Σημειώσεις στα πλαίσια του μαθήματος:

Βελτιστοποίηση συστημάτων υδατικών πόρων – Υδροπληροφορική

Τοπικές και ολικές τεχνικές βελτιστοποίησης

Ανδρέας Ευστρατιάδης & Χρήστος Μακρόπουλος

Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Το πρόβλημα μη γραμμικής (ολικής) βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς

- Γενική διατύπωση προβλημάτων βελτιστοποίησης:

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

- Χαρακτηριστικά προβλήματος *ολικής βελτιστοποίησης* (global optimization):
  - Μη γραμμική στοχική συνάρτηση
  - Συνεχείς μεταβλητές ελέγχου:

$$\mathbf{x} \in R^n$$

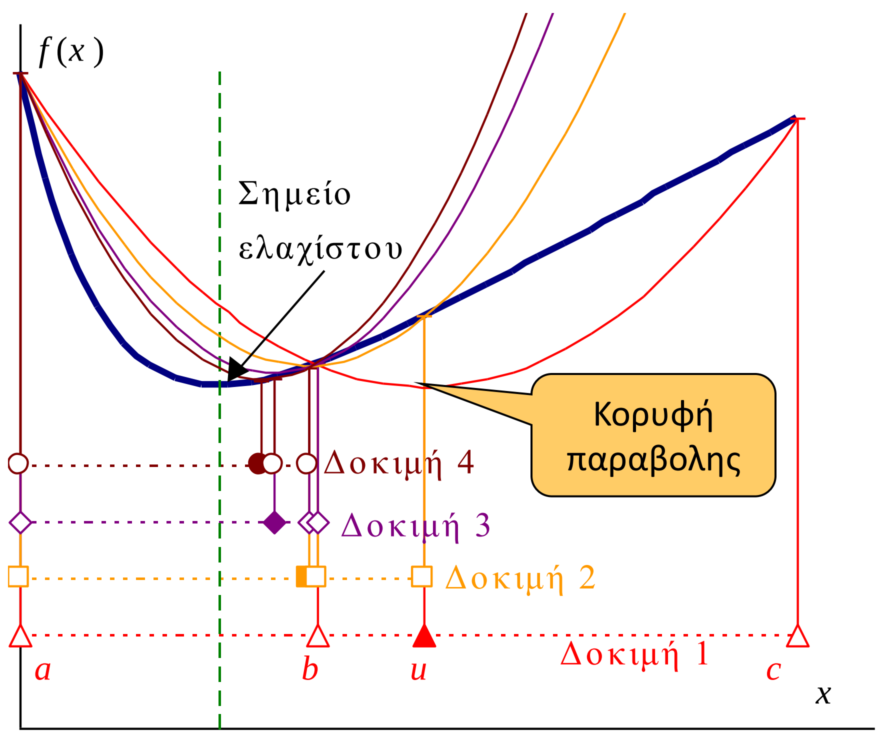
  - Απουσία περιορισμών, με εξαίρεση ρητούς περιορισμούς της μορφής:

$$l_j \leq x_j \leq u_j \;\forall\; j = 1, \ldots, n$$

- Στη γενική περίπτωση, η στοχική συνάρτηση δεν είναι μόνο μη γραμμική αλλά και *μη κυρτή*, που σημαίνει ότι περιέχει περισσότερα από ένα ακρότητα.
- Επιπλέον, η συνάρτηση (και προφανώς οι παράγωγοί της) δεν έχουν αναλυτική έκφραση, οπότε ο χειρισμός του προβλήματος γίνεται αποκλειστικά με *αριθμητικές μεθόδους*.
- Ο συνδυασμός των παραπάνω οδηγεί στο συμπέρασμα ότι το πρόβλημα μη γραμμικής βελτιστοποίησης επιλύεται προσεγγιστικά – καμία μέθοδος δεν εγγυάται τον εντοπισμό του ολικού ακροτάτου της συνάρτησης με πεπερασμένο αριθμό δοκιμών.

Αναζήτηση ακροτάτου συνάρτησης μιας μεταβλητής (ελαχιστοποίηση σε «γραμμή»)

- Επιλύεται το πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης *f*(*x*), με αριθμητικές τεχνικές (π.χ. χρυσή τομή, παραβολική παρεμβολή· βλ. Press *et al.*, 1992).
- Κατά κανόνα χρησιμοποιείται ως βοηθητική ρουτίνα πιο σύνθετων αλγορίθμων, για τον εντοπισμό της βέλτιστης τιμής μιας πολυμεταβλητής συνάρτησης *f*(**x**) σε ένα ευθύγραμμο τμήμα (line minimization), ήτοι μια τομή του εφικτού χώρου.



Μέθοδος παραβολικής παρεμβολής

1. Ξεκινάμε από τρία σημεία *a*, *b*, *c*.
2. Πυκνώνουμε με ένα ακόμη σημείο (*u*) προσαρμόζοντας παραβολή στα τρία γνωστά σημεία (*a*, *b*, *c*) και υπολογίζοντας την κορυφή της παραβολής.
3. Εξετάζουμε ποιο από τα δύο ενδιάμεσα σημεία έχει τη μικρότερη τεταγμένη.
4. Κρατάμε αυτό το σημείο και δύο εναλλάξ.
5. Σταματάμε όταν το διάστημα που ορίζουν τα δύο ακραία σημεία προς το άθροισμα των τετμημένων των δύο ενδιάμεσων σημείων (κατ' απόλυτη τιμή) γίνει μικρότερο από μια τιμή ανοχής.

Τεχνικές αναζήτησης τοπικών ακροτάτων

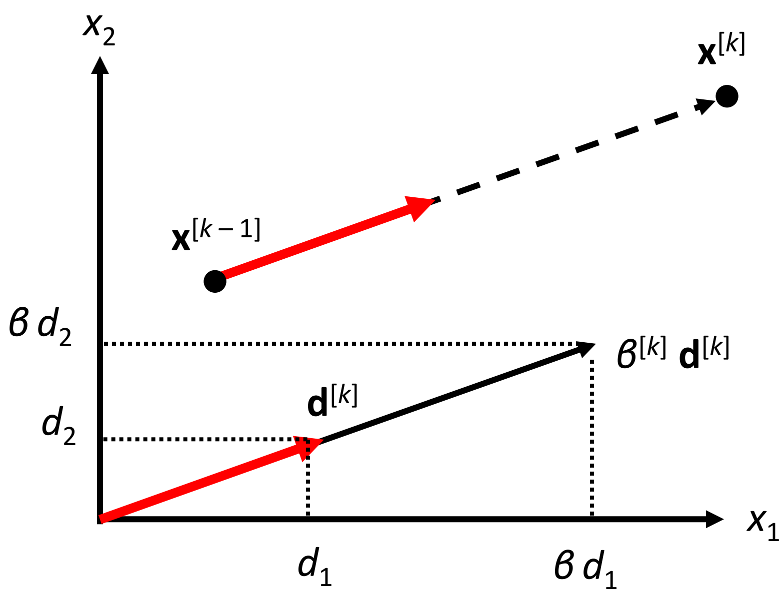
- Πρόκειται για επαναληπτικές αριθμητικές μεθόδους που, ξεκινώντας από μια αρχική λύση $\mathbf{x}^{[0]}$, βελτιώνουν σταδιακά την τιμή της στοχικής συνάρτησης $f(\mathbf{x})$, παράγοντας μια βελτιωμένη λύση με εφαρμογή κανόνων μετάβασης της μορφής:

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

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

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

- Η παραπάνω προσδιοριστική διαδικασία εγγυάται σύγκλιση στο τοπικό ελάχιστο που βρίσκεται εγγύτερα στο σημείο εκκίνησης $\mathbf{x}^{[0]}$.
- Οι επιμέρους τεχνικές αναζήτησης τοπικών ακροτάτων διαφοροποιούνται με βάση τη διαδικασία εκτίμησης των παραμέτρων β και $\mathbf{d}$.
- Οι μέθοδοι 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).



Πλέον απότομη κατάβαση (steepest descent)

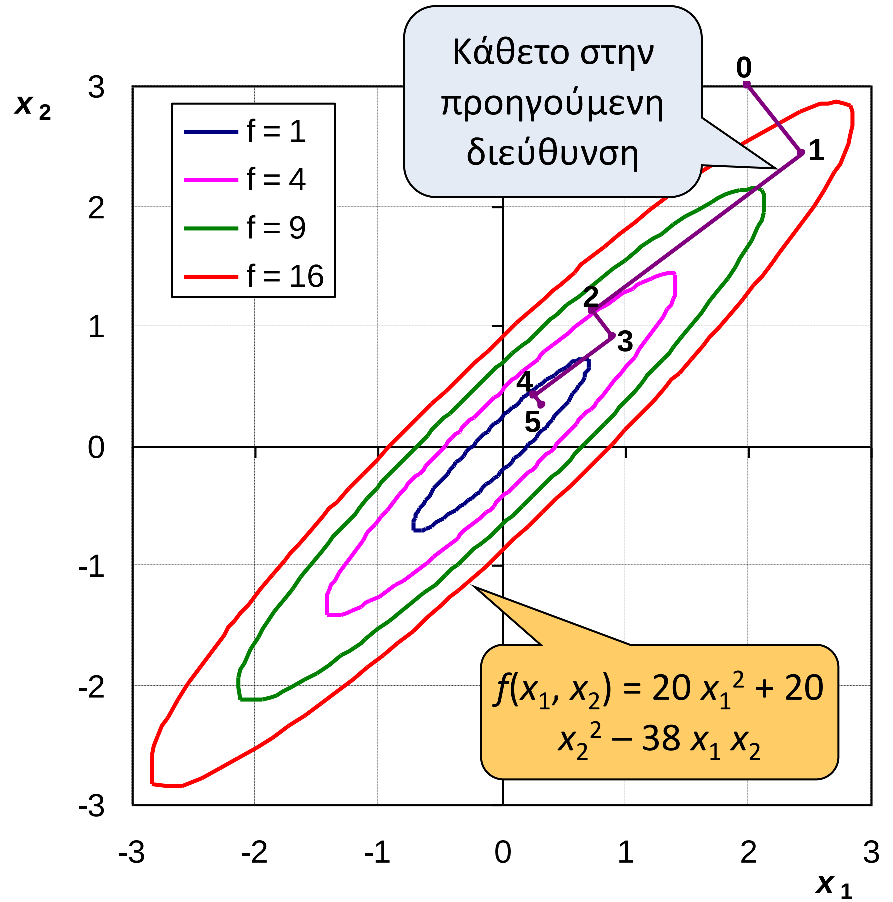
- Πρόκειται για την απλούστερη τεχνική κλίσης, στην οποία η διεύθυνση **d** είναι αντίθετη στο διάνυσμα κλίσης ∇f της συνάρτησης f. Η διαδικασία αναζήτησης βασίζεται στον κανόνα κίνησης του νερού και γράφεται:

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

- Η μετακίνηση είναι πάντα κάθετη στη διεύθυνση της τρέχουσας λύσης $\mathbf{x}^{[k-1]}$, ενώ κάθε επόμενο σημείο $x^{[k]}$ είναι η θέση ελαχίστου της f κατά μήκος της διεύθυνσης που ορίζει η κλίση $\nabla f(\mathbf{x}^{[k-1]})$.
- Το μέτρο $\beta^{[k]}$ προσδιορίζεται έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται η f στο ευθύγραμμο τμήμα $\mathbf{x}^{[k-1]} - \beta \nabla f(\mathbf{x}^{[k-1]})$, ήτοι:

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

- Συνεπώς, σε κάθε επαναληπτικό βήμα k διαμορφώνεται ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας μεταβλητής, το οποίο επιλύεται αριθμητικά.
- Μειονέκτημα της μεθόδου είναι η αργή σύγκλιση (κάθετα, μικρά βήματα).



Συζυγείς κλίσεις (conjugate gradients)

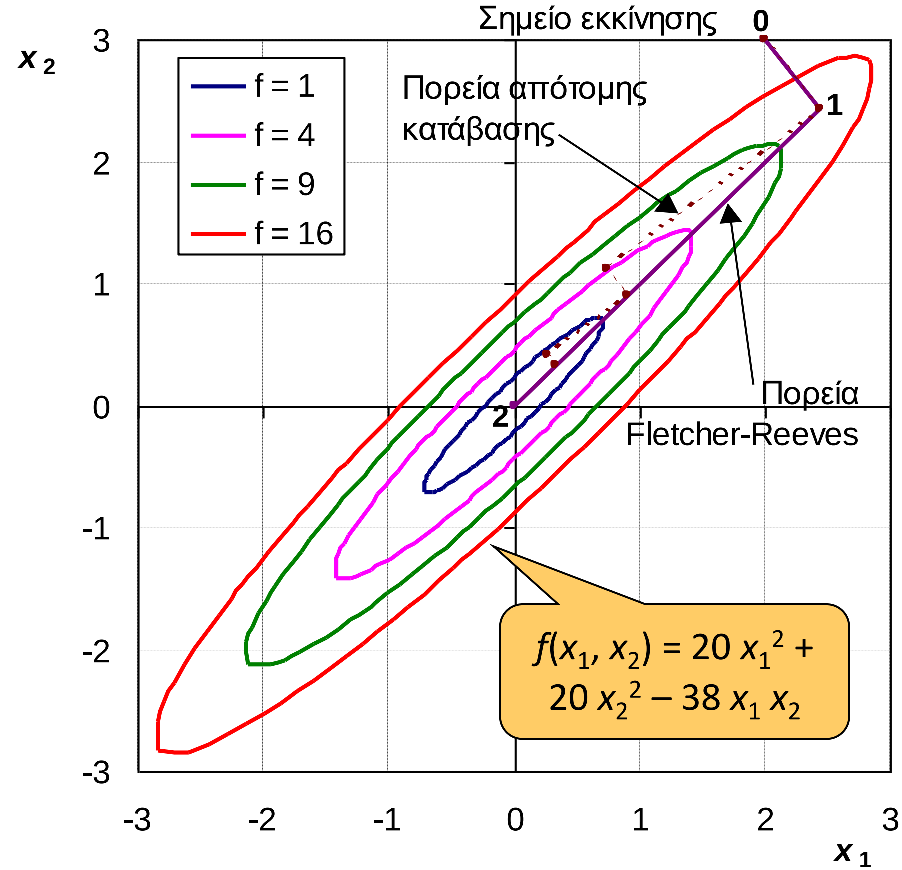
- Η πορεία αναζήτησης επιταχύνεται σημαντικά, όταν η διεύθυνση **d** παράγεται ως γραμμικός συνδυασμός του διανύσματος κλίσης στο τρέχον ($\mathbf{x}^{[k-1]}$) και το προηγούμενο ($\mathbf{x}^{[k-2]}$) σημείο, ως εξής:

$$\mathbf{x}^{[k]} = \mathbf{x}^{[k-1]} - \beta^{[k]} \left[\nabla f(\mathbf{x}^{[k-1]}) + \gamma^{[k]} \nabla f(\mathbf{x}^{[k-2]})\right]$$

- Στην εκδοχή των Fletcher and Reeves (1964), η παράμετρος $\gamma^{[k]}$ εκτιμάται ως ο λόγος:

$$\gamma^{[k]} = \nabla f(\mathbf{x}^{[k-1]})^{2} / \nabla f(\mathbf{x}^{[k-2]})^{2}$$

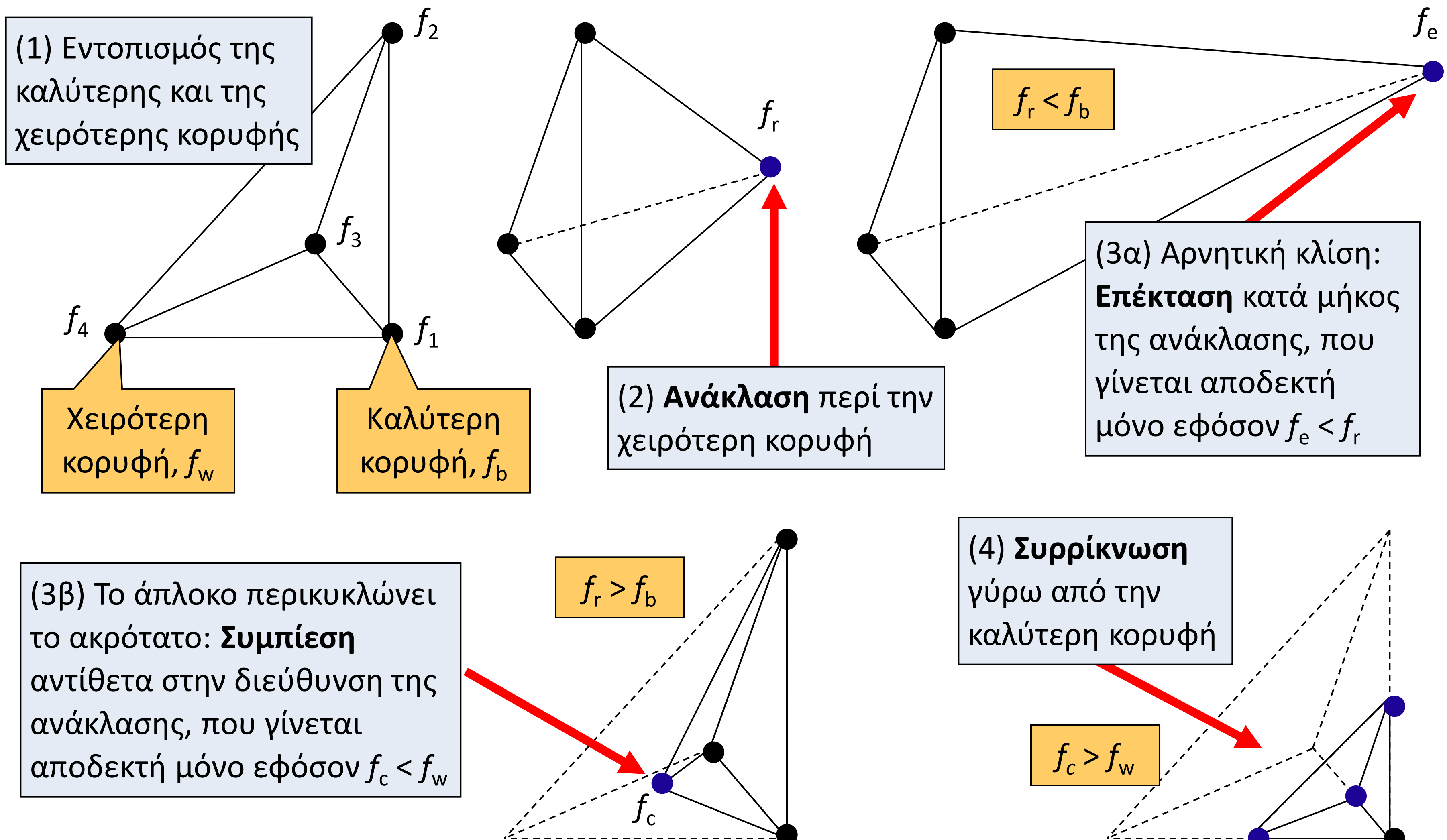
- Άλλες εκδοχές της μεθόδου δίνονται από τους Press *et al.* (1992).
- Σε κάθε περίπτωση, το μέτρο $\beta^{[k]}$ προσδιορίζεται όπως στη μέθοδο της πλέον απότομης κατάβασης, δηλαδή με ελαχιστοποίηση της βοηθητικής έκφρασης $g(\beta) = f(\mathbf{x}^{[k]})$.
- Στη μέθοδο συζυγών κλίσεων, αποδεικνύεται ότι αν η συνάρτηση f είναι **τετραγωνικής μορφής**, το ακρότατο εντοπίζεται σε n βήματα.



Τεχνικές άμεσης αναζήτησης

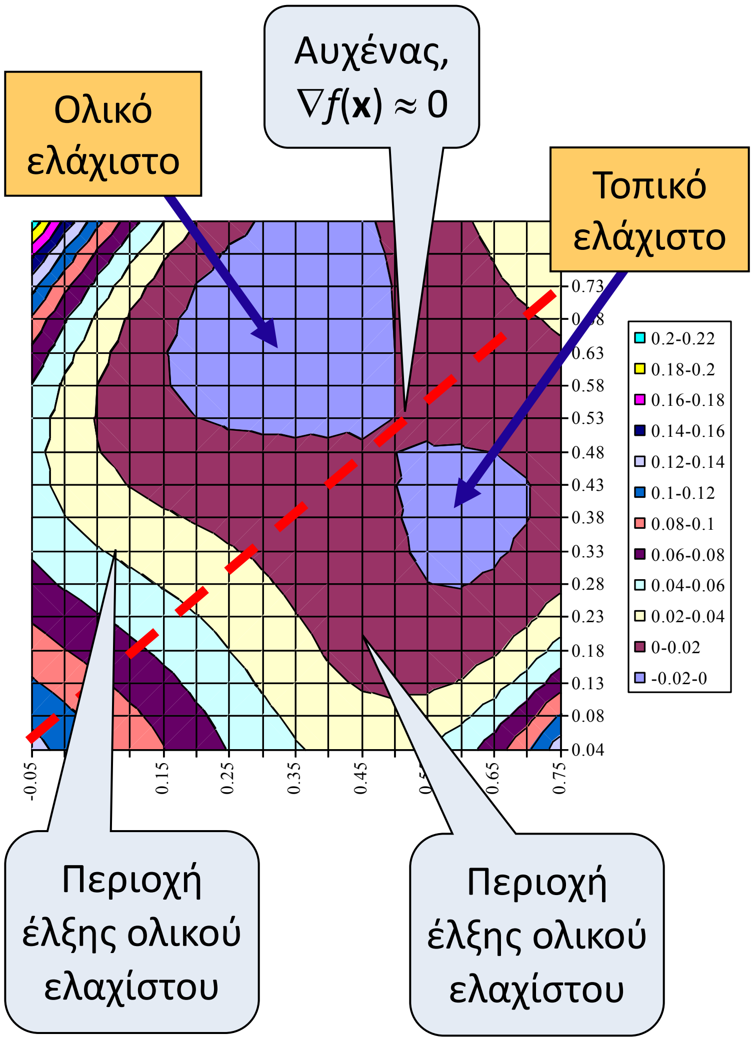
- Στα περισσότερα προβλήματα της πράξης, η εφαρμογή των μεθόδων κλίσης καθίσταται υπολογιστικά ασύμφορη, εφόσον:
  - δεν είναι γνωστή η αναλυτική έκφραση των παραγώγων, οπότε απαιτούνται αριθμητικές προσεγγίσεις με εξισώσεις διαφορών (ειδικά σε πολυδιάστατους χώρους, τραχείας γεωμετρίας, όπου απαιτείται η χρήση μικρών διαφορών)·
  - η αριθμητική επίλυση του προβλήματος μονοδιάστατης βελτιστοποίησης σε κάθε επαναληπτικό βήμα είναι χρονοβόρα, καθώς η συνάρτηση $g(\beta)$ 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
- Ειδικότερα, 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 απαιτούνται και για την πλέον στοιχειώδη αριθμητική προσέγγιση της κλίσης της f).

Μέθοδος κατερχόμενου απλόκου (downhill simplex· Nelder and Mead, 1965)



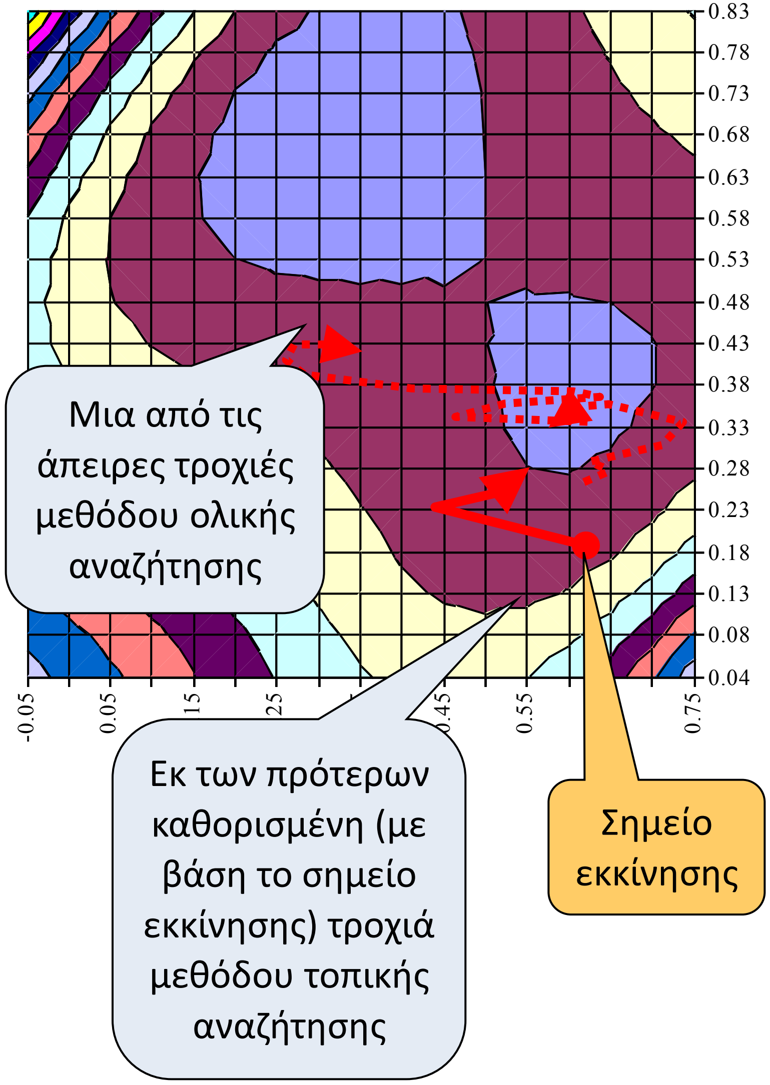
Γιατί οι μέθοδοι τοπικής αναζήτησης δεν εγγυώνται τον εντοπισμό του ολικού βελτίστου;

- Οι τεχνικές τοπικής αναζήτησης είναι κατάλληλες για κυρτές συναρτήσεις, που έχουν ένα και μοναδικό ακρότατο.
- Σε μη κυρτές συναρτήσεις, οι τεχνικές τοπικής αναζήτησης εντοπίζουν το εγγύτερο ακρότατο που ανήκει στην **περιοχή έλξης** (region of attraction) του σημείου εκκίνησης – συνεπώς, η εύρεση του ολικού βελτίστου εξαρτάται από την, κατά κανόνα τυχαία, διαδικασία εκκίνησης.
- 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 ολικής βελτιστοποίησης

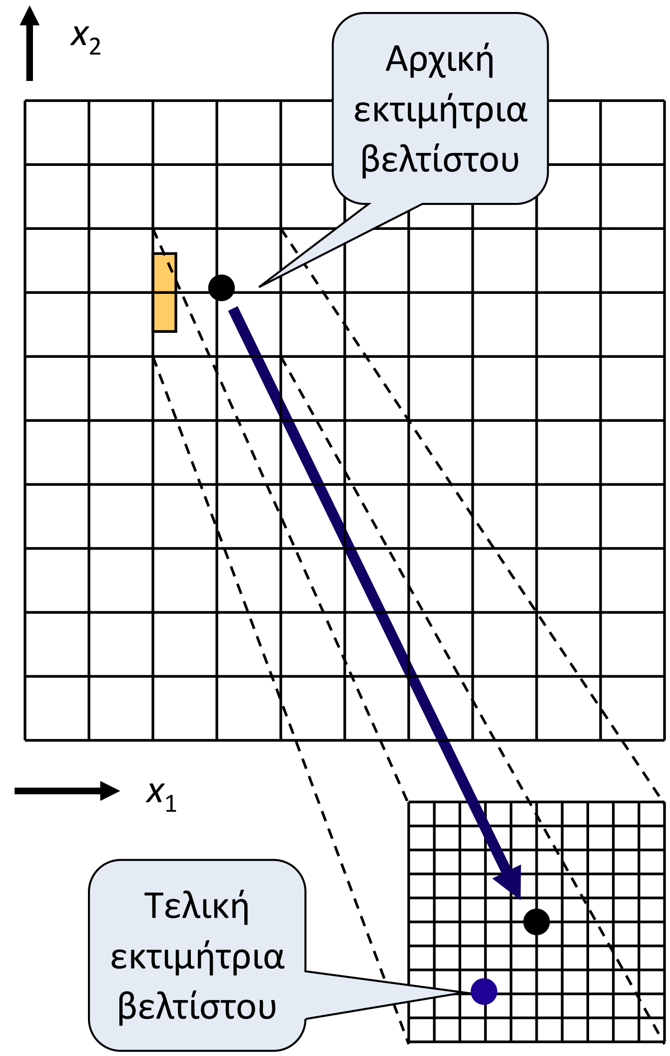
- Καμία προσδιοριστική διαδικασία δεν μπορεί να εγγυηθεί τον εντοπισμό του ολικού ακροτάτου μιας μη κυρτής συνάρτησης, εξαιτίας του κινδύνου εγκλωβισμού της σε τοπικό ακρότατο.
- Η διαφυγή από τα τοπικά ακρότατα (ελάχιστα) επιτυγχάνεται με την ελεγχόμενη αποδοχή μη βέλτιστων κινήσεων, δηλαδή βημάτων αναρρίχησης, και όχι μόνο κατάβασης.
- Η παραπάνω διαδικασία προϋποθέτει την εφαρμογή 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.



Ολική βελτιστοποίηση με «προσδιοριστικές» προσεγγίσεις: αναζήτηση σε πλέγμα

- **Μέθοδος απλού πλέγματος**: Διαμορφώνεται ένα πλέγμα διακριτών σημείων, στους κόμβους του οποίου υπολογίζεται η τιμή της συνάρτησης, και το καλύτερο σημείο λαμβάνεται ως εκτιμήτρια της βέλτιστης λύσης.
- **Μέθοδος επάλληλων πλεγμάτων**: Αρχικά σχηματίζεται ένα αδρό πλέγμα, που σταδιακά πυκνώνει γύρω από την περιοχή του εκάστοτε βελτίστου.
- Η μέθοδος είναι επίπονη υπολογιστικά, καθώς το πλήθος των δοκιμών αυξάνει εκθετικά με την διάσταση του προβλήματος («**κατάρα της διαστατικότητας**», curse of dimensionality).
- Αν η διακριτοποίηση είναι ομοιόμορφη και δ είναι το πλήθος των ίσων διαστημάτων σε κάθε διάσταση, τότε για n μεταβλητές ελέγχου το πλήθος των κόμβων του πλέγματος είναι:

$$N = (1 + \delta)^n$$



Τεχνικές Monte Carlo: Τυχαία δειγματοληψία

- Η εκτιμήτρια του ολικού ακροτάτου λαμβάνεται από ένα προεπιλεγμένο πλήθος N τυχαίων σημείων, ομοιόμορφα κατανεμημένων στον εφικτό χώρο X := [**l**, **u**].
- Το j στοιχείο κάθε τυχαίου διανύσματος στο εφικτό διάστημα [**l**, **u**] παράγεται μέσω της γεννήτριας:

$$x_j = l_j + r\,(u_j - l_j), \text{ για κάθε } j = 1, \ldots, n$$

όπου r τυχαίος ομοιόμορφος αριθμός στο [0, 1], διαφορετικός για κάθε j.

- Έστω X^* ένα υποσύνολο του εφικτού χώρου X, όπου ανήκει το ολικό ακρότατο $\mathbf{x}^*$. 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 $m(X^*) / m(X)$ εκφράζει το ποσοστό όγκου που καταλαμβάνει η περιοχή του X^* στον εφικτό χώρο. Αν κάθε $\mathbf{x} \in X^*$ θεωρείται εξίσου αποδεκτή προσέγγιση του ολικού βελτίστου, η ποσότητα $\alpha = 1 - m(X^*) / m(X)$ αποτελεί μέτρο της ακρίβειας.
- Για πιθανότητα P και ακρίβεια a, το απαιτούμενο μέγεθος δείγματος είναι:

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

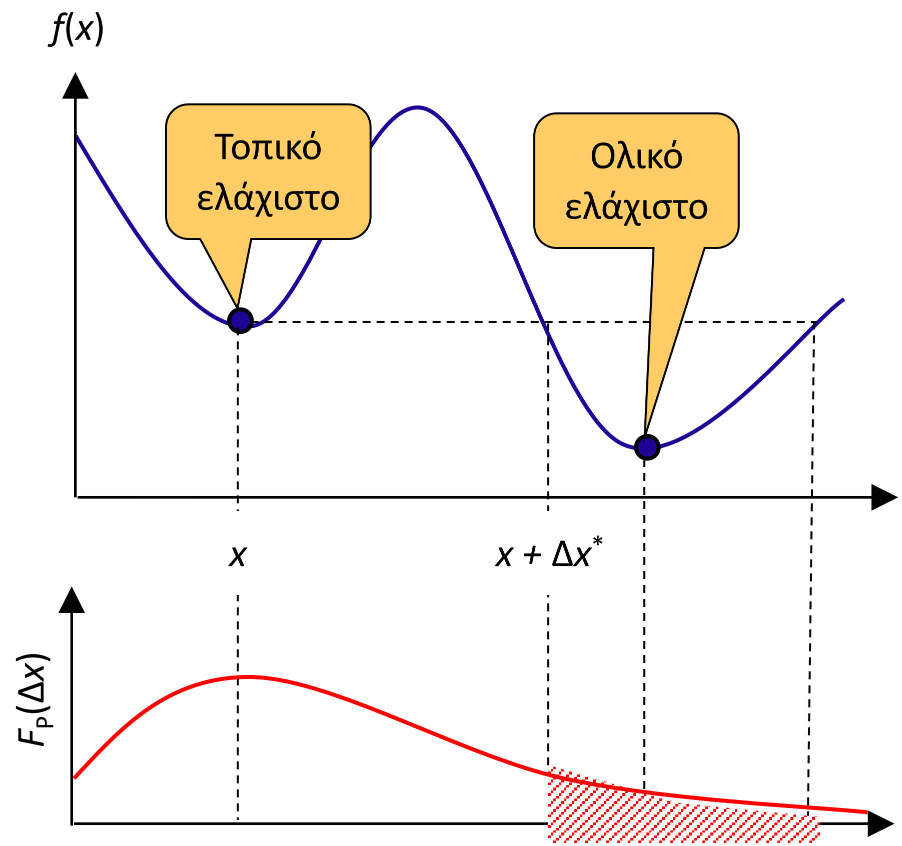
- Παράδειγμα: για $P = 0.95$, $\alpha = 0.01$, $N \approx 300$, ενώ για $P = 0.99$, $\alpha = 0.001$, $N \approx 4600$
- Συνεπώς, σε αντίθεση με τις μεθόδους συστηματικής δειγματοληψίας, η ακρίβεια της τυχαίας δειγματοληψίας είναι ανεξάρτητη της διάστασης του προβλήματος.

Προσαρμοστικές στοχαστικές τεχνικές αναζήτησης (adaptive search)

- Απλές στοχαστικές προσεγγίσεις που, πέραν της τυχαίας δειγματοληψίας, χρησιμοποιούν και στοιχειώδεις προσδιοριστικούς κανόνες, ώστε να προσαρμόζονται στη γεωμετρία της επιφάνειας απόκρισης.
- Η γενική τους στρατηγική βασίζεται στη γέννηση τυχαίων διαταραχών Δ**x**, που γίνονται δεκτές αν βελτιώνουν την τιμή της συνάρτησης, δηλαδή:

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

- Οι διαταραχές παράγονται από μια συνεχή κατανομή πιθανοτήτων (τυχαίος περίπατος), εξασφαλίζοντας ότι υπάρχει πάντα μια μη μηδενική πιθανότητα διαφυγής από το τρέχον τοπικό ακρότατο και μετάβασης στην περιοχή έλξης του ολικού ακροτάτου.



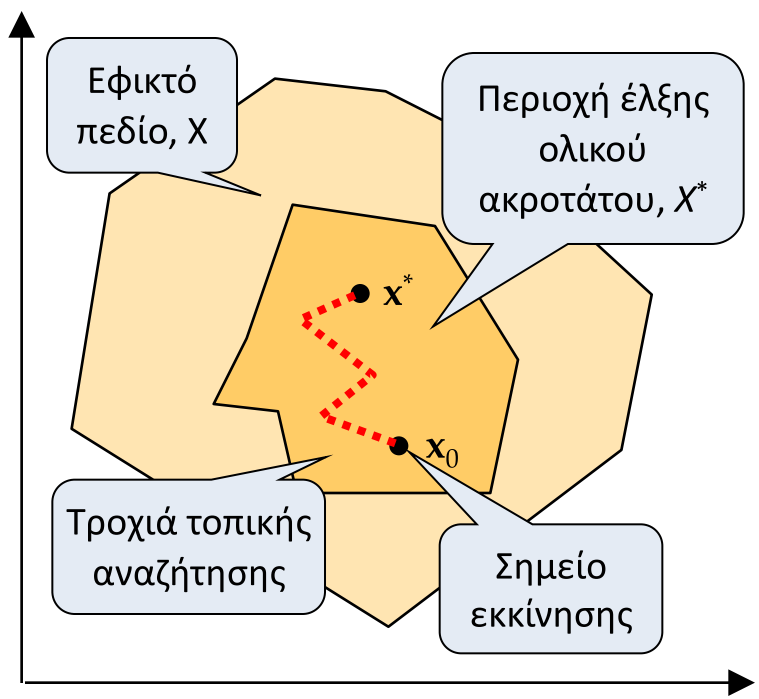
Το γραμμοσκιασμένο εμβαδόν αποτελεί μέτρο της πιθανότητας γέννησης ικανής διαταραχής Δx^*, που εξασφαλίζει μετάβαση στην περιοχή έλξης του ολικού ελαχίστου x^*

Πολλαπλές εκκινήσεις τοπικών επιλυτών

- Οι αλγόριθμοι τοπικής αναζήτησης εντοπίζουν με μεγάλη αξιοπιστία και ταχύτητα το ακρότατο (τοπικό ή ολικό), στην περιοχή έλξης του οποίου βρίσκεται το σημείο εκκίνησης.
- Σε μη κυρτούς χώρους, η αποτελεσματικότητα μιας μεθόδου τοπικής αναζήτησης (δηλαδή η πιθανότητα εντοπισμού του ολικού ακροτάτου) σχετίζεται άμεσα με την **πιθανότητα εκκίνησης στην περιοχή έλξης** X^* του ολικού ακροτάτου.
- Η συγκεκριμένη πιθανότητα εξαρτάται από το ποσοστό του όγκου που καταλαμβάνει η περιοχή X^* στον εφικτό χώρο X, δηλαδή τον λόγο $\beta = m(X^*) / m(X)$.
- Επαναλαμβάνοντας την επίλυση N φορές, με διαφορετικές συνθήκες εκκίνησης, η πιθανότητα επιτυχίας είναι :

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

- Ιδεατά, επιδιώκεται η εκκίνηση από διαφορετική, κάθε φορά, περιοχή έλξης, με σκοπό τον εντοπισμό όλων των τοπικών ακροτάτων. Στην πράξη, αυτό προϋποθέτει κάποια συστηματική προεπεξεργασία για τον διαχωρισμό του χώρου αναζήτησης σε περιοχές έλξης, με τη δημιουργία υπο-περιοχών ή συστοιχιών (clustering).



Προσομοιωμένη ανόπτηση: φυσικό υπόβαθρο

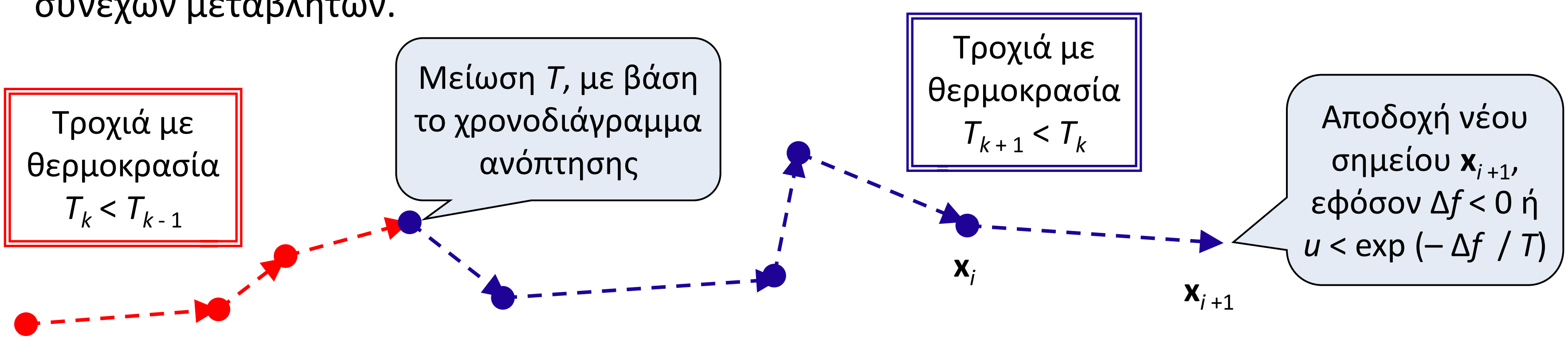
- Ανόπτηση (annealing) είναι η διεργασία ανακατανομής των ατόμων κατά την ψύξη ενός θερμοδυναμικού συστήματος (π.χ. μετάλλου). Σε υψηλές θερμοκρασίες, τα μόρια του μετάλλου κινούνται ελεύθερα προς όλες τις κατευθύνσεις, αλλά καθώς το μέταλλο ψύχεται, η θερμική κινητικότητα των μορίων του περιορίζεται.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

$$P(E) \sim \exp(-E / \kappa T), \text{ όπου } \kappa \text{ σταθερά Boltzman}$$

- Η φυσική διεργασία επιτρέπει πάντοτε **μη μηδενική** πιθανότητα μετάβασης σε κατάσταση υψηλότερης ενέργειας, παρέχοντας στο σύστημα την ευκαιρία να ξεφεύγει από τοπικά ενεργειακά ελάχιστα και να αναζητά βελτιωμένες καταστάσεις ισορροπίας. Η πιθανότητα είναι μεγάλη στην αρχή, οπότε η θερμοκρασία του συστήματος είναι υψηλή, και μειώνεται σταδιακά, καθώς το σύστημα ψύχεται, μεταβαίνοντας στην περιοχή της ολικά ελάχιστης ενέργειας.
- Απαραίτητη προϋπόθεση για την δημιουργία τέλειων κρυστάλλων είναι ο **αργός ρυθμός ψύξης**. Διαφορετικά, το μέταλλο δεν φτάνει στην κατάσταση ελάχιστης ενέργειας, αλλά προκύπτει μια πολυκρυσταλλική δομή, μεγαλύτερης ενέργειας.

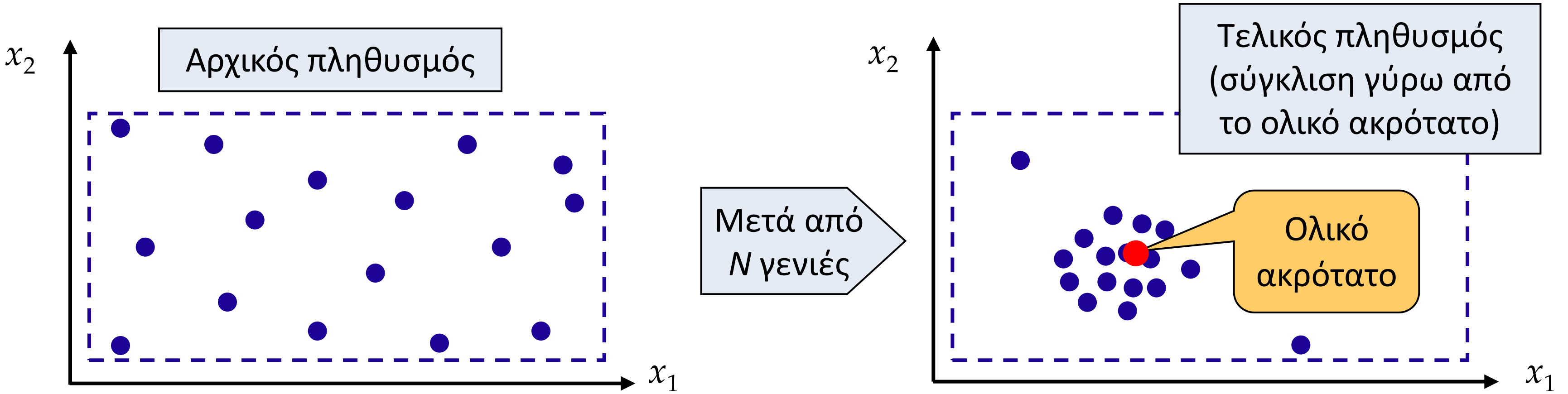
Ολική βελτιστοποίηση μέσω τεχνικών προσομοιωμένης ανόπτησης

- Στην **προσομοιωμένη ανόπτηση** (simulated annealing), η στοχική συνάρτηση θεωρείται ως το μαθηματικό αντίστοιχο της ενέργειας, ενώ εισάγονται ακόμη:
  - μια παράμετρος ελέγχου T, αντίστοιχη της θερμοκρασίας·
  - ένα *χρονοδιάγραμμα ανόπτησης* (annealing cooling schedule), που περιγράφει την διαδικασία μείωσης της θερμοκρασίας·
  - μια συνάρτηση πιθανότητας $p(T)$, αντίστοιχη της συνάρτησης Boltzman, που χρησιμοποιείται για την αποδοχή βημάτων αναρρίχησης (η συνάρτηση απαντά και ως κριτήριο Metropolis).
- Η μέθοδος έχει χρησιμοποιηθεί με επιτυχία κυρίως σε προβλήματα συνδυαστικής βελτιστοποίησης μεγάλης κλίμακας, δηλαδή σε προβλήματα διακριτών τιμών με πολλές μεταβλητές ελέγχου, ενώ είναι σαφώς πιο περιορισμένη η εφαρμογή της σε προβλήματα συνεχών μεταβλητών.



Εξελικτικοί (evolutionary) αλγόριθμοι

- Οι εξελικτικοί αλγόριθμοι έχουν ως υπόβαθρο την εξέλιξης ενός **πληθυσμού** (population) εφικτών σημείων, μέσω υπολογιστικών διαδικασιών εμπνευσμένων από τη **φυσική επιλογή** και την **αναπαραγωγή**.
- Η πιθανότητα επιβίωσης κάθε ατόμου εξαρτάται από το βαθμό καταλληλότητάς του (fitness rate), που αποτιμάται με βάση την τιμή της συνάρτησης.
- Η εξέλιξη πραγματοποιείται σε στάδια, που καλούνται **γενιές** (generations). Σε κάθε γενιά επιλέγονται ορισμένα μέλη του πληθυσμού που «πεθαίνουν» (στατιστικά τα λιγότερο κατάλληλα), ενώ γεννώνται νέα μέλη (εφικτά σημεία) που καλούνται **απόγονοι** (offsprings) – η παραγωγική διαδικασία υλοποιείται με στοχαστικές διαδικασίες που λέγονται **γενετικοί τελεστές**.
- Η διαδικασία εξασφαλίζει βελτίωση της μέσης ποιότητας του πληθυσμού σε κάθε γενιά, άρα και ασυμπτωτική σύγκλιση στο ολικό ακρότατο.



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, άγνοια γεωμετρίας του χώρου, ασάφεια ορισμού 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.

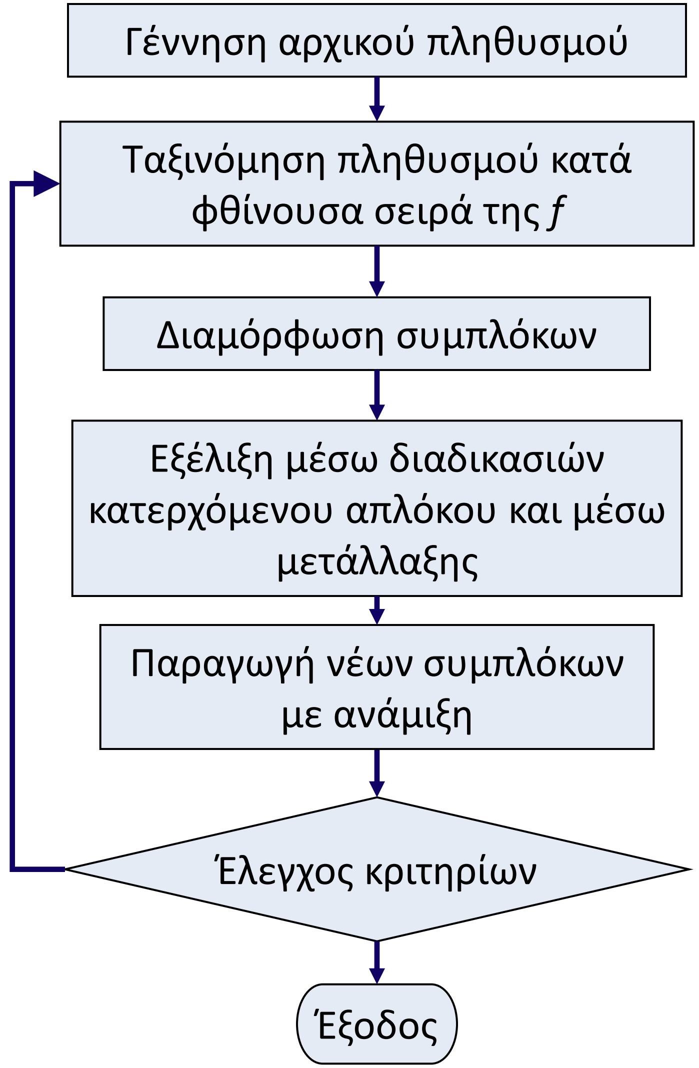
Ακρίβεια

Διαμόρφωση στοχαστικών εξελικτικών σχημάτων, που για την παραγωγή νέων λύσεων χρησιμοποιούν υπολογιστικές διαδικασίες και γεωμετρικούς μετασχηματισμούς των μεθόδων τοπικής αναζήτησης, εισάγοντας και τυχαιότητα

Ταχύτητα

Εξελικτική μέθοδος αναδευόμενων συμπλόκων (shuffled complex evolution, SCE)

- Η μέθοδος SCE-UA (Duan *et al.*, 1992) αναπτύχθηκε στο Πανεπιστήμιο της Αριζόνα, και μέχρι πρόσφατα υπήρξε η πλέον πρόσφορη διαδεδομένη μέθοδος βαθμονόμησης υδρολογικών μοντέλων.
- Κεντρική ιδέα αποτελεί ο διαχωρισμός του πληθυσμού σε σύμπλοκα (complexes), δηλαδή υποσύνολα μεγέθους $m > n + 1$, τα οποία εξελίσσονται παράλληλα.
- Αντί της διαδικασίας διασταύρωσης των γενετικών αλγορίθμων, εδώ εφαρμόζονται οι τυπικοί γεωμετρικοί μετασχηματισμοί της μεθόδου Nelder-Mead.
- Κατά περιοδικά διαστήματα, γίνεται μίξη του πληθυσμού και επανασχηματισμός των συμπλόκων, επιτρέποντας τη «διάχυση» των πληροφοριών που συλλέγονται κατά την αναζήτηση.



Εξελικτικός αλγόριθμος ανόπτησης-απλόκου

- Ευρετική μέθοδος ολικής βελτιστοποίησης (Efstratiadis and Koutsoyiannis, 2002), με επιτυχή εφαρμογή σε σύνθετα προβλήματα υδατικών πόρων, που υλοποιεί:
  - μια διαδικασία **εξελικτικής αναζήτησης**, για την παράλληλη διερεύνηση του εφικτού χώρου από ένα δείγμα (πληθυσμό) σημείων·
  - ένα πλέγμα κανόνων εξέλιξης, που βασίζονται σε ένα τροποποιημένο σχήμα **κατερχόμενου απλόκου**, για τον ταχύ εντοπισμό τοπικών ακροτάτων, σε συνδυασμό με διαδικασίες **μετάλλαξης**, με τις οποίες εξασφαλίζεται αυξημένη διασπορά του πληθυσμού·
  - μια στρατηγική **προσομοιωμένης ανόπτησης**, με ένα αυτορρυθμιζόμενο χρονοδιάγραμμα, για έλεγχο της τυχαιότητας κατά την αξιολόγηση της καταλληλότητας των μελών του πληθυσμού.
- Εισάγονται ένα εσωτερικό και ένα εξωτερικό εύρος των μεταβλητών ελέγχου, το πρώτο (χαλαρό) για τη γέννηση του αρχικού πληθυσμού και το δεύτερο (δεσμευτικό) για την οριοθέτηση του εφικτού χώρου.
- Η ενσωμάτωση στρατηγικών τοπικής και ολικής αναζήτησης σε ένα ενιαίο αλγοριθμικό σχήμα εξασφαλίζει:
  - ευελιξία κινήσεων, για τον χειρισμό των γεωμετρικών ιδιομορφιών των μη κυρτών επιφανειών απόκρισης·
  - ταχεία διερεύνηση των κυρτών περιοχών των εν λόγω επιφανειών.

Ποια είναι τα επιθυμητά χαρακτηριστικά ενός αλγορίθμου ολικής βελτιστοποίησης;

- **Αμεροληψία**: Εγγυημένη σύγκλιση στο ολικό ακρότατο, ανεξάρτητα από το σημείο, ομάδα σημείων (πληθυσμό) ή περιοχή εκκίνησης της διαδικασίας αναζήτησης (έχει νόημα μόνο για κυρτές συναρτήσεις).
- **Ευρωστία**: Προσαρμογή στις γεωμετρικές ιδιαιτερότητες της επιφάνειας απόκρισης (αυχένες, μακρόστενες χαράδρες, πλατιές κοιλάδες, ασυνέχειες αναγλύφου, τοπικά ακρότατα μικρής και μεγάλης κλίμακας).
- **Αποτελεσματικότητα** (effectiveness): Εντοπισμός (ή προσέγγιση) ολικού βελτίστου με ικανοποιητική αξιοπιστία και ακρίβεια (για μη κυρτές συναρτήσεις).
- **Αποδοτικότητα** (efficiency): Ικανοποιητικός ρυθμός προόδου στη διαδικασία αναζήτησης, ταχύτητα εντοπισμού ικανοποιητικών λύσεων.
- **Γενικότητα**: Απουσία προϋποθέσεων ως προς τα χαρακτηριστικά της στοχικής συνάρτησης και των παραγώγων της (κυρτότητα, διαφορισιμότητα).
- **Ευκολία στη χρήση**: «Απλότητα» διαδικασίας και περιορισμένος αριθμός αλγοριθμικών παραμέτρων εισόδου, ώστε να εξασφαλίζεται αποτελεσματική εφαρμογή του αλγορίθμου από χρήστες περιορισμένης εμπειρίας.

Επειδή τα παραπάνω χαρακτηριστικά είναι, ως επί το πλείστον, αντικρουόμενα, η καταλληλότητα ενός αλγορίθμου για πρακτικές εφαρμογές αξιολογείται με βάση τη δυνατότητα εντοπισμού **ικανοποιητικών λύσεων** με **εύλογο αριθμό δοκιμών**.

Γενική βιβλιογραφία

- Belegundu, A. D, and T. R. Chandrupatla, *Optimization Concepts and Applications in Engineering*, Prentice-Hall Inc., 1999.
- Fletcher, R., and C. M. Reeves, Function minimization by conjugate gradients, *Comp. J.*, 7, 149-154, 1964.
- Hooke, R., and T. A. Jeeves, Direct search solution of numerical and statistical problems, *Journal of the Association of Computing Machinery*, 8, 212-229, 1961.
- Goldberg, D. E., *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley, 1989.
- Kirkpatrick, S., C. D. Gelatti, and M. P. Vecchi, Optimization by simulated annealing, *Science*, 220, 671-680, 1983.
- Lewis, R. M., V. Torczon, and M. W. Trosset, Direct search methods: then and now, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 124, 191-207, 2000.
- 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, *Comp. J.*, 7(4), 308-313, 1965.
- Pardalos, P. M., H. E. Romeijn, and H. Tuy, Recent developments and trends in global optimization, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 124, 209-228, 2000.
- 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.
- Price, W. L., Global optimization by controlled random search, *Journal of Optimization Theory and Applications*, 40, 333-348, 1987.
- Rubinstein, R. Y., *Monte Carlo Optimization, Simulation and Sensitivity of Queuing Networks*, John Willey, 1986.
- Schwefel, H.-P., *Evolution and Optimum Seeking*, John Willey, 1994.
- Torn, A., M. M. Ali, and S. Viitanen, Stochastic global optimization: Problem classes and solution techniques, *Journal of Global Optimization*, 14, 437-447, 1999.
- Van Laarhoven, P. J. M., and E. H. L. Aarts, *Simulated Annealing: Theory and Applications*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, 1987.

Υδρολογικές εφαρμογές ολικής βελτιστοποίησης

- Cooper, V. A., V. T. V. Nguyen, and J. A. Nicell, Evaluation of global optimization methods for conceptual rainfall-runoff model calibration, *Water Science and Technology*, 36(5), 53-60, 1997.
- Dougherty, D. E., and R. A. Marryott, Optimal groundwater management: 1. Simulated annealing, *Water Resources Research*, 27(10), 2493-2508, 1991.
- Duan, Q., S. Sorooshian, and V. Gupta, Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models, *Water Resources Research*, 28(4), 1015-1031, 1992.
- Efstratiadis, A., and D. Koutsoyiannis, An evolutionary annealing-simplex algorithm for global optimisation of water resource systems, *Proceedings of the Fifth International Conference on Hydroinformatics*, Cardiff, UK, 1423-1428, International Water Association, 2002.
- Freedman, V. L., V. L. Lopes, and M. Hernandez, Parameter identifiability for catchment-scale erosion modeling: a comparison of optimization algorithms, *Journal of Hydrology*, 207, 83-97, 1998.
- Hendrickson, J. D., S. Sorooshian, and L. E. Brazil, Comparison of Newton-type and direct search algorithms for calibration of conceptual rainfall-runoff models, *Water Resources Research*, 24(5), 691-700, 1988.
- Goswami, M., and K.M. O'Connor, Comparative assessment of six automatic optimization techniques for calibration of a conceptual rainfall-runoff model, *Hydrological Sciences Journal*, 52(3), 432-449, 2007.
- Pan, L., and L. Wu, A hybrid global optimization method for inverse estimation of hydraulic parameters: annealing-simplex method, *Water Resources Research*, 34(9), 2261-2269, 1998.
- Shoemaker, C. A., R. G. Regis, and R. C. Fleming, Watershed calibration using multistart local optimization and evolutionary optimization with radial basis function approximation, *Hydrological Sciences Journal*, 52(3), 450-465, 2007.
- Solomatine, D. P., Two strategies of adaptive cluster covering with descent and their comparison to other algorithms, *Journal of Global Optimization*, 14(1), 55-78, 1999.
- Thyer, M., G. Kuczera, and B. C. Bates, Probabilistic optimization for conceptual rainfall-runoff models: A comparison of the shuffled complex evolution and simulation annealing algorithms, *Water Resources Research*, 35(3), 767-773, 1999.