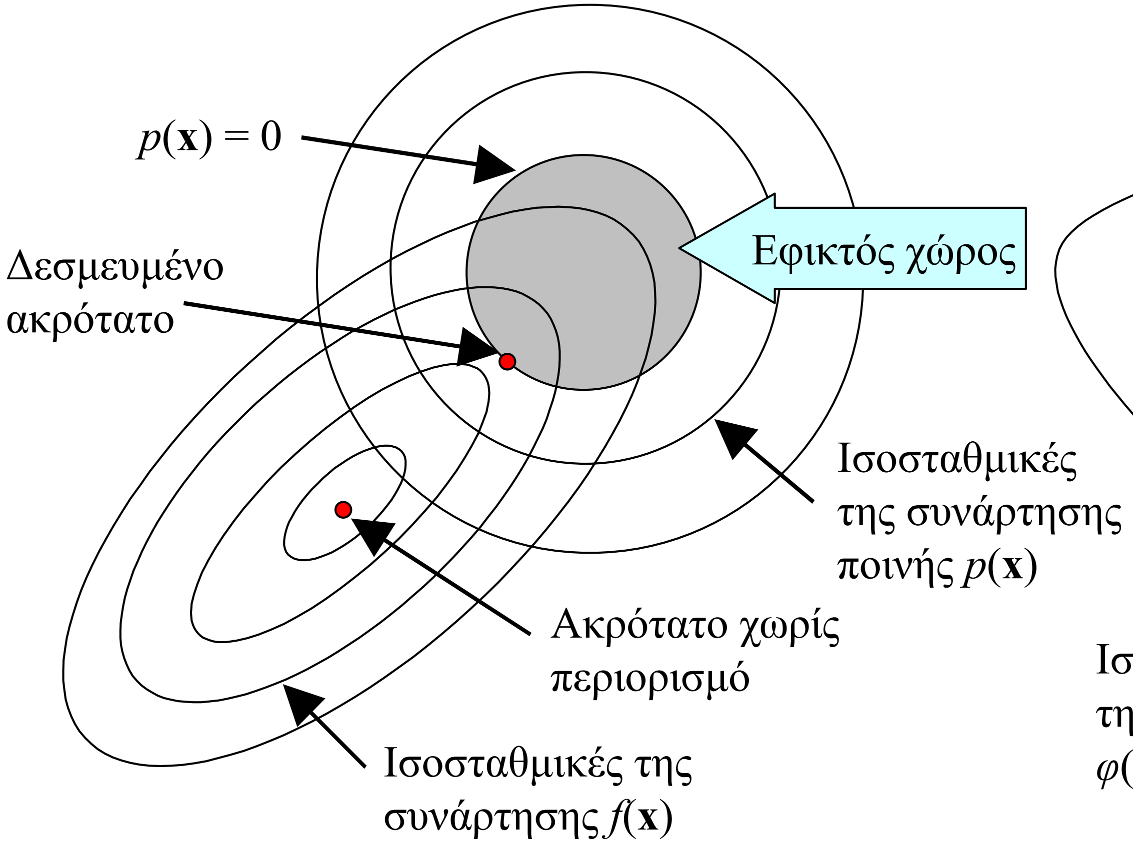
Εναλλακτικά, οι περιορισμοί ενσωματώνονται στη στοχική συνάρτηση ως **συναρτήσεις ποινής** (penalty functions). Στην περίπτωση αυτή, ορίζεται ένα μετασχηματισμένο πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, της μορφής:

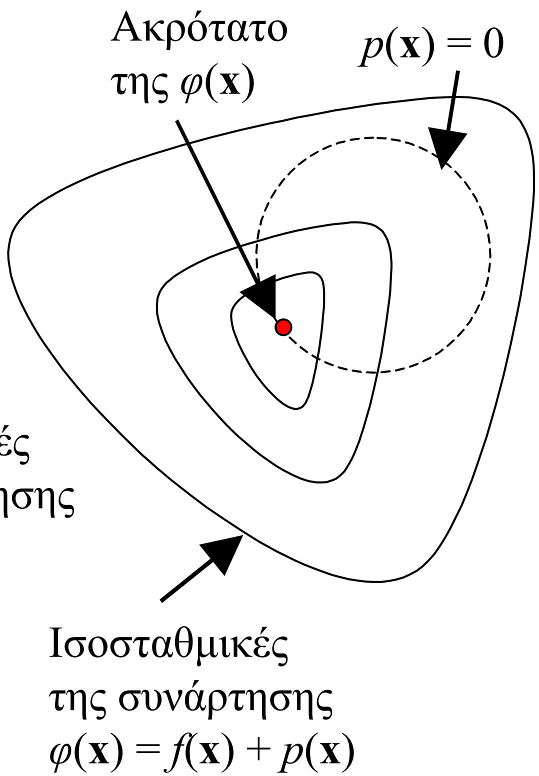
$$min\ \varphi(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{k} p_i(\mathbf{x})$$

όπου $p_i(\mathbf{x}) \geq 0$ κατάλληλα ορισμένη συνάρτηση, τέτοια ώστε $p_i(\mathbf{x}) = 0$ αν $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$, και $p_i(\mathbf{x}) > 0$ αν $g_i(\mathbf{x}) > 0$. Μειονέκτημα της παραπάνω προσέγγισης είναι:

- ο αυθαίρετος ορισμός των συναρτήσεων $p_i(\mathbf{x})$·
- η ύπαρξη ασυνέχειας στο όριο του εφικτού χώρου (συνήθως δεχόμαστε $p_i(\mathbf{x}) \approx 0$ αν δεν παραβιάζεται ο περιορισμός ή παραβιάζεται οριακά, και $p_i(\mathbf{x}) >> 0$ αλλιώς).

Γεωμετρική ερμηνεία συναρτήσεων ποινής





Η προσθήκη όρων ποινής στην προς βελτιστοποίηση συνάρτηση αλλοιώνει την μορφή της επιφάνειας απόκρισης, δημιουργώντας ένα νέο εφικτό χώρο που ταυτίζεται με το R^n.

Ποια είναι τα επιθυμητά χαρακτηριστικά ενός αλγορίθμου μη γραμμικής βελτιστοποίησης;

- **Ευρωστία**: Προσαρμογή στις γεωμετρικές ιδιαιτερότητες της επιφάνειας απόκρισης (αυχένες, μακρόστενες χαράδρες, πλατιές κοιλάδες, ασυνέχειες αναγλύφου, τοπικά ακρότατα μικρής και μεγάλης κλίμακας).
- **Αμεροληψία**: Εγγυημένη σύγκλιση στο ολικό ακρότατο, ανεξάρτητα από την περιοχή εκκίνησης της διαδικασίας αναζήτησης.
- **Γενικότητα**: Απουσία προϋποθέσεων ως προς τα χαρακτηριστικά του προβλήματος (κυρτότητα, διαφορισιμότητα, συνέχεια μεταβλητών ελέγχου).
- **Αποτελεσματικότητα**: Προσέγγιση της θεωρητικά βέλτιστης λύσης με ικανοποιητική ακρίβεια.
- **Ευκολία στη χρήση**: Αποτελεσματική εφαρμογή του αλγορίθμου από χρήστες περιορισμένης εμπειρίας.
- **Αποδοτικότητα**: Ικανοποιητικός ρυθμός προόδου στη διαδικασία αναζήτησης, ταχύτητα εντοπισμού ικανοποιητικών λύσεων.

Επειδή τα παραπάνω χαρακτηριστικά είναι, ως επί το πλείστον, αντικρουόμενα μεταξύ τους, η επιλογή του κατάλληλου αλγορίθμου είναι αποτέλεσμα συμβιβασμών.

Τεχνικές αναζήτησης τοπικών ακροτάτων

Πρόκειται για **επαναληπτικές αριθμητικές μεθόδους** που, ξεκινώντας από μια αρχική τιμή $\mathbf{x}^{[0]}$, βελτιώνουν σταδιακά την τιμή της στοχικής συνάρτησης f, μεταβαίνοντας στο επόμενο σημείο με εφαρμογή του γενικού κανόνα:

$$\mathbf{x}^{[k+1]} = \mathbf{x}^{[k]} + \beta^{[k]}\,\mathbf{d}^{[k]}$$

όπου β βαθμωτή **παράμετρος κλίμακας** και $\mathbf{d}$ μια **διεύθυνση** στο R^n, τέτοιες ώστε:

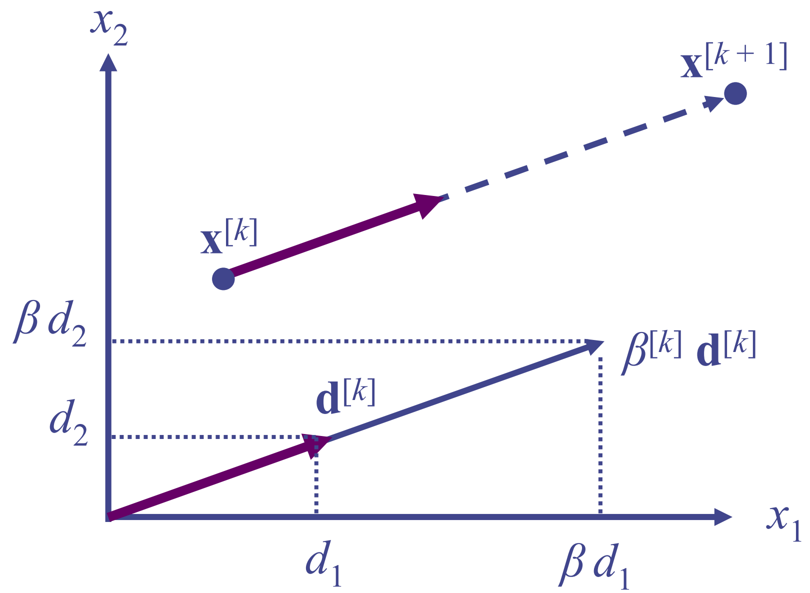
$$f(\mathbf{x}^{[k+1]}) < f(\mathbf{x}^{[k]}), \text{ για κάθε μετατόπιση } k$$

Η παραπάνω **προσδιοριστική** διαδικασία εγγυάται σύγκλιση στο τοπικό ελάχιστο που βρίσκεται εγγύτερα στο σημείο εκκίνησης $\mathbf{x}^{[0]}$.

Οι επιμέρους τεχνικές διαφοροποιούνται ανάλογα με τον τρόπο ορισμού των β και $\mathbf{d}$.

Οι μέθοδοι αναζήτησης τοπικών ακροτάτων χωρίζονται σε δύο κατηγορίες, ανάλογα με τον αν χρησιμοποιούν ή όχι τις παραγώγους της συνάρτησης:

- μέθοδοι **κλίσης** (gradient methods)·
- μέθοδοι **άμεσης αναζήτησης** (direct search methods).



Κλασικές τεχνικές κλίσεων

- Η απλούστερη τεχνική κλίσης είναι η μέθοδος της **πλέον απότομης κατάβασης** (steepest descent), όπου η διεύθυνση $\mathbf{d}^{[k]}$ είναι αντίθετη στην κλίση $\nabla f(\mathbf{x}^{[k]})$ της συνάρτησης (κανόνας κίνησης του νερού). Η διαδικασία αναζήτησης γράφεται:

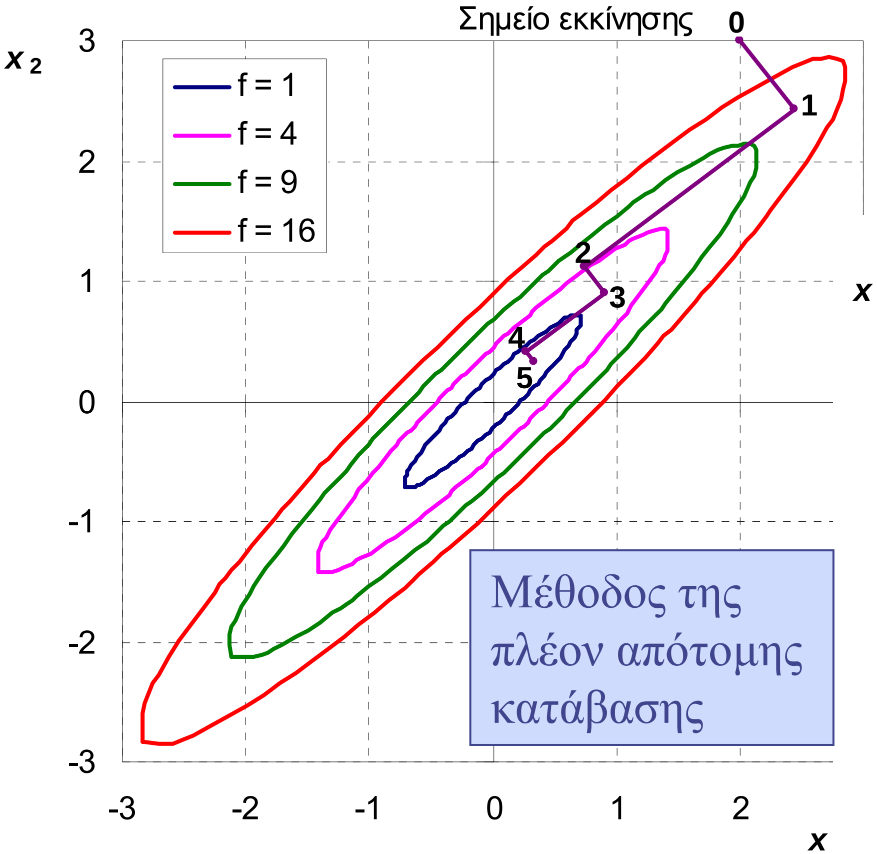
$$\mathbf{x}^{[k+1]} = \mathbf{x}^{[k]} - \beta^{[k]} \nabla f(\mathbf{x}^{[k]})$$

- Κάθε νέο σημείο $\mathbf{x}^{[k+1]}$ είναι η θέση ελαχίστου της f κατά μήκος της διεύθυνσης που ορίζει η κλίση της. Συνεπώς, το $\beta^{[k]}$ προσδιορίζεται με τρόπο ώστε να ελαχιστοποιείται η έκφραση $g(\beta^{[k]}) = f(\mathbf{x}^{[k]} - \beta^{[k]} \nabla f(\mathbf{x}^{[k]}))$. Με τον τρόπο αυτό, προκύπτει ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης μιας μεταβλητής, που επιλύεται με τυπικές αριθμητικές μεθόδους (π.χ. χρυσή τομή, παραβολική παρεμβολή).
- Η πορεία σύγκλισης της μεθόδου είναι αργή (μικρά βήματα), ενώ η μετακίνηση είναι πάντα κάθετη στη διεύθυνση του προηγούμενου βήματος.
- Στη μέθοδο **συζυγών κλίσεων** (conjugate gradient) των Fletcher-Reeves (1964), η πορεία επιταχύνεται, αφού η νέα διεύθυνση προκύπτει ως γραμμικός συνδυασμός των κλίσεων στο τρέχον και το προηγούμενο σημείο, με βάση τη σχέση:

$$\mathbf{x}^{[k+1]} = \mathbf{x}^{[k]} - \beta^{[k]} [\nabla f(\mathbf{x}^{[k]}) + \gamma^{[k]} \nabla f(\mathbf{x}^{[k-1]})]$$

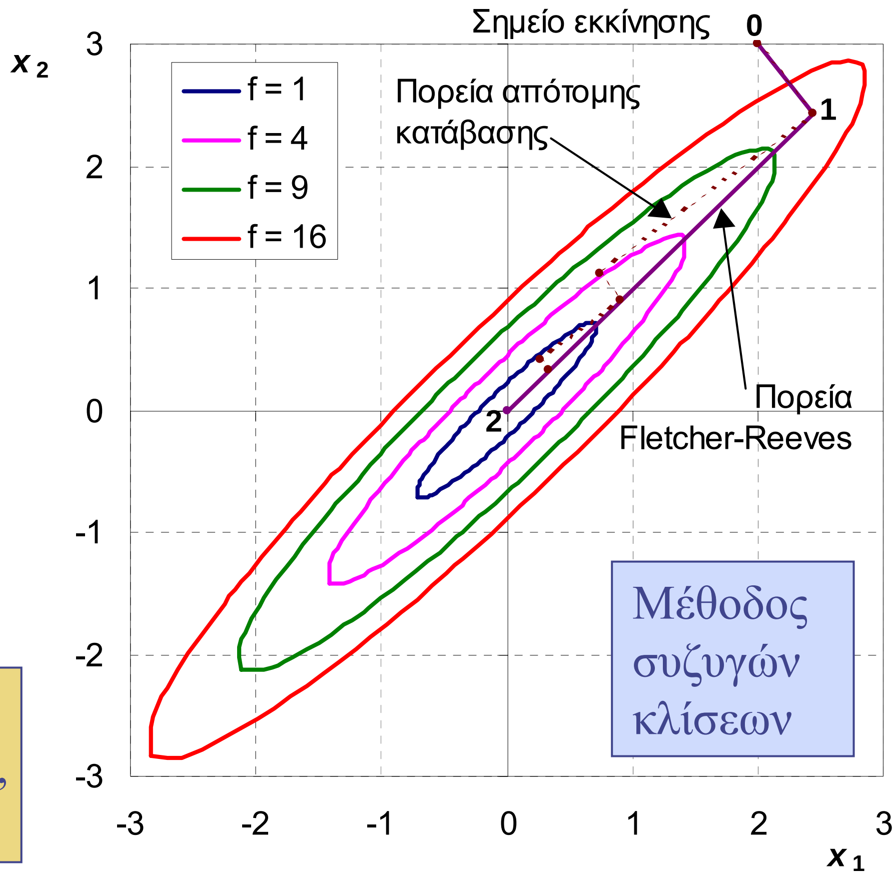
όπου: $\gamma^{[k]} = ||\nabla f(\mathbf{x}^{[k]})||^2 / ||\nabla f(\mathbf{x}^{[k-1]})||^2$ και $\beta^{[k]}$ παράμετρος που προσδιορίζεται με τρόπο ώστε να ελαχιστοποιείται η έκφραση $g(\beta^{[k]}) = f(\mathbf{x}^{[k+1]})$.

Παράδειγμα σύγκρισης τεχνικών κλίσης



Μέθοδος της πλέον απότομης κατάβασης

Παράδειγμα: Εντοπισμός ελαχίστου της $f(x_1, x_2) = 20\,x_1^2 + 20\,x_2^2 - 38\,x_1\,x_2$



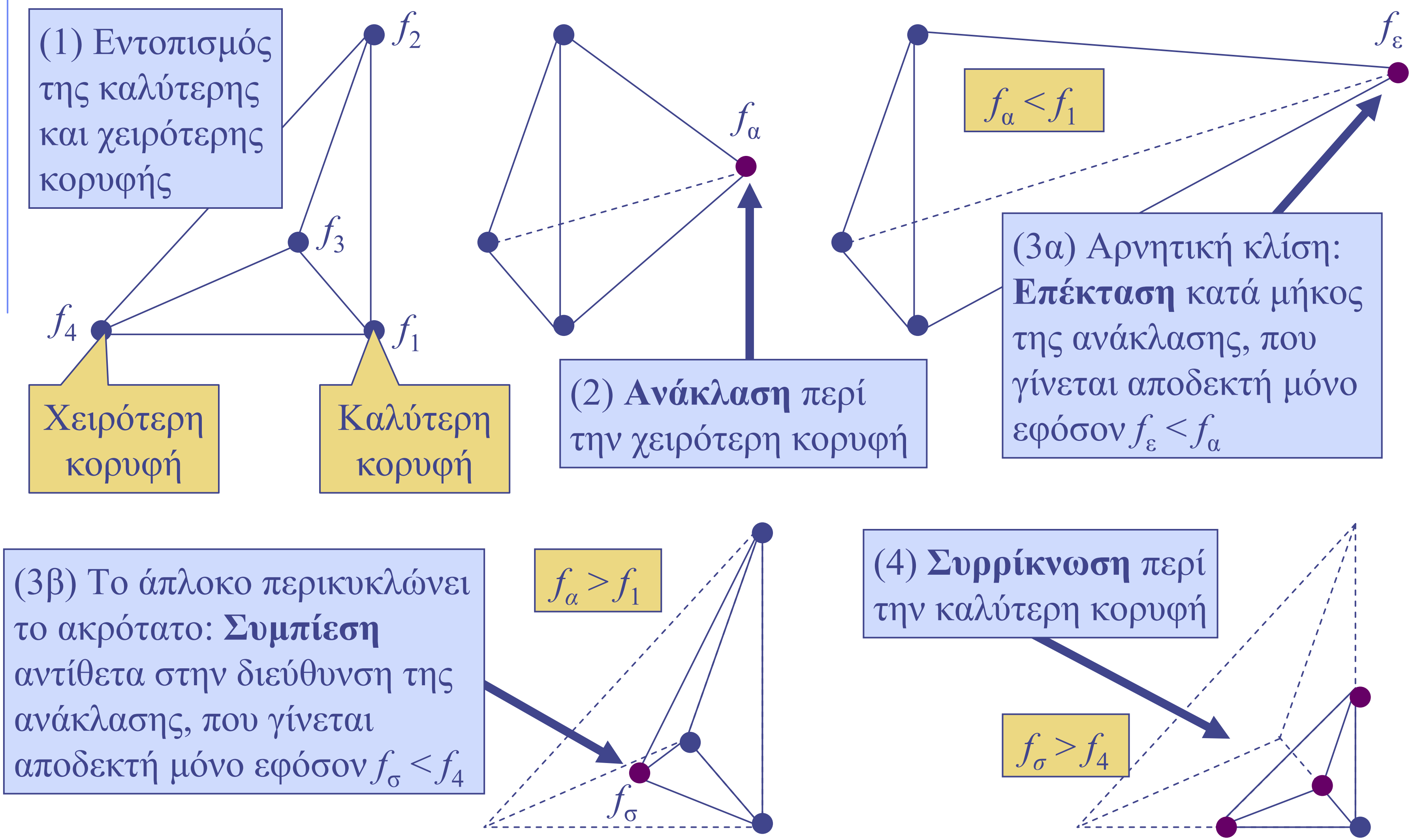
Μέθοδος συζυγών κλίσεων

Στη μέθοδο συζυγών κλίσεων, αν η συνάρτηση f είναι **τετραγωνικής μορφής**, το ακρότατο εντοπίζεται σε n βήματα.

Τεχνικές άμεσης αναζήτησης

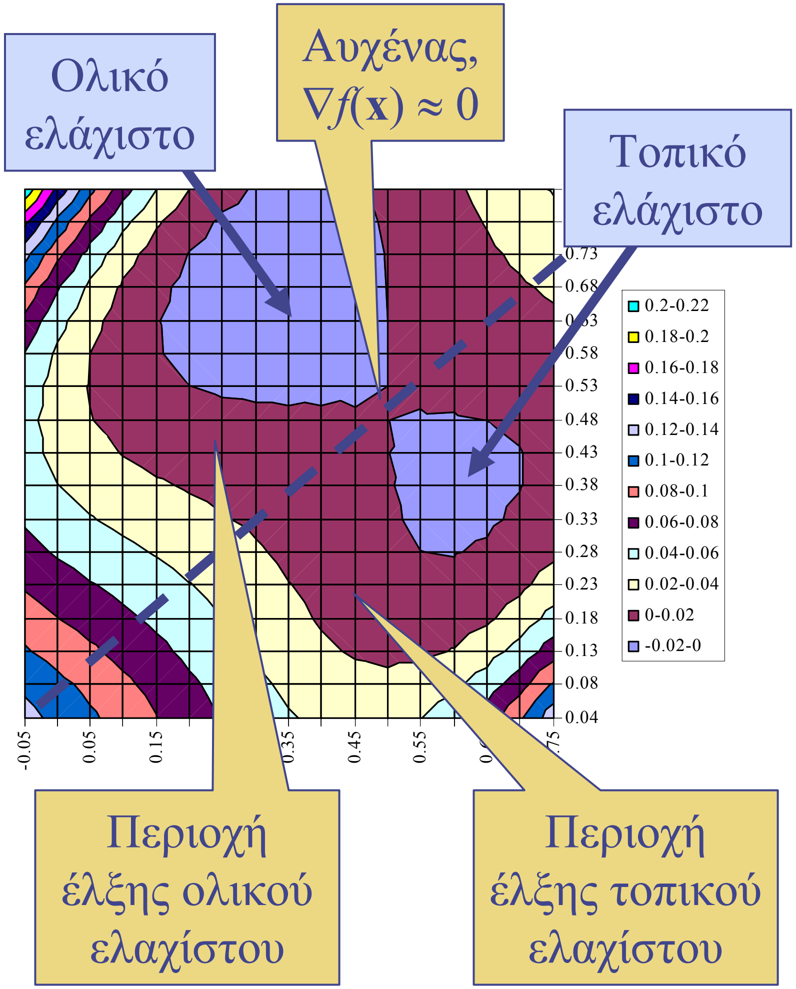
- Στις περισσότερες εφαρμογές της πράξης, η εφαρμογή των μεθόδων κλίσης καθίσταται υπολογιστικά ασύμφορη, εφόσον:
  - δεν είναι γνωστή η αναλυτική έκφραση των παραγώγων, οπότε απαιτείται αριθμητική προσέγγιση αυτών (ειδικά σε πολυδιάστατους χώρους, τραχείας γεωμετρίας, όπου υιοθετούνται μικρά βήματα Δx)·
  - η αριθμητική επίλυση του προβλήματος μονοδιάστατης βελτιστοποίησης είναι χρονοβόρα (η συνάρτηση που σχηματίζεται δεν έχει παραβολική μορφή).
- Οι τεχνικές άμεσης αναζήτησης είναι επαναληπτικές διαδικασίες, που δεν χρησιμοποιούν παραγώγους, ούτε αριθμητικές προσεγγίσεις αυτών. Αντίθετα, εφαρμόζουν ένα **γεωμετρικό ανάλογο της κλίσης**, εξερευνώντας τον ευκλείδειο χώρο σε n γραμμικά ανεξάρτητες διευθύνσεις.
- Οι παράμετροι $\beta^{[k]}$ και $\mathbf{d}^{[k]}$ της διαδικασίας μετάβασης επιλέγονται με βάση την σχετική διάταξη των τιμών της συνάρτησης πάνω στα σημεία που ορίζουν το εκάστοτε γεωμετρικό ανάλογο, και όχι με βάση τις ίδιες τις τιμές της συνάρτησης
- Αν είναι γνωστές οι τιμές της συνάρτησης σε $n + 1$ σημεία του n-διάστατου εφικτού χώρου, τότε μπορεί να προσδιοριστεί μια διεύθυνση μείωσης της τιμής της f (τόσα σημεία θα απαιτούνταν και για την αριθμητική προσέγγιση της κλίσης ∇f).

Μέθοδος κατερχόμενου απλόκου (Nelder & Mead, 1965)



Μπορεί μια μέθοδος τοπικής αναζήτησης να εγγυηθεί τον εντοπισμό του ολικού ακροτάτου;

- Αν η συνάρτηση είναι μη κυρτή, δεν υπάρχει ένα και μοναδικό ακρότατο.
- Η εύρεση κάθε τοπικού ακροτάτου εξαρτάται από την θέση του **σημείου εκκίνησης** της διαδικασίας αναζήτησης.
- Για να εντοπιστεί το ολικό ακρότατο, η εκκίνηση πρέπει να γίνει στη **περιοχή έλξης** (region of attraction) του.
- Αν και οι διαδικασίες τοπικής αναζήτησης εξελίσσονται γρήγορα στις κυρτές περιοχές, παρουσιάζουν πολύ κακή συμπεριφορά (εξαιρετικά αργή ή και μηδενική πρόοδο) στην περίπτωση μη ομαλής γεωμετρίας της επιφάνειας απόκρισης, που οφείλεται στην ύπαρξη αυχένων, μακρόστενων κοιλάδων, κ.ά.



Γενικές αρχές μεθόδων ολικής βελτιστοποίησης

- Καμία προσδιοριστική διαδικασία δεν μπορεί να εγγυηθεί τον εντοπισμό του ολικού ακροτάτου μιας **μη κυρτής** (πολυσχηματικής) συνάρτησης, εξαιτίας του κινδύνου εγκλωβισμού της σε τοπικό ακρότατο.
- Η διαφυγή από τα τοπικά ακρότατα επιτυγχάνεται με την **ελεγχόμενη αποδοχή μη βέλτιστων κινήσεων**, δηλαδή βημάτων αναρρίχησης, και όχι μόνο κατάβασης.
- Η παραπάνω διαδικασία προϋποθέτει τη χρήση **συνδυαστικών κανόνων μετάβασης** (προσδιοριστικών και στοχαστικών).
- Η **τυχαιότητα**, που αποτελεί θεμελιώδη αρχή όλων των μεθόδων ολικής βελτιστοποίησης, όχι μόνο εμποδίζει τον εγκλωβισμό σε τοπικά ακρότατα, αλλά παρέχει την απαιτούμενη ευελιξία κινήσεων σε έντονα μη κυρτούς χώρους.
- Το ιστορικό των μεθόδων ολικής βελτιστοποίησης έχει ως εξής:
  - **1960**: Στοχαστικές μέθοδοι δειγματοληψίας
  - **1970**: Γενετικοί αλγόριθμοι (ΗΠΑ) – Εξελικτικές στρατηγικές (Γερμανία)
  - **1980**: Προσομοιωμένη ανόπτηση
  - **1990**: Συνδυαστικά σχήματα - Υβριδικοί εξελικτικοί αλγόριθμοι

Μέθοδοι τυχαίας δειγματοληψίας

- Γεννάται ένα προεπιλεγμένο πλήθος N τυχαίων σημείων, τα οποία **κατανέμονται ομοιόμορφα** στον εφικτό χώρο, και επιλέγεται το καλύτερο. Το j στοιχείο κάθε τυχαίου διανύσματος στο εφικτό διάστημα $[x_j^{\min}, x_j^{\max}]$ παράγεται μέσω της σχέσης:

$$x_j = x_j^{\min} + u\,(x_j^{\max} - x_j^{\min}), \text{ για κάθε } j = 1, \ldots, n$$

  όπου u τυχαίος ομοιόμορφος αριθμός στο διάστημα [0, 1].
- Έστω X^* ένα υποσύνολο του εφικτού χώρου X, όπου ανήκει το ολικό ακρότατο x^*. Η πιθανότητα ένα τουλάχιστον σημείο ενός δείγματος να ανήκει στο X^* είναι:

$$P = 1 - [1 - m(X^*) \,/\, m(X)]^N$$

  όπου $m(X)$ ένα μέτρο (π.χ. όγκος) του συνόλου X.
- Ο λόγος $\beta = m(X^*) \,/\, m(X)$ εκφράζει το ποσοστό του όγκου που καταλαμβάνει το X^* στον εφικτό χώρο. Αν κάθε $x \in X^*$ μπορεί να θεωρηθεί αποδεκτή προσέγγιση του ολικού ακροτάτου, η ποσότητα $\alpha = 1 - \beta$ εκφράζει την ακρίβεια προσέγγισης.
- Για δεδομένη αξιοπιστία P και ακρίβεια a, το απαιτούμενο μέγεθος δείγματος είναι:

$$N = \ln(1 - P) \,/\, \ln(1 - a)$$

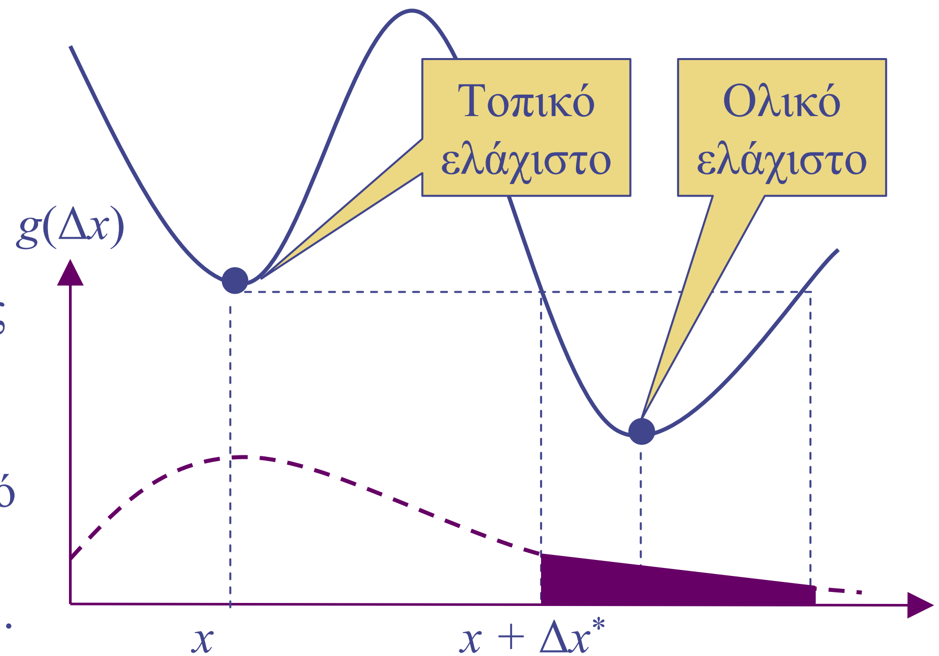
- Συνεπώς, σε αντίθεση με τις μεθόδους συστηματικής δειγματοληψίας (εξονυχιστική αναζήτηση σε πλέγμα), η ακρίβεια της τυχαίας δειγματοληψίας είναι **ανεξάρτητη της διάστασης** του προβλήματος.

Προσαρμοστικές μέθοδοι τυχαίας αναζήτησης

- Πρόκειται για απλές στοχαστικές μεθόδους αναζήτησης, που εκτός της τυχαίας δειγματοληψίας χρησιμοποιούν και **προσδιοριστικούς κανόνες**, αξιοποιώντας την γνώση που αποκτούν κατά την διερεύνηση του εφικτού χώρου. Άρα, δεν βασίζονται μόνο στην τύχη αλλά προσαρμόζονται στη γεωμετρία της επιφάνειας απόκρισης.
- Η στρατηγική τους βασίζεται στη γέννηση τυχαίων διαταραχών $\Delta\mathbf{x}$, που γίνονται δεκτές αν βελτιώνουν την τιμή της συνάρτησης, δηλαδή:

$$f(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) < f(\mathbf{x})$$

- Επειδή τα $\Delta\mathbf{x}$ παράγονται μέσω μιας κατανομής πιθανοτήτων (τυχαίος περίπατος), υπάρχει πάντα μια **μη μηδενική πιθανότητα** διαφυγής από τοπικό ακρότατο και μετάβασης στην περιοχή του ολικού ακροτάτου.



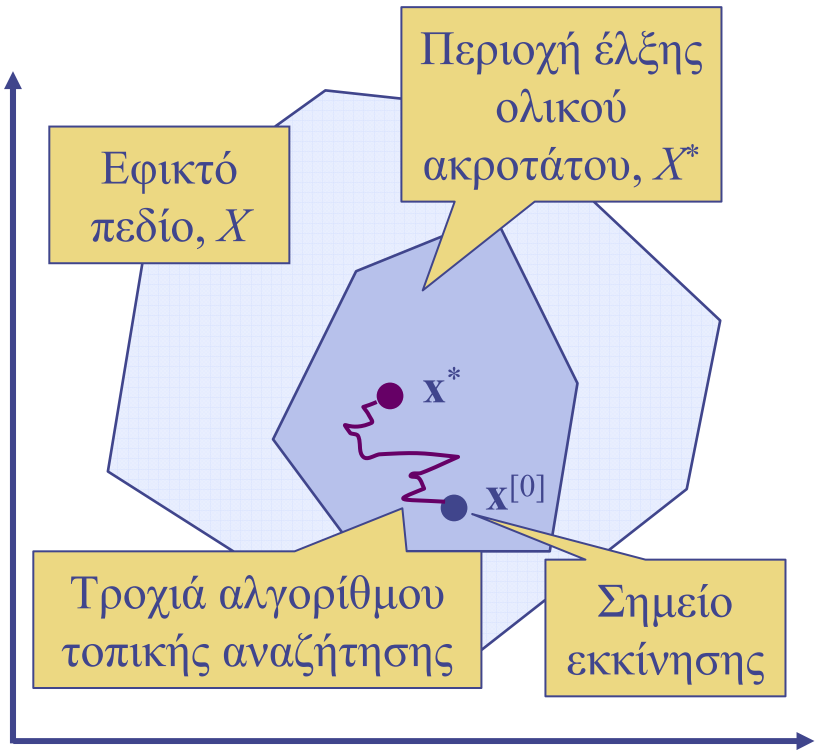
Το εμβαδόν του γραμμοσκιασμένου τμήματος αποτελεί μέτρο της πιθανότητας γέννησης ικανής διαταραχής Δx^*, που εξασφαλίζει μετάβαση στην περιοχή του ολικού ελαχίστου.

Πολλαπλές εκκινήσεις τοπικών επιλυτών

- Οι αλγόριθμοι τοπικής αναζήτησης εντοπίζουν με μεγάλη αξιοπιστία και ταχύτητα το ακρότατο, στην περιοχή έλξης του οποίου βρίσκεται το σημείο εκκίνησης.
- Σε μη κυρτούς χώρους, η πιθανότητα επιτυχίας μιας μεθόδου τοπικής αναζήτησης ισούται με την **πιθανότητα εκκίνησης στην περιοχή έλξης** του ολικού ακροτάτου, X^*. Η τελευταία εξαρτάται από το ποσοστό του όγκου που καταλαμβάνει ο χώρος X^* στο εφικτό πεδίο X, δηλαδή το λόγο $\beta = m(X^*) / m(X)$.
- Επαναλαμβάνοντας την επίλυση N φορές, με διαφορετικές κάθε φορά συνθήκες εκκίνησης, η πιθανότητα επιτυχίας είναι ίση με:

$$P = 1 - (1 - \beta)^N$$

- Στην ιδανική περίπτωση, επιδιώκεται η εκκίνηση από διαφορετική, κάθε φορά, περιοχή έλξης, με σκοπό τον εντοπισμό όλων των τοπικών ακροτάτων. Αυτό προϋποθέτει κάποια συστηματική επεξεργασία του αρχικού δείγματος, με τη δημιουργία συστοιχιών (clustering).



Προσομοιωμένη ανόπτηση: Φυσική ερμηνεία

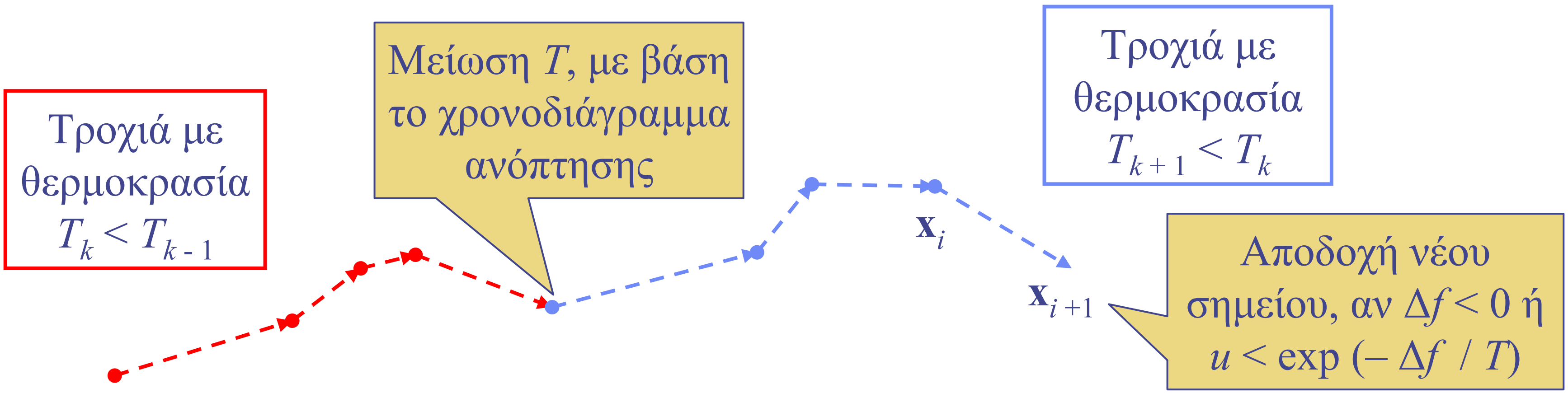
- **Ανόπτηση** (annealing) είναι η διεργασία ανακατανομής των ατόμων κατά την ψύξη ενός θερμοδυναμικού συστήματος (π.χ. μετάλλου). Σε υψηλές θερμοκρασίες, τα μόρια του μετάλλου κινούνται ελεύθερα προς όλες τις κατευθύνσεις. Καθώς το μέταλλο ψύχεται, η θερμική κινητικότητα των μορίων του περιορίζεται. Όταν η θερμοκρασία μειωθεί αρκετά, διαμορφώνεται μια κρυσταλλική δομή, που αποτελεί την κατάσταση **ελάχιστης ενέργειας** του συστήματος.
- Η διεργασία περιγράφεται από νόμους της **στατιστικής μηχανικής**. Η ενέργεια E ενός συστήματος σε θερμική ισορροπία, με θερμοκρασία T, θεωρείται τυχαία μεταβλητή, που ακολουθεί μια συνάρτηση κατανομής Boltzman της μορφής:

$$P(E) \sim \exp\left(-E / \kappa T\right) \qquad (\kappa\text{: σταθερά})$$

- Υπάρχει πάντοτε **μη μηδενική πιθανότητα** μετάβασης σε κατάσταση υψηλότερης ενέργειας, που παρέχει στο σύστημα την ευκαιρία να εξέλθει από ένα **τοπικό ενεργειακό ελάχιστο** και να αναζητήσει βελτιωμένες καταστάσεις ισορροπίας. Η πιθανότητα είναι μεγάλη στην αρχή, που η θερμοκρασία είναι υψηλή, και μειώνεται σταδιακά, καθώς το σύστημα μεταβαίνει στην περιοχή του ολικού ακροτάτου.
- Απαραίτητη προϋπόθεση για την δημιουργία τέλειων κρυστάλλων είναι ο **αργός ρυθμός ψύξης**. Διαφορετικά, το μέταλλο δεν φτάνει στην κατάσταση ελάχιστης ενέργειας, αλλά διαμορφώνει μια πολυκρυσταλλική δομή, μεγαλύτερης ενέργειας.

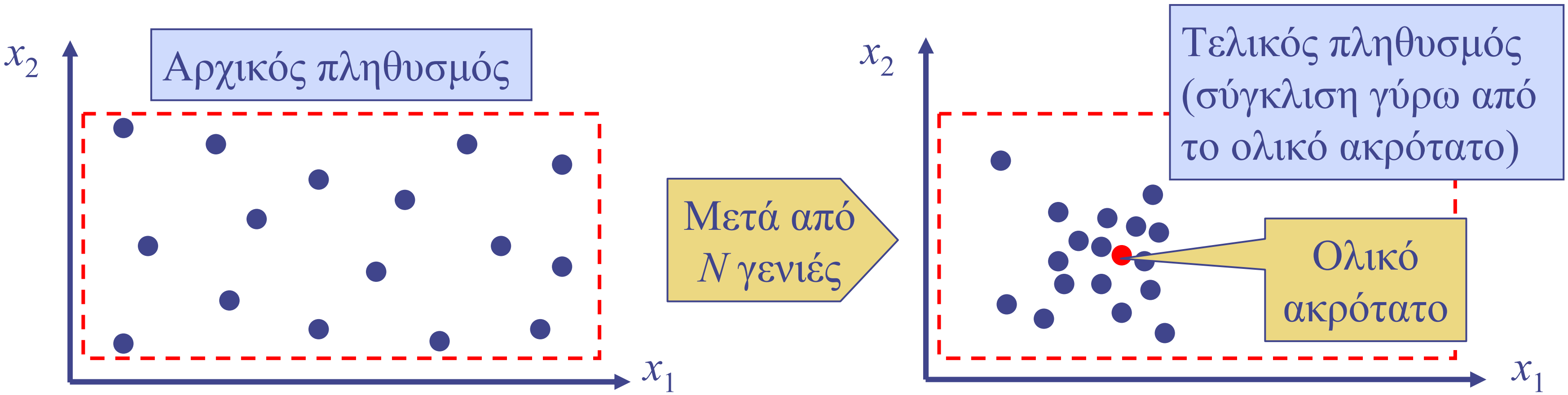
Μεταφορά αρχών προσομοιωμένης ανόπτησης στη βελτιστοποίηση (Kirkpatrick *et al.*, 1983)

Συνιστώσα φυσικού προβλήματος	**Μαθηματικό ανάλογο στη βελτιστοποίηση**
Καταστάσεις θερμικής ισορροπίας	Μεταβλητές ελέγχου
Ενέργεια συστήματος	Στοχική συνάρτηση
Γεννήτρια θερμικών διαταραχών	Κανόνας μετάβασης (τυχαίος περίπατος;)
Θερμοκρασία	Παράμετρος ελέγχου τυχαιότητας
Ρυθμός ψύξης	Χρονοδιάγραμμα μείωσης της θερμοκρασίας
Συνάρτηση Boltzman	Στοχαστικός κανόνας επιλογής νέων λύσεων



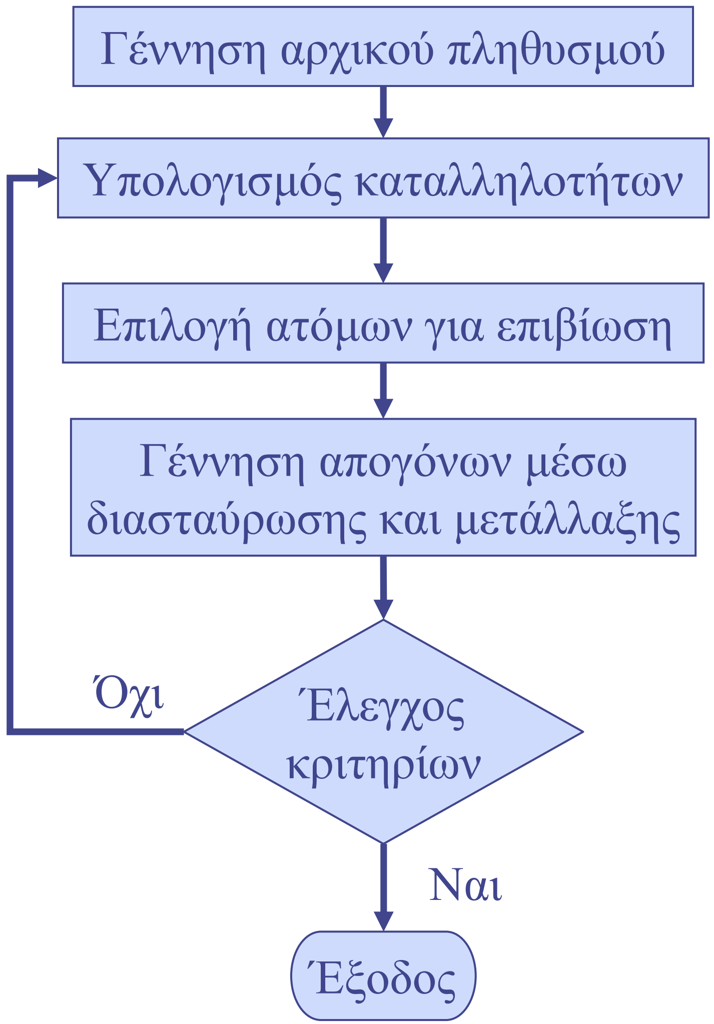
Εξελικτικοί αλγόριθμοι: Φυσική ερμηνεία και ορισμοί

- Οι εξελικτικοί αλγόριθμοι έχουν ως εννοιολογική βάση την προσομοίωση της εξέλιξης ενός **πληθυσμού** (population) εφικτών σημείων, μέσω υπολογιστικών διαδικασιών εμπνευσμένων από τη **φυσική επιλογή** και την **αναπαραγωγή**.
- Σε κάθε **άτομο** (individual) αντιστοιχεί μια εφικτή λύση. Μέτρο της ποιότητας κάθε ατόμου είναι ο **βαθμός καταλληλότητας** (fitness rate), που αποτιμάται με βάση την τιμή της στοχικής συνάρτησης και ορίζει μια αντίστοιχη **πιθανότητα επιβίωσης**.
- Η εξέλιξη πραγματοποιείται σε στάδια, που καλούνται **γενιές** (generations). Κάθε νέα λύση καλείται **απόγονος** (offspring), και γεννάται είτε με **διασταύρωση** (crossover) δύο ή περισσότερων γονέων του είτε μέσω **μετάλλαξης** (mutation).
- Η διαδικασία εξασφαλίζει βελτίωση της **μέσης ποιότητας του πληθυσμού** σε κάθε γενιά, άρα και ασυμπτωτική σύγκλιση στο ολικό ακρότατο.



Κατηγορίες εξελικτικών αλγορίθμων – Τυπικό διάγραμμα ροής

- **Γενετικοί αλγόριθμοι** (genetic algorithms): Αναπτύχθηκαν στις ΗΠΑ, στις αρχές της δεκαετίας του 1970. Κύριο χαρακτηριστικό τους είναι η κωδικοποιημένη, συνήθως δυαδική, αναπαράσταση των μεταβλητών ελέγχου. Η κύρια διαδικασία παραγωγής νέων λύσεων (σε ποσοστό άνω του 95%) είναι η **διασταύρωση**. Σε κάθε γενιά, τα ισχυρότερα άτομα έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα επιβίωσης.
- **Εξελικτικές στρατηγικές** (evolutionary strategies): Αναπτύχθηκαν στη Γερμανία, κατά τη δεκαετία του 1960. Η κύρια διαδικασία παραγωγής νέων λύσεων είναι η **μετάλλαξη**, με τη μορφή τυχαίων διαταραχών, με μέση τιμή μηδέν. Σε κάθε γενιά επιβιώνουν τα ισχυρότερα άτομα από το σύνολο των γονέων και απογόνων τους.

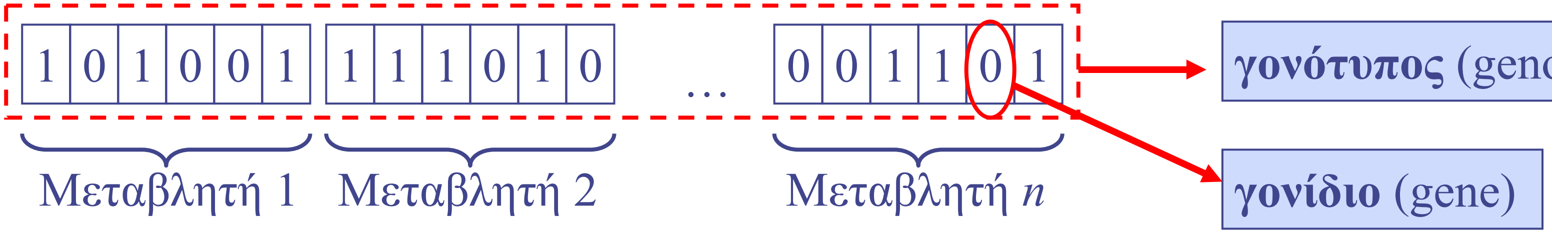


Γενετικοί αλγόριθμοι: Υπολογιστική διαδικασία

- Ο **αρχικός πληθυσμός** παράγεται με τυχαία δειγματοληψία, ενώ οι επόμενες γενιές παράγονται με εφαρμογή των λεγόμενων **γενετικών τελεστών** (genetic operators). Το μέγεθος του πληθυσμού ορίζεται από τον χρήστη και διατηρείται σταθερό.
- Μέσω του **τελεστή επιλογής** (selection), καθορίζονται οι ευκαιρίες αναπαραγωγής κάθε ατόμου, αντιστοιχώντας σε κάθε μέλος του πληθυσμού μια συγκεκριμένη πιθανότητα επιβίωσης. Η διαδικασία αποσκοπεί στη βελτίωση των μέσων γενετικών χαρακτηριστικών του πληθυσμού, παρέχοντας στα πλέον ικανά άτομα μεγαλύτερη πιθανότητα επιβίωσης στην επόμενη γενιά.
- Σε κάθε γενιά δημιουργείται μια **δεξαμενή ζευγαρώματος** (mating pool), που περιέχει ένα ή περισσότερα αντίγραφα ατόμων από τον πληθυσμό. Από εκεί επιλέγονται τυχαία τα άτομα-γονείς που, μέσω του **τελεστή διασταύρωσης** (crossover), ανταλλάσσουν τη γενετική τους πληροφορία, με σκοπό την παραγωγή στατιστικά ισχυρότερων απογόνων.
- Ο **τελεστής μετάλλαξης** (mutation) επιφέρει τυχαίες τροποποιήσεις στα γενετικά χαρακτηριστικά του πληθυσμού, με μικρή συχνότητα. Με τη μετάλλαξη επιτυγχάνεται μεγαλύτερη ποικιλία λύσεων και διαφυγή από τοπικά ακρότατα.
- Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για προκαθορισμένο **αριθμό γενεών** ή τερματίζεται εφόσον ικανοποιούνται ορισμένα κριτήρια σύγκλισης.

Γενετικοί αλγόριθμοι: Κωδικοποίηση μεταβλητών

- Συνήθως, οι συντεταγμένες των σημείων απεικονίζονται ως **δυαδικές συμβολοσειρές** (binary strings), δηλαδή ακολουθίες ψηφίων με τιμές 0 ή 1.
- Η δυαδική κωδικοποίηση εξασφαλίζει τεράστια **ευελιξία**, καθώς επιτρέπει την αναπαράσταση οποιασδήποτε έκφρασης, αριθμητικής ή όχι (π.χ. ακέραιες μεταβλητές, λογικές εκφράσεις, αριθμητικοί τελεστές, κλπ.)
- Στη δυαδική αναπαράσταση βασίζονται οι ιδιότητες της στατιστικής σύγκλισης των γενετικών αλγορίθμων, μέσω της **θεωρίας σχήματος** (schema theory).
- Η εν λόγω κωδικοποίηση μειονεκτεί ως προς την αναπαράσταση των **πραγματικών αριθμών**, αφού για μεγάλο αριθμό μεταβλητών ελέγχου που εκτείνονται σε μεγάλο εύρος απαιτείται η διαμόρφωση πολύ μεγάλων συμβολοσειρών.



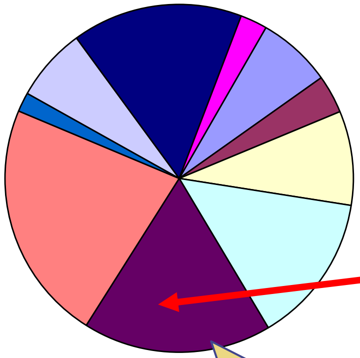
Στο παράδειγμα, σε κάθε μεταβλητή αντιστοιχούν 64 δυνατές τιμές. Η τιμή της πρώτης μεταβλητής είναι $x_1 = 1 \times 2^5 + 0 \times 2^4 + 1 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 0 \times 2^1 + 1 \times 2^0 = 41$. Οι τιμές των συντεταγμένων $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$ συνιστούν τον **φαινότυπο** (phenotype) του ατόμου.

Γενετικοί αλγόριθμοι: Τελεστές επιλογής

1. Τροχός ρουλέτας (roulette wheel): Διαμορφώνεται ένας εικονικός τροχός, με πλήθος εγκοπών όσο και το μέγεθος του πληθυσμού N, ενώ το πλάτος κάθε εγκοπής είναι ανάλογο της πιθανότητας επιλογής κάθε ατόμου i, που ορίζεται ως :

$$p_i = \varphi_i / \sum \varphi_i$$

όπου φ_i ο βαθμός καταλληλότητας του ατόμου (= f_i, εφόσον ζητείται η μεγιστοποίηση της f). Με τον τρόπο αυτό, κάθε άτομο, ακόμη και το πλέον αδύναμο, έχει μη μηδενική πιθανότητα επιλογής.



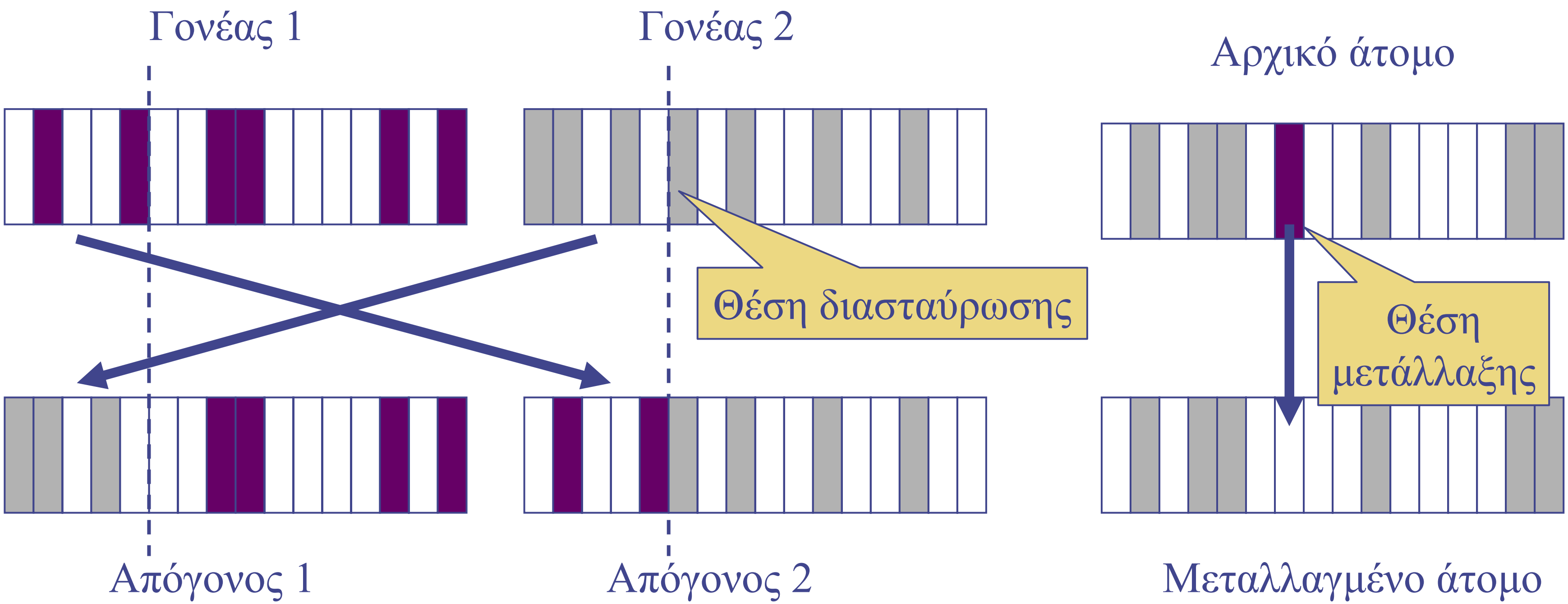
Το μέσο πλήθος αντιγράφων είναι 0.174 × 10 = 1.74

fi	pi
0.40	0.070
0.20	0.035
0.50	0.087
0.80	0.139
1.00	0.174
1.30	0.226
0.10	0.017
0.40	0.070
0.90	0.157
0.15	0.026
5.75	**1.000**

2. Διαγωνισμός (tournament): Επιλέγονται τυχαία δύο (binary tournament) ή περισσότερα άτομα, και το ισχυρότερο αντιγράφεται στη δεξαμενή ζευγαρώματος. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να συμπληρωθεί το μέγεθος του πληθυσμού.

3. Εκλεκτισμός (elitism): Η τρέχουσα βέλτιστη λύση αντιγράφεται πάντα στη δεξαμενή ζευγαρώματος, και συνεπώς προστατεύεται αφού δεν υπάρχει κίνδυνος να χαθεί εξαιτίας της τυχαιότητας της διαδικασίας επιλογής.

Γενετικοί αλγόριθμοι: Τελεστές αναπαραγωγής και μετάλλαξης



Διασταύρωση: Από τη δεξαμενή ζευγαρώματος, επιλέγονται τυχαία οι γονείς και διατάσσονται σε ζεύγη. Η συχνότητα επιλογής είναι της τάξης του 0.60 έως 0.90. Στην απλή διασταύρωση, για κάθε ζεύγος επιλέγεται μια τυχαία θέση, όπου γίνεται η ανταλλαγή της γενετικής πληροφορίας.

Μετάλλαξη: Ορισμένα γονίδια από το σύνολο του πληθυσμού αλλάζουν τιμή από 0 σε 1 και αντίστροφα. Η συχνότητα μετάλλαξης είναι ένας πολύ μικρός αριθμός, της τάξης του 0.001 έως 0.01.

Υβριδικά σχήματα σύζευξης μεθόδων τοπικής και ολικής αναζήτησης

Μέθοδοι ολικής αναζήτησης

Γενική περιγραφή: Εξελικτικές, κατά κανόνα, τεχνικές, που χρησιμοποιούν συνδυασμούς προσδιοριστικών και στοχαστικών κανόνων αναζήτησης.

Πλεονέκτημα: Ευελιξία διερεύνησης μη κυρτών χώρων, μη χρήση παραγώγων, δυνατότητα απεγκλωβισμού από τοπικά ακρότατα, στατιστικά εγγυημένη εύρεση του ολικού ακροτάτου.

Μειονέκτημα: Αργή σύγκλιση, ασάφεια ορισμού των αλγοριθμικών παραμέτρων.

Μέθοδοι τοπικής αναζήτησης

Γενική περιγραφή: Προσδιοριστικές τεχνικές βήμα προς βήμα αναζήτησης, στην κατεύθυνση βελτίωσης της τιμής της συνάρτησης.

Πλεονέκτημα: Γρήγορος και εγγυημένος εντοπισμός του τοπικού ακροτάτου, στην περιοχή έλξης του οποίου βρίσκεται το σημείο εκκίνησης του αλγορίθμου.

Μειονέκτημα: Εγκλωβισμός σε τοπικά ακρότατα, κακή συμπεριφορά σε μη κυρτές επιφάνειες απόκρισης.

Ακρίβεια

Διαμόρφωση στοχαστικών εξελικτικών σχημάτων, που για τη γέννηση νέων λύσεων χρησιμοποιούν υπολογιστικές διαδικασίες των μεθόδων τοπικής αναζήτησης, για αύξηση της ταχύτητας σύγκλισης.

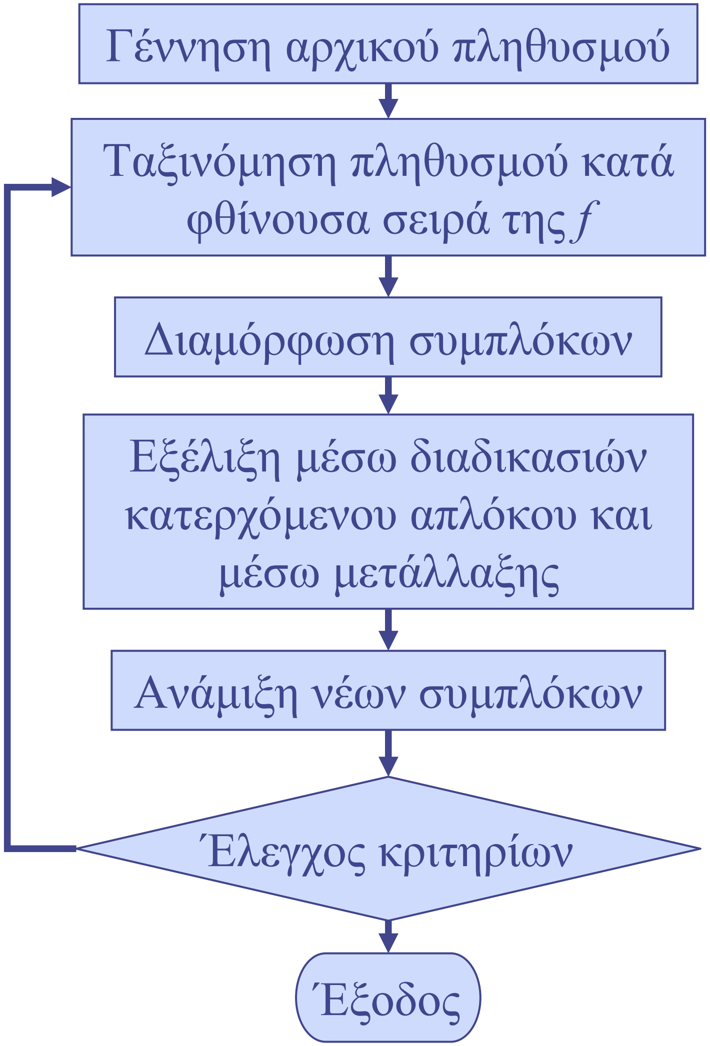
Ταχύτητα

Κατηγορίες υβριδικών σχημάτων

- **Γενετικοί αλγόριθμοι με πραγματική κωδικοποίηση**: Χρησιμοποιούν πραγματικές και όχι κωδικοποιημένες μεταβλητές ελέγχου (συμβολοσειρές), με κατάλληλη προσαρμογή των τελεστών διασταύρωσης και μετάλλαξης.
- **Παράλληλοι γενετικοί αλγόριθμοι**: Ο πληθυσμός χωρίζεται σε υποπληθυσμούς που εξελίσσονται ανεξάρτητα, ενώ κατά περιόδους επιτρέπεται η ανταλλαγή λύσεων – διαδικασία που αναφέρεται ως μετανάστευση (migration).
- **Υβριδικοί εξελικτικοί αλγόριθμοι**: Για την επιτάχυνση της διαδικασίας αναζήτησης εφαρμόζουν, αντί του τελεστή διασταύρωσης, πρότυπα των μεθόδων άμεσης αναζήτησης (π.χ. μετασχηματισμοί κατερχόμενου απλόκου).
- **Εξελικτικοί αλγόριθμοι με έλεγχο διασποράς**: Επέμβαση στη διαδικασία επιλογής, που ευνοεί την επιβίωση απομακρυσμένων λύσεων (προς όφελος της διατήρησης μεγαλύτερης διασποράς στον πληθυσμό, και συνεπώς πιο εκτενούς διερεύνησης του εφικτού χώρου), σε σχέση με λύσεις που συσσωρεύονται γύρω από τοπικά ακρότατα.
- **Μέθοδοι ανόπτησης-απλόκου**: Ως σχήμα εξέλιξης, χρησιμοποιείται η μέθοδος κατερχόμενου απλόκου, όπου η προς αντικατάσταση κορυφή επιλέγεται με βάση πιθανοτικούς κανόνες, που εξαρτώνται από την τρέχουσα «θερμοκρασία».

Εξέλιξη αναδιατασσόμενων συμπλόκων (SCE-UA, Duan *et al.*, 1992)

- Η μέθοδος SCE-UA (shuffled complex evolution) αναπτύχθηκε στο Πανεπιστήμιο της Αριζόνα, και μέχρι πρόσφατα (πριν την εξάπλωση των πολυκριτηριακών μεθόδων) υπήρξε η πλέον πρόσφορη **τεχνική βαθμονόμησης** υδρολογικών μοντέλων.
- Ο πληθυσμός διαχωρίζεται σε **σύμπλοκα** (complexes), δηλαδή υποσύνολα μεγέθους $m > n + 1$, που εξελίσσονται παράλληλα.
- Αντί της διασταύρωσης δύο γονέων, εφαρμόζονται τυπικοί μετασχηματισμοί της **μεθόδου Nelder-Mead**.
- Περιοδικά, γίνεται **μίξη του πληθυσμού** και επανασχηματισμός των συμπλόκων, επιτρέποντας τη διάχυση των πληροφοριών που συλλέγονται κατά την αναζήτηση.



Υπάρχει μια «βέλτιστη» μέθοδος βελτιστοποίησης;

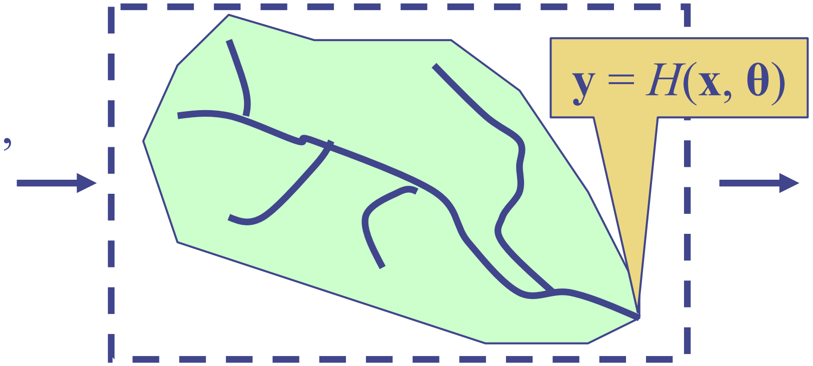
- Η «ολικά βέλτιστη» μέθοδος βελτιστοποίησης θα πρέπει να συνδυάζει τα δύο ακόλουθα θεμελιώδη χαρακτηριστικά επίδοσης (Duan *et al.*, 1992):
  - **αποτελεσματικότητα** (effectiveness), δηλαδή υψηλή αξιοπιστία εντοπισμού (ή προσέγγισης) του ολικού ακροτάτου της συνάρτησης·
  - **αποδοτικότητα** (efficiency), δηλαδή υψηλή ταχύτητα σύγκλισης (εγγυημένος εντοπισμός του ολικού ακροτάτου, με εύλογο πλήθος δοκιμών).
- Τα χαρακτηριστικά αυτά είναι **αντικρουόμενα** (π.χ. η συστηματική αναζήτηση σε πλέγμα πυκνής διακριτοποίησης προσεγγίζει το ολικό βέλτιστο με ακρίβεια, αλλά και απαιτεί ανέφικτα υψηλό υπολογιστικό φόρτο, ενώ οι γρήγορες τεχνικές άμεσης αναζήτησης εγκλωβίζονται εύκολα σε τοπικά ακρότατα).
- Η επίδοση ενός αλγορίθμου ελέγχεται μόνο **πειραματικά**, επιλύοντας διάφορους τύπους προβλημάτων και από διαφορετικές συνθήκες εκκίνησης.
- Τα **εξελικτικά υβριδικά σχήματα** βελτιστοποίησης δείχνουν να υπερτερούν, στις περισσότερες κατηγορίες προβλημάτων βελτιστοποίησης της πράξης.
- Μειονέκτημά τους είναι η ύπαρξη αρκετών **παραμέτρων εισόδου**, που επηρεάζουν σημαντικά την επίδοση των αλγορίθμων (π.χ. μέγεθος πληθυσμού), ο ορισμός των οποίων προϋποθέτει χρήστες υψηλής εμπειρίας.

Εκτίμηση παραμέτρων υδρολογικών μοντέλων

Κατηγορίες μοντέλων

- **Φυσικής βάσης**: Αναπαριστούν σε λεπτομερή χωρική κλίμακα τις υδρολογικές διεργασίες μιας λεκάνης απορροής ή ενός υδροφορέα, συναρτήσει των φυσικών νόμων που σχετίζονται με την κίνηση του νερού. Οι παράμετροί τους έχουν φυσική ερμηνεία, και υπολογίζονται με βάση τα χωρικά χαρακτηριστικά της λεκάνης (τοπογραφικά, εδαφολογικά, υδρογεωλογικά, κλπ.) ή μέσω μετρήσεων πεδίου.
- **Εννοιολογικά** (conceptual): Αναπαριστούν τις κύριες διεργασίες μιας λεκάνης ή των υπολεκανών της, με παραμέτρους $\boldsymbol{\theta}$ που εκτιμώνται με βάση τις παρατηρημένες χρονοσειρές απόκρισης της λεκάνης. Πλεονέκτημά τους είναι η δυνατότητα αναπαράστασης πολύπλοκων και χωρικά ανομοιογενών διεργασιών, μέσω ενός μικρού, σχετικά, αριθμού παραμέτρων που, αν και δεν έχουν πλήρη φυσική έννοια, θεωρούνται αντιπροσωπευτικές των «μέσων» χαρακτηριστικών της λεκάνης.

Φόρτιση λεκάνης, x: βροχόπτωση, χιονόπτωση, δυνητική εξατμοδιαπνοή, υδατικές απολήψεις κτλ.



Απόκριση λεκάνης, y: απορροή, πραγματική εξάτμιση, κατείσδυση, εκφόρτιση υδροφορέα (επίγεια, υπόγεια) κτλ.

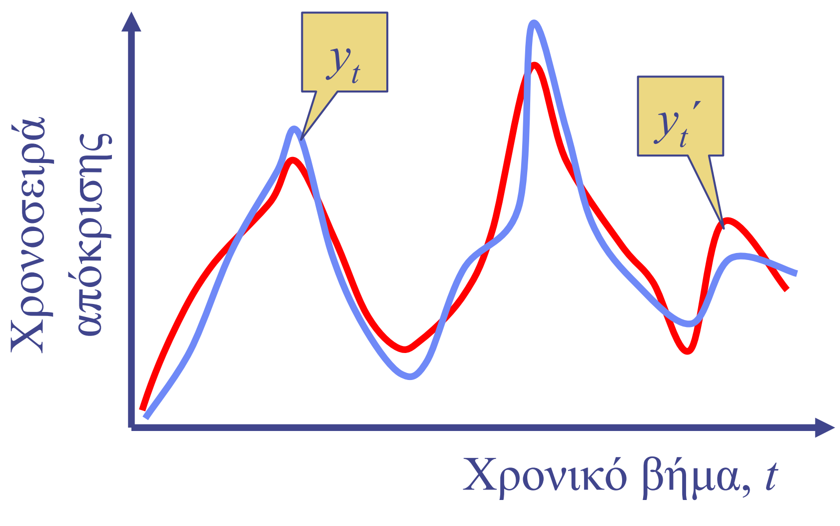
Εκτίμηση παραμέτρων υδρολογικών μοντέλων

Αυτοματοποίηση της διαδικασίας βαθμονόμησης

- Επιλέγονται οι παράμετροι (= μεταβλητές ελέγχου) του μοντέλου, **θ**, και ορίζεται το **πεδίο αναζήτησης** *Θ*, που κατά κανόνα δίνεται με τη μορφή άνω και κάτω ορίων.
- Επιλέγεται ένα **δείγμα παρατηρήσεων** ως προς τις αποκρίσεις **y**, που πρέπει να είναι αντιπροσωπευτικό της υδρολογικής δίαιτας της λεκάνης.
- Διαμορφώνεται ένα **βαθμωτό μέτρο προσαρμογής** *g* μεταξύ των προσομοιωμένων (**y**΄) και των παρατηρημένων (**y**) χρονοσειρών απόκρισης.
- Διατυπώνεται το πρόβλημα **μη γραμμικής βελτιστοποίησης**:

  $$\min g(\boldsymbol{\theta}),\ \boldsymbol{\theta} \in \Theta$$

- Με εφαρμογή του κατάλληλου **αλγορίθμου** βελτιστοποίησης, εντοπίζονται οι βέλτιστες τιμές των παραμέτρων, $\boldsymbol{\theta}^* \in \Theta$.
- Ελέγχεται η προσαρμογή του μοντέλου σε μια μεταγενέστερη περίοδο (**επαλήθευση**).



Εκτίμηση παραμέτρων υδρολογικών μοντέλων

Τυπικά μέτρα καλής προσαρμογής

1. Μέσο τετραγωνικό σφάλμα:

$$\mathrm{RMS} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - y_i')^2}$$

Αν, αντί του τετραγώνου, το σφάλμα υψωθεί σε μεγαλύτερη άρτια δύναμη, δίνεται μεγαλύτερη έμφαση στην αναπαράσταση των αιχμών της απόκρισης.

2. Συντελεστής προσδιορισμού (δείκτης Nash-Sutcliffe):

$$r = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i - y_i')^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \overline{y})^2}$$

Αδιάστατο μέτρο, που λαμβάνει τιμές από – ∞ μέχρι 1 (= τέλεια προσαρμογή), και εκφράζει κατά πόσο η προσομοιωμένη απόκριση y_t' αποτελεί καλύτερη εκτίμηση σε σχέση με την παρατηρημένη μέση τιμή.

3. Μέσο σφάλμα ή μεροληψία:

$$\mathrm{BIAS} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - y_i')$$

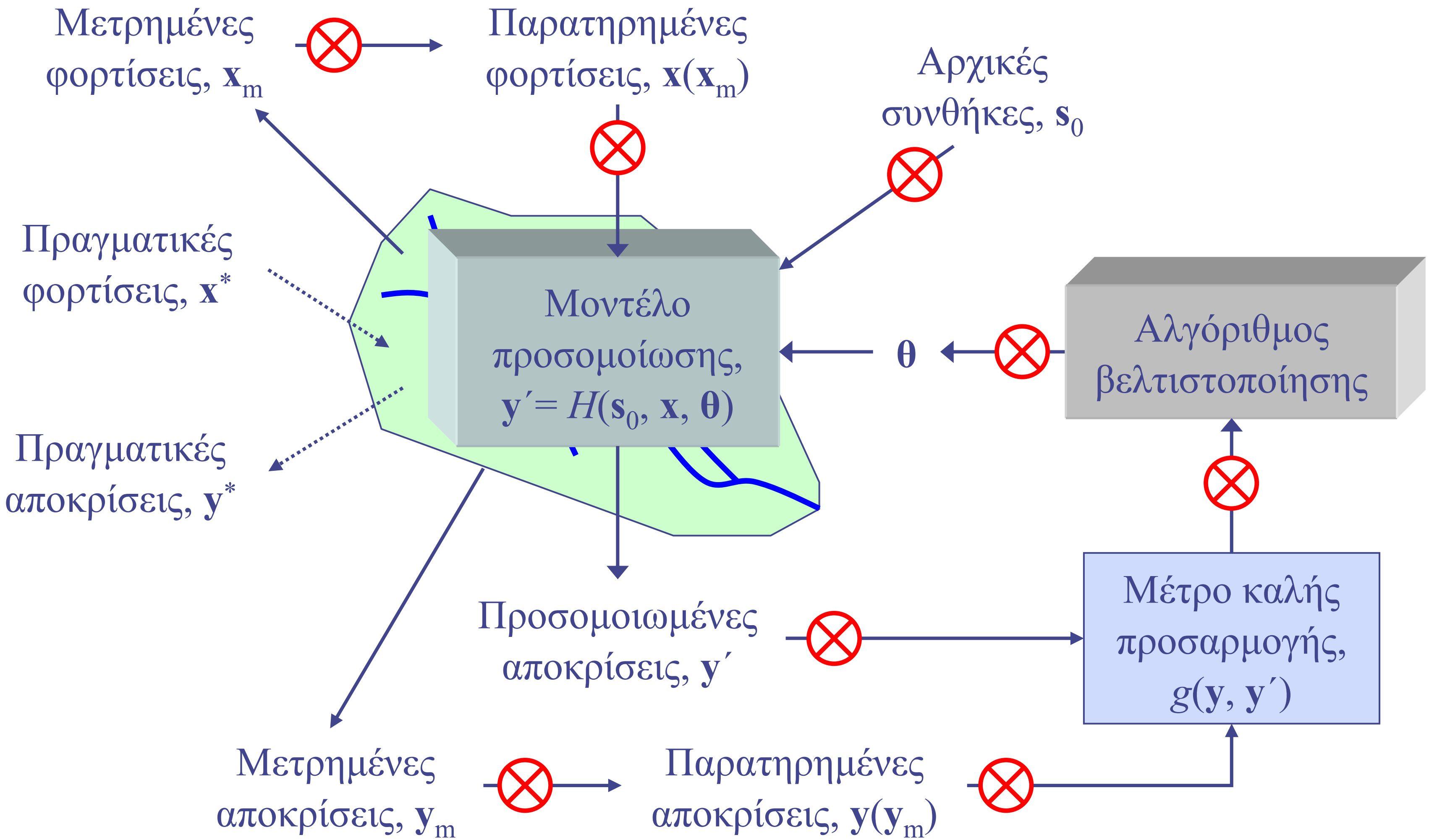
Εκφράζει τη διαφορά της μέσης προσομοιωμένης από τη μέση παρατηρημένη χρονοσειρά απόκρισης.

Εκτίμηση παραμέτρων υδρολογικών μοντέλων

Πηγές αβεβαιότητας στη βαθμονόμηση

- **Μαθηματική δομή μοντέλου**: Υπερβολικά αδρή αναπαράσταση των φυσικών διεργασιών, έως και απόκρυψη σημαντικών πτυχών του υδρολογικού κύκλου (υπο-παραμετροποίηση) ή χρήση περισσότερων παραμέτρων από όσες μπορούν να υποστηρίξουν η πολυπλοκότητα των φυσικών διεργασιών, σε συνδυασμό με τα διαθέσιμα ιστορικά δεδομένα (υπερ-παραμετροποίηση).
- **Αντιπροσωπευτικότητα πληροφορίας**: Προσαρμογή σε δείγματα που δεν καλύπτουν όλο το φάσμα των υδρολογικών καταστάσεων της λεκάνης, τόσο των «μέσων» όσο και των «ακραίων.
- **Σφάλματα δεδομένων**: Οι ιστορικές χρονοσειρές φορτίσεων και αποκρίσεων προέρχονται από την επεξεργασία πρωτογενών μετρήσεων. Τόσο οι μετρήσεις όσο και οι επεξεργασίες υπόκειται σε συστηματικά και τυχαία σφάλματα.
- **Αρχικές συνθήκες**: Οι συνθήκες εκκίνησης της προσομοίωσης (υγρασία εδάφους, αποθήκευση υπόγειου νερού), είναι μη μετρήσιμες και, συνεπώς, άγνωστες.
- **Στοχική συνάρτηση**: Η βαθμονόμηση με χρήση διαφορετικών μέτρων καλής προσαρμογής, καθώς και η επιλογή διαφορετικών περιόδων ελέγχου, οδηγεί σε βέλτιστες τιμές παραμέτρων που διαφέρουν, και ενδεχομένως σημαντικά.

Εκτίμηση παραμέτρων υδρολογικών μοντέλων
Αλληλεπίδραση αβεβαιοτήτων



Εκτίμηση παραμέτρων υδρολογικών μοντέλων
Τελικές επισημάνσεις

- Η **προγνωστική ικανότητα** ενός μοντέλου ελέγχεται με βάση δύο κριτήρια:
  - το μοντέλο αναπαράγει όλο το φάσμα των ιστορικών αποκρίσεων·
  - οι παράμετροι είναι συνεπείς με τα φυσικά χαρακτηριστικά της λεκάνης.
- Η κύρια δυσκολία στη βαθμονόμηση ενός μοντέλου έγκειται στην ύπαρξη πολλών συνδυασμών παραμέτρων, που παράγουν **ισοδύναμα καλές αποκρίσεις** της λεκάνης (στη βιβλιογραφία χρησιμοποιείται ο όρος equifinality). Το γεγονός αυτό συνεπάγεται μεγάλη αβεβαιότητα ως προς την προγνωστική ικανότητα των μοντέλων, που γίνεται πιο έντονη όσο αυξάνει ο αριθμός των παραμέτρων.
- Η έρευνα στην υδρολογία έχει στραφεί στην **ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας**, είτε με στατιστικές μεθόδους είτε με ταυτόχρονη βελτιστοποίηση πολλαπλών κριτηρίων καλής προσαρμογής.
- Η διεθνής εμπειρία αποδεικνύει ότι δεν υπάρχει ούτε το «ολικά βέλτιστο» μοντέλο, ούτε το «ολικά βέλτιστο» κριτήριο καλής προσαρμογής, ούτε ο «ολικά βέλτιστος» αλγόριθμος βελτιστοποίησης. Αναγνωρίζεται, ωστόσο, ότι η χρήση μοντέλων **φειδωλών σε παραμέτρους** περιορίζει την αβεβαιότητα και συνεπάγεται πιο ευσταθή και πιο αξιόπιστα μαθηματικά σχήματα.

Βιβλιογραφία μη γραμμικής βελτιστοποίησης

- Belegundu, A. D, and T. R. Chandrupatla, *Optimization Concepts and Applications in Engineering*, Prentice-Hall Inc., 1999.
- Pierre, D. A., *Optimization Theory with Applications*, Dover Publications, New York, 1986.
- Press, W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, 2nd edition, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1992.
- Rubinstein, R. Y., *Monte Carlo Optimization, Simulation and Sensitivity of Queuing Networks*, John Willey, 1986.
- Goldberg, D. E., *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley Publishing Company, 1989.
- Kirkpatrick, S., C. D. Gelatti, and M. P. Vecchi, Optimization by simulated annealing, *Science*, 220, 671-680, 1983.
- Marlow, W. H., *Mathematics for Operations Research*, Dover Publications, New York, 1993.
- Michalewicz, Z., *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*, Springer-Verlag, New York, 1996.
- Nelder, J. A., and R. Mead, A simplex method for function minimization, *Computer Journal*, 7(4), 308-313, 1965.
- Schwefel, H.-P., *Evolution and Optimum Seeking*, John Willey, 1994.
- Van Laarhoven, P. J. M., and E. H. L. Aarts, *Simulated Annealing: Theory and Applications*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, 1987.

Βαθμονόμηση μοντέλων: Επιλεγμένα άρθρα

- Beven, K. J., and A. M. Binley, The future of distributed models: model calibration and uncertainty prediction, *Hydrological Processes*, 6, 279-298, 1992.
- Boyle, D. P., Gupta, H. V., and S. Sorooshian, Toward improved calibration of hydrologic models: Combining the strengths of manual and automatic methods, *Water Resources Research*, 36(12), 3663-3674, 2000.
- Duan, Q., S. Sorooshian, and V. K. Gupta, Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models, *Water Resources Research*, 28(4), 1015-1031, 1992.
- Franchini, M., G. Galeati, and S. Berra, Global optimization techniques for the calibration of conceptual rainfall–runoff models, *Hydrological Sciences Journal*, 43(3), 443–458, 1998.
- Freer, J., K. J. Beven, and B. Ambroise, Bayesian estimation of uncertainty in runoff prediction and the value of data: An application of the GLUE approach, *Water Resources Research*, 32(7), 2161-2173, 1996.
- Gan, T. Y., E. M. Dlamini, and G. F. Biftu, Effects of model complexity and structure, data quality, and objective functions on hydrologic modelling, *Journal of Hydrology*, 192, 81-103, 1997.
- Gupta, H. V., S. Sorooshian, and P. O. Yapo, Toward improved calibration of hydrologic models: Multiple and non-commensurable measures of information, *Water Resources Research*, 34(4), 751-763, 1998.
- Madsen, H., Automatic calibration of a conceptual rainfall-runoff model using multiple objectives, *Journal of Hydrology*, 235(4), 276-288, 2000.
- Refsgaard, J. C.: Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models, *Journal of Hydrology*, 198, 69-97, 1997.
- Rozos, E., A. Efstratiadis, I. Nalbantis, and D. Koutsoyiannis, Calibration of a semi-distributed model for conjunctive simulation of surface and groundwater flows, *Hydrological Sciences Journal*, 49(5), 819-842, 2004.
- Wagener, T., D. P. Boyle, M. Lees, H. S. Wheater, H. V. Gupta, and S. Sorooshian, A framework for development and application of hydrological models, *Hydrology and Earth System Sciences*, 5(1), 13-26, 2001.